

**FIȘA DISCIPLINEI****1. Date despre program**

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași
1.2 Facultatea	Facultatea de Chimie
1.3 Departamentul	DEPARTAMENTUL DE CHIMIE
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclu de studii	Licență
1.6 Programul de studii / Calificarea	Chimie medicală

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Chimie medicală computațională și structurală						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. Dr. IONEL HUMELNICU						
2.3 Titularul activităților de laborator	Lect. Dr. DUMITRU-CLAUDIU SERGENTU						
2.4 An de studiu	II	2.5 Semestrul	IV	2.6 Tip de evaluare*	E	2.7 Regimul disciplinei**	Ob

*E – Examen / C – Colocviu / V – Verificare

**OB – Obligatoriu / OP – Opțional / F – Facultativ

3. Timpul total estimat (ore pe semestru și activități didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	6	3.2 curs	3	3.3 seminar/laborator	3
3.4 Total ore din planul de învățământ	84	3.5 curs	42	3.6 seminar/laborator	42
Distribuția fondului de timp					ore
Studiu după manual, suport de curs, bibliografie și altele					28
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					14
Pregătire seminare/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					16
Tutoriat					4
Examinări					4
Alte activități					0

3.7 Total ore studiu individual*	66
3.8 Total ore pe semestru	150
3.9 Numărul de credite	6

4. Precondiții - De curriculum (dacă este cazul)

Matematică, Bazele chimiei anorganice, Bazele chimiei organice

5. Condiții (dacă este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	sală cu dotare multimedia
5.2 De desfășurare a laboratorului	- Sală cu dotările necesare activităților practice, aparatură și tehnică de calcul; - Respectarea normelor de protecția muncii în laboratoare cu caracter chimic; - În caz de absență, cu motive bine întemeiate, recuperarea activității se poate face cu o altă semigrupă ținând cont de disponibilitatea salii, aparaturii de laborator, orar și acordul cadrului didactic

6. Obiective

Înșușirea bazelor teoretice referitoare la structura cuantică a materiei și a principalelor modele cuantice ce stau la baza înțelegerii structurii moleculare, a naturii legăturii chimice și a proprietăților moleculare. Determinarea unor parametri și legități cuantice ce guvernează lumea materială.

La finalizarea cu succes a acestei discipline, studenții vor fi capabili să:

- Explice conceptele fundamentale, teoriile, modelele și abordările utilizate în studiul structurii moleculare și ale proprietăților electronice ale compușilor chimici.
- Utilizeze tehnici experimentale și de calcul, precum și metode teoretice adecvate, pentru investigarea structurii și proprietăților electronice și fizico-chimice ale sistemelor moleculare
- Analizeze structura și proprietățile fizico-chimice ale sistemelor moleculare
- Determine proprietățile structurale ale compușilor moleculari

7. Competențe/Rezultate ale învățării

- Operarea cu noțiuni de structură și reactivitate a compușilor chimici, biochimici și farmaceutici.
- Operarea cu noțiuni privind relația de legătură între structura și activitatea chimică și biologică a compușilor chimici, biochimici și farmaceutici.
- Determinarea compoziției, structurii și proprietăților fizico-chimice a unor compuși chimici, biochimici și farmaceutici.
- Abordarea interdisciplinară a unor teme din domeniile chimiei și biochimiei.
- Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată.

8. Conținut

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Elemente fundamentale ale mecanicii cuantice - Natura cuantică a materiei - Dualismul undă - corpuscul - Principiul de incertitudine a lui Heisenberg	prelegerea, conversația euristică, explicația	3 ore
Formularea generală a mecanicii cuantice - Stări și observabile - Transformări și operator	prelegerea, conversația euristică, explicația	3 ore
- Proprietăți generale ale operatorilor - Valori proprii și vectorii proprii ale operatorilor	prelegerea, conversația euristică, explicația	3 ore
Aplicații ale mecanicii cuantice - Ecuația lui Schrödinger - Semnificația fizică a funcției de undă	prelegerea, conversația euristică, explicația	3 ore
- Atomul de hidrogen (hidrogenoidul) - Funcțiile de undă (orbitalele atomice) pentru atomul de hidrogen	prelegerea, conversația euristică, explicația, modelarea	3 ore
- Semnificația fizică a orbitalelor atomice hidrogenoide Spinul electronic în mecanica cuantică - Necesitatea spinului electronic	prelegerea, conversația euristică, explicația	3 ore
- Teoria lui Pauli a spinului electronic - Operatorii de spin - Principiul lui Pauli	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația	3 ore
- Funcția de undă totală pentru starea fundamentală a atomului de heliu	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația	3 ore
Metode aproximative ale mecanicii cuantice aplicabile în chimia cuantică	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația	3 ore

