

FIȘA DISCIPLINEI

Structura și proprietățile moleculelor, anul universitar 2020-2021

1. Date despre program

1.1	Instituția de învățământ superior	Universitatea din Pitești
1.2	Facultatea	Științe, Educație fizică și Informatică
1.3	Departamentul	Științe ale naturii
1.4	Domeniul fundamental	Chimie
1.5	Ciclul de studii	Licență
1.6	Programul de studiu / calificarea	Chimie / Chimie

2. Date despre disciplină

2. Date despre disciplina											
2.1	Denumirea disciplinei					Structura și proprietățile moleculelor					
2.2	Titularul activităților de curs					Lector univ. dr. Gabriel Bratu					
2.3	Titularul activităților de seminar / laborator					Lector univ. dr. Gabriel Bratu					
2.4	Anul de studii	II	2.5	Semestrul	I	2.6	Tipul de evaluare	E	2.7	Regimul disciplinei	O

3. Timpul total estimat

3.1	Număr de ore pe săptămână	4	3.2	din care curs	2	3.3	seminar	2
3.4	Total ore din planul de învăț.	56	3.5	din care curs	28	3.6	seminar	28
Distribuția fondului de timp alocat studiului individual								ore
Studiu după manual, suport de curs, bibliografie și notițe								32
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren								24
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii, eseuri								24
Tutorat								8
Examinări								6
Alte activități								--
3.7	Total ore studiu individual	94						
3.8	Total ore pe semestru	150						
3.9	Număr de credite	6						

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1	De curriculum	Cunoștințe generale de chimie, fizică și matematică.
4.2	De competențe	Utilizarea în mod adecvat și în context a terminologiei de specialitate

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1	De desfășurare a cursului	Sală dotată cu videoproiector și ecran
5.2	De desfășurare a seminarului	Laboratorul disciplinei (sala S014), calculator, internet, materiale cu aplicații de calcul corelate cu tematica de curs.

6. Competențe specifice vizate

Competențe profesionale	C1. Operarea cu noțiuni de structură și reactivitatea compușilor chimici (PC=2/6) C2. Determinarea compoziției, structurii și proprietăților fizico-chimice ale unor compuși chimici (PC=2/6) C4. Abordarea interdisciplinară a unor teme din domeniul chimiei (PC=1/6)
Competențe transversale	CT1. Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată (PC=0,5/6) CT3. Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională asistată, atât în limba română, cât și într-o limbă de circulație internațională. (PC=0,5/6)

7. Obiectivele disciplinei

7.1 Obiectivul general al disciplinei	Dezvoltarea de competențe în domeniul determinării și interpretării structurii moleculare
7.2 Obiectivele specifice	<p><i>Obiective cognitive</i></p> <ul style="list-style-type: none"> Cunoașterea terminologiei, vocabularului chimic, proprietăților, principiilor, legilor, fenomenelor și proceselor studiate; Înțelegerea și aplicarea principiilor și legilor în context diferit; Analiza interrelațiilor structură – proprietăți, cauză – efect, specifice temelor studiate. <p><i>Obiective procedurale</i></p> <ul style="list-style-type: none"> Aplicarea corectă a principiilor și legilor chimiei în rezolvarea aplicațiilor practice; Dezvoltarea capacității de investigare experimentală în cadrul metodelor de investigare fizico-chimică a materialelor; Formarea capacității de corelare a parametrilor măsurabili cu proprietățile compușilor analizați.

	<p><i>Obiective atitudinale</i></p> <ul style="list-style-type: none"> crearea deprinderilor practice în efectuarea unei lucrări de laborator, a unor calcule matematice specifice și de interpretare în mod corespunzător a rezultatelor obținute; identificarea surselor de informații pentru atingerea obiectivelor propuse; conștientizarea și cultivarea responsabilităților privind disciplina în efectuarea muncii din punct de vedere a corectitudinii, al respectării termenelor impuse, al respectului față de colegi, față de membrii echipei în care își desfășoară activitatea; cultivarea unei atitudini pozitive, de dialog cu spirit de inițiativă, în spiritul respectului față de profesia de chimist.
--	--

