# FIŞA DISCIPLINEI

## 1. Date despre program

| | |
|---|---|
| **1.1** Instituţia de învăţământ superior | **Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iaşi** |
| **1.2** Facultatea | **Facultatea de Chimie** |
| **1.3** Departamentul | **DEPARTAMENTUL DE CHIMIE** |
| **1.4** Domeniul de studii | **Chimie** |
| **1.5** Ciclul de studii | **Licenţă** |
| **1.6** Programul de studii / Calificarea | **Chimie medicală** |

## 2. Date despre disciplină

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **2.1** Denumirea disciplinei | | | Chimie medicală computațională și structurală | | | | |
| **2.2** Titularul activităţilor de curs | | | Conf. Dr. IONEL HUMELNICU | | | | |
| **2.3** Titularul activităţilor de laborator | | | Conf. Dr. IONEL HUMELNICU | | | | |
| **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 – Opţional / F – Facultativ*

## 3. Timpul total estimat (ore pe semestru si activitati didactice)

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| **3.1** Număr de ore pe săptămână | 6 | **3.2** curs | 3 | **3.3** laborator | 3 |
| **3.4** Total ore din planul de învăţământ | 84 | **3.5** curs | 42 | **3.6** laborator | 42 |
| Distribuţia fondului de timp | | | | | ore |
| Studiu după manual, suport de curs, bibliografie şi altele | | | | | 28 |
| Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate şi pe teren | | | | | 14 |
| Pregătire laboratoare, teme, referate, portofolii şi eseuri | | | | | 16 |
| Tutoriat | | | | | 4 |
| Examinări | | | | | 4 |
| Alte activităţi | | | | | 0 |

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

## 4. Precondiţii - De curriculum (dacă este cazul)

| |
|---|
| Matematică, Bazele chimiei anorganice, Bazele chimiei organice |

## 5. Condiţii (dacă este cazul)

| | |
|---|---|
| **5.1** De desfăşurare a cursului | Cursul se va desfăşura on-site în cadrul Facultății de Chimie, în amfiteatru cu tablă, videoproiector și conexiune la internet. Studenţii vor consulta suportul de curs pus la dispoziţie înaintea fiecărei prelegeri pe platforma MOODLE. Se va stimula participarea interactivă. Utilizarea telefonului sau a altor dispozitive electronice este permisă exclusiv pentru activitățile didactice din cadrul cursului. |
| **5.2** De desfăşurare a laboratorului | Laborator dotat cu 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. Studenții vor fi admiși la activitățile experimentale doar cu echipament de protecție adecvat (halat) și după însușirea normelor de securitate și sănătate în muncă. Recuperarea activităților neefectuate se realizează în limita posibilităților organizatorice, conform regulamentului și cu acordul cadrului didactic titular. |

## 6. Competențe

| 6.1 Competențele dobândite în urma absolvirii programului de studii | |
|---|---|
| Competențe Profesionale | |
| Codul competenței | Competență |
| CP27 | **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. |
| CP13 | **Efectuează simulări de laborator**: Efectuează simulări pe prototipuri, sisteme sau produse chimice recent dezvoltate utilizând echipamente de laborator. |
| CP30 | **Aplică metode științifice:** Aplică metode și tehnici științifice pentru investigarea fenomenelor, dobândind noi cunoștințe sau corectând și integrând cunoștințele anterioare |
| CP3 | **Analizează substanțe chimice:** Se ocupă de studiul și testarea substanțelor chimice pentru a analiza compoziția și caracteristicile acestora |
| CP14 | **Documentează rezultatele analizelor:** Documentează pe suport hârtie sau pe dispozitive electronice procesul și rezultatele analizelor efectuate asupra eșantioanelor |
| 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 | **Conduce controlul calității:** Urmărește excelența în procesele, produsele și activitățile de la locul de muncă |
| CT5 | **Respectă angajamente:** Îndeplinește sarcini în mod autodisciplinat, fiabil și cu orientare spre obiective |

