

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Inginerie chimică
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie / Chimist (Licențiat în Chimie)

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Structură chimică – CLR1123						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. dr. ing. Alexandra Csavdári						
2.3 Titularul activităților de seminar/laborator	Conf. dr. ing. Alexandra Csavdári Asist. dr. Dana Sabou						
2.4 Anul de studiu	1	2.5 Semestrul	1	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	Obl

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	0/1
3.4 Total ore din planul de învățământ	42	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	0/14
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					40
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					28
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, studii de caz					3
Tutoriat					8
Examinări					4
Alte activități: nu este cazul					-
3.7 Total ore studiu individual	83				
3.8 Total ore pe semestru	125				
3.9 Numărul de credite	5				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	• Nu este cazul
4.2 de competențe	• 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 laborator cu telefoanele mobile închise. • Studenții se vor prezenta în laborator cu halat, mănuși, ochelari de protecție, cârpă de laborator. • Studenții nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune. • Studenții se vor prezenta la laborator cu calculatoare științifice de mână și hârtie milimetrică (la indicațiile conducătorului de lucrări). • Predarea referatului de laborator se va face cel târziu în săptămâna următoare desfășurării efective a lucrării. • Este interzis fumatul și 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 concepte, proprietăți, noțiuni fundamentale ale structurii compusilor chimici; Aplicarea noțiunilor fundamentale pentru rezolvarea problemelor asociate structurii compusilor chimici; Analiza critică a teoriilor și modelelor existente cu privire la structura compusilor chimici; Identificarea conceptelor și procedurilor elementare folosite în sinteza chimică; Aplicarea cunostintelor la solutionarea unor provocări practice în sinteza compusilor chimici; Formularea, dezvoltarea și implementarea creativă a unor soluții în sinteza compusilor chimici.
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> Executarea sarcinilor profesionale conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit și cu îndrumare calificată; Rezolvarea sarcinilor profesionale în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru și distribuirea de sarcini pentru nivelurile subordonate; Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba română și într-o limbă de circulație internațională cu utilizarea metodelor moderne de informare și comunicare.

7. Obiectivele disciplinei

7.1 Obiectivul general al disciplinei	Familiarizarea cu noțiuni de chimie cuantică, metode de elucidare a structurii și a proprietăților compusilor chimici
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Dobândire de cunostințe privind: descrierea mecanic-cuantică a atomului și a legăturii chimice în molecule și faze cristaline. Dobândire de cunostințe teoretice de bază pentru înțelegerea metodelor moderne de investigare a structurii compusilor chimici. Dezvoltarea capacității a utiliza și aplica aceste cunostințe în practica studierii structurii și proprietăților compusilor chimici.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Introducere. Modelul cuantico-mecanic al atomului: Operatori ai mecanicii cuantice; Relațiile de incertitudine; Ecuația lui Schrödinger; valori și vectori proprii; Atomi hidrogenoizi	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.2. Orbitali atomici: funcție radială și angulară, numere cuantice, densitate de probabilitate, suprafețe nodale	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.3. Invelișul electronic în atomi poliatomici. Configurații electronice: compunerea momentelor, principiul identității microparticulelor, principiul lui	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore

Pauli, metode SCF, orbitali in atomi polielectronici.		
8.1.4. Spectre si 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 Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.5. Legatura chimica, orbitali moleculari in molecule diatomice nepolare: aproximatia Born-Oppenheimer; solutii exacte ale ecuatiei lui Schroedinger; metode aproximative ale chimie cuantice; metoda functionalei de densitate; metode OM; OM <i>sigma</i> si <i>pi</i> ; ordin de legatura.	Prelegerea Explicatia Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.6. Orbitali moleculari in molecule diatomice polare. Molecule poliatomice. Polaritatea legaturii; Moment dipolar; OM in molecule polare; OM in molecule poliatomice; metoda LV; Orbitale localizate.	Prelegerea Explicatia Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.7. Aranjarea spatiala a atomilor in molecule poliatomice; Diagrame Walsh; Hibridizare; Calcularea orbitalilor hibridi; Configuratiile moleculelor.	Prelegerea Explicatia Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.8. Simetrie si grupuri de simetrie; Elemente de simetrie; Operatii de simetrie; Grupuri punctuale de simetrie; Simetria moleculelor.	Prelegerea Explicatia Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.9. Reprezentările grupelor de simetrie - aplicatii in chimie: reprezentarea grupurilor; tabele de caractere; aplicatii in hibridizare; construirea OM de simetrie; spectre de vibratie.	Prelegerea Explicatia Conversația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.10. Sisteme electronice delocalizate. Metoda HMO. Aproximatia electronilor <i>pi</i> ; Delocalizare; Metode SCF-MO; Metoda HMO; Heteroatomi; Nivele de energie; Densitate electronica; Ordin de legatura.	Prelegerea Explicatia Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.11. Indici de reactivitate. Legatura chimica in solide ionice. Indici de reactivitate din metode OM; Distributia electronica; Nivele de energie potentiala, Metode QSAR si QSPR; Solide ionice; Energie de retea.	Prelegerea Explicatia Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.12. Legatura chimica in solide metalice semiconductoare. Legatura chimica in solide; Benzi de energie; Nivel Fermi; Stari energetice; Metoda functionalei de densitate.	Prelegerea Explicatia Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.13. Metode spectrale pentru cercetarea structurii; spectre IR si Raman; rotatii si vibratii moleculare; Spectre electronice; Spectroscopie fotoelectronica.	Prelegerea Explicatia Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.14. Metode de investigare a structurii chimice: Metode RMN bi- si tri-dimensionale; Metode de difractie; Spectroscopie Auger; Microscopie de emisie si de ionizare de camp; Microscopie de baleiaj (SEM,	Prelegerea Explicatia Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore

