

## FIȘA DISCIPLINEI

**Chimie computațională,**  
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 de studii	Chimie
1.5	Ciclul de studii	Licență
1.6	Programul de studiu / calificarea	Chimie/ Chimist

**2. Date despre disciplină**

2. Date despre disciplina											
2.1	Denumirea disciplinei					Chimie computațională					
2.2	Titularul activităților de curs					Conf. univ. dr. Vijan Loredana Elena					
2.3	Titularul activităților de laborator					Conf. univ. dr. Vijan Loredana Elena					
2.4	Anul de studii	II	2.5	Semestrul	II	2.6	Tipul de evaluare	E	2.7	Regimul disciplinei	S/O

**3. Timpul total estimat**

3.1	Număr de ore pe săptămână	3	3.2	din care curs	1	3.3	laborator	2
3.4	Total ore din planul de învăț.	42	3.5	din care curs	14	3.6	laborator	28
<b>Distribuția fondului de timp alocat studiului individual</b>								ore
Studiu după manual, suport de curs, bibliografie și notițe								24
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren								10
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii, eseuri								16
Tutorat								4
Examinări								4
Alte activități .....								
3.7	Total ore studiu individual			58				
3.8	Total ore pe semestru			100				
3.9	Număr de credite			4				

**4. Precondiții (acolo unde este cazul)**

4.1	De curriculum	Cunoștințe de matematică, fizică, bazele chimiei anorganice, bazele chimiei organice, structura atomilor și moleculelor
4.2	De competențe	Identificarea, descrierea și utilizarea adecvată și în context a noțiunilor specifice chimiei

**5. Condiții (acolo unde este cazul)**

5.1	De desfășurare a cursului	Sală dotată cu tablă
5.2	De desfășurare a laboratorului	Sală de lucrări practice, dotată cu echipament specific (aparatură și tehnică de calcul) și reactivii chimici necesari desfășurării lucrărilor practice. Respectarea normelor de protecția muncii în laboratoare cu caracter chimic. Prezența obligatorie la lucrările practice.

**6. Competențe specifice vizate**

Competențe profesionale	C1. Operarea cu noțiuni de structură și reactivitatea compușilor chimici (PC=1/4) C2. Determinarea compoziției, structurii și proprietăților fizico-chimice a unor compuși chimici (PC=1/4) C4. Abordarea interdisciplinară a unor teme din domeniul chimiei (PC=0,5/4)
Competențe transversale	CT1. Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată (PC=0,5/4) CT2. Realizarea unor activități în echipă multidisciplinară utilizând abilități de comunicare interpersonală pentru îndeplinirea obiectivelor propuse (PC=0,5/4) 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=0,5/4)

**7. Obiectivele disciplinei**

7.1 Obiectivul general al disciplinei	Însușirea bazelor teoretice referitoare la analiza structurii moleculare, natura legăturii chimice și a proprietăților moleculare. Determinarea teoretică a elementelor structurale, energetice și de reactivitate ale sistemelor moleculare. Formarea de abilități de lucru experimental, într-un climat optim, cu respectarea normelor de protecție a muncii.
7.2 Obiectivele specifice	<i>Obiective cognitive</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>Cunoașterea terminologiei,</li> <li>Explicarea proprietăților, conceptelor, teoriilor, modelelor și noțiunilor fundamentale de structură și reactivitate a sistemelor chimice,</li> </ul>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Descrierea conceptelor, teoriilor, metodelor și modelelor utilizate la studiul structurii, proprietăților electronice și reactivității compușilor chimici,</li> <li>• Aplicarea teoriilor, metodelor și modelelor utilizate la studiul structurii, proprietăților electronice și reactivității compușilor chimici în context diferit,</li> <li>• Utilizarea aparaturii, tehnicii de calcul, noțiunilor fundamentale și metodelor teoretice corespunzătoare pentru investigarea structurii, proprietăților și reactivității sistemelor moleculare,</li> <li>• Calcularea proprietăților structurale și de reactivitate ale compușilor moleculari.</li> </ul> <p><i>Obiective procedurale</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aplicarea corectă a principiilor și legilor chimiei în rezolvarea aplicațiilor practice,</li> <li>• Dezvoltarea capacității de investigare experimentală în cadrul metodelor de investigare fizico-chimică a materialelor,</li> <li>• Formarea capacității de corelare a parametrilor măsurabili cu proprietățile compușilor analizați.</li> </ul> <p><i>Obiective atitudinale</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• crearea deprinderilor practice în efectuarea unei lucrări de laborator, a unor calcule matematice specifice și de interpretare în mod corespunzător a rezultatelor obținute,</li> <li>• identificarea surselor de informații pentru atingerea obiectivelor propuse,</li> <li>• 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,</li> <li>• cultivarea unei atitudini pozitive, de dialog cu spirit de inițiativă, în spiritul respectului față de profesia de chimist.</li> </ul>
--	---

