

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	Chimie cuantică organică (optional 4)						
2.2 Titularul activităților de curs	Lect. Dr. Ing. Rácz Csaba Pál						
2.3 Titularul activităților de seminar	Drd. Ing. Rácz Levente Zsolt						
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	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					10
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					10
Tutoriat					1
Examinări					3
Alte activități:					
3.7 Total ore studiu individual		44			
3.8 Total ore pe semestru		100			
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. Teoria orbitalelor moleculare (OM). <i>Concepte de baza, cuvinte cheie:</i> orbitale atomice, molecule derivate din atomul de hidrogen,	Prelegerea Explicația, Conversația	

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

<p><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> aproximația electronilor pi; delocalizare; metode SCF-MO; metoda HMO; heteroatomi; nivele de energie, densitate electronică, ordin de legătură.</p>	Problematizarea;	
<p>8.1.11 Indici de reactivitate. Legătura chimică în solide ionice</p> <p><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> transfer de electron celibatar, nucleofilicitate, efectul solventului, efectul alfa, electrofilicitate, carbene.</p>	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
<p>8.1.12. Reactii ionice- stereochemie</p> <p><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> substituite la carbon saturat, reacții de eliminare, atac nucleofil și atac electrofil al unei legături π, diastereoselectivitate.</p>	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
<p>8.1.13. Reactii periciclice</p> <p><i>Concepte de bază, cuvinte cheie:</i> formare și rupere concertată de legături chimice, regula Woodward-Hoffmann, structuri de tranziție aromatice, orbitale de frontieră, diagrame de corelare.</p>	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
<p>8.1.14. Reactii fotochimice</p> <p><i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> substituție aromatică nucleofilă, substituție aromatică electrofilă, regula Woodward- Hoffmann pentru reacții fotochimice, fotocicloadiții, regioselectivitate.</p>	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
<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 Fizică</i>, EDP, București 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	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	Experimentul; Explicația; Conversația;	

experimentale și reprezentarea grafică a datelor, calculul erorilor.	Descrierea;Problematizarea	
8.2.3. Determinarea caldurii de ardere a benzenului <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> calorimetrie, calorimetru bomba, caldura de ardere	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.4. Determinarea caldurii de ardere a 1,5,9-trans, trans, cis-1,5,9- ciclododecatrienei. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> calorimetrie, legaturi duble neconjugate.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.5. Calculul energiei de rezonanta a benzenului <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> energie de delocalizare, metoda HMO.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.6. Calcule prin metoda Paar-Pariser-Pople.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.7. Calcule HF.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
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	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs	Examen scris – accesul la examen este condiționat de susținerea colocviului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor	80%
	Rezolvarea corectă a		

	problemelor	lucrărilor practice Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar/laborator	Referatele de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice – se predau în ultima săptămână de activitate didactică	20%
	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"> Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât și la examen conform baremului. 			

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

02.04.2020




Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

28.04.2020

Prof. Dr. PAIZS Csaba

