

**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 | Biochimie tehnologică                        |

**2. Date despre disciplină**

|                                        |    |               |                                                               |                      |   |                           |    |
|----------------------------------------|----|---------------|---------------------------------------------------------------|----------------------|---|---------------------------|----|
| 2.1 Denumirea disciplinei              |    |               | Chimie cuantică și structură                                  |                      |   |                           |    |
| 2.2 Titularul activităților de curs    |    |               | Conf. Dr. IONEL HUMELNICU                                     |                      |   |                           |    |
| 2.3 Titularul activităților de seminar |    |               | Conf. Dr. IONEL HUMELNICU/ 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                      | Cursul se va desfășura într-o sală dotată cu mijloace multimedia, pentru a susține o prezentare interactivă și eficientă a materialului didactic.                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| 5.2 De desfășurare a seminarului/<br>laboratorului | - Sală cu dotările necesare activităților practice, aparatură și tehnică de calcul<br>- Respectarea normelor de securitate și sănătate în muncă pentru activitățile didactice în laboratoare cu caracter chimic<br>- În cazul absențelor justificate, recuperarea activității se poate face cu o altă semigrupă, în conformitate cu disponibilitatea laboratorului, aparaturii și normativelor de securitate și sănătate în muncă |

## 6. Obiective

Generale: Însușirea 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. Dezvoltarea capacității de a determina parametri și legități cuantice ce guvernează lumea materială.

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

- Explice proprietățile, conceptele, abordările, teoriile, modelele și noțiunile fundamentale de structură moleculară
- Descrie conceptele, abordările, teoriile, metodele și modelele utilizate la studiul structurii și proprietăților electronice ale compușilor chimici
- Utilizeze aparatura, tehnica de calcul, noțiunile fundamentale și metodele teoretice corespunzătoare pentru investigarea structurii și proprietăților 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.
- Determinarea compoziției, structurii și proprietăților fizico-chimice a unor compuși chimici.
- Abordarea interdisciplinară a unor teme din domeniul chimiei.
- 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<br>(ore și referințe bibliografice) |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|
| Elemente fundamentale ale mecanicii cuantice<br>- Natura cuantică a materiei<br>- Dualismul undă - corpuscul<br>- Principiul de incertitudine a lui Heisenberg | prelegerea, conversația euristică, explicația               | 3 ore                                          |
| Formularea generală a mecanicii cuantice<br>- Stări și observabile<br>- Transformări și operator                                                               | prelegerea, conversația euristică, explicația               | 3 ore                                          |
| - Proprietăți generale ale operatorilor<br>- Valori proprii și vectorii proprii ale operatorilor                                                               | prelegerea, conversația euristică, explicația               | 3 ore                                          |
| Aplicații ale mecanicii cuantice<br>- Ecuația lui Schrödinger<br>- Semnificația fizică a funcției de undă                                                      | prelegerea, conversația euristică, explicația               | 3 ore                                          |
| - Atomul de hidrogen (hidrogenoidul)<br>- Funcțiile de undă (orbitalele atomice) pentru atomul de hidrogen                                                     | prelegerea, conversația euristică, explicația, modelarea    | 3 ore                                          |
| - Semnificația fizică a orbitalelor atomice hidrogenoide<br>Spinul electronic în mecanica cuantică<br>- Necesitatea spinului electronic                        | prelegerea, conversația euristică, explicația               | 3 ore                                          |
| - Teoria lui Pauli a spinului electronic<br>- Operatorii de spin<br>- Principiul lui Pauli                                                                     | prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația | 3 ore                                          |

