

FISA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Institutia de învățământ superior	Univeristatea Babes-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie si Inginerie Chimica
1.3 Departamentul	Departamentul de Chimie si Inginerie Chimica 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 disciplina

2.1 Denumirea disciplinei	Structura si dinamica moleculara CMM6631						
2.2 Titularul activitatilor de curs	Lect. Dr. Ing. Rácz Csaba Pál						
2.3 Titularul activitatilor 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	DA

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

3.1 Numar de ore pe saptamâna	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
Distributia fondului de timp:					ore
Studiul dupa manual, suport de curs, bibliografie si notite					30
Documentare suplimentara în biblioteca, pe platformele electronice de specialitate si pe teren					20
Pregatire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii si eseuri					20
Tutoriat					2
Examinari					5
Alte activitati:					
3.7 Total ore studiu individual		77			
3.8 Total ore pe semestru		125			
3.9 Numarul de credite		6			

4. Preconditii (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	? Nu este cazul
4.2 de competente	? Nu este cazul

5. Conditii (acolo unde este cazul)

5.1 De desfasurare a cursului	? Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise ? Nu va fi acceptata întârzierea
5.2 De desfasurare a seminarului/laboratorului	? Studentii se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închise ? Studentii se vor prezenta în laborator cu halat, manusi, cârpa de laborator. ? Studentii nu pot lasa nesupravegheata o instalatie în functiune ? Predarea referatului de laborator se va face cel târziu în saptamâna urmatoare desfasurarii efective a lucrarii ? Nu va fi acceptata întârzierea ? Este interzis accesul cu mâncare în laborator

6. Competentele specifice acumulate

Competente profesionale	? Definirea notiunilor, conceptelor, teoriilor si modelelor de baza din domeniul chimiei si ingineriei si utilizarea lor adecvata în comunicarea profesionala ? Utilizarea cunostintelor de baza din domeniul chimiei si ingineriei chimice pentru explicarea si interpretarea fenomenelor ingineresti ? Identificarea si aplicarea conceptelor, metodelor si teoriilor pentru rezolvarea problemelor tipice ingineriei chimice în conditii de asistenta calificata ? Analiza critica si utilizarea principiilor, metodelor si tehnicilor de lucru pentru evaluarea cantitativa si calitativa a proceselor din ingineria chimica ? Aplicarea conceptelor si teoriilor fundamentale din domeniul chimiei si ingineriei chimice pentru elaborarea de proiecte profesionale
Competente transversale	? Executarea sarcinilor solicitate conform cerintelor 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 concordanta cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru ? Preocuparea pentru perfectionarea rezultatelor activitatii profesionale prin implicarea în activitatile desfasurate.

7. Obiectivele disciplinei (reiesind din grila competentelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	? Familiarizarea studentilor cu unele metode de chimie cuantica si de elucidarea relatiei structura-reactivitate chimica.
7.2 Obiectivele specifice	? Metode de aproximari în chimia cuantica. ? Metoda variationala. ? Metoda perturbationala. ? Reactivitate chimica. ? Aprecierea reactivitatii chimice functie de structura moleculara.

8. Continuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observatii
8.1.1. Metode exacte si metode bazate pe aproximari <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> Ecuatia lui	Prelegerea Explicatia, Conversatia	

Schroedinger, Spinul electronului, determinantul Slater.		
8.1.2. Metoda OM a lui Huckel <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> sisteme de legaturi pi. Sisteme localizate, sisteme delocalizate. Exemplul etenei.	Prelegerea Explicatia Conversatia Problematizarea	
8.1.3. Aplicatii de calcul prin metoda Huckel <i>Concepte de baza, cuvinte -cheie:</i> butadiena calculul coeficientilor prin metoda van Fleck.	Prelegerea Explicatia Conversatia Problematizarea	
8.1.4 Aplicatii de calcul pe baza simetriei moleculare. <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> benzenul, hidrocarburi alternante si h. nealternante	Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.5. Sisteme delocalizate cu heteroatomi. <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> piridina, aproximarea integralelor	Prelegerea Explicatia Conversatia	
8.1.6. Metoda Huckel perfectionata <i>Concepte de baza, cuvinte -cheie:</i> polaritatea legaturii; moment dipolar;	Prelegerea Explicatia Conversatia	
8.1.7. Metoda polarizabilitatilor <i>Concepte de baza, cuvinte -cheie :</i> ecuatia Coulson.	Prelegerea Explicatia Conversatia Problematizarea	
8.1.8. Calculul unor integrale moleculare <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> integrale de acoperire pentru orbitali Slater, orbitale GTO	Prelegerea Explicatia Conversatia	
8.1.9 Evaluari semiempirice în teoria OM <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> termeni monoelectronici, termeni multielectronici	Prelegerea Explicatia Conversatia	
8.1.10. Formule aproximative pentru termenii multielectronici <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> formalismul hamiltonianului monoelectronic efectiv, pastrarea invariatiei.	Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.11 Calculul prin procedee semiempirice de OM a unor proprietati fizico-chimice <i>Concepte de baza, cuvinte cheie:</i> Teorema Hellmann-Feynmann , geometria de echilibru.	Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;	

