

## 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              | <b>Structură și dinamică moleculară CMM6631</b> |               |   |                        |   |                         |    |
| 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 | DA |

### 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   |    |                    |    |                       | 3   |
| Examinări  |    |                    |    |                       | 5   |
| Alte activități: .....   |    |                    |    |                       |     |
| 3.7 Total ore studiu individual  |    | 78                 |    |                       |     |
| 3.8 Total ore pe semestru  |    | 125                |    |                       |     |
| 3.9 Numărul de credite   |    | 5                  |    |                       |     |

### 4. Precondiții (acolo unde este cazul)

|                   |   |
|-------------------|---|
| 4.1 de curriculum | <ul style="list-style-type: none"> <li>Nu este cazul</li> </ul> |
| 4.2 de competențe | <ul style="list-style-type: none"> <li>Nu este cazul</li> </ul> |

### 5. Condiții (acolo unde este cazul)

|  |   |
|--|---|
| 5.1 De desfășurare a cursului                  | <ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise</li> <li>• Nu va fi acceptată întârzierea</li> </ul>   |
| 5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului | <ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închise</li> <li>• Studenții se vor prezenta în laborator cu halat, manusi, cârpă de laborator.</li> <li>• Studenții nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune</li> <li>• Predarea referatului de laborator se va face cel târziu în săptămâna următoare desfășurării efective a lucrării</li> <li>• Nu va fi acceptată întârzierea</li> <li>• Este interzis accesul cu mâncare în laborator</li> </ul> |

## 6. Competențele specifice acumulate

|                         |   |
|-------------------------|---|
| Competențe profesionale | <ul style="list-style-type: none"> <li>• Definierea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională</li> <li>• Utilizarea cunoștințelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru explicarea și interpretarea fenomenelor ingineresti</li> <li>• Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor pentru rezolvarea problemelor tipice ingineriei chimice în condiții de asistență calificată</li> <li>• Analiza critică și utilizarea principiilor, metodelor și tehnicilor de lucru pentru evaluarea cantitativă și calitativă a proceselor din ingineria chimică</li> <li>• Aplicarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru elaborarea de proiecte profesionale</li> </ul> |
| Competențe transversale | <ul style="list-style-type: none"> <li>• 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</li> <li>• Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru</li> <li>• Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate.</li> </ul>  |

## 7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

|                                       |   |
|---------------------------------------|---|
| 7.1 Obiectivul general al disciplinei | <ul style="list-style-type: none"> <li>• Familiarizarea studenților cu unele metode de chimie cuantică și de elucidarea relației structură-reactivitate chimică.</li> </ul>   |
| 7.2 Obiectivele specifice             | <ul style="list-style-type: none"> <li>• Metode de aproximări în chimia cuantică.</li> <li>• Metoda variatională.</li> <li>• Metoda perturbatională.</li> <li>• Reactivitate chimică.</li> <li>• Aprecierea reactivității chimice funcție de structura moleculară.</li> </ul> |

## 8. Conținuturi

|  |  |            |
|--|--|------------|
| 8.1 Curs   | Metode de predare                        | Observații |
| 8.1.1. Metode exacte și metode bazate pe aproximări<br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> Ecuația lui | Prelegerea<br>Explicația,<br>Conversația |            |

|   |   |  |
|---|---|--|
| Schroedinger, Spinul electronului, determinantul Slater.  |   |  |
| 8.1.2. Metoda OM a lui Huckel.<br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> sisteme de legături pi. Sisteme localizate, sisteme delocalizate. Exemplul etenei.                        | Prelegerea<br>Explicația<br>Conversația<br>Problematizarea            |  |
| 8.1.3. Aplicații de calcul prin metoda Huckel.<br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> butadiena calculul coeficientilor prin metoda van Fleck.                                  | Prelegerea<br>Explicația<br>Conversația<br>Problematizarea            |  |
| 8.1.4 Aplicații de calcul pe baza simetriei moleculare.<br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> benzenul, hidrocarburi alternante și h. nealternante                             | Prelegerea; Explicația<br>Conversația; Descrierea<br>Problematizarea; |  |
| 8.1.5. Sisteme delocalizate cu heteroatomi.<br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> piridina, aproximarea integralelor   | Prelegerea<br>Explicația<br>Conversația                               |  |
| 8.1.6. Metoda Huckel perfecționată <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> polaritatea legăturii; moment dipolar;   | Prelegerea<br>Explicația<br>Conversația                               |  |
| 8.1.7. Metoda polarizabilităților<br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> ecuația Coulson.   | Prelegerea<br>Explicația<br>Conversația<br>Problematizarea            |  |
| 8.1.8. Calculul unor integrale moleculare<br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> integrale de acoperire pentru orbitali Slater, orbitale GTO                                    | Prelegerea<br>Explicația<br>Conversația                               |  |
| 8.1.9 Evaluări semiempirice în teoria OM<br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> termeni monoelectronici, termeni multielectronici   | Prelegerea<br>Explicația<br>Conversația                               |  |
| 8.1.10. Formule aproximative pentru termenii multielectronici<br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> formalismul hamiltonianului monoelectronic efectiv, păstrarea invarianței. | Prelegerea; Explicația<br>Conversația; Descrierea<br>Problematizarea; |  |
| 8.1.11 Calculul prin procedee semiempirice de OM a unor proprietăți fizico-chimice<br><i>Concepte de bază, cuvinte cheie:</i> Teorema Hellmann-Feynmann , geometria de echilibru.   | Prelegerea; Explicația<br>Conversația; Descrierea<br>Problematizarea; |  |