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
- Metoda variațională - Metoda perturbațiilor independente de timp		
- Perturbații dependente de timp - Hamiltonianul unui sistem atomic cu mai mulți electroni	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația, modelarea	3 ore
- Modelul Hartree - Fock al structurii atomice Abordarea sistemelor moleculare în chimia cuantică - Hamiltonianul molecular. Aproximația Born – Oppenheimer	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația, modelarea	3 ore
- Metoda orbitalelor moleculare a lui Roothaan - Metode ab-initio Natura legăturii chimice. Stările electronice ale moleculei diatomice - Teoria cuantică a legăturii covalente. Ionul molecular de hidrogen	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația, modelarea	3 ore
- Stările electronice ale moleculei de hidrogen în teoria orbitalelor moleculare (OM)	prelegerea, conversația euristică, explicația	3 ore
- Molecula de hidrogen în teoria legăturii de valență (VB) - Molecula de hidrogen. Introducerea spinul în funcția de undă și comparație între metoda MO și VB	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația, modelarea	3 ore

Bibliografie

1. C. Ghirvu, I. Humelnicu, “Introducere în Chimia cuantică – Principii și metode generale”, Editura Matrix Rom, București, 2011
2. I. Humelnicu, Iuliana Voicu, C. Ghirvu, M. Constantinescu, “Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea I – atomistică”, Editura Universității < Alexandru Ioan Cuza > Iași, 2004
3. I.N. Levine, “Quantum Chemistry”, Prentice Hallby, 7th Edition, 2013
4. S.J. Jang, Quantum Mechanics for Chemistry, Springer 2024
5. I.G. Murgulescu, “Introducere în Chimia fizică - Atomi, molecule, legătura chimică”, vol. I, 1, Editura Academiei Române, București, 1976
6. I.G. Murgulescu, “Introducere în Chimia fizică - Structura și proprietățile moleculelor”, vol. I, 2, Editura Academiei Române, București, 1978
7. J. Autschbach, “Quantum Theory for Chemical Applications. From Basic Concepts to Advanced Topics” Oxford University Press, 2021
8. D.A. McQuarrie, “Quantum Chemistry”, University Science Books; 2nd edition, 2007
9. P.W. Atkins, R.S. Friedman, “Molecular Quantum Mechanics”, Oxford University Press, USA; 5 edition, 2010
10. V. Magnasco, “Methods of Molecular Quantum Mechanics: An Introduction to Electronic Molecular Structure”, Wiley, 2009
11. E.G. Lewars., Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics (ediția a IV-a). Cham: Springer, 2024.
12. G. Schatz, M. Ratner, “Quantum Mechanics in Chemistry”, Courier Dover Publications, 2002

8.2 Laborator	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Sisteme de coordonate în mecanica și chimia cuantică	Explicația, studiu de caz, conversația, demonstrația	3 ore
Operatorul Laplacean în coordonate polare sferice	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	3 ore
Studiul comportării unei particule într-o cutie de potențial	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	3 ore
Studiul oscilatorului armonic liniar	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	3 ore
Trecerea unei particule printr-o barieră de potențial dreptunghiulară. Efectul tunel	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	3 ore
Operatorii momentului cinetic în coordonate polare sferice Studiul relațiilor de comutare ale operatorilor momentului cinetic	Explicația, studiu de caz, conversația	3 ore
Valorile proprii și funcțiile proprii ale operatorului proiecției momentului cinetic pe axa z	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	3 ore
Valorile proprii și funcțiile proprii ale operatorului momentului cinetic la pătrat	Conversație, explicație, simulare, problematizarea	3 ore
Studiul componentei radiale a funcției de undă pentru atomii hidrogenoizi. Reprezentarea grafică și interpretarea fizică a orbitalelor atomice pentru atomii hidrogenoizi (aplicații pe calculator)	Conversație, probă practică, demonstrație	3 ore