8. Conținuturi

8.1. Curs		Nr. ore	Metode de predare	Observații Resurse folosite
1	Noțiuni introductive de structură moleculară. Teoria legăturii ionice. Teoria lui Kossel. Scara electronegativității elementelor. Energia legăturii ionice. Proprietăți calculabile pe aceste baze.	2	Prelegere Dezbateri Studiu de caz	Calculator Videoproiector Suport documentar
2	Teoria legăturii covalente. Teoria clasică despre legătura covalentă. Metoda orbitalelor moleculare. Aplicarea metodei orbitalelor moleculare la molecula de H_2^+ . Aplicarea metodei LCAO-MO la molecule diatomice homonucleare. Configurația electronică a moleculelor diatomice homonucleare.	2		
3	Configurația electronică a unor molecule diatomice heteronucleare. Polaritatea legăturii. Tratarea legăturii în moleculele poliatomice. Molecule în care apar legături σ provenite din orbitale atomice pure. Molecule în care apar legături σ provenite din orbitale atomice hibride. Hibridizarea.	2		
4	Tratarea legăturii în moleculele poliatomice. Molecule în care apar legături π localizate. Molecule în care apar legături π delocalizate.	2		
5	Indici statici de reactivitate. Metoda orbitalelor moleculare aplicată la metale.	2		
6	Nivele de organizare structurală la biomolecule. Considerații generale privind tratarea legăturii la biomolecule. Structura primară a proteinelor și enzimelor. Structura secundară, terțiară și cuaternară.	2		
7	Forțe intermoleculare. Clasificare. Interacția prin punți de hidrogen. Interacția prin transfer de sarcină. Interacții hidrofobe	2		
8	Metode pentru determinarea caracteristicilor structurale ale moleculelor. Fundamentarea metodelor. Clasificarea metodelor de studiu structural. Comportarea moleculei în câmp electric. Acțiunea câmpului electric continuu și alternativ. Aditivitatea refracțiilor atomice. Calculul teoretic al momentului de dipol. Comportarea moleculelor în câmp magnetic. Determinarea experimentală a susceptibilității magnetice. Calculul proprietăților magnetice.	2		
9	Rezonanța magnetică nucleară. Principiul metodei. Deplasarea chimică. Tipuri de cuplaje. Particularitățile spectroscopiei RMN C13. Rezonanța electronică de spin. Structura hiperfină a spectrelor RES. Marcajul de spin. Studiul radicalilor prin metoda captării de spin.	2		
10	Comportarea moleculei în câmpuri electrice și magnetice combinate. Spectrometria de masă. Metode cuplate cu spectrometria de masă. Activitatea optică. Chiralitatea moleculară. Rotația optică și implicațiile structurale. Importanța studiului activității optice în biologie.	2		
11	Spectre moleculare. Tipuri de tranziții și nivele de energie moleculară. Spectre de rotație la molecule biatomice și poliatomice. Spectre de vibrație la moleculele diatomice.	2		
12	Spectre de vibrație – rotație ale moleculelor diatomice. Molecule poliatomice. Tehnica spectroscopiei de vibrație.	2		
13	Spectre electronice. Stările electronice și spectrele electronice ale moleculelor diatomice. Principiul Frank – Condon pentru procese intramoleculare. Spectrele electronice ale moleculelor poliatomice.	2		
14	Metode de determinare a parametrilor structurali bazate pe studiul difracției radiațiilor. Obținerea informațiilor structurale prin utilizarea izotopilor. Obținerea informațiilor structurale pentru substanțe în stare lichidă din măsurători de vâscozitate, densitate și din proprietăți superficiale.	2		
Bibliografie: 1. G. Bratu. Structură moleculară. EUP. Pitesti. 2014:				

2. G. Bratu, C. Mandravel, Chimie fizică, EUP, Pitești, 2003;
3. G. Bratu, Chimie fizică. Introducere în studiul structurii atomice și moleculare, EUP, Pitești, 1999;
3. P. W. Atkins, J de Paula Tratat de Chimie fizica, Ed. Tehnica, 2005;
4. I. G. Murgulescu, Introducere în Chimia fizică – Structura și proprietățile moleculelor, vol. I, 2, edit. Acad. Române, București, 1978;
5. P. W. Atkins și C. A. Trapp – Exerciții și probleme rezolvate de chimie fizică, Edit. Tehnică, București, 1997.
6. C. Ghirvu, I. Humelnicu, Introducere în chimia cuantică – principii și metode generale, Editura Matrix Rom, București, 2011;
7. M.V. Putz, M. Lazea, A. Chiriac, Introducere în chimie-fizică. Structura și proprietățile atomilor și moleculelor, Editura Mirton, Timișoara, 2010;
8. P. W. Atkins, Tratat de chimie fizică, Editura tehnică, București, 2005;
9. I. Humelnicu, C. Ghirvu, Elemente de spectroscopie moleculară, Editura Tehnopress, Iași, 2003;
10. J. Zsako, M.T. Cotisel, Simetria și structura moleculelor, Presa Universitară Clujeană, Cluj-Napoca, 1998;
11. J. Zsako, L. D. Bobos, I. Marian, Structura chimica, Curs litografiat, Litografia Universității Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca, 1995;
12. R. Daudel, G Leroy, D. Peeters, M. Sana, Chimie cuantică, Editura Academiei. Române, București, 1988
13. C. Ghirvu, Mecanică cuantică, I. P. Iași, 1983;
14. Ș. Moldoveanu, A. Savin, Aplicații în chimie ale metodelor semiempirice de orbitali moleculari, Editura Academiei Române, București, 1980;
15. C. Ghirvu, Chimie fizică. Elemente de structură și reactivitate moleculară, Editura Institutului Politehnic Iași, 1979
16. I.G. Murgulescu, Introducere în Chimia fizică - Atomii, molecule, legătura chimică, vol. I. 1, Editura Academiei Române, București, 1976;
17. A. Messiah, Mecanică cuantică, Editura Științifică, București, 1974;
18. C. Ghirvu, Structură chimică, Editura Universității "Al. I. Cuza" Iași, 1973;
19. Note de curs in format electronic transmise studenților pe CD sau memory stick.

