



FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1. Instituția de învățământ superior	Universitatea din Craiova
1.2. Facultatea	Științe
1.3. Departamentul	Chimie
1.4. Domeniul de studii	Chimie
1.5. Ciclul de studii universitare	Licență
1.6. Forma de organizare	IF
1.7. Programul de studii	Chimie

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	Structura și proprietățile moleculelor						
2.2. Titularul activităților de curs	Lect.univ.dr. Aurelian DOBRIȚESCU						
2.3. Titularul activităților de laborator	Lect.univ.dr. Aurelian DOBRIȚESCU						
2.4. Anul de studiu	II	2.5. Semestrul	I	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7. Regimul disciplinei	DF/DOB

3. Timpul total estimat (ore pe semestru a activităților didactice)

3.1. Numărul de ore pe săptămână	4	din care: 3.2 curs	2	3.3. seminar	2
3.4. Total ore din planul de învățământ	56	din care: 3.5 curs	2	3.6. seminar	2
Distribuția fondului de timp – ore / săptăm.					
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					28
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					14
Pregătire seminarii / laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					9
Tutoriat					4
Examinări (test curs + examen final)					6
Alte activități (pregătire proiect final, prelucrare rezultate)					8
3.7. Total ore studiu individual					69
3.8. Total ore pe semestru					125
3.9. Numărul de credite					5

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1. de curriculum	<ul style="list-style-type: none">cunoștințe de chimie generală și chimie organică;competențe digitale elementare;noțiuni de biochimie;capacitatea de a analiza date științifice și de a redacta rapoarte tehnice.
4.2. de competențe	<ul style="list-style-type: none">competențe cognitive (cunoștințe de bază);competențe instrumentale (abilități practice);competențe digitale;competențe de analiză și interpretare;competențe de comunicare științifică.

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1. de desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none">• Tablă interactivă, Sistem de videoproiecție, Sistem audio adecvat, Rețea stabilă de internet, Sistem de management al resurselor și învățării (Google Classroom), Laptop.• Resurse digitale (suport de curs în format electronic, bibliografie electronică actualizată, bibliotecă de imagini și figuri explicative).
5.2. de desfășurare a laboratorului	<ul style="list-style-type: none">• Tablă interactivă, Sistem de videoproiecție, Sistem audio adecvat, Rețea stabilă de internet, Acces la resurse electronice, Instrumente digitale, Google Classroom, Laptop.• Resurse digitale (seturi de date și fișiere de lucru, tutoriale video, ghiduri de utilizare pentru software).

6. Obiectivele disciplinei - rezultate așteptate ale învățării la formarea cărora contribuie parcurgerea și promovarea disciplinei

Cunoștințe	<p>Studentul/Absolventul:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Studentul/absolventul identifică metode și procedee adecvate și efectuează experimente chimice pentru sinteza și analiza compușilor chimici.2. Studentul/absolventul formulează soluții pentru probleme chimice complexe, inclusiv cu respectarea normelor de mediu.3. Studentul/absolventul descrie și integrează cunoștințe specifice și interdisciplinare în activitatea profesională.
Aptitudini (Abilități)	<p>Studentul/Absolventul:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Studentul/absolventul evaluează critic informații din literatura științifică în vederea argumentării și comunicării clare în rapoarte științifice și către cei interesați: elevi, studenți, alte categorii socio-economice, în limba română și în cel puțin o limbă străină.2. Studentul/absolventul interpretează responsabil rezultatele documentării în vederea comunicării acestora și rezolvă probleme complexe de chimie utilizând metode specifice domeniilor conexe.3. Studentul/absolventul aplică principiile științei pentru redactarea și prezentarea unor rapoarte științifice și aplică metode interdisciplinare adecvate pentru a rezolva probleme chimice complexe, teoretice și practice.
Responsabilitate și autonomie	<p>Studentul/Absolventul:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Studentul/absolventul aplică sistematic strategii, gândirea critică și metode științifice, utilizează individual instrumente/ tehnici clasice de laborator și echipamente moderne, proiectează experimente, interpretează și analizează în mod corespunzător rezultatele obținute.2. Studentul/absolventul selectează cele mai adecvate rezultate ale informării/documentării și le transmite clar și concis celor interesați.3. Studentul/absolventul întocmește și prezintă rapoarte științifice respectând normele eticii în colectarea și redactarea rezultatelor asumându-și responsabilitatea de a gestiona colaborări interdisciplinare.

