# FIŞA DISCIPLINEI

## 1. Date despre program

| | |
|---|---|
| 1.1 Instituţia de învăţământ superior | **Universitatea Babeş-Bolyai, Cluj-Napoca** |
| 1.2 Facultatea | **Chimie şi Inginerie Chimică** |
| 1.3 Departamentul | **Inginerie chimică** |
| 1.4 Domeniul de studii | **Chimie** |
| 1.5 Ciclul de studii | **Licenţă** |
| 1.6 Programul de studiu / Calificarea | **Chimie / Chimist (Licenţiat în Chimie)** |

## 2. Date despre disciplină

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 2.1 Denumirea disciplinei | **Structură chimică – CLR1123** | | | | | | |
| 2.2 Titularul activităţilor de curs | Conf. dr. Alexandru Lupan | | | | | | |
| 2.3 Titularul activităţilor de seminar | Conf. dr. Alexandru Lupan | | | | | | |
| 2.4 Anul de studiu | **1** | 2.5 Semestrul | **1** | 2.6. Tipul de evaluare | **E** | 2.7 Regimul disciplinei | **DF/ Obl** |

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

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 3.1 Număr de ore pe săptămână | **3** | Din care: 3.2 curs | **2** | 3.3 seminar | **1** |
| 3.4 Total ore din planul de învăţământ | **42** | Din care: 3.5 curs | **28** | 3.6 seminar | **14** |
| Distribuţia fondului de timp: | | | | | **ore** |
| Studiul după manual, suport de curs, bibliografie şi notiţe | | | | | **30** |
| Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate şi pe teren | | | | | **28** |
| Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, studii de caz | | | | | **15** |
| Tutoriat | | | | | **6** |
| Examinări | | | | | **4** |
| Alte activităţi: nu este cazul | | | | | **-** |

| | |
|---|---|
| 3.7 Total ore studiu individual | **83** |
| 3.8 Total ore pe semestru | **125** |
| 3.9 Numărul de credite | **5** |

## 4. Precondiţii (acolo unde este cazul)

| | |
|---|---|
| 4.1 de curriculum | • Nu este cazul |
| 4.2 de competenţe | • Nu este cazul |

## 5. Condiţii (acolo unde este cazul)

| | |
|---|---|
| 5.1 De desfăşurare a cursului | • Studenţii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise<br>• Nu va fi acceptată întârzierea |
| 5.2 De desfăşurare a seminarului | • Studenţii se vor prezenta la seminar cu telefoanele mobile închise.<br>• Studenţii se vor prezenta la seminar cu calculatoare stiintifice.<br>• Nu va fi acceptată întârzierea. |

**6. Competenţele specifice acumulate**

| | |
|---|---|
| **Competenţe profesionale** | • Recunoasterea si descrierea conceptelor, abordarilor, teoriilor, metodelor si modelelor elementare privitoare la structura compusilor chimici;<br>• Explicarea si interpretarea unor concepte, proprietati, notiuni fundamentale ale structirii compusilor chimici;<br>• Aplicarea notiunilor fundamentale pentru rezolvarea problemelor asociate structurii compusilor chimici;<br>• Analiza critica a teoriilor si modelelor existente cu privire la structura compusilor chimici; |
| **Competenţe transversale** | • Executarea sarcinilor profesionale conform cerinţelor precizate şi în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională şi de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit şi cu îndrumare calificată;<br>• Rezolvarea sarcinilor profesionale în concordanţă cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru şi distribuirea de sarcini pentru nivelurile subordonate;<br>• Informarea şi documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba română şi într-o limbă de circulaţie internaţională cu utilizarea metodelor moderne de informare şi comunicare. |

**7. Obiectivele disciplinei**

| | |
|---|---|
| 7.1 Obiectivul general al disciplinei | Familiarizarea cu notiuni de chimie cuantica, metode de elucidare a structurii si a proprietatilor compusilor chimici |
| 7.2 Obiectivele specifice | • Dobandire de cunostinte privind: descrierea mecanic-cuantica a atomului şi a legaturii chimice in molecule şi faze cristaline.<br>• Dobandire de cunostinte teoretice de baza pentru intelegerea metodelor moderne de investigare a structurii compusilor chimici.<br>• Dezvoltarea capacitatii a utiliza si aplica aceste cunostinte in practica studierii structurii si proprietatilor compusilor chimici. |

**8. Conţinuturi**

| 8.1 Curs | Metode de predare | Observaţii |
|---|---|---|
| 8.1.1. Introducere. Modele atomice. Notiuni de teorie cuantica. Natura luminii. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia<br>Demonstraţia | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.2. Notiuni de spectroscopie. Spectre de emisie si spectre de absorbtie. Bazele mecanicii cuantice. Ipoteza lui Louis de Broglie. Operatori utilizati in mecanica cuantica. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia<br>Demonstraţia | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.3. Spatiu Hilbert. Legile de comutativitate ale lui Heisenberg. Reprezentarea operatorilor. Ecuatia lui Schrodinger independenta de timp. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia<br>Demonstraţia | Fond de timp alocat = 2 ore |

