

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	Inginerie Chimica
1.4 Domeniul de studii	Inginerie Chimica
1.5 Ciclul de studii	Licenta
1.6 Programul de studiu / Calificarea	CISOPC / inginer chimist

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	IV	2.5 Semestrul	8	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	Opt

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

3.1 Numar de ore pe saptamâna	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
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					30
Pregatire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii si eseuri					30
Tutoriat					6
Examinari					3
Alte activitati:					
3.7 Total ore studiu individual		69			
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

	<ul style="list-style-type: none"> • Pentru predarea cu întârziere se penalizează cu 0,5 puncte/zi • Este interzis accesul cu mâncare în laborator
--	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • Recunoașterea și descrierea conceptelor, abordărilor, teoriilor, metodelor și modelelor elementare privitoare la structura compusilor chimici • Explicarea și interpretarea unor proprietăți, concepte, abordări, teorii, modele și noțiuni fundamentale de structura a compusilor chimici • Aplicarea noțiunilor fundamentale pentru rezolvarea problemelor asociate structurii compusilor chimici. • Analiza critică a modelelor și teoriilor existente cu privire la structura compusilor chimici. • Identificarea conceptelor, teoriilor, metodelor, modelelor și procedurilor elementare folosite în sinteza chimică • Explicarea și interpretarea conceptelor, teoriilor, modelelor, metodelor și procedurilor elementare folosite în sinteza chimică • Aplicarea cunoștințelor, specifice domeniului pentru rezolvarea unor probleme practice de sinteză a compusilor chimici • Analiza critică a metodelor și procedurilor folosite în sinteza chimică și a rezultatelor obținute • Formularea, dezvoltarea și implementarea creativă de soluții pentru probleme specifice, în contexte bine definite, asociate sintezei unor compusi chimici.
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> • Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului sub asistența calificată. • Realizarea unor activități în echipă multidisciplinară utilizând abilități de comunicare interpersonală pentru îndeplinirea obiectivelor propuse. • Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională asistată, atât în limba română, cât și într-o limbă de circulație internațională.

7. Obiectivele disciplinei (reiesind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Familiarizarea cu unele metode de chimie cuantică și cu metode de elucidare a structurii și proprietăților diferitelor molecule.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază necesare descrierii mecanic-cuantice a atomului și a legăturii chimice în molecule și solide • Dobândirea unor cunoștințe privind metodele moderne de investigare a structurii • Dobândirea abilității 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; relațiile de incertitudine; ecuația lui Schroedinger; valori proprii și	Prelegerea Explicatia Conversația	

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 hibridi; 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	

difracție, spectroscopie Auger, microscopie de emisie și de ionizare de câmp, microscopie de baleiaj (SEM, TEM, AFM), tehnica fasciculelor moleculare	Conversația Descrierea	
Bibliografie 1. P.W.Atkins, <i>Chimie fizică</i> Ed.Tehnica, 1996 2. J.Zsako, M.Tomoaia-Cotisel, <i>Simetria și structura moleculelor</i> , Presa Univ.Clujeana, 1998 3. I.Zsako, L.D.Bobos, I.Marian, <i>Structura chimică</i> , curs litografiat, UBB Cluj, 1995 4. S.Moldoveanu, <i>Aplicațiile teoriei grupurilor în chimie</i> , Ed.St.Enc. București, 1975		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observatii
8.2.1. .Norme de protecția muncii la lucrările practice de structură chimică. Metode de prelucrare și interpretare a datelor experimentale: notarea datelor experimentale, prezentare grafică, programe de calculator de chimie cuantică, prelucrarea datelor experimentale, calculul erorilor	Explicatia Conversația Exercițiul	4ore
8.2.2. Metode electrice în studiul structurii. Dipolmoment și măsurarea lui. Dielectricul. Calcularea dipolmomentului.	Explicatia Conversația Experimentul	4 ore
8.2.3. Metode de difracție a razelor X în determinarea structurii. Difractograma X și interpretarea ei. Rețele cristaline, constanta celulei elementare, distanțe interplanare	Explicatia Conversația Experimentul Exercițiul	4 ore
8.2.4. Utilizarea spectrelor UV-VIS în elucidarea structurii. Tranzitii electronice. Grupări cromofore. Modelarea la calculator a tranzițiilor spectrale.	Explicatia Conversația Experimentul Exercițiul	4 ore
8.2.5. Metode optice de investigare a structurii moleculelor.	Explicatia Conversația Experimentul	4 ore
8.2.6. Metode magnetice	Explicatia Conversația Experimentul	4 ore
8.2.7. Spectroscopia în infraroșu.	Explicatia Conversația Experimentul Exercițiul	4 ore
Bibliografie 1. Z. Andrei, I. Zsako, L. D. Bobos, și col., <i>Lucrări practice de termodinamică și structură chimică</i> , Ed. UBB, Cluj-Napoca, 1995. 2. G. Niac, V. Voiculescu, I. Bâldea, M. Preda, <i>Formule, tabele, probleme de Chimie fizică</i> , Ed. Dacia, Cluj-Napoca, 1984.		

9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina *Structura chimică* 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 finală
10.4 Curs	Corectitudinea	Teste de cunoștințe aplicate	75%

	raspunsurilor la teste- însusirea si înțelegerea corecta a problematicii tratate la curs	pe parcursul semestrului	
	Rezolvarea corecta a problemelor	Intentia de fraudă la examen se pedepseste cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepseste 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

.....

.....
