

## FIȘA DISCIPLINEI

### 1. Date despre program

<b>1.1 Instituția de învățământ superior</b>	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
<b>1.2 Facultatea</b>	Facultatea de Fizică
<b>1.3 Departamentul</b>	Departamentul de Fizică Biomoleculară
<b>1.4 Domeniul de studii</b>	Fizică; Științe ingineresti
<b>1.5 Ciclul de studii</b>	Licență
<b>1.6 Programul de studiu</b>	Fizică, Fizică Informatică, Fizică Medicală; Fizică Tehnologică

### 2. Date despre disciplină

<b>2.1 Denumirea disciplinei</b>	<b>Fizica Moleculi – FLR1506</b>						
<b>2.2 Titularul activităților de curs</b>	Prof.dr. Vasile Chiș						
<b>2.3 Titularul activităților de seminar</b>	Prof.dr. Vasile Chiș						
<b>2.4 Titularul activităților de laborator</b>							
<b>2.5 Anul de studiu</b>	III	<b>2.6 Semestrul</b>	V	<b>2.7 Tipul de evaluare</b>	E	<b>2.8 Regimul disciplinei</b>	DS

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

<b>3.1 Număr de ore pe săptămână</b>	4	<b>Din care:</b>					
<b>3.2 curs</b>	2	<b>3.3 seminar</b>	1	<b>3.4 laborator</b>	1		
<b>3.5 Total ore din planul de învățământ</b>	98	<b>Din care:</b>					
<b>3.6 curs</b>	28	<b>3.7 seminar</b>	14	<b>3.8 laborator</b>	14		
<b>Distribuția fondului de timp:</b>						<b>ore</b>	
<b>Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe</b>						28	
<b>Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren</b>						14	
<b>Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri</b>						28	
<b>Tutoriat</b>						3	
<b>Examinări</b>						3	
<b>Alte activități:</b>						-	
<b>3.9 Total ore studiu individual</b>	70						
<b>3.10 Total ore pe semestru</b>	126						
<b>3.11 Numărul de credite</b>	5						

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

<b>4.1 de curriculum</b>	Mecanică cuantică, Electricitate, Termodinamică și căldură, Calcul diferențial și integral
<b>4.2 de competențe</b>	Elementare de conduită în laborator

## 5. Condiții (acolo unde este cazul)

<b>5.1 de desfășurare a cursului</b>	Sală adecvată, tablă, videoproiector Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise
<b>5.2 de desfășurare a seminarului</b>	Sală adecvată, tablă, videoproiector, rețea de calculatoare; Studentii se vor prezenta la seminar cu telefoanele mobile închise
<b>5.3 de desfășurare a laboratorului</b>	Sală adecvată, echipament specific laboratorului, rețea de calculatoare

## 6. Competențele specifice acumulate

<b>Competențe profesionale</b>	<p>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.</p> <p>C2. Utilizarea de pachete software pentru analiza și prelucrarea de date. Utilizarea conexiunilor logice cu alte domenii științifice fundamentale implicate în definirea conceptelor fizicii moleculii. Utilizarea sistemelor informatice de prelucrare și gestiune a datelor.</p> <p>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. Asigurarea de activități suport pentru cercetare.</p> <p>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 aplicațiilor specifice pentru prelucrarea, reprezentarea și stocarea datelor. Utilizarea aparaturii standard de laborator de cercetare sau industriale pentru efectuarea de experimente de cercetare.</p> <p>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.</p> <p>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.</p>
--------------------------------	---

<b>Competențe transversale</b>	<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)

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

## 8. Conținuturi

<b>8.1 Curs</b>	<b>Metode de predare</b>	<b>Observații</b>
<b>Curs 1-2</b> <b>Introducere; Recapitulare; Orbitali atomici aproximativi</b> Orbitali atomici de tip Slater (STO) Orbitali atomici de tip Gauss (GTO)	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	4 ore

