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 Chimică
1.5 Ciclul de studii	Licenţă
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Inginerie chimică /CISOPC-LM

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	**Chimie cuantică organică (optional 4) CLM2189**						
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.

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 la diferite clase de compuşi organici. • Reactivitatea compuşilor organici. • Aprecierea reactivităţii chimice funcţie de structura moleculară.

8. Conţinuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observaţii
8.1.1. Teoria orbitalelor moleculare (OM). *Concepte de baza, cuvinte cheie:* orbitale atomice, molecule derivate din atomul de hidrogen,	Prelegerea Explicaţia, Conversaţia	

„molecule” H_2 , H_3 , H_4.		
8.1.2. Legaturi: C-H si C-C *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: orbitale atomice ale carbonului, metan, metilena, hibridizarea, legaturi π, etena.	Prelegerea Explicaţia Conversaţia Problematizarea	
8.1.3. Conjugarea –teoria Huckel *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: sistemul allilic, butadiena	Prelegerea Explicaţia Conversaţia Problematizarea	
8.1.4 Sisteme aromatice *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: sisteme aromatice si antiaromatice, anionul si cationul de ciclopentadienil, homoaromaticitate, spiro conjugare.	Prelegerea; Explicaţia Conversaţia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.5. Legaturi σ tensionate, legaturi heteronucleare *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: energia orbitalelor atomice, electronegativitate, sistem aromatic heterociclic	Prelegerea Explicaţia Conversaţia	
8.1.6. Legatura “tau”. Metode spectrale *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: spectroscopie UV, Spectre RMN, spectre fotoelectronice, spectre de spin electronic.	Prelegerea Explicaţia Conversaţia	
8.1.7.Efectul conjugarii π , hiperconjugarea. *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: grupari stabilizatoare, grupari destabilizatoare, hiperconjugarea C-H, C-C, C-M, hiperconjugarea negativa.	Prelegerea Explicaţia Conversaţia Problematizarea	
8.1.8. Configuratia si conformatia moleculelor *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: rotatii restrictionate, conformatii preferentiate, inversie de configuratie, structuri piramidale, hipervalenta, interactiuni de tip van der Waals.	Prelegerea Explicaţia Conversaţia	
8.1.9 Reactii chimice *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: echilibrul chimic, acizi si baze tari si slabe, structuri de tranzitie, teoria perturbationala a reactivitatii, ecuatia Salem-Klopmann.	Prelegerea Explicaţia Conversaţia	
8.1.10. Reactii ionice-Reactivitate.	Prelegerea; Explicaţia Conversaţia; Descrierea	

Concepte de bază, cuvinte-cheie: aproximaţia electronilor pi; delocalizare; metode SCF-MO; metoda HMO; heteroatomi; nivele de energie, densitate electronică, ordin de legătură.	Problematizarea;	
8.1.11 Indici de reactivitate. Legătura chimică în solide ionice *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: transfer de electron celibatar, nucleofilicitate, efectul solventului, efectul alfa, electrofilicitate, carbene.	Prelegerea; Explicaţia Conversaţia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.12. Reactii ionice- stereochimie *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: substitute la carbon saturat, reactii de eliminare, atac nucleofil si atac electrofil al unei legaturi π, diastereoselectivitate.	Prelegerea; Explicaţia Conversaţia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.13. Reactii periciclice *Concepte de bază, cuvinte cheie:* formare si rupere concertata de legaturi chimice, regula Woodward-Hoffmann, structuri de tranzitie aromatice, orbitale de frontiera, diagrame de corelare.	Prelegerea; Explicaţia Conversaţia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.14. Reactii fotochimice *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: substitutie aromatica nucleofila, substitutie aromatica electrofila, regula Woodward- Hoffmann pentru reactii fotochimice, fotocicloaditii, regioselectivitate.	Prelegerea; Explicaţia Conversaţia; Descrierea Problematizarea;	
Bibliografie 1. P.W.Atkins, J.de Paula, *Physical Chemistry*, 7th Ed., Oxford, 2002. 2. I. Zsakó, *Chimie Fizică*, EDP, Bucureşti 1973 3. J. Keeler, P. Wothers, *Chemical Structure and Reactivity*, Oxford University Press, 2008. 4. I. Fleming, *Molecular orbitals and organic chemical reactions*, J.Wiley& Sons, 2010.		
8.2 Seminar / laborator	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	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia;	

experimentale şi reprezentarea grafică a datelor, calculul erorilor.	Descrierea;Problematizarea	
8.2.3. Determinarea caldurii de ardere a benzenului *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: calorimetrie, calorimetru bomba, caldura de ardere	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea;Problematizarea	
8.2.4. Determinarea caldurii de ardere a 1,5,9-trans, trans, cis-1,5,9- ciclododecatrienei. *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: calorimetrie, legaturi duble neconjugate. Verificarea cunostintelor.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea;Problematizarea Test.	
8.2.5. Calculul energiei de rezonanta a benzenului *Concepte de bază, cuvinte-cheie*: energie de delocalizare, metoda HMO.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea;Problematizarea	
8.2.6. Calcule prin metoda Paar-Pariser-Pople.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea;Problematizarea	
8.2.7. Verificarea cunostiintelor.	Test.	
Bibliografie 1.) Z.Andrei, I.Zsako**,** L.D.Bobos, şi col., *"Lucrari practice de termodinamica şi structura chimica"*, Ed. UBB, Cluj-Napoca, **1996**. 2.) Arthur M.Halpern, Experimental Physical Chemistry, 2-nd ed., Prentice-Hall International, London 1997.		

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 **Chimie cuantică organică (optional 5)** studenţii dobândesc un bagaj de cunoştinţe consistent, in concordanţă cu competentele parţiale cerute pentru ocupaţiile posibile prevăzute in Grila 2 – RNCIS.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însuşirea şi înţelegerea corectă a problematicii tratate la curs	Examen scris – accesul la examen este condiţionat de susţinerea colocviului de laborator şi prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor	80%
	Rezolvarea corectă a		

	problemelor	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	
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însuşirea şi înţelegerea corectă a problematicii tratate la seminar/laborator	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	20%
	Calitatea referatelor pregătite		
	Activitatea desfăşurată în laborator		
10.6 Standard minim de performanţă			
• Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât şi la examen conform baremului.			

Data completării | Semnătura titularului de curs | Semnătura titularului de seminar

02.04.2024

Data avizării în departament | Semnătura directorului de departament

05.apr.2024.....