7. Conținuturi

7.1. CURS	Modalitatea de desfășurare	Metode de predare	Fond de timp alocat (ore)
1. Introducere în mecanica cuantică: originile mecanicii cuantice (cuantificarea energiei: radiația corpului negru; distribuția Planck; efectul fotoelectric; spectrele atomice și moleculare); dualitatea undă-corpusul (ipoteza lui de Broglie, experimentul Davisson-Germer).	Față în față	Expunere interactivă; conversație euristică; problematizare.	2
2. Dinamica sistemelor microscopice: ecuația lui Schrödinger atemporală și temporală; interpretarea Born a funcției de undă; proprietățile funcției de undă; soluțiile ecuației Schrödinger pentru atomul de hidrogen; numerele cuantice (n, l, m_l, m_s); formulele și orientările orbitalilor atomici (s, p, d, f).	Față în față	Expunere interactivă; conversație euristică; problematizare.	2
3. Principiile mecanicii cuantice: formularea operatorială a mecanicii cuantice ondulatorii; principiul de incertitudine Heisenberg; postulatele mecanicii cuantice.	Față în față	Expunere interactivă; conversație euristică; problematizare.	4
4. Teoria modernă a legăturii de valență: suprapunerea orbitalilor atomici fără deformare prin cuplarea de spin; hibridizarea orbitalilor atomici și geometria moleculelor; molecule diatomice homonucleare; molecule poliatomice.	Față în față	Expunere interactivă; conversație euristică; problematizare.	2

5. Teoria orbitalilor moleculari: combinații liniare ale orbitalilor atomici; ordinul de legătură; molecule diatomice homonucleare; molecule diatomice heteronucleare.	Față în față	Expunere interactivă; conversație euristică; simulare interactivă; problematizare.	2
6. Orbitali moleculari pentru sisteme poliatomice: aproximația Hückel; chimia computațională; predicția proprietăților moleculare.	Față în față	Expunere interactivă; conversație euristică; simulare interactivă; problematizare.	2
7. Proprietăți electrice: momentul de dipol electric permanent; comportarea dipolului electric în câmp electric; polarizarea în câmp electric static; polarizabilități; polarizații molare; polarizația molară în câmp electric alternativ; polarizarea mutuală dintre ioni.	Față în față	Expunere interactivă; conversație euristică; simulare interactivă; problematizare.	4
8. Proprietăți magnetice: surse ale câmpului magnetic; proprietăți ale liniilor de câmp magnetic; permeabilități magnetice; forțe magnetice; diamagnetismul; paramagnetismul; feromagnetismul.	Față în față	Expunere interactivă; conversație euristică; simulare interactivă; problematizare.	4
9. Proprietăți optice: indici de refracție; permitivități electrice; refracția pozitivă; refracția negativă; metamateriale; refracția molară; refracția specifică.	Față în față	Expunere interactivă; conversație euristică; simulare interactivă; problematizare.	4
10. Absorbția luminii în medii transparente: interacțiunea luminii cu substanța; legile absorbției luminii; mărimi specifice absorbției luminii.	Față în față	Expunere interactivă; conversație euristică; simulare interactivă; problematizare.	2

Bibliografie:

1. Atkins, P., de Paula, J. & Keeler, J., *Atkins' Physical Chemistry* (11th ed.). Oxford University Press., **2017**.
2. Atkins, P. & de Paula, J., *Physical Chemistry for the Life Sciences* (3rd ed.). Oxford University Press., **2018**.
3. Bahl, A., Bahl, B. S. & Tuli, G. D., *Essentials of Physical Chemistry* (26th ed.). S. Chand Publishing, **2016**.
4. Chang, R., *Chemistry* (10th ed.). McGraw-Hill, **2010**.
5. Lewars, E. G., *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics* (4th ed.). Springer International Publishing, **2024**.

7.2. Laborator	Modalitatea de desfășurare	Metode de predare	Fond de timp alocat (ore)
1. Determinarea constantei lui Planck și a lucrului mecanic de extracție prin studiul efectului fotoelectric extern.	Față în față	Explicație, studiu de caz, conversație euristică, experiment virtual.	2
2. Studiul spectrului corpului negru.	Față în față	Explicație, studiu de caz, conversație euristică, experiment virtual.	2
3. Construirea și vizualizarea structurilor moleculare	Față în față	Demonstrație practică în timp real, învățare prin descoperire ghidată, exerciții individuale cu feedback imediat.	4
4. Studiul proprietăților electronice ale moleculelor cu sistem delocalizat de electroni π prin metoda Hückel.	Față în față	Explicație, studiu de caz, conversație euristică, simulare interactivă.	4
5. Determinarea concentrației unor soluții prin metoda refractometrică.	Față în față	Explicație, studiu de caz, conversație euristică, experiment.	2
6. Determinarea refracției molare a soluției apoase de acetonă.	Față în față	Explicație, studiu de caz, conversație euristică, experiment.	2
7. Determinarea refracțiilor ionice.	Față în față	Explicație, studiu de caz, conversație euristică, experiment.	2
8. Determinarea momentului de dipol electric al benzenului la 20 °C.	Față în față	Prezentare PowerPoint interactivă, tutoriale on-line, experiment virtual, modelare moleculară.	4
9. Studiul legii lui Beer prin simulare.	Față în față	Prezentare PowerPoint interactivă, tutoriale on-line, experiment virtual.	2
10. Colocviu și verificare portofoliu digital	Față în față	Test grilă on-line (formular web interactiv) și discuții on-site privind conținutul portofoliului digital.	4