| 8.1 Curs                                                                                                                                                                                                              | Metode de predare                                                      | Observații<br>(ore și referințe bibliografice) |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|
| - 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<br>- Metoda variațională<br>- Metoda perturbațiilor independente de timp                                                                     | prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația            | 3 ore                                          |
| - Perturbații dependente de timp<br>- Hamiltonianul unui sistem atomic cu mai mulți electroni                                                                                                                         | prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația, modelarea | 3 ore                                          |
| - Modelul Hartree - Fock al structurii atomice<br>Abordarea sistemelor moleculare în chimia cuantică<br>- Hamiltonianul molecular. Aproximația Born – Oppenheimer                                                     | prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația, modelarea | 3 ore                                          |
| - Metoda orbitalelor moleculare a lui Roothaan<br>- Metode ab-initio<br>Natura legăturii chimice. Stările electronice ale moleculei diatomice<br>- 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)<br>- 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. I.G. Murgulescu, “Introducere în Chimia fizică - Atomi, molecule, legătura chimică”, vol. I, 1, Editura Academiei Române, București, 1976
5. I.G. Murgulescu, “Introducere în Chimia fizică - Structura și proprietățile moleculelor”, vol. I, 2, Editura Academiei Române, București, 1978
6. D.A. McQuarrie, “Quantum Chemistry”, University Science Books; 2nd edition, 2007
7. P.W. Atkins, R.S. Friedman, “Molecular Quantum Mechanics”, Oxford University Press, USA; 5 edition, 2010
8. V. Magnasco, “Methods of Molecular Quantum Mechanics: An Introduction to Electronic Molecular Structure”, Wiley, 2009
9. C. Ghirvu, “Chimie fizică - Elemente de structură și reactivitate moleculară”, Institutul Politehnic Iași, 1979
10. G. Schatz, M. Ratner, “Quantum Mechanics in Chemistry”, Courier Dover Publications, 2002

| 8.2 Seminar / Laborator                                                                                                                                                          | Metode de predare                                    | Observații<br>(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, demonstrația | 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<br>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                                                                                    | Conversație, explicație, simulare, problematizarea   | 3 ore                                          |
| Valorile proprii și funcțiile proprii ale operatorului momentului cinetic la pătrat                                                                                              | Conversație, explicație, simulare, problematizarea   | 3 ore                                          |
| Studiul părții radiale a funcției de undă pentru hidrogenoid<br>Reprezentarea grafică și interpretarea fizică a orbitalelor atomice pentru hidrogenoid (aplicații pe calculator) | Conversație, probă practică, demonstrație            | 3 ore                                          |

| 8.2 Seminar / Laborator                                                                                                                                            | Metode de predare                                | Observații<br>(ore și referințe bibliografice) |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------|------------------------------------------------|
| Măsurători fizico – chimice generale, densitate, indice de refracție etc.<br>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        | 6 ore                                          |
| Studiul structurii moleculare prin măsurători de momente de dipol electric permanent                                                                               | Conversație, probă practică, demonstrație        | 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, 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             |
| Seminar / 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               | Nu             |
|                        |                                                                         | Portofoliu                  | 50               | Nu             |

|                             |                    |                         |
|-----------------------------|--------------------|-------------------------|
| <b>10.2 Evaluare finală</b> | Pondere (max. 70%) | 70                      |
|                             | Forma de evaluare  | Verificare mixtă finală |

|                                                      |  |
|------------------------------------------------------|--|
| <b>10.3 Mențiuni (situații speciale în evaluare)</b> |  |
|                                                      |  |

|                                                                                                                                                               |  |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
| <b>10.4 Standard minim de performanță</b>                                                                                                                     |  |
| - semnificația fizică a funcției de undă, scrierea hamiltonianului unui sistem molecular<br>- cunoașterea principalelor metode de studiu al legăturii chimice |  |

**Data  
completării,  
29.09.2025**

**Titular de curs,  
Conf. Dr. IONEL HUMELNICU**

**Titular de seminar,  
Conf. Dr. IONEL HUMELNICU/ Lect. Dr. DUMITRU-CLAUDIU  
SERGENTU**

**Data avizării în departament,**

**Director de departament,  
Prof. Dr. MIHAIL LUCIAN BIRSA**