## 7. Rezultate ale învăţării

| 7.1 Rezultatele învățării vizate prin disciplină, specifice programului de studii | | | |
|---|---|---|---|
| Codul competenței | Cunoștințe | Aptitudini | Responsabilitate și autonomie |
| CP3, CP13, CP14, CP27, 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 |
| CP30, CT2, CT3, CT5 | 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 definește și explică postulatele mecanicii cuantice, ecuația Schrödinger, semnificația funcției de undă și operatorii cuantici (hermitici, de moment cinetic, de spin), în scopul înțelegerii structurii electronice a materiei la nivel atomic și molecular.<br>- Studentul descrie și compară aproximația Born-Oppenheimer, metoda câmpului autoconsistent Hartree-Fock, metoda orbitalilor moleculari (MO) și a legăturii de valență (VB), recunoscând limitele și domeniul lor de aplicabilitate în chimia structurală.<br>- Studentul corelează parametrii cuantici calculați (densitate electronică, orbitali de frontieră HOMO-LUMO, moment de dipol) cu proprietățile fizico-chimice macroscopice și cu reactivitatea compușilor chimici și moleculelor biologic active. |
| Aptitudini |
| - Studentul utilizează tehnica de calcul și pachete software specializate pentru a construi geometrii moleculare, a simula comportamentul sistemelor cuantice model (particula în cutie, oscilator armonic) și a vizualiza orbitali atomici și moleculari 3D.<br>- Studentul măsoară experimental și calculează indici fizico-chimici (densitate, indice de refracție, refracții atomice, moment de dipol electric permanent, absorbanță UV-Vis conform legii Lambert-Beer) și compară rezultatele experimentale cu modelele teoretice.<br>- Studentul elaborează rapoarte tehnice și un portofoliu de lucrări practice, integrând datele experimentale și cele obținute prin simulare computațională conform standardelor academice și profesionale. |
| Responsabilitate și autonomie |
| - Studentul aplică sistematic gândirea abstractă, spiritul critic și rigoarea științifică pentru investigarea și rezolvarea problemelor complexe de structură electronică și reactivitate chimică.<br>- Studentul își asumă responsabilitatea pentru execuția autonomă a calculelor și simulărilor, respectând termenele de predare, etica raportării datelor științifice și regulile de lucru în echipă în cadrul laboratorului. |

## 8. Conţinut

| **8.1 Curs** | | **Metode de predare** | **Observaţii** (ore) |
|---|---|---|---|
| 1 | *Elemente fundamentale ale mecanicii cuantice*<br>- Natura cuantică a materiei<br>- Dualismul undă - corpuscul<br>- Principiul de incertitudine a lui Heinsenberg | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia | 3 ore |
| 2 | *Formularea generală a mecanicii cuantice*<br>- Stări şi observabile<br>- Transformări şi operator | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia | 3 ore |
| 3 | - Proprietăţi generale ale operatorilor, operatori liniari și hermitici<br>- Valori proprii şi vectorii proprii ale operatorilor | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia | 3 ore |
| 4 | *Aplicaţii ale mecanicii cuantice*<br>- Ecuaţia lui Schrödinger<br>- Semnificaţia fizică al funcţiei de undă | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia | 3ore |
| 5 | - Atomul de hidrogen (hidrogenoidul)<br>- Funcţiile de undă (orbitalele atomice) pentru atomul de hidrogen | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia, modelarea | 3 ore |
| 6 | - Semnificaţia fizică a orbitalelor atomice hidrogenoide<br>*Spinul electronic în mecanica cuantică*<br>- Necesitatea spinului electronic | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia | 3 ore |
| 7 | - Teoria lui Pauli a spinului electronic<br>- Operatorii de spin<br>- Principiul lui Pauli; Determinant Slater | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia, demonstraţia | 3 ore |
| 8 | *Sisteme multielectronice*<br>- Funcţia de undă totală pentru starea fundamentală a atomului de heliu; Corelaţia electronică | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia, demonstraţia | 3 ore |
| 9 | *Metode aproximative ale mecanicii cuantice aplicabile în chimia cuantică*<br>- Metoda variaţională<br>- Metoda perturbaţiilor independente de timp | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia, demonstraţia | 3 ore |
| 10 | - Perturbaţii dependente de timp<br>- Hamiltonianul unui sistem atomic multielectronic | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia, demonstraţia, modelarea | 3 ore |
| 11 | - Modelul câmpului autoconsistent (Hartree – Fock) al structurii atomice<br>*Abordarea sistemelor moleculare în chimiea cuantică*<br>- Hamiltonianul molecular. Aproximaţia Born – Oppenheimer | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia, demonstraţia, modelarea | 3 ore |
| 12 | - Metoda orbitalelor moleculare a lui Roothaan (LCAO-MO)<br>- Introducere în metode *ab-initio* și DFT<br>*Natura legăturii chimice. Stările electronice ale moleculei diatomice*<br>- Teoria cuantică a legăturii covalente. Ionul molecular de hidrogen ($H_2^+$) | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia, demonstraţia, modelarea | 3 ore |
| 13 | - Stările electronice ale moleculei de hidrogen în teoria orbitalelor moleculare (OM) | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia | 3 ore |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 14 | - Molecula de hidrogen în teoria legăturii de valenţă (VB)<br>- Molecula de hidrogen. Introducerea spinul în funcţia de undă şi comparaţie între metoda MO şi VB | prelegerea, conversaţia euristică, explicaţia, demonstraţia, modelarea | 3 ore |

