

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		Structura și dinamica molecularăCMM6631					
2.2 Titularul activităților de curs				Lect. Dr. Ing. Rácz Csaba Pál			
2.3 Titularul activităților de seminar				Lect. 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	ob

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	42	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	14
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		150			
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"> ● Definirea 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 etică 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"> -Bazele mecanicii cuantice. -Structură moleculară și stări ale materiei - Reactivitate chimică. -Aprecierea reactivității chimice funcție de structura moleculară.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Electroni în atomi <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> Introducere în mecanica cuantică; orbitale atomice hidrogenoide.	Prelegerea Explicația, Conversația	

8.1.2. Electroni în molecule diatomice. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> orbitale moleculare, molecule diatomice homonucleare, spectre fotoelectronice, molecule diatomice heteronucleare.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.3. Electroni în molecule poliatomice <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> molecule triatomice (cazul H_3^+), orbitale molecular în apă și metan, orbitale atomice hibride, structuri delocalizate.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.4. Hibridizarea orbitalelor: factorul electronic cheie în controlul structurii și reactivității. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> regula lui Bent; conjugarea și hiperconjugarea; hibridizarea și rehibridizarea; reactivitate/structură		
8.1.5 Electroni în solide <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> legături în metale, benzi electronice, solizi ionici.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.6. Legătura chimică, diverse aspecte. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> configurația electronică și sistemul periodic, energii orbitale, sarcina nucleară efectivă, energii de ionizare și afinități chimice, stări de oxidare.	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.7. Descrierea reacțiilor utilizând orbitali-1. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> redistribuirea electronilor în reacții, interacții HOMO-LUMO.	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.8. Descrierea reacțiilor utilizând orbitali-2. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> interacțiuni în care sunt implicați LUMO de nelegătură, interacțiuni în care sunt implicați LUMO π de antilegătură, interacțiuni care implică LUMO σ de antilegătură.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	

<p>8.1.9. Reacții intramoleculare</p> <p><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> interacțiunea orbitalelor intramoleculare, reacții de rearanjare intramoleculară.</p>	<p>Prelegerea Explicația Conversația</p>	
--	--	--

8.1.10. Metale tranziționale-1 <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> energii orbitale și stări de oxidare, complecși, legătura chimică în complecși octaedrali, spin jos și spin înalt.	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.11. Metale tranziționale-2 <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> proprietăți magnetice și electrice ale complecșilor, complecși tetraedrici și plan pătrați.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.12. Spectre atomice și moleculare în viziunea mecanicii cuantice <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> oscilatorul armonic, nivele energetice, spectre IR, molecule diatomice, molecule poliatomice.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.13. Spectre -2- <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> spectre Raman, spectre de vibrație și rotație	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.14. Aplicabilitatea teoriei DFT în spectroscopia vibrațională <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> spectroscopie moleculară; spectre IR și Raman; rotații și vibrații moleculare; teoria DFT.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
Bibliografie 1. P.W.Atkins, J.de Paula, <i>Physical Chemistry</i> , 7 th Ed., Oxford, 2002.		

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 teoretică a 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. Calcule HMO <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> teoria HMO, programe de calcul	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.5. Compuși metalici <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> software de calcul MO.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.7. Evaluare	Test	

Bibliografie

- 1.) Z.Andrei, I.Zsako, L.D.Bobos, și col., *“Lucrari practice de termodinamica și structura chimica”*, 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 CMM6631** 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

Semnătura titularului de curs
lector dr. ing. Rácz Csaba

Semnătura titularului de seminar
lector dr. ing. Rácz Csaba

10.03.2015

Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

lector dr. Szabó Gabriella Stefănia

27.04.2016