

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Chimie
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie / chimie

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Structura chimica - CLR1123						
2.2 Titularul activităților de curs	Lect. dr. Bobos Liviu						
2.3 Titularul activităților de seminar	Lect. dr. Bobos Liviu						
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	Ob

3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților 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 învățământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					25
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					17
Tutoriat					4
Examinări					3
Alte activități:					
3.7 Total ore studiu individual		69			
3.8 Total ore pe semestru		125			
3.9 Numărul de credite		5			

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> Nu este cazul
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> Nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise Nu va fi acceptată întârzierea
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> Studentii se vor prezenta la laborator cu telefoanele mobile închise Studentii se vor prezenta în laborator cu halat, manusi, cârpă de laborator. Studentii nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune Predarea referatului de laborator se va face cel târziu în săptămâna următoare desfășurării efective a lucrării

	<ul style="list-style-type: none"> • Pentru predarea cu întârziere se penalizează cu 0,5 puncte/zi • Este interzis accesul cu mâncare în laborator
--	--

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • Recunoașterea și descrierea conceptelor, abordărilor, teoriilor, metodelor și modelelor elementare privitoare la structura compușilor chimici • Explicarea și interpretarea unor proprietăți, concepte, abordări, teorii, modele și noțiuni fundamentale de structura a compușilor chimici • Aplicarea noțiunilor fundamentale pentru rezolvarea problemelor asociate structurii compușilor chimici. • Analiza critică a modelelor și teoriilor existente cu privire la structura compușilor chimici. • Identificarea conceptelor, teoriilor, metodelor, modelelor și procedurilor elementare folosite în sinteza chimică • Explicarea și interpretarea conceptelor, teoriilor, modelelor, metodelor și procedurilor elementare folosite în sinteza chimică • Aplicarea cunoștințelor, specifice domeniului pentru rezolvarea unor probleme practice de sinteză a compușilor chimici • Analiza critică a metodelor și procedurilor folosite în sinteza chimică și a rezultatelor obținute • Formularea, dezvoltarea și implementarea creativă de soluții pentru probleme specifice, în contexte bine definite, asociate sintezei unor compuși chimici.
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> • Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată. • Realizarea unor activități în echipă multidisciplinară utilizând abilități de comunicare interpersonală pentru îndeplinirea obiectivelor propuse. • 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.

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Familiarizarea cu unele metode de chimie cuantică și cu metode de elucidare a structurii și proprietăților diferitelor molecule.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază necesare descrierii mecanic-cuantice a atomului și a legăturii chimice în molecule și solide • Dobândirea unor cunoștințe privind metodele moderne de investigare a structurii • Dobândirea abilității de a le aplica în practica studierii compușilor chimici

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Modelul cuantomecanic al atomului: operatori ai mecanicii cuantice; relațiile de incertitudine; ecuația lui Schroedinger; valori proprii și	Prelegerea Explicația Conversația	

vectori proprii; atomi hidrogenoizi	Descrierea	
8.1.2. Orbitali atomici: funcție radială, funcție angulară, numere cuantice, densitate de probabilitate, suprafețe nodale	Prelegerea; Explicația Conversația Descrierea	
8.1.3. Invelișul electronic în atomi polielectronici. Configurații electronice: compunerea momentelor, principiul identității microparticulelor, principiul lui Pauli, metode SCF, orbitale în atomi polielectronici.	Prelegerea; Explicația Conversația Descrierea Exercitiul	
8.1.4. Spectre. Termeni spectrali. Spectre atomice de absorbție și de emisie; ecuația lui Schroedinger dependentă de timp; reguli de selecție; termeni spectrali; regulile lui Hund; spectrele metalelor alcaline	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea	
8.1.5. Legătura chimică – orbitali moleculari în molecule diatomice nepolare: aproximația Born-Oppenheimer, soluții exacte ale ecuației lui Schrödinger, metode aproximative ale chimiei cuantice, metoda funcționalei de densitate, metode OM; OM sigma și pi; ordin de legătură	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.6. Orbitali moleculari în molecule diatomice polare. Molecule poliatomice. Polaritatea legăturii; moment dipolar; OM în molecule polare; OM în molecule poliatomice; metoda LV; orbitale localizate	Prelegerea; Explicația Conversația Descrierea Exercitiul	
8.1.7. Aranjarea spațială a atomilor în molecule poliatomice. diagrame Walsh, hibridizare; calcularea orbitalilor hibridi; configurațiile moleculelor	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea	
8.1.8. Simetrie și grupuri de simetrie: elemente de simetrie; operații de simetrie; grupuri punctuale de simetrie, simetria moleculelor	Prelegerea Explicația Conversația Exercitiul	
8.1.9. Reprezentările grupelor de simetrie – aplicații în chimie: reprezentarea grupurilor; tabele de caractere; aplicații în hibridizare, construirea OM de simetrie, spectre de vibrație	Prelegerea Explicația Conversația Exercitiul	
8.1.10. Sisteme electronice delocalizate. Metoda HMO. aproximația electronilor pi; delocalizare; metode SCF-MO; metoda HMO; heteroatomi; nivele de energie, densitate electronică, ordin de legătură.	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea	
8.1.11. Indici de reactivitate. Legătura chimică în solide ionice indici de reactivitate din metode OM; distribuția electronică; nivele de energie; orbitale de frontieră, suprafețe de energie potențială, metode QSAR, QSPR, programe de calcul; solide ionice; energie de rețea	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Exercitiul	
8.1.12. Legătura chimică în solide metalice și semiconductoare: legătura chimică în solide; benzi de energie; nivel Fermi; stări energetice; metoda funcționalei de densitate	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea	
8.1.13. Metode spectrale pentru cercetarea structurii :spectroscopie moleculară; spectre IR și Raman; rotații și vibrații moleculare; spectre electronice; spectroscopie fotoelectronică	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea	
8.1.14. Metode noi de investigare a structurii : metode RMN bi- și tridimensionale, metode de	Prelegerea Explicația	