## 8. Conținuturi

8.1. Curs		Nr. ore	Metode de predare	Observații Resurse folosite
1	Elemente fundamentale de mecanică cuantică. Natura cuantică a materiei. Dualismul undă - corpuscul. Principiul de incertitudine a lui Heisenberg	1	Prelegerea, conversația euristică, explicația, studiul de caz	Sală de curs Tablă Cretă
2	Formularea generală a mecanicii cuantice. Stări și observabile. Transformări și operatori. Proprietăți generale ale operatorilor. Valori proprii și vectorii proprii ale operatorilor.	1		
3	Aplicații ale mecanicii cuantice. Ecuația lui Schrödinger. Sensul fizic al funcției de undă.	1		
4	Atomul de hidrogen (hidrogenoidul). Funcții de undă (orbitale atomice) pentru atomul de hidrogen. Semnificația fizică a orbitalelor atomice hidrogenoide.	1		
5	Spinul electronic în mecanica cuantică Necesitatea spinului electronic. Teoria lui Pauli a spinului electronic. Operatorii de spin, matricele de spin ale lui Pauli. Principiul lui Pauli.	1		
6	Funcția de undă pentru starea fundamentală a atomului de heliu. Metode aproximative ale mecanicii cuantice aplicabile în chimia cuantică. Metoda variațională.	1		
7	Metoda perturbațiilor independente de timp. Perturbații dependente de timp.	1		
8	Hamiltonianul unui sistem atomic cu mai mulți electroni. Modelul Hartree - Fock al structurii atomice.	1		
9	Abordarea sistemelor moleculare în chimia cuantică. Hamiltonianul molecular. Aproximația Born – Oppenheimer.	1		
10	Metoda orbitalelor moleculare a lui Roothaan. Metode <i>ab-initio</i> .	1		
11	Natura legăturii chimice. Stările electronice ale moleculei diatomice. Teoria cuantică a legăturii covalente. Ionul molecular de hidrogen.	1		
12	Stările electronice ale moleculei de hidrogen în teoria orbitalelor moleculare (MOT).	1		
13	Molecula de hidrogen în teoria legăturii de valență (VB).	1		
14	Molecula de hidrogen. Introducerea spinul în funcția de undă și comparație între metoda MO și VB.	1		
<b>Bibliografie</b> * Note de curs în format electronic transmise studenților pe CD sau memory stick 1. V. Florescu, M. Boca, Lecții de fizică cuantică avansată I, Editura Universității din București, 2013 2. C. Ghirvu, I. Humelnicu, Introducere în Chimia cuantică – Principii și metode generale, Editura Matrix Rom, București, 2011 3. M.V. Putz, M. Lazea, A. Chiriac, Introducere în chimie-fizică. Structura și proprietățile atomilor și moleculelor, Editura Mirton, Timișoara, 2010 4. I. Humelnicu, Iuliana Voicu, C. Ghirvu, M. Constantinescu, Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea I – atomistică, Editura Universității Alexandru Ioan Cuza Iași, 2004 5. I. Humelnicu, Elemente de chimie teoretică, Editura Tehnopress, Iași, 2003				

6. L. E. Vîjan, E. Volanschi, M. Hillebrand, *Molecular modeling of anthracycline-DNA interaction*, Progress in Colloid and Polymer Science, 122 (2003) 67-72, ISSN: 0340-255X. In Aqueous Polymer — Cosolute Systems, Springer Berlin/Heidelberg, ISBN: 978-3-540-00099-0
7. R. Daudel, G. Leroy, D. Peeters, M. Sana, Chimie cuantică, Editura Academiei. Române, București, 1988
8. C. Ghirvu, Mecanică cuantică, I. P. Iași, 1983
9. C. Ghirvu, Chimie fizică - Elemente de structură și reactivitate moleculară, Editura Institutului Politehnic Iași, 1979
10. I.G. Murgulescu, Introducere în Chimia fizică - Structura și proprietățile moleculelor, vol. I.2, Editura Academiei Române, București, 1978
11. I.G. Murgulescu, Introducere în Chimia fizică - Atomi, molecule, legătura chimică, vol. I. 1, Editura Academiei Române, București, 1976

8.2. Aplicații: Laborator		Nr. ore	Metode de predare	Observații Resurse folosite
1	Sisteme de coordonate în chimia cuantică. Operatorul Laplacean în coordonate polare sferice. (aplicații numerice)	2	Exercițiul Experimentul Studiul de caz Explicația Învățarea prin descoperire Simularea Conversația	Echipamente specifice Calculator
2	Studiul comportării unei particule într-o cutie de potențial (aplicații pe calculator).	2		
3	Studiul oscilatorului armonic liniar (aplicații pe calculator).	2		
4	Trecerea unei particule printr-o barieră de potențial dreptunghiulară. Efectul tunel. (aplicații numerice)	2		
5	Operatorii momentului cinetic în coordonate polare sferice. Studiul relațiilor de comutare ale operatorilor momentului cinetic. Valorile proprii și funcțiile proprii ale operatorului proiecției momentului cinetic pe axa z, $\hat{L}_z$ (aplicații numerice)	2		
6	Valorile proprii și funcțiile proprii ale operatorului $\hat{L}^2$ (aplicații numerice).	2		
7	Studiul părții radiale a funcției de undă pentru hidrogenoid. Reprezentarea grafică și interpretarea fizică a orbitalelor atomice pentru hidrogenoid (aplicații pe calculator).	2		
8	Măsurători fizico – chimice generale, densitate, indice de refracție, etc. Verificarea legii generale a absorbției de radiație de către materie (Lambert – Beer) – probă practică	2		
9	Studiul refracțiilor atomice și ionice și corelarea acestora cu structura moleculară – probă practică.	2		
10	Studiul structurii moleculare prin măsurători de momente de dipol electric – probă practică.	2		
11	Studiul structurii moleculare prin spectroscopie de infraroșu – probă practică.	2		
12	Studiul structurii moleculare prin spectroscopie de UV și vizibil – probă practică.	2		
13	Determinarea unor proprietăți electronice ale sistemelor moleculare (aplicații pe calculator).	2		
14	Investigații teoretice și obținerea spectrelor moleculare (aplicații pe calculator).	2		