| | | |
|---|---|---|
| 8.1.4. Particule in ”cutie” monodimensionala. Relatiile de incertitudine. Latimea naturala a liniilor spectrale. Energia de zero absolut. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia<br>Demonstraţia | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.5. Structura atomului. Rezolvarea ecuatie lui Schrodinger pentru atomii hidrogenoizi in mecanica cuantica nerelativista. Notiunea de orbital. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia<br>Demonstraţia | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.6. Orbitali *s* ai atomului hidrogenoid. Raza medie a orbitalilor *s*. Ecuatia lui Schrodinger dependenta de timp. Ecuatia lui Dirac. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia<br>Demonstraţia | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.7. Efecte relativiste in mecanica cuantica. Reguli de selectie pentru atomii hidrogenoizi in aproximatia relativista. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia<br>Demonstraţia | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.8. Atomi cu mai multi electroni. Tabelul periodic al elementelor. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia<br>Demonstraţia | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.9. Simetria moleculara. Elemente si operatii de simetrie. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.10. Clasificarea moleculelor in functie de simetrie. Reprezentarea grupurilor. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia<br>Demonstraţia | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.11. Tipurile de hibridizare. Scheme de hibridizare. Expresiile functiilor pentru orbitalele hidride *sp*. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia<br>Demonstraţia | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.12. Molecule diatomice. Molecula ”ion” de hidrogen. Metoda orbitalilor moleculari. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia<br>Demonstraţia | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.13. Formarea orbitalilor moleculari din orbitali atomici. Molecule diatomice homonucleare. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia<br>Demonstraţia | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.14. Sisteme cu dublete $\pi$. Aproximatia lui Huckel. Determinantul secular. | Prelegerea<br>Explicaţia<br>Conversaţia<br>Demonstraţia | Fond de timp alocat = 2 ore |

Bibliografie

**1.** P. W. Atkins, *Chimie Fizica*, Editura Tehnica, Bucuresti, 1996.

**2.** J. Zsako, M. Tomoaia-Cotisel, *Simetria si structura moleculelor*, Presa Universitara Clujeana, Cluj-Napoca, 1998.

**3.** J. Zsako, L. D. Bobos, I. Marian, *Structura chimica*, Curs litografiat, Lito UBB, Cluj-Napoca, 1995.

**4**. A.Lupan, Suport de curs, 2018

| 8.2. Seminar | Metode de predare | Observaţii |
|---|---|---|
| 8.2.1. Corelarea dintre pozitia elementelor in tabelul periodic si repartitia electronilor pe straturi. | Explicaţia<br>Conversaţia | Fond de timp alocat = 2 ore |

| | | |
|---|---|---|
| | Problematizarea<br>Exercitiul | |
| 8.2.2. Calcularea razei medii si razei celei mai probabile pentru orbitalele *1s* si *2s*. Variatia valorilor cu Z. | Explicaţia<br>Conversaţia<br>Problematizarea<br>Exercitiul | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.2.3. Legatura dintre pozitia elementelor in tabelul periodic si termenii spectrali corespunzatori. | Explicaţia<br>Conversaţia<br>Problematizarea<br>Exercitiul | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.2.4. Exercitii cu elemente si operatii de simetrie. | Explicaţia<br>Conversaţia<br>Problematizarea<br>Exercitiul | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.2.5. Deducerea si importanta grupului de simetrie pentru diverse molecule. | Explicaţia<br>Conversaţia<br>Problematizarea<br>Exercitiul | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.2.6. Valoarea energiei de delocalizare si stabilitatea compusilor chimici. | Explicaţia<br>Conversaţia<br>Problematizarea<br>Exercitiul | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.2.7. Ordinul de legatura si indicele de valenta libera. | Explicaţia<br>Conversaţia<br>Problematizarea<br>Exercitiul | Fond de timp alocat = 2 ore |

Bibliografie

**1.** P. W. Atkins, *Chimie Fizica*, Editura Tehnica, Bucuresti, 1996.

**2.** J. Zsako, M. Tomoaia-Cotisel, *Simetria si structura moleculelor*, Presa Universitara Clujeana, Cluj-Napoca, 1998.

**3.** J. Zsako, L. D. Bobos, I. Marian, *Structura chimica*, Curs litografiat, Lito UBB, Cluj-Napoca, 1995.

**4.** G. Niac, V. Voiculescu, I. Bâldea, M. Preda, *Formule, Tabele şi Probleme de chimie fizică*, Editura Dacia, Cluj-Napoca, 1984.

**9. Coroborarea conţinuturilor disciplinei cu aşteptările reprezentanţilor comunităţii epistemice, asociaţiilor profesionale şi angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului**

- Prin insusirea conceptelor teoretico-metodologice si abordarea aspectelor practice incluse in disciplina **Structura chimica,** studentii dobandesc un bagaj de cunostinte consistent, in concordanta cu competentele din Suplimentul la diploma si calificarile din ANC.

**10. Evaluare**

| Tip activitate | 10.1 Criterii de evaluare | 10.2 Metode de evaluare | 10.3 Pondere in nota finală |
|---|---|---|---|
| 10.4 Curs | Corectitudinea răspunsurilor – însuşirea şi înţelegerea corectă a problematicii tratate la curs | Examen scris. | 80% |
| | Capacitatea de a aplica | | |

| | | | |
|---|---|---|---|
| | cunostintele dobandite in diverse cazuri (probleme si exercitii) | | |
| 10.5 Seminar | Participarea activă la seminar, însuşirea şi înţelegerea corectă a problematicii tratate la seminar | Teme pentru acasa date la seminar. | 20% |
| | Capacitatea de a aplica cunostintele dobandite in diverse cazuri (probleme si exercitii) | | |
| 10.6 Standard minim de performanţă | | | |
| • Cunoaşterea noţiunilor de bază de structura chimica.<br>• Nota 5 (cinci) ca medie ponderata a notelor obtinute la verificarile scrise si la testele de seminar (conform subpunctelor 10.4 si 10.5). | | | |

| Data completării | Semnătura titularului de curs | Semnătura titularului de seminar |
|---|---|---|
| 2 Aprilie 2024 | Conf. dr. Alexandru Lupan | Conf. dr. Alexandru Lupan |

| Data avizării în departament | Semnătura directorului de departament |
|---|---|
| 2 Aprilie 2024 | Prof. habil. dr. ing. Graziella Liana Turdean |