|   |  |            |
|---|--|------------|
|   |  |            |
| 8.1.12. Constante de forta din studii MO<br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> calduri de formare, atomizare.  | Prelegerea; Explicația<br>Conversația; Descrierea<br>Problematizarea;    |            |
| 8.1.13. Aplicarea metodelor semiempirice de MO în studiul tranzițiilor spectrale.<br><i>Concepte de bază, cuvinte cheie:</i> intensitati IR   | Prelegerea; Explicația<br>Conversația; Descrierea<br>Problematizarea;    |            |
| 8.1.14. Calculul de constante de scindare hiperfina, studiul constantelor de ecranare<br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> RES, RMN.  | Prelegerea; Explicația<br>Conversația; Descrierea<br>Problematizarea;    |            |
| Bibliografie<br>1. P.W.Atkins, J.de Paula, <i>Physical Chemistry</i> , 7 <sup>th</sup> Ed., Oxford, 2002.<br>2. I. Zsakó, <i>Chimie Fizică</i> , EDP, București 1973<br>3. J. Keeler, P. Wothers, <i>Chemical Structure and Reactivity</i> , Oxford University Press, 2008.<br>4. S. Moldoveanu, A.Savin: Aplicații în chimie ale metodelor semiempirice de OM, Ed. Academiei Republicii Socialiste Romania 1980. |  |            |
| 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;<br>Conversația;<br>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;<br>Conversația;<br>Descrierea;Problematizarea  |            |
| 8.2.3. Determinarea caldurii de ardere a benzenului<br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> calorimetrie, calorimetru bomba, caldura de ardere   | Experimentul; Explicația;<br>Conversația;<br>Descrierea;Problematizarea  |            |
| 8.2.4. Determinarea caldurii de ardere a 1,5,9-trans, trans, cis-1,5,9- ciclododecatrienei.<br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> calorimetrie, legaturi duble neconjugate.  | Experimentul; Explicația;<br>Conversația;<br>Descrierea;Problematizarea  |            |

|   |   |  |
|---|---|--|
| 8.2.5. Calculul energiei de rezonanță a benzenului<br><br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> energie de delocalizare, metoda HMO.  | Experimentul; Explicația;<br>Conversația;<br>Descrierea;Problematizarea |  |
| 8.2.6. Calculul prin metoda HMO a carotenoidelor<br><br><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> straturi monomoleculare, moment de dipol, geometria așezării în strat a moleculelor.  | Experimentul; Explicația;<br>Conversația;<br>Descrierea;Problematizarea |  |
| 8.2.7. Evaluare   | Test  |  |
| Bibliografie<br><br>1.) Z.Andrei, I.Zsako, L.D.Bobos, și col., “ <i>Lucrări practice de termodinamică și structură chimică</i> ”, Ed. UBB, Cluj-Napoca, <b>1996</b> .<br><br>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"> <li>Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina <b>Structură și dinamică moleculară</b> studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 2 – RNCIS.</li> </ul> |
|---|

**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<br><br>Rezolvarea corectă a problemelor | Examen scris – accesul la examen este condiționat de susținerea colocviului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice<br>Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen.<br>Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB | 80%                          |
| 10.5 Seminar/laborator | Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și   | Referatele de laborator corespunzătoare 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  |  |  |  |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât și la examen conform baremului.</li> </ul> |  |  |  |

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

16 aprilie 2018

Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

16 aprilie 2018

Lector dr. Szabó Gabriella Stefánia