

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	de Fizică
1.3 Departamentul	Fizică Biomoleculară
1.4 Domeniul de studii	Fizică / Științe Inginerești Aplicate
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studiu	Fizică / Fizică informatică / Fizică medicală / Fizică tehnologică

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Fizica Moleculei						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. dr. Vasile Chiș						
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof.dr Vasile Chiș						
2.4 Titularul activităților de laborator	Conf. dr. Nicolae Leopold						
2.5 Anul de studiu	II	2.6 Semestrul	IV	2.7 Tipul de evaluare	E	2.8 Regimul disciplinei	F

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	7	Din care:					
3.2 curs	2	3.3 seminar	1	3.4 laborator	1		
3.5 Total ore din planul de învățământ	98	Din care:					
3.6 curs	28	3.7 seminar	14	3.8 laborator	14		
Distribuția fondului de timp:							ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe							32
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren							32
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri							28
Tutoriat							3
Examinări							3
Alte activități:							-
3.9 Total ore studiu individual	98						
3.10 Total ore pe semestru	19						
	6						
3.11 Numărul de credite	8						

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	Mecanică Cuantică, Electricitate, Calcul diferențial și integral
4.2 de competențe	Elementare de conduită în laborator

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	Sală adecvată, tablă, videoproiector
5.2 de desfășurare a seminarului	Sală adecvată, tablă, videoproiector
5.3 de desfășurare a laboratorului	Sală adecvată, echipament specific laboratorului, computer

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale

C1. Identificarea și utilizarea adecvată a principalelor legi și principii fizice într-un context dat. Identificarea și exploatarea principalelor legi, noțiuni și concepte teoretice specifice Fizicii mediului.

Utilizarea adecvată a fundamentelor teoretice ale științelor ingineresti aplicate.

C2. Utilizarea de pachete software pentru analiza și prelucrarea de date.

Utilizarea conexiunilor logice cu alte domenii științifice fundamentale implicate în definirea conceptelor de mediu.

Utilizarea sistemelor informatice de prelucrare și gestiune a datelor.

C3. Rezolvarea problemelor de fizică în condiții impuse, folosind metode numerice și statistice. Efectuarea experimentelor de fizică, biofizică, fizică medicală și evaluarea rezultatelor pe baza modelelor teoretice.

Utilizarea metodelor, instrumentelor, aparaturii și tehnologiilor pentru activități de măsurare și monitorizare.

Asigurarea de activități suport pentru cercetare.

C4. Aplicarea cunoștințelor din domeniul fizicii atât în situații concrete din domenii conexe, cât și în cadrul unor experimente, folosind aparatura standard de laborator.

Utilizarea de pachete software pentru analiza și prelucrarea datelor experimentale în vederea optimizării diagnosticului și tratamentului medical.

Utilizarea aplicațiilor specifice pentru prelucrarea, reprezentarea și stocarea datelor de mediu.

Utilizarea aparaturii standard de laborator de cercetare sau industriale pentru efectuarea de experimente de cercetare.

C5. Comunicarea și analiza informațiilor cu caracter didactic, științific și de popularizare din domeniul Fizicii.

Dezvoltarea și folosirea de aplicații informatice și instrumentație virtuală pentru rezolvarea diferitelor probleme de fizică.

Interpretarea informațiilor cu caracter fizico-medical și transmiterea lor într-o formă coerentă și accesibilă.

Analiza și prelucrarea datelor din măsurători și identificarea alternativelor optime de monitorizare și analiză pentru Fizica mediului.

Utilizarea pentru activități de producție, expertiză și monitorizare a fundamentelor fizicii tehnologice, a metodelor și instrumentelor specifice.

C6. Abordarea interdisciplinară a unor teme din domeniul fizicii.

Participarea în echipe interdisciplinare (medici, fizicieni, biologici, chimiști) pentru stabilirea diagnosticului și tratamentului adecvat.

Analiză și comunicarea informațiilor cu caracter științific.

Coordonarea de structuri organizaționale având ca obiect de activitate proiectarea, fabricarea sau întreținerea de echipamente specifice.

