FIŞA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituţia de învăţământ superior	Univeristatea Babeş-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie şi Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Departamentul de Chimie si Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Inginerie
1.5 Ciclul de studii	Licenţă
1.6 Programul de studiu / Calificarea	CISOPC IV LM

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	**Structură chimică- CLM 1123 (optional 4)**						
2.2 Titularul activităţilor de curs	Lect. dr. Ing. Rácz Csaba Pál						
2.3 Titularul activităţilor de seminar	Lect.dr.ing. Rácz Csaba-Pál						
2.4 Anul de studiu	IV	2.5 Semestrul	7	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	DS

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	Din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învăţământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuţia fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie şi notiţe					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate şi pe teren					10
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii şi eseuri					10
Tutoriat					1
Examinări					3
Alte activităţi:					

3.7 Total ore studiu individual	44
3.8 Total ore pe semestru	100
3.9 Numărul de credite	4

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 • Nu va fi acceptată întârzierea
5.2 De desfăşurare a seminarului/laboratorului	• Studenţii se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închise • Studenţii se vor prezenta în laborator cu halat, manusi, cârpă de laborator. • Studenţii nu pot lăsa nesupravegheată o instalţie în funcţiune • Predarea referatului de laborator se va face cel târziu în săptămâna următoare desfăşurării efective a lucrării • Nu va fi acceptată întârzierea • Este interzis accesul cu mâncare în laborator

6. Competenţele specifice acumulate

Competenţe profesionale	• Definirea noţiunilor, conceptelor, teoriilor şi modelelor de bază din domeniul chimiei şi ingineriei şi utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională • Utilizarea cunoştinţelor de bază din domeniul chimiei şi ingineriei chimice pentru explicarea şi interpretarea fenomenelor inginereşti • Identificarea şi aplicarea conceptelor, metodelor şi teoriilor pentru rezolvarea problemelor tipice ingineriei chimice în condiţii de asistenţă calificată • Analiza critică şi utilizarea principiilor, metodelor şi tehnicilor de lucru pentru evaluarea cantitativă şi calitativă a proceselor din ingineria chimică • Aplicarea conceptelor şi teoriilor fundamentale din domeniul chimiei şi ingineriei chimice pentru elaborarea de proiecte profesionale
Competenţe transversale	• Executarea sarcinilor solicitate conform cerinţelor precizate si în termenele impuse, cu respectarea normelor de etica profesionala si de conduita morala, urmând un plan de lucru prestabilit • Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanţă cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru • Preocuparea pentru perfecţionarea rezultatelor activităţii profesionale prin implicarea în activităţile desfăşurate. • Universitatea Babeș-Bolyai este o instituție care promovează egalitatea de șanse și combate discriminarea

7. Obiectivele disciplinei (reieşind din grila competenţelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	• Familiarizarea studenţilor cu unele metode de chimie cuantică şi de elucidarea relaţiei structură-reactivitate chimică.
7.2 Obiectivele specifice	• Modelul cuantomecanic al atomului. • Simetrie moleculara. • Metode de calcul al structurii moleculare. • Reactivitate chimica. • Aprecierea reactivităţii chimice funcţie de structura moleculară.

8. Conţinuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observaţii

8.1.1. Elementele simetriei moleculare.	Prelegerea Explicaţia, Conversaţia	
8.1.2. Grupuri de simetrie. Determinarea grupurilor de simetrie.	Prelegerea Explicaţia Conversaţia Problematizarea	
8.1.3. Teoria grupurilor in simetria moleculara.	Prelegerea Explicaţia Conversaţia Problematizarea	
8.1.4. Tabele de caractere si utilizarea lor.	Prelegerea; Explicaţia Conversaţia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.5. Axiomele mecanicii cuantice.1	Prelegerea Explicaţia Conversaţia	
8.1.6. Axiomele mecanicii cuantice. 2	Prelegerea Explicaţia Conversaţia	
8.1.7. Rezolvarea ecuatiei lui Schrodinger pentru atomul de hidrogen.	Prelegerea Explicaţia Conversaţia Problematizarea	
8.1.8. Numere cuantice.	Prelegerea Explicaţia Conversaţia	
8.1.9. Moleculele in oglinda mecanicii cuantice.	Prelegerea Explicaţia Conversaţia	
8.1.10. Experimentul Stern-Gerlach. Spinul electronului.	Prelegerea; Explicaţia Conversaţia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.11. Chimia cuantica. Aproximatii.	Prelegerea; Explicaţia Conversaţia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.12. Aproximatia Born-Oppenheimer.	Prelegerea; Explicaţia Conversaţia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.13. Aproximatia monoelectronica.	Prelegerea; Explicaţia Conversaţia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.14. Metoda variationala.	Prelegerea; Explicaţia Conversaţia; Descrierea Problematizarea;	
Bibliografie 1. J. Zsakó, D. Bobos, Atom és molekula szerkezet, 1995-„Babes-Bolyai Tudományegyetem,		

