

**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

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 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 laborator	3
3.4 Total ore din planul de învățământ	84	3.5 curs	42	3.6 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 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 on-site în cadrul Facultății de Chimie; - Sală de curs / amfiteatru cu tablă, videoproiector și conexiune la internet; - Studenții vor consulta suportul de curs pus la dispoziție pe platforma MOODLE; - se va stimula participarea interactivă; - Utilizarea telefonului sau a altor dispozitive electronice este permisă doar pentru activitățile didactice din cadrul cursului.
5.2 De desfășurare a laboratorului	- Sală cu dotările necesare activităților practice, aparatură de analiză fizico-chimică și tehnică de calcul cu software specific instalat; - Prezența la activitățile de laborator este obligatorie în conformitate cu reglementările în vigoare; - Respectarea normelor de securitate și sănătate în muncă și protecția muncii în laboratoare cu caracter chimic; - Echipamentul de protecție (halat) este obligatoriu la ședințele experimentale; - Recuperarea activităților neefectuate din motive întemeiate se realizează în limita posibilităților organizatorice, cu acordul cadrului didactic titular.

6. Competențe

6.1 Competențele dobândite în urma absolvirii programului de studii	
Competențe Profesionale	
Codul competenței	Competență
CP14	Gândește în mod abstract: Demonstrează capacitatea de a utiliza concepte pentru a crea și înțelege generalizările și de a le corela sau conecta la alte elemente, evenimente sau experiențe.
CP7	Aplică metode științifice: Aplică metode și tehnici științifice pentru investigarea fenomenelor, dobândind noi cunoștințe sau corectând și integrând cunoștințele anterioare.
CP2	Analizează substanțe chimice: Se ocupă de studiul și testarea substanțelor chimice pentru a analiza compoziția și caracteristicile acestora.
CP11	Efectuează cercetare științifică: Se angajează în conceperea sau crearea de noi cunoștințe prin cercetarea, îmbunătățirea sau dezvoltarea de concepte, teorii, modele, tehnici, instrumente, software sau metode operaționale.
CP16	Întocmește rapoarte de lucru: Întocmește rapoarte de lucru care sprijină gestionarea eficace a documentării și evidențelor conform unor standarde înalte; prezintă rezultate într-un mod clar și inteligibil.
Competențe Transversale	
CT1	Dă dovadă de inițiativă: Este proactiv și face primul pas într-o acțiune fără a aștepta să afle ce spun sau fac ceilalți
CT2	Își asumă responsabilitatea: Acceptă responsabilitatea și răspunderea pentru propriile decizii și acțiuni profesionale sau pentru cele delegate altora
CT3	Gândește analitic: Gândește folosind logica și raționamentul pentru a identifica punctele tari și punctele slabe ale soluțiilor alternative, concluziilor sau abordărilor problemelor
CT4	Lucrează în echipe: Lucrează cu încredere în cadrul unui grup, fiecare făcându-și partea lui în serviciul întregului
CT5	Respectă angajamente: Îndeplinește sarcini în mod autodisciplinat, fiabil și cu orientare spre obiective

7. Rezultate ale învățării

7.1 Rezultatele învățării vizate prin disciplină, specifice programului de studii			
Codul competenței	Cunoștințe	Aptitudini	Responsabilitate și autonomie
CP2, CP14, CP16, CT1, CT2, CT3	Studentul/absolventul identifică și definește/explică concepte fundamentale de chimie (generală, anorganică, organică, analitică și chimie fizică) folosite în literatura de specialitate	Studentul/absolventul analizează și evaluează corect noțiunile fundamentale din domeniul chimiei, aplică teoriile și conceptele fundamentale pentru redarea și interpretarea caracteristicilor sistemelor chimice.	Studentul/absolventul utilizează corect teoriile și principiile fundamentale ale chimiei în context didactic și în laborator
CP11, CP14, CP16, CT1	Studentul/absolventul descrie și integrează cunoștințe specifice și interdisciplinare în activitatea profesională.	Studentul/absolventul aplică metode interdisciplinare adecvate pentru a rezolva probleme chimice complexe, teoretice și practice.	Studentul/absolventul își asumă responsabilitatea de a gestiona colaborări interdisciplinare și de a coordona activități în cadrul echipelor de lucru.