8.2 Laborator	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
Determinarea, măsurarea unor parametri fizico – chimici (densitate, concentrație, indice de refracție, indici spectrali) esențiali pentru înțelegerea comportamentului fizico-chimic al substanțelor și pentru aplicarea acestora în diverse domenii ale chimiei. Verificarea legii generale a absorbției de radiație de către materie (Lambert – Beer)	Conversație, probă practică, demonstrație	3 ore
Studiul refracțiilor atomice și ionice și corelarea acestora cu structura moleculară	Conversație, probă practică, demonstrație, modelare	6 ore
Studiul structurii moleculare prin măsurarea momentelor de dipol electric permanent	Conversație, probă practică, demonstrație, modelare	3 ore
Aplicații ale spinul electronic și operatorilor de spin în mecanica cuantică	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	3 ore

Bibliografie

1. I. Humelnicu, Iuliana Voicu, C. Ghirvu, M. Constantinescu, “Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea I – atomistică”, Editura Universității Iași, 2004, oricare reeditare
2. C. Ghirvu, I. Humelnicu, “Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea II – Structură moleculară”, Editura Universității Iași, 2005, oricare reeditare
3. L. Pauling, E. Bright Wilson, “Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry”, Dover Publications, 1985
4. K. Tamvakis, “Problems and Solutions in Quantum Mechanics”, Cambridge University Press, Cambridge, New York, 2005
5. E. D’Emilio, L.E. Picasso, “Problems in Quantum Mechanics: with Solutions”, Springer, 2012
6. I.G. Murgulescu, “Introducere în Chimia fizică - Atomi, molecule, legătura chimică”, vol. I, 1, Editura Academiei Române, București, 1976
7. I.G. Murgulescu, “Introducere în Chimia fizică - Structura și proprietățile moleculelor”, vol. I, 2, Editura Academiei Române, București, 1978
8. A. Messiah, “Quantum Mechanics”, Dover Pub., New York, 1999
9. P.W. Atkins, “Tratat de chimie fizică - traducere”, Ed. Tehnică București, 1996
10. G. Schatz, M. Ratner, “Quantum Mechanics in Chemistry”, Courier Dover Publications, 2002

9. Coroborarea conținutului disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității, asociațiilor profesionale și angajatorilor reprezentativi din domeniul aferent programului

Conținutul cursului și al aplicațiilor de laborator este aliniat cerințelor asociațiilor profesionale naționale și internaționale, fiind în concordanță cu așteptările comunității, ale asociațiilor profesionale și ale angajatorilor relevanți din domeniul programului

10. Evaluare

10.1 Evaluare continuă		Pondere (min. 30%)		30	
Curs	Forma de evaluare		Verificare mixtă		
	Pondere		70		
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale		Da		
	Metode de evaluare	Detalii		Pondere	cu reexaminare
		Test		40	Da
		Verificare orală periodică		60	Da
Laborator	Forma de evaluare		Verificare mixtă		
	Pondere		30		
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale		Da		
	Metode de evaluare	Detalii		Pondere	cu reexaminare
		Verificare scrisă periodică		50	Da
		Portofoliu		50	Da
10.2 Evaluare finală		Pondere (max. 70%)		70	

	Forma de evaluare	Verificare mixtă finală
--	-------------------	-------------------------

10.3 Mențiuni (situații speciale în evaluare)

Pentru studenții aflați în mobilitate internațională, evaluarea va fi efectuată în conformitate cu prevederile specifice

10.4 Standard minim de performanță

Explicarea semnificației fizice a funcției de undă și formularea hamiltonianului pentru un sistem molecular
Înșușirea principalelor metode de investigare a legăturii chimice

Data completării,
29.09.2025

Titular de curs,
Conf. Dr. IONEL HUMELNICU

Titular de laborator,
Lect. Dr. DUMITRU-CLAUDIU SERGENTU

Data avizării în departament,

Director de departament,
Prof. Dr. MIHAIL LUCIAN BIRSA