8.2. Aplicații: Seminar		Nr. ore	Metode de predare	Observații Resurse folosite
1	Metode de prelucrare a datelor experimentale.	2	Prelegere Dezbateri Exerciții Algoritmizarea Învățarea prin descoperire Studiul de caz Lucrul în grup	Culegeri cu aplicații de calcul
2	Studiul ionului molecular de hidrogen și a moleculei de hidrogen.	2		
3	Analiza structurii moleculelor cu ajutorul spectrelor H-RMN	2		
4	Studiul reactivității sistemelor moleculare. Probleme referitoare la interpretarea spectrelor moleculare.	2		
5	Integrale de schimb și suprapunere.	2		
6	Mișcarea particulelor încărcate electric în câmpuri electrice longitudinale și transversale.	2		
7	Deviația particulelor încărcate electric în câmpuri magnetice transversale și longitudinale.	2		
8	Metoda parabolilor. Analizoare magnetice și electrice. Tipuri de spectrometre de masă.	2		
9	Dualismul corpuscul-undă. Efect fotoelectric. Efect Compton. Radiația corpului negru. Teoria cuantelor lui Planck.	2		
10	Sondarea atomilor cu electroni și particule grele. Modelul atomic al lui Bohr. Serii spectrale. Constanta lui Rydberg.	2		
11	Ipoteza lui de Broglie. Particula și pachetul de unde. Relații de incertitudine.	2		
12	Probabilitatea de localizare a electronilor în atom. Orbitali atomici. Numere cuantice.	2		
13	Spinul electronului. Modelul vectorial al atomului. Termeni spectrali. Stări fundamentale.	2		
14	Radiația X. Spectrul continuu și discret al radiației X. Interacțiunea lor cu substanța. Efectul Zeeman. Rezonanță electronică de spin.	2		

Bibliografie

1. G. Bratu, Structură moleculară, EUP, Pitești, 2014;
2. G. Bratu, Chimie fizică. Lucrări practice, EUP, Pitești, 2005;
3. G. Bratu, C. Mandravel, Chimie fizică, Editura Universității din Pitești, Pitești, 2003;
4. G. Bratu, Chimie fizică. Introducere în studiul structurii atomice și moleculare, EUP, Pitești, 1999;
5. C. Ghirvu, I. Humelnicu, Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea II – Structură moleculară, Editura Universității "Al.I. Cuza" Iași, 2005;
6. I. Humelnicu, Iuliana Voicu, C. Ghirvu, M. Constantinescu, Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea I – atomistică, Editura Universității Alexandru Ioan Cuza Iași, 2002;
7. I. Humelnicu, I. Voicu, C. Ghirvu, M. Constantinescu, Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea I - atomistică, Editura Universității Al.I. Cuza Iași, 2002;
8. P. W. Atkins, C. A. Trapp, Exerciții și probleme rezolvate de chimie fizică, Editura tehnică, București, 1997;
9. Z. Andrei, I. Zsako, L. D. Bobos, Lucrări practice de termodinamică și structură chimică, Litografia Universității Babeș Bolyai, Cluj-Napoca, 1995;
10. V.Em.Sahini, M. Hillebrand, Chimie cuantică în exemple și aplicații, Editura Academiei Române, București, 1985;
11. G. Niac, V. Voiculescu, I. Bâldea, M. Preda, Formule, tabele și probleme de chimie fizică, Editura Dacia, Cluj-Napoca, 1984;
12. Ș. Moldoveanu, A. Savin, Aplicații în chimie ale metodelor semiempirice de orbitali moleculari, Editura Academiei

Române, București, 1980;	
8.3. Tema de casă	
1	Se solicită fiecărui student să elaboreze un referat cu temă impusă/aleasă, pe baza conținutului predat la curs, urmărindu-se familiarizarea studenților cu cerințele de redactare a lucrărilor de finalizare a studiilor, de scriere a unei referințe bibliografice, etc.
Bibliografie * Note de curs.Literatura de specialitate.	

9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori din domeniul aferent programului

Competențele dobândite la disciplină permit absolvenților programului să lucreze ca: Chimist – 211301; Cercetător în chimie – 211306.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.1 Curs	Prezență Temă de casă Evaluare finală	Prezență curs Referat pe o temă aleasă Probă scrisă – subiecte teoretice și studii de caz	10% 20% 50%
10.2 Seminar	Rezolvarea studiilor de caz și completarea fișelor de lucru la seminar.	Probă scrisă	20%
10.3 Standard minim de performanță	2,5 puncte acumulate din evaluarea activităților periodice și 2,5 puncte la evaluarea finală; Nota 5 la testul de evaluare finală și rezolvarea în proporție de 50% a cerințelor de la seminar și a temei de casă.		

Data completării
17.09.2020

Titular de curs,
Lector univ. dr. Gabriel Bratu

Titular de laborator,
Lector univ. dr. Gabriel Bratu

Data aprobării în Consiliul departamentului,
30.09.2020

Director de departament,
Conf. univ. dr. Soare Liliana Cristina