<p><b>Curs 3-4</b>  <b> rotația moleculelor biatomice</b>  Rotatorul rigid  Ecuția 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  Spectroscopia Raman de rotație</p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	4 ore
<p><b>Curs 5-6</b>  <b>Vibrația moleculelor biatomice</b>  Ecuția Schrödinger 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</p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	4 ore
<p><b>Curs 7</b>  <b>Cationul H<sub>2</sub><sup>+</sup></b>  Coordonate eliptice  Aproximația Born-Oppenheimer  Aproximația LCAO-MO pentru cationul H<sub>2</sub><sup>+</sup></p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
<p><b>Curs 8-9</b>  <b>Cationul H<sub>2</sub><sup>+</sup></b>  Energii orbitalilor moleculari și funcțiile de undă  Tipuri de orbitali moleculari: de legătură, de antilegătură, de nelegătură; ordinul de legătură  Îmbunătățirea metodei LCAO-MO</p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	4 ore
<p><b>Curs 10-11</b>  <b>Molecula de hidrogen</b>  Hamiltonianul moleculei H<sub>2</sub>  Aproximația LCAO-MO pentru H<sub>2</sub>  Deficiențele și îmbunătățirea metodei LCAO-MO pentru H<sub>2</sub>  Metoda Heitler-London pentru molecula H<sub>2</sub>  Îmbunătățirea metodei Heitler-London  Starea fundamentală, starea excitată de singlet și starea excitată de triplet pentru molecula H<sub>2</sub></p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	4 ore
<p><b>Curs 12</b>  <b>Configurații electronice ale moleculelor biatomice</b>  Forma și ordinea orbitalilor moleculari pentru moleculele biatomice  Completarea orbitalilor moleculari cu electroni  Configurații electronice ale moleculelor biatomice  Principiile spectroscopiei fotoelectronice</p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
<p><b>Curs 13-14</b>  <b>Stări electronice ale moleculelor biatomice</b>  Termeni spectrali  Stări electronice excitate  Reguli de selecție pentru tranziții electronice  Principiul Franck-Condon  Spectre electronice de absorbție și emisie</p>	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	4 ore

## **Bibliografie**

1. D.A. McQuarrie, J.D. Simon, Physical Chemistry, A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, 1997
2. Atkins's Physical Chemistry, 11-th edition, Peter Atkins, Julio de Paula, James Keeler, Oxford University Press, 2017.
3. P.W. Atkins, Molecular Quantum Mechanics 5-th edition, Oxford University Press, 2011
4. T. Shida, The Chemical Bond – A fundamental Quantum-Mechanical Picture, Springer, 2001
5. H. Haken, H. C. Wolf, The Physics of Atoms and Quanta, Ed. Springer-Verlag, Berlin, London, Tokyo, 1993
6. R.G. Mortimer, Physical Chemistry, Elsevier, 2008
7. W. Demtroder, Atoms, molecules and photons - an introduction to atomic, molecular and quantum physics, Springer, 2006W. Demtroder, Atoms, molecules and photons - an introduction to atomic, molecular and quantum physics, Springer, 2006
8. H. Haken, H.C. Wolf, Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry, Springer-Verlag Berlin, 2004
9. Antonio Hernanz Gismero, Metodos Teoricos de la Quimica Fisica, UNED Madrid, 1991
10. B.H. Bransden, C.J. Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall, 2003
11. J.M. Hollas, Modern Spectroscopy, John Wiley and Sons, 2004
12. V. Chiş, O. Cozar, L. David, Simetrie moleculară, Ed. Napoca Star, Cluj-Napoca, 2007
13. A. Hinchliffe, Modelling molecular structures, John Wiley and Sons, 2000
14. V.E. Sahini, M. Hillebrand, Chimie cuantică în exemple și aplicații, Ed. Academiei, București, 1985
15. I.G. Murgulescu, Introducere în chimia fizică, vol.I.1, Editura Academiei, București, 1976
16. W. Demtroder, Molecular Physics, Theoretical Principles and Experimental Methods, Wiley-VCH Verlag, 2003