difracție, spectroscopie Auger, microscopie de emisie și de ionizare de câmp, microscopie de baleiaj (SEM, TEM, AFM), tehnica fasciculelor moleculare	Conversația Descrierea	
Bibliografie 1. P.W.Atkins, <i>Chimie fizică</i> Ed.Tehnică, 1996 2. J.Zsako, M.Tomoaia-Cotisel, <i>Simetria și structura moleculelor</i> , Presa Univ.Clujeana, 1998 3. I.Zsako, L.D.Bobos, I.Marian, <i>Structura chimica</i> , curs litografiat, UBB Cluj, 1995 4. S.Moldoveanu, <i>Aplicațiile teoriei grupurilor în chimie</i> , Ed.St.Enc. Bucuresti, 1975		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Norme de protecția muncii la lucrările practice de structura chimica. Metode de prelucrare și interpretare a datelor experimentale: notarea datelor experimentale, prezentare grafică, programe de calculator de chimie cuantica, prelucrarea datelor experimentale, calculul erorilor	Explicația Conversația Exercițiul	4 ore
8.2.2. Metode optice de investigare a structurii; refractometria; refractometrul Abbe. Refracție specifică și molară. Refracții atomice și ionice	Explicația Conversația Experimentul Exercițiul	4 ore
8.2.3. Metode electrice în studiul structurii. Dipolmoment și măsurarea lui. Dielectricitatea. Calcularea dipolmomentului.	Explicația Conversația Experimentul	4 ore
8.2.4. Metode difracție a razelor X în determinarea structurii. Difractograma X și interpretarea ei. Rețele cristaline, constanta celulei elementare, distanțe interplanare	Explicația Conversația Experimentul Exercițiul	4 ore
8.2.5. Spectrele IR. Spectroscopie și spectrografe. Spectre de vibrație și rotație Interpretarea spectrelor. Elucidarea structurii pe baza spectrelor IR	Explicația Conversația Experimentul Exercițiul	4 ore
8.2.6. Utilizarea spectrelor UV-VIS în elucidarea structurii. Tranzitii electronice. Grupări cromofore. Modelarea la calculator a tranzițiilor spectrale.	Explicația Conversația Experimentul Exercițiul	4 ore
Bibliografie 1. Z. Andrei, I. Zsako, L. D. Bobos, și col., <i>Lucrări practice de termodinamică și structura chimică</i> , Ed. UBB, Cluj-Napoca, 1995. 2. G. Niac, V. Voiculescu, I. Bâldea, M. Preda, <i>Formule, tabele, probleme de Chimie fizică</i> , Ed. Dacia, Cluj-Napoca, 1984.		

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

Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina *Structura chimică* studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 1 – 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 la teste – însușirea și înțelegerea	Teste de cunoștințe aplicate pe parcursul semestrului	75%

	corectă a problematicii tratate la curs		
	Rezolvarea corectă a problemelor	Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	
10.5 Laborator	Activitatea desfasurata in laborator	Referatele de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice se predau după fiecare activitate de laborator	25%
	Calitatea referatelor prezentate		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none">Cunoasterea notiunilor teoretice de baza, scrierea corecta a unei configuratii electronice a unui atom sau molecule biatomice, folosirea unui program de chimie cuantica, incadrarea unei molecule la grupul de simetrie corespunzatorNota 5 (cinci) atat la rezolvarile de probleme, cat si la testele de cunostinte			

Data completării

30 sept. 2012

Semnătura titularului de curs

.....

Semnătura titularului de seminar

.....

Data avizării în departament

.....

Semnătura directorului de departament

.....