Competențe transversale	<p>CT1. Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată.</p> <p>Aplicarea strategiilor de muncă eficientă și responsabilă, de punctualitate, seriozitate și răspundere personală, pe baza principiilor, normelor și a valorilor codului de etică profesională.</p> <p>Aplicarea, în contextul respectării legislației, a drepturilor de proprietate intelectuală (inclusiv transfer tehnologic), a metodologiei de certificare a produselor, a principiilor, normelor și valorilor codului de etică profesională în cadrul propriei strategii de muncă riguroasă, eficientă și responsabilă.</p> <p>CT2. Aplicarea tehnicilor de muncă eficientă în echipă multidisciplinară pe diverse paliere ierarhice.</p> <p>Identificarea rolurilor și responsabilităților într-o echipă și aplicarea de tehnici de relaționare și muncă eficientă în cadrul echipei.</p> <p>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.</p> <p>Documentarea în limba română și cel puțin într-o limbă străină, pentru dezvoltarea profesională și personală, prin formare continuă și adaptarea eficientă la noile descoperiri științifice.</p> <p>Identificarea oportunităților de formare continuă și valorificarea eficientă a resurselor și tehnicilor de învățare pentru propria dezvoltare.</p>
--------------------------------	--

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> Asimilarea conceptelor și formarea de competente și aptitudini în domeniul fizicii moleculare și al spectroscopiei moleculare
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Dobândirea cunoștințelor teoretice pentru înțelegerea structurii geometrice și electronice a moleculelor Dobândirea de competențe practice de lucru în domeniul spectroscopiei moleculare și al modelării moleculare

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
Curs 1 Introducere Recapitulare Orbitali atomici aproximativi Orbitali atomici de tip Slater (STO) Orbitali atomici de tip Gauss (GTO)	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
Curs 2 Introducere în fizica moleculii Proprietățile mecanice ale moleculelor: dimensiune, masă, formă Clasificarea moleculelor; Structura spațială a moleculelor Aplicații ale moleculelor în nanotehnologie și medicină	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore

Tehnici experimentale și teoretice (compuționale) de investigare a moleculelor Interacțiunea moleculelor cu câmpul electromagnetic		
Curs 3 rotația moleculelor biatomice Rotatorul rigid - Ecuația Schrodinger, Funcții de undă de rotație, energia nivelelor de rotație, tranziții între nivelele de rotație - Reguli de selecție, momentul de dipol al tranziției, spectre de rotație; intensitatea liniilor spectrale Rotatorul nerigid - energia nivelelor rotatorului nerigid - aplicații ale spectroscopiei de rotație	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
Curs 4 Vibrația moleculelor biatomice Ecuația Schrodinger radială Oscilatorul armonic: energia nivelelor, funcțiile de undă, reguli de selecție pentru oscilatorul armonic Oscilatorul anarmonic: potențialul Morse. energia nivelelor oscilatorului anarmonic, energia de vibrație de punct zero (ZPVE) Rotația-vibrația moleculelor biatomice	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
Curs 5 Cationul H₂⁺ Coordonate eliptice Aproximația Born-Oppenheimer Aproximația LCAO pentru cationul H ₂ ⁺	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
Curs 6 Cationul H₂⁺ Interacțiunea de configurație Energile și funcțiile de undă Tipuri de orbitali moleculari: de legătură, de antilegătură, de nelegătură; ordinul de legătură Îmbunătățirea metodei LCAO-MO pentru H ₂ ⁺	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
Curs 7 Molecula de hidrogen Hamiltonianul moleculei H ₂ . Aproximația LCAO-MO pentru H ₂ Deficiențele și îmbunătățirea metodei LCAO-MO pentru H ₂	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
Curs 8 Molecula de hidrogen Metoda Heitler-London pentru molecula H ₂ ; Îmbunătățirea metodei Heitler-London Starea fundamentală, starea excitată de singlet și starea excitată de triplet pentru molecula H ₂	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
Curs 9 Configurații electronice ale moleculelor biatomice	prelegerea combinată, se vor	2 ore

