

FISA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Institutia de învățământ superior	Universitatea Babes-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie si Inginerie Chimica
1.3 Departamentul	Chimie
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Licenta
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie / chimie

2. Date despre disciplina

2.1 Denumirea disciplinei	Structura chimica - CLR1123						
2.2 Titularul activitatilor de curs							
2.3 Titularul activitatilor de seminar							
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	1	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	Obl

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	42	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	14
Distributia fondului de timp:					ore
Studiul dupa manual, suport de curs, bibliografie si notite					40
Documentare suplimentara în biblioteca, pe platformele electronice de specialitate si pe teren					30
Pregatire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii si eseuri					3
Tutoriat					7
Examinari					3
Alte activitati:					
3.7 Total ore studiu individual	83				
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	<ul style="list-style-type: none"> • Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise • Nu va fi acceptata întârzierea
5.2 De desfasurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> • Studentii se vor prezenta la 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

- Pentru predarea cu întârziere se penalizeaza cu 0,5 puncte/zi
- Este interzis accesul cu mâncare în laborator

6. Competentele specifice acumulate

Competente profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • Recunoasterea si descrierea conceptelor, abordarilor, teoriilor, metodelor si modelelor elementare privitoare la structura compusilor chimici • Explicarea si interpretarea unor proprietati, concepte, abordari, teorii, modele si notiuni fundamentale de structura a compusilor chimici • Aplicarea notiunilor fundamentale pentru rezolvarea problemelor asociate structurii compusilor chimici. • Analiza critica a modelelor si teoriilor existente cu privire la structura compusilor chimici. • Identificarea conceptelor, teoriilor, metodelor, modelelor si procedurilor elementare folosite in sinteza chimica • Explicarea si interpretarea conceptelor, teoriilor, modelelor, metodelor si procedurilor elementare folosite in sinteza chimica • Aplicarea cunostintelor, specifice domeniului pentru rezolvarea unor probleme practice de sinteza a compusilor chimici • Analiza critica a metodelor si procedurilor folosite in sinteza chimica si a rezultatelor obtinute • Formularea, dezvoltarea si implementarea creativa de solutii pentru probleme specifice, in contexte bine definite, asociate sintezei unor compusi chimici.
Competente transversale	<ul style="list-style-type: none"> • Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient si responsabil cu respectarea legislatiei si deontologiei specifice domeniului sub asistenta calificata. • Realizarea unor activitati în echipa multidisciplinara utilizând abilitati de comunicare interpersonală pentru îndeplinirea obiectivelor propuse. • Utilizarea eficienta a surselor informationale si a resurselor de comunicare si formare profesionala asistata, atât în limba româna, cât si într-o limba de circulatie internationala.

7. Obiectivele disciplinei (reiesind din grila competentelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Familiarizarea cu unele metode de chimie cuantica si cu metode de elucidare a structurii si proprietatilor diferitelor molecule.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Dobândirea cunostintelor teoretice de baza necesare descrierii mecanic-cuantice a atomului si a legaturii chimice în molecule si solide • Dobândirea unor cunostinte privind metodele moderne de investigare a structurii • Dobândirea abilitatii de a le aplica în practica studierii compusilor chimici

8. Continuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observatii
8.1.1. Modelul cuantomecanic al atomului: operatori ai mecanicii cuantice; relatiile de incertitudine; ecuatia lui Schroedinger; valori proprii si	Prelegerea Explicatia Conversatia	

