

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Univeristatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Departamentul de Chimie si Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	TMSC

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Structură și dinamică moleculară				
2.2 Titularul activităților de curs	Asist. Dr. Ing. Rácz Csaba Pál				
2.3 Titularul activităților de seminar	Asist. Dr. Ing. Rácz Csaba Pál				
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	E
2.7 Regimul disciplinei					

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	3	Din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	1
3.4 Total ore din planul de învățământ	36	Din care: 3.5 curs	24	3.6 seminar/laborator	12
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					30
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					20
Tutoriat					2
Examinări					5
Alte activități:					
3.7 Total ore studiu individual	77				
3.8 Total ore pe semestru	125				
3.9 Numărul de credite	6				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	• Nu este cazul
4.2 de competențe	• Nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

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

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • Definierea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională • Utilizarea cunoștințelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru explicarea și interpretarea fenomenelor ingineresti • Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor pentru rezolvarea problemelor tipice ingineriei chimice în condiții de asistență calificată • Analiza critică și utilizarea principiilor, metodelor și tehnicilor de lucru pentru evaluarea cantitativă și calitativă a proceselor din ingineria chimică • Aplicarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru elaborarea de proiecte profesionale
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> • Executarea sarcinilor solicitate conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etica profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit • Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru • Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate.

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Familiarizarea studenților cu unele metode de chimie cuantică și de elucidarea relației structură-reactivitate chimică.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Modelul cuantomecanic al atomului. • Simetrie moleculară. • Metode de calcul al structurii moleculare. • Reactivitate chimică. • Aprecierea reactivității chimice funcție de structura moleculară.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Modelul cuantomecanic al atomului <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> operatori ai mecanicii cuantice; relațiile de incertitudine;	Prelegerea Explicația, Conversația	

ecuația lui Schroedinger; valori proprii și vectori proprii; atomi hidrogenoizi		
8.1.2. Orbitale atomice. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> orbital atomic, funcție radială, funcție angulară, numere cuantice, densitate de probabilitate, suprafețe nodale	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.3. Invelișul electronic în atomi polielectronici. Configurații electronice. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> compunerea momentelor, principiul identității microparticulelor, principiul lui Pauli, metode SCF, orbitale în atomi polielectronici.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.4 Spectre. Termeni spectrali. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> 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 – orbitale moleculare în molecule diatomice nepolare. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> 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	
8.1.6. Orbitale moleculare în molecule diatomice polare. Molecule poliatomice. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> polaritatea legăturii; moment dipolar; OM în molecule polare; OM în molecule poliatomice; metoda LV; orbitale localizate.	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.7. Aranjarea spațială a atomilor în molecule poliatomice. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> diagrame Walsh, hibridizare; calcularea orbitalelor hibride; configurațiile moleculelor	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.8. Simetrie și grupuri de simetrie <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> elemente de simetrie; operații de simetrie; grupuri punctuale de simetrie, simetria moleculelor	Prelegerea Explicația Conversația	

<p>8.1.9 Reprezentările grupelor de simetrie – aplicații în chimie</p> <p><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> reprezentarea grupurilor; tabele de caractere; aplicații în hibridizare, construirea OM de simetrie, spectre de vibrație</p>	<p>Prelegerea Explicația Conversația</p>	
<p>8.1.10. . Sisteme electronice delocalizate. Metoda HMO.</p> <p><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> aproximația electronilor pi; delocalizare; metode SCF-MO; metoda HMO; heteroatomi; nivele de energie, densitate electronică, ordin de legătură.</p>	<p>Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;</p>	
<p>8.1.11 Indici de reactivitate. Legătura chimică în solide ionice</p> <p><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> 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.</p>	<p>Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;</p>	
<p>8.1.12. Legatura chimica în solide metalice și semiconductoare</p> <p><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> legătura chimică în solide; benzi de energie; nivel Fermi; stări energetice; metoda funcționalei de densitate.</p>	<p>Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;</p>	
<p>8.1.13. Metale tranziționale.</p> <p><i>Concepte de bază, cuvinte cheie:</i> energia orbitalelor și starea de oxidare; complecși; teoria câmpului de liganzi; complecși oeganometalici.</p>	<p>Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;</p>	
<p>8.1.14. Metode spectrale pentru cercetarea structurii</p> <p><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i>spectroscopie moleculară; spectre IR și Raman; rotații și vibrații moleculare; spectre electronice; spectroscopie fotoelectronică</p>	<p>Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;</p>	
<p>Bibliografie</p> <p>1. P.W.Atkins, J.de Paula, <i>Physical Chemistry</i>, 7th Ed., Oxford, 2002.</p>		

2. I. Zsakó, *Chimie Fizică*, EDP, București 1973

3. J. Keeler, P. Wothers, *Chemical Structure and Reactivity*, Oxford University Press, 2008.

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Protecția muncii, prezentarea lucrărilor și cerințelor referitoare la modul de întocmire a referatelor. Metode de prelucrare a datelor experimentale	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea;	
8.2.2. Prezentarea programelor de calculator Origin și Excel pentru prelucrarea datelor experimentale și reprezentarea grafică a datelor, calculul erorilor.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.3. Determinarea momentelor de dipol ale unor molecule <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> polarizație molară; polarizație de deplasare și de orientare; moment de dipol permanent și indus; dielcometrie	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.4. Spectroscopie IR <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> spectre de rotație; spectre de vibrație; spectre de vibrație- rotație ale moleculelor diatomice; vibrații de valență și de deformare; benzi caracteristice; modelarea spectrelor IR.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.5. Spectroscopie UV/VIS <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> tranziții electronice, nivele electronice, orbitali moleculari, cromofori, tabelul Deslandres; software de calcul MO	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.6. Difrakția cu raze X <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> raze Roentgen, difrakția prin rețele cristaline, constanta rețelei, interpretarea spectrelor	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.7. Evaluare	Test	
Bibliografie		
1.) Z.Andrei, I.Zsako, L.D.Bobos, și col., “ <i>Lucrari practice de termodinamica și structura chimica</i> ”, Ed. UBB, Cluj-Napoca, 1996 .		
2.) Arthur M.Halpern, Experimental Physical Chemistry, 2-nd ed., Prentice-Hall International, London 1997.		

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 **Structură și dinamica moleculară (optional 4)** studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în 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 – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs	Examen scris – accesul la examen este condiționat de susținerea colocviului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	80%
	Rezolvarea corectă a problemelor		
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar/laborator	Referatele de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice – se predau în ultima săptămână de activitate didactică Colocviu laborator – test – se susține în ultima săptămână de activitate didactică	20%
	Calitatea referatelor pregătite		
	Activitatea desfășurată în laborator		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none">Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât și la examen conform baremului.			

Data completării
15.03.2013

.....

Semnătura titularului de curs

.....

Semnătura titularului de seminar

.....

Data avizării în departament
15.03.2013

.....

Semnătura directorului de departament

.....



