

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

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Strucură chimicaCLM1123						
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	IV	2.5 Semestrul	7	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	DS

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	48	Din care: 3.5 curs	24	3.6 seminar/laborator	24
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		4			

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"> • 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 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 la diferite clase de compuși organici. • Reactivitatea compușilor organici. • Aprecierea reactivității chimice funcție de structura moleculară.

8. Conținuturi

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

proprii și vectori proprii; atomi hidrogenoizi		
8.1.2. Orbitale atomice. 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. compunerea momentelor, principiul identității microparticulelor, principiul lui Pauli, metode SCF, orbitale în atomi polielectronici.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.4 Spectre. Termeni spectrali. Spectre atomice de absorbție și de emisie; ecuația lui Schrodinger 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. 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.: 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. diagrame Walsh, hibridizare; calcularea orbitalelor hibride; configurațiile moleculelor	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.8. Simetrie și grupuri de simetrie elemente de simetrie; operații de simetrie; grupuri punctuale de simetrie, simetria moleculelor	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.9 Reprezentările grupelor de simetrie – aplicații în chimie reprezentarea grupurilor; tabele de caractere; aplicații în hibridizare, construirea OM de	Prelegerea Explicația Conversația	

simetrie, spectre de vibrație		
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 Problematizarea;	
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 Problematizarea;	
8.1.12. Geometria compușilor organici. relațiile dintre isomeri, efectul rotațiilor în jurul legăturilor, enantiomeria și chiralitatea, simetria și chiralitatea, conformația moleculelor ciclice	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.13. Reacții în sisteme π -1. reacții de eliminare, formarea alchenelor, aditii electrofile la alchene.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.14. Reacții în sisteme π -2 enoli și enolate, sisteme aromatice.	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, <i>Chimie Fizică</i> , EDP, București 1973 3. J. Keeler, P. Wothers, <i>Chemical Structure and Reactivity</i> , 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	Experimentul; Explicația; Conversația;	

Polarizație molară; polarizație de deplasare și de orientare; moment de dipol permanent și indus; dielcometrie	Descrierea;Problematizarea	
8.2.4. Spectroscopie IR Spectre de rotație; spectre de vibrație; spectre de vibrație-rotatie 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 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 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

<ul style="list-style-type: none"> Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice si abordarea aspectelor practice incluse in disciplina Chimie cuantică organică (optional 5) studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, in concordanță cu competentele parțiale cerute pentru ocupațiile 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	<p>Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs</p> <p>Rezolvarea corectă a problemelor</p>	<p>Examen scris – accesul la examen este condiționat de susținerea colocviului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice</p> <p>Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen.</p> <p>Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB</p>	80%

10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea 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 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

10 03 2015

Semnătura titularului de curs

lector dr. ing. Rácz Csaba

Semnătura titularului de seminar

lector dr. ing. Rácz Csaba




Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

lector dr. Szabó Gabriella Stefánia



.....