#### Bibliografie

1. C. Ghirvu, I. Humelnicu, Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea II – Structură moleculară, Editura Universității Al.I. Cuza Iași, 2005
2. I. Humelnicu, I. Voicu, C. Ghirvu, M. Constantinescu, Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea I - atomistică, Editura Universității Al.I. Cuza Iași, 2002
3. I. Schiketanz, F. Badea, Chimie organică prin probleme, Editura Științifică și Enciclopedică, București, 1989
4. V.Em Sahini, M. Hillebrand, Chimie cuantică în exemple și aplicații, Editura Academiei Române, București, 1985
5. E. Luca, M. Strat, M. Chiriac, V. Bărboiu, Analiza structurală prin metode fizice, Editura Academiei Române, București, 1985
6. A. T. Balaban, M. Banciu, I. Popany, Aplicații ale metodelor fizice în chimia organică, Editura Științifică și Enciclopedică, București, 1983
7. Ș. Moldoveanu, A. Savin, Aplicații în chimie ale metodelor semiempirice de orbitali moleculari, Editura Academiei Române, București, 1980
8. S. Mager, Analiza structurală organică, Editura Științifică și Enciclopedică, București, 1979
9. F. Badea, Mecanisme de reacție în chimia organică, Editura Științifică, București, 1971
10. M. Avram, Gh. Mateescu, Spectroscopia în infraroșu. Aplicații în chimia organică, Editura Tehnică, București 1966

#### Tema de casă

- 1 Se cere fiecărui student să elaboreze un referat cu temă impusă, urmărindu-se învățarea studenților cu cerințele de redactare a lucrărilor de finalizare a studiilor, de scriere a unei referințe bibliografice, etc.

#### Bibliografie

\* Note de curs in format electronic transmise studenților pe CD sau memory stick, literatura de specialitate

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

În vederea actualizării și îmbunătățirii conținutului disciplinei, cadrele didactice au participat la următoarele activități:

- întâlniri de lucru cu specialiști din producție și angajatori;
- schimb de bune practici cu colegi din alte centre universitare;
- participarea la conferințe, simpozioane și workshop-uri cu participarea unor specialiști din domeniu.

**10. Evaluare**

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Participarea activă la curs. Frecvența și relevanța intervențiilor orale. Capacitatea de a opera cu cunoștințele asimilate. Capacitatea de a corela cunoștințele și de a le aplica în cazuri particulare. Corectitudinea și complectitudinea cunoștințelor. Înțelegerea și aplicarea corectă a problematicei specifice. Capacitatea de analiză și sinteză.	Înregistrare săptămânală	10%
		Evaluare finală prin probă scrisă	50%
10.5 Laborator / Tema de casă	Capacitatea de a opera cu cunoștințele asimilate Conștiințiozitate, interes pentru studiu individual Consemnarea sistematică a informațiilor semnificative Frecvența și relevanța intervențiilor orale Capacitatea de a aplica cunoștințele teoretice în practică	Caiet de laborator	20%
		Evaluare pe baza de referat	20%
10.6 Standard minim de performanță	Participarea studentului la evaluarea finală este condiționată de îndeplinirea condiției: finalizarea integral a activităților cu prezență obligatorie (activitate de laborator, tema de casă) și obținerea notei minime de promovare (nota 5). Nota 5 la testul de evaluare finală. Promovarea studentului este strict condiționată de însușirea bazelor teoretice referitoare la analiza structurii moleculare, natura legăturii chimice și a proprietăților moleculare, de cunoașterea principalelor metode de studiu al legăturii chimice, de cunoașterea semnificației fizice a funcției de undă, de scrierea corectă a hamiltonianului unui sistem molecular și de determinarea teoretică a elementelor structurale, energetice și de reactivitate ale sistemelor moleculare.		

Data completării  
18.09.2020

Titular de curs,  
Conf. univ. dr. Vîjan Loredana Elena

Titular de seminar,  
Conf. univ. dr. Vîjan Loredana Elena

Data aprobării în Consiliul departamentului,  
30.09.2020

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