

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	Inginerie
1.5 Ciclu de studii	Licență
1.6 Programul de studiu / Calificarea	CISOPC IV LM

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Structură chimică- CLM 1123 (optional 4)						
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	IV	2.5 Semestrul	7	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	DS

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	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					10
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					10
Tutoriat					1
Examinări					3
Alte activități:					
3.7 Total ore studiu individual	44				
3.8 Total ore pe semestru	100				
3.9 Numărul de credite	4				

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 seminar/laborator cu telefoanele mobile închise • Studenții se vor prezenta în laborator cu halat, manusi, cârpă de laborator. • Studenții nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune • Predarea referatului de laborator se va face cel târziu în săptămâna următoare desfășurării efective a lucrării • Nu va fi acceptată întârzierea • Este interzis accesul cu mâncare în laborator

6. Competențele specifice acumulate

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

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Familiarizarea studenților cu unele metode de chimie cuantică și de elucidarea relației structură-reactivitate chimică.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Modelul cuantomecanic al atomului. • Simetrie moleculară. • Metode de calcul al structurii moleculare. • Reactivitate chimică. • Aprecierea reactivității chimice funcție de structura moleculară.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
----------	-------------------	------------

8.1.1. Elementele simetriei moleculare.	Prelegerea Explicația, Conversația	
8.1.2. Grupuri de simetrie. Determinarea grupurilor de simetrie.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.3. Teoria grupurilor in simetria moleculara.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.4. Tabele de caractere si utilizarea lor.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.5. Axiomele mecanicii cuantice.1	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.6. Axiomele mecanicii cuantice. 2	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.7. Rezolvarea ecuatiei lui Schrodinger pentru atomul de hidrogen.	Prelegerea Explicația Conversația Problematizarea	
8.1.8. Numere cuantice.	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.9. Moleculele in oglinda mecanicii cuantice.	Prelegerea Explicația Conversația	
8.1.10. Experimentul Stern-Gerlach. Spinul electronului.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.11. Chimia cuantica. Aproximatii.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.12. Aproximatia Born-Oppenheimer.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.13. Aproximatia monoelectronica.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.14. Metoda variationala.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea;	
Bibliografie		
1. J. Zsakó, D. Bobos, Atom és molekula szerkezet, 1995-„Babes-Bolyai Tudományegyetem,		

Kolozsvár”

2. Veszprémi T., Fehér M. : A kvantumkémia alapjai és alkalmazása. Műszaki Könyvkiadó Bp. 2002.

3. P.W. Atkins: Fizikai kémia II. –Szerkezet. Nemzeti Tankönyvkiadó RT. , Bp. 2002.

	Metode de predare	Observații
8.2.1. Protecția muncii, prezentarea lucrărilor și cerințelor referitoare la modul de întocmire a referatelor. Metode de prelucrare a datelor experimentale	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea;	
8.2.2. Prezentarea programelor de calculator Origin și Excel pentru prelucrarea datelor experimentale și reprezentarea grafică a datelor, calculul erorilor.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.3. Determinarea simetriei moleculare.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.4. Grupuri de simetrie. Clasificarea moleculelor după grupurile de simetrie. Verificarea cunoștințelor.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea Test.	
8.2.5. Nivele de energie și numerele cuantice.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.6. Calcule prin metoda variațională.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;Problematizarea	
8.2.7. Verificarea cunoștințelor.	Test.	
1. Dr. Máthé J. : Molekula spektroszkópiái és kvantumkémiái számítások., Tankönyvkiadó Bp. 1982.		
2. Arthur M. Halpern, Experimental Physical Chemistry, 2-nd ed., Prentice-Hall International, London 1997.		
3. Szabó G., Bolla Cs.: Fizikai-ükémiái számítások, Egyetemi Műhely Kiadó, 2008.		

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 **Structură chimică** studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 2 – RNCIS.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la curs	Examen scris – accesul la examen este condiționat de susținerea colocviului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	80%
	Rezolvarea corectă a problemelor		
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii 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"> Nota 5 (cinci) atât la colocviul de laborator cât și la examen conform baremului. 			

Data completării

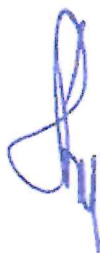
04.04.2023

Semnătura titularului de curs

Lect.dr.ing. Rác Csaba-Pál

Semnătura titularului de seminar

Lect.dr.ing. Rác Csaba-Pál




Data avizării în departament

05.04.2023

Semnătura directorului de departament

Prof.dr.ing. Paizs Csaba