**Bibliografie**


1. C. Ghirvu, I. Humelnicu, “Introducere în Chimia cuantică – Principii şi metode generale”, Editura Matrix Rom, Bucureşti, 2011
2. I. Humelnicu, Iuliana Voicu, C. Ghirvu, M. Constantinescu, “Chimie cuantică - Aplicaţii generale şi probleme. Partea I – atomistică”, Editure Universităţii < Alexandru Ioan Cuza > Iaşi, 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, Bucureşti, 1976
5. I.G. Murgulescu, “Introducere în Chimia fizică - Structura şi proprietăţile moleculelor”, vol. I, 2, Editura Academiei Române, Bucureşti, 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 şi reactivitate moleculară”, Institutul Politehnic Iaşi, 1979
10. G. Schatz, M. Ratner, “Quantum Mechanics in Chemistry”, Courier Dover Publications, 2002


| **8.2 Laborator** | | **Metode de predare** | **Observaţii** (ore) |
|---|---|---|---|
| 1 | Sisteme de coordonate în mecanica şi chimia cuantică (carteziene, polare sferice) | Explicaţia, studiu de caz, conversaţia, demonstraţia | 3 ore |
| 2 | Operatorul Laplacean în coordonate polare sferice și aplicarea acestuia | Explicaţia, studiu de caz, conversaţia, simulare | 3 ore |
| 3 | Studiul comportării unei particule într-o cutie de potenţial | Explicaţia, studiu de caz, conversaţia, simulare | 3 ore |
| 4 | Studiul oscilatorului armonic liniar; funcții proprii și stări energetice | Explicaţia, studiu de caz, conversaţia, simulare | 3 ore |
| 5 | Trecerea unei particule printr-o barieră de potenţial dreptunghiulară. Efectul tunel | Explicaţia, studiu de caz, conversaţia, simulare | 3 ore |
| 6 | Operatorii momentului cinetic în coordonate polare sferice. Relaţii de comutare | Explicaţia, studiu de caz, conversaţia | 3 ore |
| 7 | Valorile proprii şi funcţiile proprii ale operatorului proiecţiei momentului cinetic pe axa z ($L_z$) | Explicaţia, studiu de caz, conversaţia, simulare | 3 ore |
| 8 | Valorile proprii şi funcţiile proprii ale operatorului momentului cinetic la pătrat ($L^2$) | Conversaţie, explicaţie, 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) | Conversaţie, probă practică, demonstraţie | 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<br>Verificarea legii Lambert-Beer și analiza spectrală în domeniul UV-Vis; Corelarea spectrelor cu tranzițiile electronice | Conversaţie, probă practică, demonstraţie | 3 ore |
| 11 | Studiul refracţiilor atomice şi ionice şi corelarea acestora cu structura moleculară | Conversaţie, probă practică, demonstraţie, modelare | 6 ore |
| 12 | Studiul structurii moleculare prin măsurarea momentelor de dipol electric permanent | Conversaţie, probă practică, demonstraţie, modelare | 3 ore |
| 13 | Aplicaţii ale spinului electronic şi operatorilor de spin în structura sistemelor moleculare poliatomice | Explicaţia, studiu de caz, conversaţia, simulare | 3 ore |

