

## 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	<b>Structură chimică – CLR1123</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	Lect. dr. Alexandru Lupan						
2.3 Titularul activităților de seminar	Lect. dr. Alexandru Lupan						
2.4 Anul de studiu	1	2.5 Semestrul	1	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	Ob

### 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	1
3.4 Total ore din planul de învățământ	42	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar	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					3
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, studii de caz					28
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	<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>Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise</li> <li>Nu va fi acceptată întârzierea</li> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Studentii se vor prezenta la seminar cu telefoanele mobile închise.</li> <li>Studentii se vor prezenta la seminar cu calculatoare științifice.</li> <li>Nu va fi acceptată întârzierea.</li> </ul>

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Recunoașterea și descrierea conceptelor, abordărilor, teoriilor, metodelor și modelelor elementare privitoare la structura compusilor chimici;</li> <li>• Explicarea și interpretarea unor concepte, proprietăți, noțiuni fundamentale ale structurii compusilor chimici;</li> <li>• Aplicarea noțiunilor fundamentale pentru rezolvarea problemelor asociate structurii compusilor chimici;</li> <li>• Analiza critică a teoriilor și modelelor existente cu privire la structura compusilor chimici;</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 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;</li> <li>• Rezolvarea sarcinilor profesionale în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru și distribuirea de sarcini pentru nivelurile subordonate;</li> <li>• 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.</li> </ul>

## 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"> <li>• Dobândire de cunoștințe privind: descrierea mecanic-cuantică a atomului și a legăturii chimice în molecule și faze cristaline.</li> <li>• Dobândire de cunoștințe teoretice de bază pentru înțelegerea metodelor moderne de investigare a structurii compusilor chimici.</li> <li>• Dezvoltarea capacității de a utiliza și aplica aceste cunoștințe în practica studierii structurii și proprietăților compusilor chimici.</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Introducere. Modele atomice. Noțiuni de teorie cuantică. Natura luminii.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.2. Noțiuni de spectroscopie. Spectre de emisie și spectre de absorbție. Bazele mecanicii cuantice. Ipoteza lui Louis de Broglie. Operatori utilizați în mecanica cuantică.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.3. Spațiu Hilbert. Legile de comutativitate ale lui Heisenberg. Reprezentarea operatorilor. Ecuația lui Schrodinger independentă de timp.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore

8.1.4. Particule in "cutie" monodimensionala. Relatiile de incertitudine. Latimea naturala a liniilor spectrale. Energia de zero absolut.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.5. Structura atomului. Rezolvarea ecuației lui Schrodinger pentru atomii hidrogenoizi in mecanica cuantica nerelativista. Notiunea de orbital.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.6. Orbitali $s$ ai atomului hidrogenoid. Raza medie a orbitalilor $s$ . Ecuația lui Schrodinger dependenta de timp. Ecuația lui Dirac.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.7. Efecte relativiste in mecanica cuantica. Reguli de selectie pentru atomii hidrogenoizi in aproximatia relativista.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.8. Atomi cu mai multi electroni. Tabelul periodic al elementelor.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.9. Simetria moleculara. Elemente si operatii de simetrie.	Prelegerea Explicația Conversația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.10. Clasificarea moleculelor in functie de simetrie. Reprezentarea grupurilor.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.11. Tipurile de hibridizare. Scheme de hibridizare. Expresiile functiilor pentru orbitalele hidride $sp$ .	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.12. Molecule diatomice. Molecula "ion" de hidrogen. Metoda orbitalilor moleculari.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.13. Formarea orbitalilor moleculari din orbitali atomici. Molecule diatomice homonucleare.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
8.1.14. Sisteme cu dublete $\pi$ . Aproximatia lui Huckel. Determinantul secular.	Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația	Fond de timp alocat = 2 ore
Bibliografie <b>1.</b> P. W. Atkins, <i>Chimie Fizica</i> , Editura Tehnica, Bucuresti, 1996. <b>2.</b> J. Zsako, M. Tomoaia-Cotisel, <i>Simetria si structura moleculelor</i> , Presa Universitara Clujeana, Cluj-Napoca, 1998. <b>3.</b> J. Zsako, L. D. Bobos, I. Marian, <i>Structura chimica</i> , Curs litografiat, Lito UBB, Cluj-Napoca, 1995.		
8.2. Seminar	Metode de predare	Observații
8.2.1. Corelarea dintre pozitia elementelor in tabelul periodic si repartitia electronilor pe straturi.	Explicația Conversația Problematizarea Exercitiul	Fond de timp alocat = 2 ore

8.2.2. Calcularea razei medii si razei celei mai probabile pentru orbitalele $1s$ si $2s$ . Variatia valorilor cu $Z$ .	Explicația Conversația Problematizarea Exercitiul	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.3. Legatura dintre pozitia elementelor in tabelul periodic si termenii spectrali corespunzatori.	Explicația Conversația Problematizarea Exercitiul	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.4. Exercitii cu elemente si operatii de simetrie.	Explicația Conversația Problematizarea Exercitiul	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.5. Deducerea si importanta grupului de simetrie pentru diverse molecule.	Explicația Conversația Problematizarea Exercitiul	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.6. Valoarea energiei de delocalizare si stabilitatea compusilor chimici.	Explicația Conversația Problematizarea Exercitiul	Fond de timp alocat = 2 ore
8.2.7. Ordinul de legatura si indicele de valenta libera.	Explicația Conversația Problematizarea Exercitiul	
Bibliografie <b>1.</b> P. W. Atkins, <i>Chimie Fizica</i> , Editura Tehnica, Bucuresti, 1996. <b>2.</b> J. Zsako, M. Tomoaia-Cotisel, <i>Simetria si structura moleculelor</i> , Presa Universitara Clujeana, Cluj-Napoca, 1998. <b>3.</b> J. Zsako, L. D. Bobos, I. Marian, <i>Structura chimica</i> , Curs litografiat, Lito UBB, Cluj-Napoca, 1995. <b>4.</b> G. Niac, V. Voiculescu, I. Bâldea, M. Preda, <i>Formule, Tabele și Probleme de chimie fizică</i> , Editura Dacia, Cluj-Napoca, <b>1984</b> .		

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

- Prin însusirea conceptelor teoretico-metodologice si abordarea aspectelor practice incluse in disciplina **Structura chimica**, studentii dobandesc un bagaj de cunostinte consistent, in concordanta cu competentele partiale cerute pentru ocupatiile posibile prevazute in Grila 1 – RNCIS.

## 10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere in nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs	Doua verificari pe parcurs in forma scrisa.	80% (cate 40% fiecare verificare scrisa)
	Capacitatea de a aplica cunostintele dobandite in diverse cazuri (probleme si		

	exercitii)		
10.5 Seminar	Participarea activă la seminar, însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar	Teste scrise de 10 minute din temele anuntate pentru seminar.	20%
	Capacitatea de a aplica cunostintele dobandite in diverse cazuri (probleme si exercitii)		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"><li>• Cunoașterea noțiunilor de bază de structura chimica.</li><li>• Nota 5 (cinci) ca medie ponderata a notelor obtinute la verificarile scrise si la testele de seminar (conform subpunctelor 10.4 si 10.5).</li></ul>			

Data completării

30 Martie 2019

Semnătura titularului de curs

Lect. dr. Alexandru Lupan



Semnătura titularului de seminar

Lect. dr. Alexandru Lupan



Data avizării în departament

3 Mai 2019

Semnătura directorului de departament

Prof. dr. ing. Graziella Liana Turdean