CP7, CP11, CP16, CT2, CT5, CT3, CT4	Studentul/absolventul recunoaște și reproduce concepte științifice din ramurile chimiei anorganice, organice, analitice și chimiei fizice.	Studentul/absolventul aplică conceptele majore din domeniul chimiei analitice, anorganice, organice, chimiei fizice, biochimiei, chimiei materialelor în practica chimică	Studentul/absolventul adaptează conceptele științifice majore din domeniul chimiei pentru a efectua cercetări, a îmbunătăți sau dezvolta noi concepte, cunoștințe, teorii și metode operaționale, produse și servicii pentru a le aplica în activitățile specifice pentru controlul calității produselor și proceselor.
7.2 Rezultatele învățării specifice disciplinei			
Cunoștințe			
- Studentul identifică și definește postulatele mecanicii cuantice, formalismul operatorilor hermitici, semnificația fizică a funcției de undă și ecuația Schrödinger, în scopul fundamentării teoretice a structurii electronice a atomilor și moleculelor. - Studentul explică și compară aproximațiile teoretice utilizate în chimia cuantică (aproximația Born-Oppenheimer, metodele variațională și perturbativă, modelul Hartree-Fock, teoriile MO și VB) pentru descrierea cantitativă a legăturii chimice. - Studentul corelează parametrii orbitali și de stare cuantică (energii de frontieră HOMO-LUMO, indici de sarcină, polarizabilitate, spin electronic) cu proprietățile fizico-chimice macroscopice și spectrale ale substanțelor chimice.			
Aptitudini			
- Studentul aplică tehnici matematice și instrumente TIC/software de calcul pentru a rezolva modele analitice și numerice fundamentale (particula în cutie, oscilatorul armonic, atomul de hidrogen). - Studentul determină experimental și simulează computațional indici structurali și fizico-chimici (densitate, indice de refracție, refracții atomice, moment de dipol electric permanent, absorbanță UV-Vis conform legii Lambert-Beer), analizând critic convergența dintre datele experimentale și cele calculate. - Studentul elaborează rapoarte de lucru și portofoliul de laborator în format riguros, sistematizând datele obținute conform procedurilor standard de operare și bunelor practici de laborator			
Responsabilitate și autonomie			
- Studentul aplică sistematic gândirea analitică și abstractă pentru a compara, analiza și valida critic structura, proprietățile și reactivitatea compușilor chimici, dezvoltându-și capacitatea de a acționa independent și autonom în activitatea de cercetare. - Studentul își asumă responsabilitatea pentru rigoarea calculelor și a măsurătorilor efectuate, respectând normele de securitate în laborator și etica profesională în cadrul echipelor de lucru.			

8. Conținut

8.1 Curs		Metode de predare	Observații (ore)
1	<i>Elemente fundamentale ale mecanicii cuantice</i> - Natura cuantică a materiei - Dualismul undă - corpuscul - Principiul de incertitudine a lui Heisenberg	prelegerea, conversația euristică, explicația	3 ore
2	<i>Formularea generală a mecanicii cuantice</i> - Stări și observabile - Transformări și operator	prelegerea, conversația euristică, explicația	3 ore
3	- Proprietăți generale ale operatorilor, operatori liniari și hermitici - Valori proprii și vectorii proprii ale operatorilor	prelegerea, conversația euristică, explicația	3 ore
4	<i>Aplicații ale mecanicii cuantice</i> - Ecuația lui Schrödinger - Semnificația fizică al funcției de undă	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația	3 ore
5	- Atomul de hidrogen (hidrogenoidul) - Funcțiile de undă (orbitalele atomice) pentru atomul de hidrogen	prelegerea, conversația euristică, explicația, modelarea	3 ore
6	- Semnificația fizică a orbitalelor atomice hidrogenoide <i>Spinul electronic în mecanica cuantică</i> - Necesitatea spinului electronic	prelegerea, conversația euristică, explicația	3 ore
7	- Teoria lui Pauli a spinului electronic - Operatorii de spin - Principiul lui Pauli; Determinant Slater	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația	3 ore
8	<i>Sisteme multielectronice</i> - Funcția de undă totală pentru starea fundamentală a atomului de heliu; Corelația electronică	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația	3 ore
9	<i>Metode aproximative ale mecanicii cuantice aplicabile în chimia cuantică</i> - Metoda variațională - Metoda perturbațiilor independente de timp	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația	3 ore

8.1 Curs		Metode de predare	Observații (ore)
10	- Perturbații dependente de timp - Hamiltonianul unui sistem atomic multielectronic	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația, modelarea	3 ore
11	- Modelul câmpului autoconsistent (Hartree – Fock) al structurii atomice <i>Abordarea sistemelor moleculare în chimia cuantică</i> - Hamiltonianul molecular. Aproximația Born – Oppenheimer	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația, modelarea	3 ore
12	- Metoda orbitalelor moleculare a lui Roothaan (LCAO-MO) - Introducere în metode <i>ab-initio</i> și DFT <i>Natura legăturii chimice. Stările electronice ale moleculei diatomice</i> - Teoria cuantică a legăturii covalente. Ionul molecular de hidrogen (H_2^+)	prelegerea, conversația euristică, explicația, demonstrația, modelarea	3 ore
13	- Stările electronice ale moleculei de hidrogen în teoria orbitalelor moleculare (OM)	prelegerea, conversația euristică, explicația	3 ore
14	- 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. 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 Laborator		Metode de predare	Observații (ore)
1	Sisteme de coordonate în mecanica și chimia cuantică (carteziene, polare sferice).	Explicația, studiu de caz, conversația, demonstrația	3 ore
2	Operatorul Laplacean în coordonate polare sferice și aplicații de transformare a operatorilor	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	3 ore
3	Studiul comportării unei particule într-o cutie de potențial monodimensională și tridimensională	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	3 ore
4	Studiul oscilatorului armonic liniar: funcții proprii Hermite și stări de vibrație moleculară	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	3 ore
5	Trecerea unei particule printr-o barieră de potențial dreptunghiulară; Efectul tunel cuantic.	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	3 ore
6	Operatorii momentului cinetic în coordonate polare sferice; Relații de comutare ale operatorilor.	Explicația, studiu de caz, conversația	3 ore
7	Valorile proprii și funcțiile proprii ale operatorului proiecției momentului cinetic pe axa z (L_z)	Explicația, studiu de caz, conversația, simulare	3 ore
8	Valorile proprii și funcțiile proprii ale operatorului momentului cinetic la pătrat (L^2)	Conversație, explicație, simulare, problematizarea	3 ore
9	Studiul componentei radiale a funcției de undă pentru atomii hidrogenoizi. Reprezentarea grafică și interpretarea fizică a orbitalelor atomice (aplicații pe calculator)	Conversație, probă practică, demonstrație	3 ore
10	Determinarea experimentală a unor parametri fizico – chimici (densitate, concentrație, indice de refracție, indici spectrali) esențiali pentru înțelegerea comportamentului fizico-chimic al substanțelor	Conversație, probă practică, demonstrație	3 ore

