

## FIȘA DISCIPLINEI

### 1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Univeristatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Departamentul de Chimie si Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	TMSC

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Structură și dinamică moleculară</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	Lect. Dr. Ing. Rácz Csaba Pál						
2.3 Titularul activităților de seminar	Lect. Dr. Ing. Rácz Csaba Pál						
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	DF

### 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/laborator	1
3.4 Total ore din planul de învățământ	42	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	14
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					38
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					20
Tutoriat					2
Examinări					3
Alte activități: .....					
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>• Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise</li> <li>• Nu va fi acceptată întârzierea</li> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închise</li> <li>• Studenții se vor prezenta în laborator cu halat, manusi, cârpă de laborator.</li> <li>• Studenții nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune</li> <li>• Predarea referatului de laborator se va face cel târziu în săptămâna următoare desfășurării efective a lucrării</li> <li>• Nu va fi acceptată întârzierea</li> <li>• Este interzis accesul cu mâncare în laborator</li> </ul>

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Definierea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională</li> <li>• Utilizarea cunoștințelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru explicarea și interpretarea fenomenelor ingineresti</li> <li>• Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor pentru rezolvarea problemelor tipice ingineriei chimice în condiții de asistență calificată</li> <li>• Analiza critică și utilizarea principiilor, metodelor și tehnicilor de lucru pentru evaluarea cantitativă și calitativă a proceselor din ingineria chimică</li> <li>• Aplicarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru elaborarea de proiecte profesionale</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Executarea sarcinilor solicitate conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etica profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit</li> <li>• Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru</li> <li>• Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate.</li> </ul>

## 7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Familiarizarea studenților cu unele metode de chimie cuantică și de elucidarea relației structură-reactivitate chimică.</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Metode de aproximări în chimia cuantică.</li> <li>• Metoda variatională.</li> <li>• Metoda perturbatională.</li> <li>• Reactivitate chimică.</li> <li>• Aprecierea reactivității chimice funcție de structura moleculară.</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Metode exacte și metode bazate pe aproximări <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> Ecuația lui	Prelegerea Explicația, Conversația	

Schroedinger, Spinul electronului, determinantul Slater.		
8.1.2. Metoda OM a lui Huckel. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> sisteme de legături pi. Sisteme localizate, sisteme delocalizate. Exemplul etenei.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.3. Aplicații de calcul prin metoda Huckel. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> butadiena calculul coeficientilor prin metoda van Fleck.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.4 Aplicații de calcul pe baza simetriei moleculare. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> benzenul, hidrocarburi alternante și h. nealternante	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.5. Sisteme delocalizate cu heteroatomi. <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> piridina, aproximarea integralelor	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.6. Metoda Huckel perfecționată <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> polaritatea legăturii; moment dipolar;	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.7. Metoda polarizabilităților <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> ecuația Coulson.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.8. Calculul unor integrale moleculare <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> integrale de acoperire pentru orbitali Slater, orbitale GTO	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.9 Evaluări semiempirice în teoria OM <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> termeni monoelectronici, termeni multielectronici	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.10. Formule aproximative pentru termenii multielectronici <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> formalismul hamiltonianului mono-electronic efectiv, păstrarea invarianței.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.11 Calculul prin procedee semiempirice de OM a unor proprietăți fizico-chimice <i>Concepte de bază, cuvinte cheie:</i> Teorema Hellmann-Feynmann , geometria de echilibru.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	

8.1.12. Constante de forta din studii MO <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> calduri de formare, atomizare.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.13. Aplicarea metodelor semiempirice de MO în studiul tranzițiilor spectrale. <i>Concepte de bază, cuvinte cheie:</i> intensitati IR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.14. Calculul de constante de scindare hiperfina, studiul constantelor de ecranare <i>Concepte de bază, cuvinte-cheie:</i> RES, RMN.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
Bibliografie 1. P.W.Atkins, J.de Paula, <i>Physical Chemistry</i> , 7 <sup>th</sup> Ed., Oxford, 2002. 2. I. Zsakó, <i>Chimie Fizică</i> , EDP, București 1973 3. J. Keeler, P. Wothers, <i>Chemical Structure and Reactivity</i> , Oxford University Press, 2008. 4. S. Moldoveanu, A.Savin: Aplicații în chimie ale metodelor semiempirice de OM, Ed. Academiei Republicii Socialiste Romania 1980.		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Noțiuni de mecanica cuantica. Notari. Constante universale.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea;	
8.2.2. Simetrie moleculara. Determinarea grupului de simetrie a moleculelor.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.3. Determinarea momentelor de dipol ale unor molecule. Polarizație molară; polarizație de deplasare și de orientare; moment de dipol permanent și indus; dielcometrie	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.4. Evaluarea teoretica a spectrelor IR  Spectre de rotație; spectre de vibrație; spectre de vibrație-rotație ale moleculelor diatomice; vibrații de valență și de deformare; benzi caracteristice; modelarea spectrelor IR.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.5. Evaluarea teoretica a spectrelor UV-VIZ. Tranziții electronice, nivele electronice, orbitali	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	

molecularari, cromofori, tabelul Deslandres.		
8.2.6. Generare teoretică de spectre de difracție Raze Roentgen, difracția prin rețele cristaline, constanta rețelei, interpretarea spectrelor	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8.2.7. Prezentarea programului de calcul Hyperchem.		
8.2.8. Calcule HMO pentru sisteme nedelocalizate.		
8.2.9. Calcule HMO pentru sisteme delocalizate.		
8.2.10. Calcule HMO pentru sisteme cu heteroatomi.		
8.2.11. Calcule cu metoda HMO perfecționată.		
8.2.12. Calculul constantelor de forță prin metoda MO.		
8.2.13. Calcule de tranziții spectrale.		
8.2.14. Calculul teoretic al spectrelor RMN.		
Bibliografie  1.) Z.Andrei, I.Zsako, L.D.Bobos, și col., <i>“Lucrări practice de termodinamică și structură chimică”</i> , Ed. UBB, Cluj-Napoca, <b>1996</b> .  2.) Arthur M.Halpern, <i>Experimental Physical Chemistry</i> , 2-nd ed., Prentice-Hall International, London 1997.		

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

<ul style="list-style-type: none"> <li>Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina <b>Structură și dinamica moleculară</b> studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 2 – RNCIS.</li> </ul>
---

### 10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	<p>Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs</p> <p>Rezolvarea corectă a problemelor</p>	<p>Examen scris – accesul la examen este condiționat de susținerea colocviului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice</p> <p>Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen.</p> <p>Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB</p>	80%

10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar/laborator	Referatele de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice – se predau în ultima săptămână de activitate didactică Colocviu laborator – test – se susține în ultima săptămână de activitate didactică	20%
	Calitatea referatelor pregătite		
	Activitatea desfășurată în laborator		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> <li>Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât și la examen conform baremului.</li> </ul>			

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar




02.04.2020

Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

27.04.2020

Prof. Dr. Ing. Csaba Paizs