<p>8.1.12. Constante de forta din studii MO</p> <p><i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> calduri de formare, atomizare.</p>	<p>Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;</p>	
<p>8.1.13. Aplicarea metodelor semiempirice de MO în studiul tranzițiilor spectrale.</p> <p><i>Concepte de baza, cuvinte cheie:</i> intensitati IR</p>	<p>Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;</p>	
<p>8.1.14. Calculul de constante de scindare hiperfina, studiul constantelor de ecranare</p> <p><i>Concepte de baza, cuvinte -cheie :</i> RES, RMN.</p>	<p>Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;</p>	
<p>Bibliografie</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. P.W.Atkins, J.de Paula, <i>Physical Chemistry</i>, 7th Ed., Oxford, 2002. 2. I. Zsakó, <i>Chimie Fizica</i>, EDP, Bucuresti 1973 3. J. Keeler, P. Wothers, <i>Chemical Structure and Reactivity</i>, Oxford University Press, 2008. 4. S. Moldoveanu, A.Savin: Aplicatii în chimie ale metodelor semiempirice de OM, Ed. Academiei Republicii Socialiste Romania 1980. 		
<p>8.2 Seminar / laborator</p> <p>8.2.1. Protectia muncii, prezentarea lucrarilor si cerintelor referitoare la modul de întocmire a referatelor. Metode de prelucrare a datelor experimentale</p>	<p>Metode de predare Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea;Problematizarea;</p>	Observatii
<p>8.2.2. Prezentarea programelor de calculator Origin si Excel pentru prelucrarea datelor experimentale si reprezentarea grafica a datelor, calculul erorilor.</p>	<p>Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea;Problematizarea</p>	
<p>8.2.3. Determinarea caldurii de ardere a benzenului</p> <p><i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> calorimetrie, calorimetru bomba, caldura de ardere</p>	<p>Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea;Problematizarea</p>	
<p>8.2.4. Determinarea caldurii de ardere a 1,5,9-trans, trans, cis-1,5,9- ciclododecatrilei.</p> <p><i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> calorimetrie, legaturi duble neconjugate.</p>	<p>Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea;Problematizarea</p>	

8.2.5. Calculul energiei de rezonanta a benzenului <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> energie de delocalizare, metoda HMO.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea;Problematizarea	
8.2.6. Calculul prin metoda HMO a carotenoidelor <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> straturi monomoleculare, moment de dipol, geometria asezarii in strat a moleculelor.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea;Problematizarea	
8.2.7. Evaluare	Test	
Bibliografie 1.) Z.Andrei, I.Zsako, L.D.Bobos, si col., “ <i>Lucrari practice de termodinamica si 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 continuturilor disciplinei cu asteptarile reprezentantilor comunitatii epistemice, asociatiilor profesionale si angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

?	Prin însusirea conceptelor teoretico-metodologice si abordarea aspectelor practice inc luse in disciplina Structura si dinamica moleculara studentii dobândesc un bagaj de cunostinte consistent, in concordanta cu competentele pariale cerute pentru ocupatiile posibile prevazute in Grila 2 – RNCIS.
---	---

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finala
10.4 Curs	Corectitudinea raspunsurilor – însusirea si înțelegerea corecta a problematii tratate la curs	Examen scris – accesul la examen este conditionat de sustinerea colocviului de laborator si prezentarea referatelor de laborator corespunzatoare tuturor lucrarilor practice Intentia de fraudă la examen se pedepseste cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepseste prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	80%
	Rezolvarea corecta a problemelor		
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea raspunsurilor – însusirea si	Referatele de laborator corespunzatoare tuturor	20%

	înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar/laborator	lucrărilor practice – se predau în ultima săptămână de activitate didactică
	Calitatea referatelor pregătite	Colocviu laborator – test – se susține în ultima săptămână de activitate didactică
	Activitatea desfășurată în laborator	
10.6 Standard minim de performanță		
? Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât și la examen conform baremului.		

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

30 martie 2017




Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

30 martie 2017

