

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	Licenta
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie an I LM

2. Date despre disciplina

2.1 Denumirea disciplinei	Structura chimica CLM1123				
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	1	2.6. Tipul de evaluare	VP
2.7 Regimul disciplinei					

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

3.1 Numar de ore pe saptamana	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		5			

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	? Modelul cuantomecanic al atomului. ? Simetrie moleculara. ? Metode de calcul al structurii moleculare. ? Reactivitate chimica. ? Aprecierea reactivitatii chimice functie de structura moleculara.

8. Continuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observatii
8.1.1. Modelul cuantomecanic al atomului <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> operatori ai mecanicii cuantice; relatiile de incertitudine;	Prelegerea Explicatia, Conversatia	

ecuatia lui Schroedinger; valori proprii si vectori proprii; atomi hidrogenoizi		
8.1.2. Orbitale atomice. <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> orbital atomic, functie radiala, functie angulara, numere cuantice, densitate de probabilitate, suprafete nodale	Prelegerea Explicatia Conversatia Problematizarea	
8.1.3. Invelisul electronic în atomi polielelectronici. Configuratii electronice. <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> compunerea momentelor, principiul identitatii microparticulelor, principiul lui Pauli, metode SCF, orbitale în atomi polielelectronici.	Prelegerea Explicatia Conversatia Problematizarea	
8.1.4 Spectre. Termeni spectrali. <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> Spectre atomice de absorbtie si de emisie; ecuatia lui Schroedinger dependenta de timp; reguli de selectie; termeni spectrali; regulile lui Hund; spectrele metalelor alcaline	Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.5. Legatura chimica – orbitale moleculare în molecule diatomice nepolare. <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> aproximatia Born-Oppenheimer, solutii exacte ale ecuatiei lui Schrödinger, metode aproximative ale chimiei cuantice, metoda functionalei de densitate, metode OM; OM sigma si pi; ordin de legatura	Prelegerea Explicatia Conversatia	
8.1.6. Orbitale moleculare în molecule diatomice polare. Molecule poliatomice. <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> polaritatea legaturii; moment dipolar; OM în molecule polare; OM în molecule poliatomice; metoda LV; orbitale localizate.	Prelegerea Explicatia Conversatia	
8.1.7. Aranjarea spatiala a atomilor în molecule poliatomice. <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie :</i> diagrame Walsh, hibridizare; calcularea orbitalelor hibride; configuratiile moleculelor	Prelegerea Explicatia Conversatia Problematizarea	
8.1.8. Simetrie si grupuri de simetrie <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> elemente de simetrie; operatii de simetrie; grupuri punctuale de simetrie, simetria moleculelor	Prelegerea Explicatia Conversatia	

<p>8.1.9 Reprezentările grupelor de simetrie – aplicatii în chimie</p> <p><i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> reprezentarea grupurilor; tabele de caractere; aplicatii în hibridizare, construirea OM de simetrie, spectre de vibrație</p>	<p>Prelegerea Explicatia Conversatia</p>	
<p>8.1.10. . Sisteme electronice delocalizate. Metoda HMO.</p> <p><i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> aproximatia electronilor pi; delocalizare; metode SCF-MO; metoda HMO; heteroatomi; nivele de energie, densitate electronica, ordin de legatura.</p>	<p>Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;</p>	
<p>8.1.11 Indici de reactivitate. Legatura chimica în solide ionice</p> <p><i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> indici de reactivitate din metode OM; distributia electronica; nivele de energie; orbitale de frontiera, suprafete de energie potentiala, metode QSAR, QSPR, programe de calcul; solide ionice; energie de retea.</p>	<p>Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;</p>	
<p>8.1.12. Legatura chimica în solide metalice si semiconductoare</p> <p><i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> legatura chimica în solide; benzi de energie; nivel Fermi; stari energetice; metoda functionalei de densitate.</p>	<p>Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;</p>	
<p>8.1.13. Metale tranzitionale.</p> <p><i>Concepte de baza, cuvinte cheie:</i> energia orbitalelor si starea de oxidare; complexi; teoria câmpului de liganzi; complexi oeganometalici.</p>	<p>Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;</p>	
<p>8.1.14. Metode spectrale pentru cercetarea structurii</p> <p><i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> spectroscopie moleculara; spectre IR si Raman; rotatii si vibratii moleculare; spectre electronice; spectroscopie fotoelectronica</p>	<p>Prelegerea; Explicatia Conversatia; 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 Fizica*, EDP, Bucuresti 1973
3. J. Zsakó, D. Bobos, Atom és molekula szerkezet, 1995-, „Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár”
4. J. Keeler, P. Wothers, *Chemical Structure and Reactivity*, Oxford University Press, 2008.

	Metode de predare	Observatii
8.2.1. Protectia muncii, prezentarea lucrarilor si cerintelor referitoare la modul de întocmire a referatelor. Metode de prelucrare a datelor experimentale	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea;Problematizarea;	
8.2.2. Prezentarea programelor de calculator Origin si Excel pentru prelucrarea datelor experimentale si reprezentarea grafica a datelor, calculul erorilor.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea;Problematizarea	
8.2.3. Determinarea momentelor de dipol ale unor molecule <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> polarizatie molară; polarizatie de deplasare si de orientare; moment de dipol permanent si indus; dielcometrie	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea;Problematizarea	
8.2.4. Spectroscopie IR <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> spectre de rotatie; spectre de vibratie; spectre de vibratie-rotatie ale moleculelor diatomice; vibratii de valenta si de deformare; benzi caracteristice; modelarea spectrelor IR.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea;Problematizarea	
8.2.5. Spectroscopie UV/VIS <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> tranzitii electronice, nivele electronice, orbitali moleculari, cromofori, tabelul Deslandres; software de calcul MO	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea;Problematizarea	
8.2.6. Difractia cu raze X <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> raze Roentgen, difractia prin retele cristaline, constanta retelei, interpretarea spectrelor	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 incluse in disciplina **Structura chimica** studentii dobândesc un bagaj de cunostinte consistent, in concordanta cu competentele parțiale 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 problematiei tratate la curs Rezolvarea corecta a problemelor	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%
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea raspunsurilor – însusirea si înțelegerea corecta a problematiei tratate la seminar/laborator Calitatea referatelor pregatite	Referatele de laborator corespunzatoare tuturor lucrarilor practice – se predau în ultima saptamâna de activitate didactica Colocviu laborator – test – se sustine în ultima saptamâna de activitate didactica	20%
10.6 Standard minim de performanta	Activitatea desfasurata în laborator		
? Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât si la examen conform baremului.			

Data completarii

Semnatura titularului de curs

Semnatura titularului de seminar

30 martie 2017

Data avizarii în departament

Semnatura directorului de departament

30 martie 2017