

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 | Inginerie Chimică |
| 1.5 Ciclul de studii | Licență |
| 1.6 Programul de studiu / Calificarea | Inginerie chimică - Trunchi comun/Inginer |

2. Date despre disciplină

| | | | | | | | |
|--|------------------------------------|---------------|---|------------------------|----|-------------------------|-----|
| 2.1 Denumirea disciplinei | Structură chimică – CLR1123 | | | | | | |
| 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 | II | 2.5 Semestrul | 3 | 2.6. Tipul de evaluare | VP | 2.7 Regimul disciplinei | Opt |

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

| | | | | | |
|--|-----|--------------------|----|-------------|-----|
| 3.1 Număr de ore pe săptămână | 3 | 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 | | | | | 22 |
| Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren | | | | | 10 |
| Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, studii de caz | | | | | 20 |
| Tutoriat | | | | | 2 |
| Examinări | | | | | 4 |
| Alte activități: nu este cazul | | | | | - |
| 3.7 Total ore studiu individual | 58 | | | | |
| 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"> Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise Nu va fi acceptată întârzierea |
| 5.2 De desfășurare a seminarului | <ul style="list-style-type: none"> Studentii se vor prezenta la seminar cu telefoanele mobile închise. Studentii se vor prezenta la seminar cu calculatoare științifice. Nu va fi acceptată întârzierea. |

6. Competențele specifice acumulate

| | |
|-------------------------|--|
| Competențe profesionale | <ul style="list-style-type: none"> • Recunoasterea 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; |
| 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 cunoștințe privind: descrierea mecanic-cuantică a atomului și a legăturii chimice în molecule și faze cristaline. • Dobândire de cunoștințe teoretice de bază pentru înțelegerea metodelor moderne de investigare a structurii compusilor chimici. • Dezvoltarea capacității a utiliza și aplica aceste cunoștințe în practica studierii structurii și proprietăților compusilor chimici. |

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 în "cutie" monodimensională. Relațiile de incertitudine. Latimea naturală 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 în mecanica cuantică nerelativistă. Noțiunea 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 dependentă de timp. Ecuația lui Dirac. | Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.7. Efecte relativiste în mecanica cuantică. Reguli de selecție pentru atomii hidrogenoizi în aproximația relativistă. | Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.8. Atomi cu mai mulți electroni. Tabelul periodic al elementelor. | Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.9. Simetria moleculară. Elemente și operații de simetrie. | Prelegerea Explicația Conversația | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.10. Clasificarea moleculelor în funcție de simetrie. Reprezentarea grupurilor. | Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 8.1.11. Tipurile de hibridizare. Scheme de hibridizare. Expresiile funcțiilor 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 π . Aproximația lui Huckel. Determinantul secular. | Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația | Fond de timp alocat = 2 ore |
| Bibliografie 1. P. W. Atkins, <i>Chimie Fizică</i> , Editura Tehnică, București, 1996. 2. J. Zsako, M. Tomoaia-Cotisel, <i>Simetria și structura moleculelor</i> , Presa Universitară Clujeană, Cluj-Napoca, 1998. 3. J. Zsako, L. D. Bobos, I. Marian, <i>Structura chimică</i> , Curs litografiat, Lito UBB, Cluj-Napoca, 1995. 4. A. Lupan, Suport de curs, 2018 | | |
| 8.2. Seminar | Metode de predare | Observații |
| 8.2.1. Corelarea dintre poziția elementelor în tabelul periodic și repartiția electronilor pe straturi. | Explicația Conversația | Fond de timp alocat = 2 ore |

| | | |
|---|--|-----------------------------|
| | Problematizarea Exercitiul | |
| 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 1. P. W. Atkins, <i>Chimie Fizica</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. 4. G. Niac, V. Voiculescu, I. Bâldea, M. Preda, <i>Formule, Tabele și Probleme de chimie fizică</i> , Editura 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 si abordarea aspectelor practice incluse in disciplina **Structura chimica**, studentii dobandesc un bagaj de cunostinte consistent, in concordanta cu competentele din Suplimentul la diploma si calificarile din ANC.

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 problematicii 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">• Cunoașterea noțiunilor de bază de structura chimica.• Nota 5 (cinci) ca medie ponderata a notelor obtinute la verificarile scrise si la testele de seminar (conform subpunctelor 10.4 si 10.5). | | | |

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