Kolozsvár”

2. Veszprémi T., Fehér M. : A kvantumkémia alapjai és alkalmazása. Műszaki Könyvkiadó Bp. 2002.

3. P.W.Attkins: Fizikai kémia II. –Szerkezet. Nemzeti Tankönyvkiadó RT. , Bp. 2002.

	Metode de predare	Observaţii
8.2.1. Protecţia muncii, prezentarea lucrărilor şi cerinţelor referitoare la modul de întocmire a referatelor. Metode de prelucrare a datelor experimentale	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea;Problematizarea;	
8.2.2. Prezentarea programelor de calculator Origin şi Excel pentru prelucrarea datelor experimentale şi reprezentarea grafică a datelor, calculul erorilor.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea;Problematizarea	
8.2.3. Determinarea simetriei moleculare.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea;Problematizarea	
8.2.4. Grupuri de simetrie. Clasificarea moleculelor dupa grupurile de simetrie. Verificarea cunostintelor.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea;Problematizarea Test.	
8.2.5. Nivele de energie si numerele cuantice.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea;Problematizarea	
8.2.6. Calcule prin metoda variationala.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea;Problematizarea	
8.2.7. Verificarea cunostintelor.	Test.	

1. Dr. Máthé J. : Molekula spektroszkópiai és kvantumkémiai számítások., Tankönyvkiadó Bp. 1982.

2. Arthur M.Halpern, Experimental Physical Chemistry, 2-nd ed., Prentice-Hall International, London 1997.
3. Szabó G., Bolla Cs.: Fizikaiükémiai számitasok, Egyetemi Műhely Kiadó, 2008.

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

- Prin însuşirea conceptelor teoretico-metodologice si abordarea aspectelor practice incluse in disciplina **Structură chimica** studenţii dobândesc un bagaj de cunoştinţe consistent, in concordanţă cu competentele parţiale cerute pentru ocupaţiile posibile prevăzute in Grila 2 – RNCIS.

10. Evaluare

<table>
<tr><td>Tip activitate</td><td>10.1 Criterii de evaluare</td><td>10.2 metode de evaluare</td><td>10.3 Pondere din nota finală</td></tr>
<tr><td rowspan="2">10.4 Curs</td><td>Corectitudinea răspunsurilor – însuşirea şi înţelegerea corectă a problematicii tratate la curs</td><td rowspan="2">Examen scris – accesul la examen este condiţionat de susţinerea colocviului de laborator şi prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice
Intenţia de frauda la examen se pedepseşte cu eliminarea din examen.
Frauda la examen se pedepseşte prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB</td><td rowspan="2">80%</td></tr>
<tr><td>Rezolvarea corectă a problemelor</td></tr>
<tr><td rowspan="3">10.5 Seminar/laborator</td><td>Corectitudinea răspunsurilor – însuşirea şi înţelegerea corectă a problematicii tratate la seminar/laborator</td><td rowspan="3">Referatele de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice – se predau în ultima săptămână de activitate didactică
Colocviu laborator – test – se susţine în ultima săptămână de activitate didactică</td><td rowspan="3">20%</td></tr>
<tr><td>Calitatea referatelor pregătite</td></tr>
<tr><td>Activitatea desfăşurată în laborator</td></tr>
<tr><td colspan="4">10.6 Standard minim de performanţă</td></tr>
<tr><td colspan="4">• Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât şi la examen conform baremului.</td></tr>
</table>

Data completării	Semnătura titularului de curs	Semnătura titularului de seminar
04.04.2024	Lect.dr.ing. Rácz Csaba-Pál	Lect.dr.ing. Rácz Csaba-Pál





Data avizării în departament	Semnătura directorului de departament
05.04.2024	Prof.dr.ing.Paizs Csaba