TEM, AFM), etc.		
Bibliografie 1. P. W. Atkins, <i>Chimie Fizică</i> , Editura Tehnica, Bucuresti, 1996. 2. J. Zsako, M. Tomoaia-Cotisel, <i>Simetria si structura moleculelor</i> , Presa Universitara Clujeana, Cluj-Napoca, 1998. 3. J. Zsako, L. D. Bobos, I. Marian, <i>Structura chimica</i> , Curs litografiat, Lito UBB, Cluj-Napoca, 1995.		
8.2. Lucrari practice	Metode de predare	Observații
8.2.1. Norme de protectia si securitatea muncii la lucrarile practice de Structura Chimica. Metode si mijloace de obtinere, prelucrare si prezentare corecta a datelor experimentale.	Explicația Conversația Problematizarea Exercitiul	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.2. Metode electrice in studiul structurii. Dipolmoment si masurarea lui. Dielcometrul. Calcularea dipolmomentului.	Experimentul Explicația Conversația	Fond de timp alocat = 4 ore
8.2.3. Metode de difracție a razelor X in determinarea structurii. Difractograma X si interpretarea ei. Rețele cristaline. Constanta celulei elementare, distante interplanare	Experimentul Explicația Conversația	Fond de timp alocat = 4 ore
8.2.4. Utilizarea spectrelor UV-Vis in elucidarea structurii compusilor chimici. Tranzitii electronice / spectrale. Grupari cromofore. T	Experimentul Explicația Conversația	Fond de timp alocat = 4 ore
Bibliografie 1. Z. Andrei, I. Zsako, L. D. Bobos <i>et al.</i> , <i>Lucrari practice de termodinamica si structura chimica</i> , Lito UBB, Cluj-Napoca, 1995. 2. G. Niac, V. Voiculescu, I. Bâldea, M. Preda, <i>Formule, Tabele și Probleme de chimie fizică</i> , Editura Dacia, Cluj-Napoca, 1984 . 3. Referate de laborator (disponibile in laborator)		

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 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 în nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs	Două verificări pe parcurs în forma scrisă Accesul la VP este condiționat de prezentarea referatelor de laborator finalizate (date experimentale și	70% (cate 35% fiecare verificare scrisă)
	Capacitatea de a aplica cunoștințele dobândite în		

	diverse cazuri (probleme si exercitii)	interpretarea acestora) corespunzătoare tuturor lucrărilor practice. Intenția de fraudă se pedepsește conform regulamentului ECST al UBB	
10.5 Lucrari practice	Participarea activă la lucrările de laborator, însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la laborator	Referatele de laborator corespunzătoare lucrărilor practice se predau la cel mult o săptămână de la desfășurarea lucrării	30%
	Elaborarea corecta si completa a referatelor corespunzătoare lucrărilor efectuate		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none">• Cunoașterea noțiunilor de bază de structura chimica.• Nota 5 (cinci) ca medie ponderata a notelor obtinute la verificarile scrise si la activitatea de laborator (conform subpunctului 10.5).			

Data completării

25 Aprilie 2016

Semnătura titularului de curs

Conf. dr. ing. Alexandra Csavdări

Semnătura titularului de seminar

Conf. dr. ing. Alexandra Csavdări

Alexandra Csavdări

Alexandra Csavdări

Data avizării în departament

25 Aprilie 2016

Semnătura directorului de departament

Conf. dr. ing. Graziella Liana Turdean

Graziella Liana Turdean