vectori proprii; atomi hidrogenoizi	Descrierea	
8.1.2. Orbitali atomici: functie radiala, functie angulara, numere cuantice, densitate de probabilitate, suprafete nodale	Prelegerea; Explicatia Conversatia Descrierea	
8.1.3. Invelisul electronic în atomi polielectronici. Configuratii electronice: compunerea momentelor, principiul identitatii microparticulelor, principiul lui Pauli, metode SCF, orbitale în atomi polielectronici.	Prelegerea; Explicatia Conversatia Descrierea Exercitiul	
8.1.4. Spectre. Termeni spectrali. 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 – orbitali moleculari în molecule diatomice nepolare: 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 Problematizarea	
8.1.6. Orbitali moleculari în molecule diatomice polare. Molecule poliatomice. Polaritatea legaturii; moment dipolar; OM în molecule polare; OM în molecule poliatomice; metoda LV; orbitale localizate	Prelegerea; Explicatia Conversatia Descrierea Exercitiul	
8.1.7. Aranjarea spatiala a atomilor în molecule poliatomice. diagrame Walsh, hibridizare; calcularea orbitalilor hibrizi; configuratiile moleculelor	Prelegerea Explicatia Conversatia Descrierea	
8.1.8. Simetrie si grupuri de simetrie: elemente de simetrie; operatii de simetrie; grupuri punctuale de simetrie, simetria moleculelor	Prelegerea Explicatia Conversatia Exercitiul	
8.1.9. Reprezentarile grupelor de simetrie – aplicatii în chimie: reprezentarea grupurilor; tabele de caractere; aplicatii în hibridizare, construirea OM de simetrie, spectre de vibratie	Prelegerea Explicatia Conversatia Exercitiul	
8.1.10. Sisteme electronice delocalizate. Metoda HMO. aproximatia electronilor pi; delocalizare; metode SCF-MO; metoda HMO; heteroatomi; nivele de energie, densitate electronica, ordin de legatura.	Prelegerea Explicatia Conversatia Descrierea	
8.1.11. Indici de reactivitate. Legatura chimica în solide ionice 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	Prelegerea Explicatia Conversatia Descrierea Exercitiul	
8.1.12. Legatura chimica în solide metalice si semiconductoare: legatura chimica în solide; benzi de energie; nivel Fermi; stari energetice; metoda functionalei de densitate	Prelegerea Explicatia Conversatia Descrierea	
8.1.13. Metode spectrale pentru cercetarea structurii :spectroscopie moleculara; spectre IR si Raman; rotatii si vibratii moleculare; spectre electronice; spectroscopie fotoelectronica	Prelegerea Explicatia Conversatia Descrierea	
8.1.14. Metode noi de investigare a structurii : metode RMN bi- si tridimensionale, metode de	Prelegerea Explicatia	

difractie, spectroscopie Auger, microscopie de emisie si de ionizare de câmp, microscopie de baleiaj (SEM, TEM, AFM), tehnica fasciculelor moleculare	Conversatia Descrierea	
Bibliografie		
1. P.W.Atkins, <i>Chimie fizica</i> Ed.Tehnica, 1996		
2. J.Zsako, M.Tomoaia-Cotisel, <i>Simetria si structura moleculelor</i> , Presa Univ.Clujeana, 1998		
3. I.Zsako, L.D.Bobos, I.Marian, <i>Structura chimica</i> , curs litografiat, UBB Cluj, 1995		
4. S.Moldoveanu, <i>Aplicatiile teoriei grupurilor în chimie</i> , Ed.St.Enc. Bucuresti, 1975		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observatii
8.2.1. Norme de protectia muncii la lucrarile practice de structura chimica. Metode de prelucrare si interpretare a datelor experimentale: notarea datelor experimentale, prezentare grafica, programe de calculator de chimie cuantica, prelucrarea datelor experimentale, calculul erorilor	Explicatia Conversatia Exercitiul	2 ore
8.2.2. Metode electrice in studiul structurii. Dipolmoment si masurarea lui. Dielectricul. Calcularea dipolmomentului.	Explicatia Conversatia Experimentul	4 ore
8.2.3. Metode difractie a razelor X in determinarea structurii. Difractograma X si interpretarea ei. Retele cristaline, constanta celulei elementare, distante interplanare	Explicatia Conversatia Experimentul Exercitiul	4 ore
8.2.4. Utilizarea spectrelor UV-VIS in elucidarea structurii. Tranzitii electronice. Grupari cromofore. Modelarea la calculator a tranzitiilor spectrale.	Explicatia Conversatia Experimentul Exercitiul	4 ore
Bibliografie		
1. Z. Andrei, I. Zsako, L. D. Bobos, si col., <i>Lucrari practice de termodinamica si structura chimica</i> ", Ed. UBB, Cluj-Napoca, 1995.		
2. G. Niac, V. Voiculescu, I. Bâldea, M. Preda, <i>Formule, tabele, probleme de Chimie fizica</i> , Ed. Dacia, Cluj-Napoca, 1984.		

9. Coroborarea continuturilor disciplinei cu asteptarile reprezentantilor comunitatii epistemice, asociatiilor profesionale si angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina *Structura chimica* studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 1 – 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 la teste- însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs	Teste de cunoștințe aplicate pe parcursul semestrului	75%
	Rezolvarea corectă a problemelor	Intentia de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al	

		UBB	
10.5 Laborator	Activitatea desfasurata in laborator	Referatele de laborator corespunzatoare tuturor lucrarilor practice se predau dupa fiecare activitate de laborator	25%
	Calitatea referatelor prezentate		
10.6 Standard minim de performanta			
<ul style="list-style-type: none">• Cunoasterea notiunilor teoretice de baza, scrierea corecta a unei configuratii electronice a unui atom sau molecule biatomice, folosirea unui program de chimie cuantica, incadrarea unei molecule la grupul de simetrie corespunzator• Nota 5 (cinci) atat la rezolvarile de probleme, cat si la testele de cunostinte			

Data completarii

Semnatura titularului de curs

Semnatura titularului de seminar

.....

.....

Data avizarii în departament

Semnatura directorului de departament

.....

..... 