<p>Forma și ordinea MO pentru moleculele biatomice</p> <p>Completarea MO cu electroni</p> <p>Interacțiunea de configurație</p> <p>Configurații electronice</p> <p>Principiile spectroscopiei fotoelectronice</p>	<p>utiliza tabla și mijloace vizuale</p>	
<p>Curs 10</p> <p>Stări electronice ale moleculelor biatomice</p> <p>Stări electronice în starea fundamentală</p> <p>Termeni spectrali</p> <p>Stări electronice excitate; reguli de selecție pentru tranziții electronice</p> <p>Principiul Franck-Condon</p> <p>Spectre electronice de absorbție și emisie</p>	<p>prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale</p>	<p>2 ore</p>
<p>Curs 11</p> <p>Simetrie moleculară și grupuri de simetrie punctuală</p> <p>Elemente și operații de simetrie</p> <p>Grupuri de simetrie punctuală</p> <p>Reprezentările grupurilor;</p>	<p>prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale</p>	<p>2 ore</p>
<p>Curs 12</p> <p>Proprietățile reprezentărilor grupurilor de simetrie punctuală</p> <p>Construirea reprezentărilor grupurilor de simetrie punctuală;</p> <p>Reprezentări reductibile și ireductibile;</p> <p>Reducerea reprezentărilor</p> <p>Simetrie și proprietăți moleculare: stabilirea integralelor nule; calculul combinațiilor liniare adaptate simetriei, determinarea simetriei modurilor normale de vibrație</p>	<p>prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale</p>	<p>2 ore</p>
<p>Curs 13</p> <p>Hibridizarea orbitalilor atomici</p> <p>Orbitali hibridi</p> <p>Problema hibridizării</p> <p>Scheme de hibridizare pentru legături σ și π</p>	<p>prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale</p>	<p>2 ore</p>
<p>Curs 14</p> <p>Metode experimentale în fizica moleculei</p> <p>Principiile spectroscopiile IR, Raman, UV-Vis, Fluorescență, fosforescență</p> <p>Spectroscopia fotoelectronică (UPS, IPES, XPS)</p> <p>Spectroscopiile de rezonanță magnetică RMN, RES</p>	<p>prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale</p>	<p>2 ore</p>
<p>Bibliografie</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. H. Haken, H. C. Wolf, The Physics of Atoms and Quanta, Ed. Springer-Verlag, Berlin, London, Tokyo, 1993 2. D.A. McQuarrie, J.D. Simon, Physical Chemistry, A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, 1997 3. R.G. Mortimer, Physical Chemistry, Elsevier, 2008 4. W. Demtroder, Atoms, molecules and photons - an introduction to atomic, molecular and quantum physics, Springer, 2006 		

5. H. Haken, H.C. Wolf, *Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry*, Springer-Verlag Berlin, 2004
6. Antonio Hernanz Gismero, *Metodos Teoricos de la Quimica Fisica*, UNED Madrid, 1991
7. B.H. Bransden, C.J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, Prentice Hall, 2003
8. J.M. Hollas, *Modern Spectroscopy*, John Wiley and Sons, 2004
9. P.W. Atkins, *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford University Press, 1983
10. V. Chiş, O. Cozar, L. David, *Simetrie moleculară*, Ed. Napoca Star, Cluj-Napoca, 2007
11. A. Hinchliffe, *Modelling molecular structures*, John Wiley and Sons, 2000
12. V.E. Sahini, M. Hillebrand, *Chimie cuantică în exemple și aplicații*, Ed. Academiei, București, 1985
13. I.G. Murgulescu, *Introducere în chimia fizică*, vol.I.1, Editura Academiei, București, 1976
14. W. Demtroder, *Molecular Physics, Theoretical Principles and Experimental Methods*, Wiley-VCH Verlag, 2003

8.2 Seminar	Metode de predare	Observații
Seminar 1 Recapitulare: Modelul Bohr, Orbitali atomici hidrogenoizi, Metoda variațională	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	1 oră
Seminar 2 Orbitali atomici aproximativi; Orbitali atomici de tip Slater (STO) Orbitali atomici de tip Gauss (GTO). Probleme	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	1 oră
Seminar 3 Rotația moleculelor biatomice Rotatorul rigid și rotatorul nerigid	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	1 oră
Seminar 4 Vibrația moleculelor biatomice. Oscilatorul armonic. Oscilatorul anarmonic. Probleme.	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	1 oră
Seminar 5 Coordonate eliptice. Integrale folosite în calculul orbitalilor moleculari	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	1 oră
Seminar 6 Calculul integralelor de suprapunere între OA pentru cationul H_2^+ .	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	1 oră
Seminar 7	prelegerea	1 oră

