

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 Ciclu 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. Alexandru Lupan | | | | | | |
| 2.3 Titularul activităților de seminar | Conf. dr. Alexandru Lupan | | | | | | |
| 2.4 Anul de studiu | 1 | 2.5 Semestrul | 1 | 2.6. Tipul de evaluare | E | 2.7 Regimul disciplinei | DF/Obl |

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 | | | | | 30 |
| Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren | | | | | 28 |
| Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, studii de caz | | | | | 15 |
| Tutoriat | | | | | 6 |
| 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"> 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">• 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; |
| 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 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 ecuatiei 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 . Ecuatia lui Schrodinger dependenta de timp. Ecuatia 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 π . Aproximatia lui Huckel. Determinantul secular. | Prelegerea Explicația Conversația Demonstrația | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 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. A. Lupan, Suport de curs, 2018 | | |
| 8.2. Seminar | Metode de predare | Observații |
| 8.2.1. Corelarea dintre pozitia elementelor in tabelul periodic si repartitia 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 | Fond de timp alocat = 2 ore |
| 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 dobândesc 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 | Examen scris. | 80% |
| | 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 Capacitatea de a aplica cunostintele dobandite in diverse cazuri (probleme si exercitii) | Teme pentru acasa date la seminar. | 20% |
| 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

6 Aprilie 2023

Semnătura titularului de curs

Conf. dr. Alexandru Lupan

Semnătura titularului de seminar

Conf. dr. Alexandru Lupan

Data avizării în departament

12 Aprilie 2023

Semnătura directorului de departament

Prof. dr. ing. Graziella Liana Turdean