Bibliografie:

1. Giustina, M., et al., *Modern Experimental Approaches to the Photoelectric Effect in Undergraduate Physics Education*. **American Journal of Physics**, 90(4), 345–353, **2022**.
2. Jensen, F., *Introduction to Computational Chemistry* (3rd ed.). Wiley, **2021**.
3. López-Moreno, A., et al., *Modern Optical Methods in Chemical Analysis: Refractometry, Spectrophotometry, and Digital Absorbance Techniques*. **Analytical Chemistry**, 95(15), 5660–5672, **2023**.
4. Karam, R., & Braga, M., *Blackbody Radiation Revisited: Pedagogical Strategies and Modern Computational Simulations*. **European Journal of Physics**, 42(6), 065601, **2021**.
5. Pettersen, E. F., et al., *UCSF ChimeraX: Structure Visualization for Researchers, Educators, and Developers*. **Protein Science**, 30(1), 70–82, **2021**.

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

Structura tematică a disciplinei reflectă direcțiile actuale de dezvoltare ale comunității epistemice internaționale din domeniul fizicii moderne, chimiei fizice și științelor materiale, armonizând conținuturile academice cu standardele de formare promovate de organisme profesionale precum American Chemical Society (ACS), American Physical Society (APS), Royal Society of Chemistry (RSC) și European Physical Society (EPS). Temele incluse — de la fundamentele mecanicii cuantice, teoria orbitalilor atomici și moleculari, până la modelarea Hückel, studiul proprietăților electrice, magnetice și optice — sunt considerate la nivel global repere esențiale pentru formarea unui specialist în științele naturii, capabil să înțeleagă comportamentul microscopic al sistemelor și implicațiile acestuia în fenomene macroscopice.

Prin structurarea conținuturilor în module care integrează fenomene cuantice fundamentale, modele atomice și moleculare, proprietăți electromagnetice și fenomene optice, disciplina oferă studenților o formare solidă, modernă și complet racordată atât la orientările actuale ale cercetării internaționale, cât și la nevoile reale ale pieței muncii din domenii precum: laboratoare fizico-chimice, industrie farmaceutică, tehnologii optice, spectroscopie, energii regenerabile, nanoelectronică și materiale avansate.

9. Evaluare

Tip activitate	9.1. Criterii de evaluare	9.2. Metode de evaluare	9.3. Pondere din nota finală
9.4. Curs	<p>Înțelegerea conceptelor teoretice fundamentale privind structura moleculară și proprietăților pe care le determină.</p> <p>Capacitatea de explicare logică a formalismului mecanicii cuantice.</p> <p>Corectitudinea analizelor și interpretărilor teoretice.</p> <p>Coerența și claritatea exprimării în scris.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Test scris cu itemi: grilă, întrebări deschise, probleme conceptuale. • Evaluare de tip „mini-eseu” pe teme teoretice. • Verificarea înțelegerii principiilor prin aplicații explicate oral. 	30%

9.5. Laborator	Abilitățile dobândite în utilizarea aplicațiilor software pentru modelarea moleculară prin calcule cuanto-chimice la nivelul aproximației Hückel.	<ul style="list-style-type: none">• Evaluare continuă pe baza fișelor de lucru.• Mini-teste aplicate la începutul anumitor laboratoare.• Verificarea rezultatelor obținute.• Portofoliu de laborator (toate lucrările completate).	30% activitatea de laborator 40% portofoliu de laborator (raport scris 25% + prezentare 15%)
	Calitatea interpretării rezultatelor obținute în laborator.		
	Acuratețea datelor din fișele de lucru și coerența explicațiilor.		
	Respectarea procedurilor de laborator și nivelul de autonomie și rigurozitate în realizarea sarcinilor practice.		
	Încadrarea în pașii metodologici predați.		
9.6. Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none">• Ecuația lui Schrödinger. Semnificația fizică a funcției de undă și proprietățile acesteia.• Operatori liniari și hermitici în spațiul Hilbert.• Algebra operatorilor care acționează în spațiul funcțiilor pătratic integrabile.• Calculul energiei orbitalilor moleculari de frontieră prin aproximația Hückel.• Polarizația molară de deplasare.• Polarizația molară de orientare.• Diamagnetismul, paramagnetismul și feromagnetismul.• Refracția molară: relație de calcul, semnificație fizică și proprietăți.• Legile absorbției luminii (Legea lui Lambert; Legea lui Beer; Legea Lambert-Beer).• Mărimi specifice absorbției luminii (absorbanța, transmitanța).• Minim 70% prezență la activitățile de laborator.• Minim 5/10 la fiecare componentă obligatorie (test curs, laborator, proiect).			

Data completării
.....

Titular de disciplină,
.....

Semnătura titularului
.....

Data avizării în departament
25.09.2025

Director de departament,
Conf.dr. Nicoleta Cioateră

Semnătura directorului de departament,
.....