Calculul integralelor coulombiene și de schimb pentru cationul H_2^+ .	combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	
Seminar 8 Molecula de hidrogen în aproximația LCAO și Heitler-London	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	1 oră
Seminar 9 Calculul configurațiilor electronice ale moleculelor biatomice	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	1 oră
Seminar 10 Termeni spectrali pentru molecule biatomice în stare fundamentală și excitată	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	1 oră
Seminar 11 Elemente de simetrie moleculară; Operații de simetrie moleculară; Grupuri de simetrie punctuală	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	1 oră
Seminar 12 Reprezentările grupurilor; bazele reprezentărilor; reprezentări reductibile și ireductibile	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	1 oră
Seminar 13 Hibridizarea orbitalilor atomici. Exemple concrete: sp , sp^2 , sp^3 , sp^2d . Probleme.	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	1 oră
Seminar 14 Excursie de studiu: INCDTIM Cluj-Napoca	prezentări laboratoare, discutii pe teme date	1 oră
Bibliografie		
<ol style="list-style-type: none"> 1. D.A. McQuarrie, J.D. Simon, Physical Chemistry, A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, 1997 2. D.A. McQuarrie, J.D. Simon, Problems and Solutions to accompany Physical Chemistry, A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, 1997 3. Antonio Hernanz Gismero, Metodos Teoricos de la Quimica Fisica, UNED Madrid, 1991 4. E. Constantin, O. Cozar, Culegere de probleme de fizica moleculei, Ed. Univ. "Babeș-Bolyai", 1983 5. Fizica moleculei – Probleme, V. Chiș, V. Simon, N. Leopold, Ed Univ. "Babeș-Bolyai", 2001. 6. H. Haken, H. C. Wolf, The Physics of Atoms and Quanta, Ed. Springer-Verlag, Berlin, London, Tokyo, 1993 7. V. Chiș, O. Cozar, L. David, Simetrie moleculară, Ed. Napoca Star, Cluj-Napoca, 2007 		

8. P.W. Atkins, Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press, 1983
9. P.W. Atkins, Solutions Manual for Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press, 1983.

8.3 Laborator	Metode de predare	Observații
Prezentare lucrărilor. Instructaj de protecție.	Prelegere; Discuție individuală	2 ore
Studiul IR al moleculelor biatomice (HCl).	Discutie individuală	2 ore
Interpretarea spectrelor de masă	Discutie individuală	2 ore
Rezonanță electronică de spin – radicali liberi	Discutie individuală	2 ore
Studiul RMN al unor molecule organice.	Discutie individuală	2 ore
Fluorescență de raze X	Discutie individuală	2 ore
Calcul spectrelor IR, RES	Prezentare teme de cercetare. Discuții.	2 ore

Bibliografie

1. H. Haken, H. C. Wolf, The Physics of Atoms and Quanta, Ed. Springer-Verlag, Berlin, London, Tokyo, 1993
2. E. Fodor, V. Znamirovski, O. Cozar, Lucrări practice de Fizica atomului, nucleului și moleculei, Ed. Univ. „Babeș-Bolyai“, 1973
3. O. Cozar, A. Farcaș, C. Cosma, V. Mercea, Lucrări de laborator de fizica moleculei, Ed. Univ. „Babeș-Bolyai“, 1975

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

Conținutul disciplinei este în concordanță cu ceea ce se studiază în alte centre universitare din țară (Timișoara, Iași, București) și străinătate. Pentru adaptarea la cerințele impuse de piața de muncă, conținutul disciplinei a fost armonizat cu cerințele impuse de specificul învățământului preuniversitar, al institutelor de cercetare și al mediului de afaceri.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Cunoștințe dobândite	Examen scris	80
10.5 Seminar	Activitate	Tematici rezolvate	10
10.6 Laborator	Activitate	Experimente realizate	10
10.7 Standard minim de performanță			
Cunoștințe fundamentale de fizica atomului și moleculei			

Semnătură titular curs
Prof.dr. Vasile Chiș

Semnătură titular seminar
Prof.dr. Vasile Chiș

Semnătură titular laborator
Conf.dr. Nicolae Leopold

Data completării

27.05.2016

Data avizării în departament

Semnătură director de
departament
