

## 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	Inginerie Chimica
1.5 Ciclul de studii	Licenta
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Inginerie chimica /CISOPC-LM

### 2. Date despre disciplina

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Chimie cuantica organica CLM2189</b>				
2.2 Titularul activitatilor de curs	Lect. Dr. Ing. RÁCZ Csaba Pál				
2.3 Titularul activitatilor de seminar	Drd. Ing. RÁCZ Levente Zsolt				
2.4 Anul de studiu	IV	2.5 Semestrul	8	2.6. Tipul de evaluare	VP
					2.7 Regimul disciplinei
					DS

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

3.1 Numar de ore pe saptamana	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
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		4			

### 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 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	? 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 asistentă 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	? 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 (reiesind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	? Familiarizarea studenților cu unele metode de chimie cuantică și de elucidarea relației structură-reactivitate chimică.
7.2 Obiectivele specifice	? Modelul cuantomecanic al atomului. ? Simetrie moleculară. ? Metode de calcul al structurii moleculare la diferite clase de compusi organici. ? Reactivitatea compusilor organici. ? Aprecierea reactivității chimice funcție de structură moleculară.

## 8. Continuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observatii
8.1.1. Teoria orbitalelor moleculare (OM). <i>Concepte de bază, cuvinte cheie:</i> orbitale atomice, molecule derivate din atomul de hidrogen,	Prelegerea Explicatia, Conversatia	

„molecule” $H_2$ , $H_3$ , $H_4$		
8.1.2. Legături: C-H și C-C <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> orbitale atomice ale carbonului, metan, metilena, hibridizarea, legături p, etena.	Prelegerea Explicatia Conversatia Problematizarea	
8.1.3. Conjugarea –teoria Huckel <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> sistemul alilic, butadiena	Prelegerea Explicatia Conversatia Problematizarea	
8.1.4 Sisteme aromatice <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> sisteme aromatice și antiaromatice, anionul și cationul de ciclopentadienil, homoaromaticitate, spiro conjugare.	Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.5. Legături s tensionate, legături heteronucleare <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> energia orbitalelor atomice, electronegativitate, sistem aromatic heterociclic	Prelegerea Explicatia Conversatia	
8.1.6. Legătura “tau”. Metode spectrale <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> spectroscopie UV, Spectre RMN, spectre fotoelectronice, spectre de spin electronic.	Prelegerea Explicatia Conversatia	
8.1.7. Efectul conjugării p, hiperconjugarea.  <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> grupări stabilizatoare, grupări destabilizatoare, hiperconjugarea C-H, C-C, C-M, hiperconjugarea negativă.	Prelegerea Explicatia Conversatia Problematizarea	
8.1.8. Configurația și conformația moleculelor  <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> rotații restricționate, conformații preferențiate, inversie de configurație, structuri piramidale, hipervalență, interacțiuni de tip van der Waals.	Prelegerea Explicatia Conversatia	
8.1.9 Reacții chimice  <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> echilibrul chimic, acizi și baze tari și slabe, structuri de tranziție, teoria perturbatională a reactivității, ecuația Salem-Klopman.	Prelegerea Explicatia Conversatia	
8.1.10. Reacții ionice-Reactivitate.	Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea	

<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.	Problematizarea;	
8.1.11 Indici de reactivitate. Legatura chimica în solide ionice  <i>Concepte de baza, cuvinte-cheie:</i> transfer de electron celibatar, nucleofilicitate, efectul solventului, efectul alfa, electrofilicitate, carbene.	Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;	
8.1.12 Reactii periciclice  <i>Concepte de baza, cuvinte cheie:</i> formare si rupere concertata de legaturi chimice, regula Woodward-Hoffmann, structuri de tranzitie aromatice, orbitale de frontiera, diagrame de corelare.	Prelegerea; Explicatia Conversatia; Descrierea Problematizarea;	
Bibliografie 1. P.W.Atkins, J.de Paula, <i>Physical Chemistry</i> , 7 <sup>th</sup> 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. I. Fleming, <i>Molecular orbitals and organic chemical reactions</i> , J.Wiley & Sons, 2010.		
8.2 Seminar / laborator	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. 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  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	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea;Problematizarea	

valenta si de deformare; benzi caracteristice; modelarea spectrelor IR.		
8.2.5. 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	
8.2.6. Spectroscopie UV/VIS  <i>Concepte de baza, cuvinte -cheie</i> : tranzitii electronice, nivele electronice, orbitali moleculari, cromofori, tabelul Deslandres; software de calcul MO		
Bibliografie  1.) Z.Andrei, I.Zsako, L.D.Bobos, si col., <i>“Lucrari practice de termodinamica si structura chimica”</i> , Ed. UBB, Cluj-Napoca, <b>1996</b> .  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 **Chimie cuantica organica (optional 5)** studentii dobândesc un bagaj de cunostinte consistent, in concordanta cu competentele partiale 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	80%
	Rezolvarea corecta a problemelor		

		exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea raspunsurilor – însusirea si înțelegerea corecta a problematicii tratate la seminar/laborator	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%
	Calitatea referatelor pregatite		
	Activitatea desfasurata în laborator		
10.6 Standard minim de performanta			
? 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