8.2 Laborator		Metode de predare	Observații (ore)
	Verificarea legii Lambert-Beer și analiza spectrală în domeniul UV-Vis; Corelarea spectrelor cu tranzițiile electronice		
11	Studiul refracțiilor atomice și ionice și corelarea acestora cu structura moleculară	Conversație, probă practică, demonstrație, modelare	6 ore
12	Studiul structurii moleculare prin măsurarea momentelor de dipol electric permanent	Conversație, probă practică, demonstrație, modelare	3 ore
13	Aplicații ale spinului electronic și operatorilor de spin în structura sistemelor moleculare poliatomice	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. 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. 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

Conținuturile disciplinei sunt orientate spre dezvoltarea capacității studenților de a utiliza corect concepte fundamentale, metode matematice și teoretice riguroase, precum și tehnici moderne de modelare computațională pentru descrierea structurii electronice și a reactivității sistemelor chimice. Disciplina asigură fundamentul conceptual esențial pentru înțelegerea legităților fizico-chimice care guvernează materia la nivel atomic și molecular, răspunzând cerințelor actuale ale pieței muncii, centrelor de cercetare științifică, laboratoarelor de analiză fizico-chimică, diagnostic structural și controlul calității din industria chimică și ramurile conexe

10. Evaluare

10.1 Evaluare continuă		Pondere (min. 30%)		30		
Curs	Forma de evaluare					
	Pondere					
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale					
	Metode de evaluare	Detalii	Pondere	cu reexaminare		
Laborator	Forma de evaluare		Verificare mixtă			
	Pondere		100			
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale		Da			
	Metode de evaluare	Detalii	Pondere	cu reexaminare		
		Verificare scrisă periodică		80	Da	
		Portofoliu		20	Da	
10.2 Evaluare finală		Pondere (max. 70%)		70		
		Forma de evaluare		Verificare mixtă finală		

10.3 Mențiuni (situații speciale în evaluare)

- Evaluarea studenților se realizează în conformitate cu cerințele și criteriile de evaluare prezentate la începutul semestrului, cu respectarea principiilor transparenței, obiectivității și egalității de șanse.
- Criteriile de evaluare reflectă direct rezultatele învățării vizate la nivelul disciplinei și al programului de studii Chimie.
- În cazul activităților de laborator, recuperarea activităților neefectuate din motive medicale sau justificate se realizează în limita posibilităților organizatorice, cu respectarea normelor de securitate a muncii și cu acordul cadrului didactic titular.
- Pentru studenții aflați în mobilitate internațională sau cu cerințe speciale documentate, modalitatea de evaluare poate fi adaptată regulamentar, fără diminuarea standardelor de competență.
- Accesul la examenul final este condiționat de efectuarea integrală a lucrărilor de laborator și de obținerea notei minime 5 la ambele componente ale evaluării continue. Tentativa de fraudă și fraudă se sancționează conform Cartei Universitare.

10.4 Standard minim de performanță

- Obținerea notei minime 5 (cinci) la fiecare componentă de evaluare: evaluarea continuă la curs, evaluarea continuă la laborator și examenul scris final;
- Cunoașterea și explicarea corectă a conceptelor cuantice fundamentale: semnificația fizică a funcției de undă, ecuația Schrödinger, scrierea hamiltonianului unui sistem molecular și aproximația Born-Oppenheimer;
- Cunoașterea principalelor modele și teorii utilizate în studiul legăturii chimice (comparație critică între metoda orbitalilor moleculari MO și a legăturii de valență VB);
- Abilitatea de a efectua calcule specifice pentru indici structurali și fizico-chimici (densitate, refracție, moment de dipol, spectru electronic) și de a corela rezultatele experimentale cu modelele cuantice teoretice

**Data completării,
214.09.2026**

**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**