8.2 Seminar	Metode de predare	Observații
<b>Seminar 1</b> <b>Recapitulare</b> Modelul Bohr, Orbitali atomici hidrogenoizi, Atomul de He	prelegerea combinată, se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
<b>Seminar 2-3</b> <b>Orbitali atomici aproximativi</b> 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	2 ore
<b>Seminar 4-5</b> <b> rotația moleculelor biatomice</b> Rotatorul rigid și rotatorul nerigid	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
<b>Seminar 6-7</b> <b>Vibrația moleculelor biatomice</b> Oscilatorul armonic. Oscilatorul anarmonic. Probleme.	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
<b>Seminar 8-10</b> <b>Integrale moleculare</b> Calculul integralelor S, J și K pentru cationul $H_2^+$ .	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
<b>Seminar 11-12</b> <b>Configurații electronice</b> Determinarea configurațiilor electronice ale moleculelor biatomice homonucleare Determinarea configurațiilor electronice ale moleculelor biatomice heteronucleare	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore
<b>Seminar 13-14</b> <b>Termeni spectrali</b> Termeni spectrali pentru molecule biatomice în stare fundamentală și excitată Tranziții electronice	prelegerea combinată, rezolvare de probleme; se vor utiliza tabla și mijloace vizuale	2 ore

**Bibliografie**

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. "Babeş-Bolyai", 1983
5. V. Chiş, V. Simon, N. Leopold, Fizica moleculei – Probleme, Ed Univ. "Babeş-Bolyai", 2001.
6. H. Haken, H. C. Wolf, The Physics of Atoms and Quanta, Ed. Springer-Verlag, Berlin, London, Tokyo, 1993
7. V. Chiş, O. Cozar, L. David, Simetrie moleculară, Ed. Napoca Star, Cluj-Napoca, 2007
8. P.W. Atkins, Molecular Quantum Mechanics 5-th edition, Oxford University Press, 2011
9. P.W. Atkins, Solutions Manual for Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press, 1983.
10. W.W. Parson, Modern Optical Spectroscopy, Springer, 2007

<b>8.3 Laborator</b>	<b>Metode de predare</b>	<b>Observații</b>
Prezentare lucrărilor. Instructaj de protecție Studiul spectrului de masă al moleculelor	Prelegere; Discuție individuală	2 ore
Studiul IR al moleculelor biatomice	Discuție individuală	2 ore
Studiul spectrelor de rezonanță magnetică nucleară (RMN)	Discuție individuală	2 ore
Studiul spectrelor de rezonanță electronică de spin (RES)	Discuție individuală	2 ore
Studiul spectrelor de absorbție electronică a moleculelor biatomice	Discuție individuală	2 ore
Studiul spectrelor de fluorescență de raze X	Discuție individuală	2 ore
Calcul spectrelor și proprietăților moleculare	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. „Babeş-Bolyai“, 1973
3. O. Cozar, A. Farcaş, C. Cosma, V. Mercea, Lucrări de laborator de fizica moleculei, Ed. Univ. „Babeş-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 (București, Iași, Timișoara) și străinătate. Pentru adaptarea la cerințele impuse de piața muncii, conținutul disciplinei a fost armonizat cu cerințele specifice învățământului preuniversitar, ale institutelor de cercetare și ale 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 oral (teorie și probleme)	80
10.5 Seminar	Activitate și proiect	Rezolvări de probleme	10
10.6 Laborator	Activitate	Experimente realizate	10
<b>10.7 Standard minim de performanță</b>			
Cunoștințe fundamentale de fizica moleculei: rotatorul rigid, oscilatorul armonic, cationul $H_2^+$ , molecula de hidrogen, configurații electronice și termeni spectrali pentru molecule biatomice			

Semnătură titular curs  
Prof.dr. Vasile Chiș

Semnătură titular seminar  
Prof.dr. Vasile Chiș

Semnătură titular laborator

Data completării

04.09.2023

Data avizării în departament

Semnătură director de departament