**Bibliografie**

1. I. Humelnicu, Iuliana Voicu, C. Ghirvu, M. Constantinescu, “Chimie cuantică - Aplicaţii generale şi probleme. Partea I – atomistică”, Editura Universităţii Iaşi, 2004, oricare reeditare
2. C. Ghirvu, I. Humelnicu, “Chimie cuantică - Aplicaţii generale şi probleme. Partea II – Structură moleculară”, Editura Universităţii Iaşi, 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, Bucureşti, 1976
7. I.G. Murgulescu, “Introducere în Chimia fizică - Structura şi proprietăţile moleculelor”, vol. I, 2, Editura Academiei Române, Bucureşti, 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 conţinutului disciplinei cu aşteptările reprezentanţilor comunităţii, asociaţiilor profesionale şi angajatorilor reprezentativi din domeniul aferent programului

Conținuturile disciplinei sunt orientate spre dezvoltarea capacității studenților de a utiliza corect concepte fundamentale, metode teoretice riguroase și instrumente software de modelare computațională pentru interpretarea structurii electronice și proprietăților compușilor chimici și biologic activi. Disciplina asigură baza conceptuală necesară înțelegerii relației dintre structura electronică/spațială și reactivitatea substanțelor, răspunzând cerințelor actuale ale centrelor de cercetare-dezvoltare, ale laboratoarelor de analiză fizico-chimică, diagnostic structural și controlul calității din industria chimică, farmaceutică și medicală

## 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 Menţiuni (situaţii speciale în evaluare)**

- Evaluarea studenților se realizează în conformitate cu cerințele și criteriile de evaluare prezentate la începutul semestrului, cu respectarea principiilor transparenței, egalității de șanse și eticii academice.
- În cazul activităților practice de laborator, recuperarea absențelor motivate se realizează în limita posibilităților organizatorice, prin activități stabilite de comun acord cu cadrul didactic titular, respectând normele de securitate a muncii.
- Pentru studenții aflați în mobilitate internațională sau cu cerințe educaționale speciale documentate, evaluarea 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 fiecare componentă a evaluării continue. Tentativa de fraudă și frauda se sancționează conform Cartei Universitare.

| **10.4 Standard minim de performanţă** |
| --- |
| - Obținerea notei minime 5 (cinci) la fiecare dintre probele de evaluare: evaluarea continuă la curs, evaluarea continuă la laborator și examenul scris final.<br>- Cunoașterea și explicarea corectă a conceptelor cuantice fundamentale: ecuația Schrödinger, semnificația fizică a funcției de undă, aproximația Born-Oppenheimer și modelul Hartree-Fock.<br>- Însușirea principiilor metodelor teoretice de investigare a legăturii chimice (comparația critică între teoria MO și VB).<br>- Abilitatea de a efectua calcule specifice și de a interpreta mărimile determinate experimental la laborator (indice de refracție, momente de dipol, absorbanță UV-Vis) prin raportare la modelele teoretice. |

**Data completării,** **Titular de curs,** **Titular de laborator,**

**Conf. Dr. IONEL HUMELNICU** **Conf. Dr. IONEL HUMELNICU**

**Data avizării în departament,** **Director de departament,**

**Prof. Dr. MIHAIL LUCIAN BIRSA**