

FISA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Institutia de învățământ superior	Universitatea Babes -Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie si Inginerie Chimica
1.3 Departamentul	Chimie si Inginerie Chimica al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Licenta
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie/ chimist

2. Date despre disciplina

2.1 Denumirea disciplinei	Chimie Anorganica Teoretica –CLM1151						
2.2 Titularul activitatilor de curs	Lector Dr. Ing. Attila-Zsolt KUN						
2.3 Titularul activitatilor de seminar	Lector Dr. Ing. Attila-Zsolt KUN						
2.4 Anul de studiu	III	2.5 Semestrul	V	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	Ob.

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

3.1 Numar de ore pe saptamâna	3	Din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	42	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distributia fondului de timp:					ore
Studiul dupa manual, suport de curs, bibliografie si notite					20
Documentare suplimentara în biblioteca, pe platformele electronice de specialitate si pe teren					8
Pregatire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii si eseuri					22
Tutoriat					6
Examinari					2
Alte activitati:					-
3.7 Total ore studiu individual	58				
3.8 Total ore pe semestru	128				
3.9 Numarul de credite	5				

4. Preconditii (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	? Nu este cazul
4.2 de competente	? Nu este cazul

5. Conditii (acolo unde este cazul)

5.1 De desfasurare a cursului	? Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise
	? Nu va fi acceptata întârzierea
5.2 De desfasurare a seminarului/laboratorului	? Studentii se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închise
	? Studentii trebuie sa participe la seminar. Rezolvarea temelor pe parcursul semestrului este obligatorie.
	? Studentii se vor prezenta în laborator cu halat si vor respecta normele de protectie a muncii.

6. Competentele specifice acumulate

Competente profesionale	? C1. Operarea cu notiuni de structura si reactivitate a compusilor chimici
	? C1.2 Explicarea si interpretarea unor proprietati, concepte, abordari, teorii, modele si notiuni fundamentale de structura si reactivitate a compusilor chimici.
	? C1.3 Aplicarea notiunilor fundamentale pentru rezolvarea problemelor asociate structurii si reactivitatii compusilor chimici.
	? C1.4 Analiza critica a modelelor si teoriilor existente cu privire la structura si reactivitatea compusilor chimici.
	? C2. Determinarea compozitiei, structurii si proprietatilor fizico-chimice a unor compusi chimici
	? C2.1 Identificarea conceptelor si a metodelor utilizate pentru determinarea compozitiei, structurii si a proprietatilor fizico-chimice ale compusilor chimici.
	? C2.2 Descrierea si interpretarea metodelor si tehnicilor folosite la determinarea structurii si a proprietatilor compusilor chimici; prelucrarea si interpretarea rezultatelor
	? C2.3 Utilizarea corecta a metodelor specifice de analiza a structurii si proprietatilor compusilor chimici
	? C2.4 Analiza critica a metodelor aplicate pentru determinarea compozitiei, structurii si a proprietatilor fizico-chimice ale unor compusi chimici
	? C2.5 Realizarea unor rapoarte stiintifice cu privire la determinarea structurii si stabilirea proprietatilor fizico-chimice ale compusilor chimici.

Competențe transversale	?	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
	?	Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba română
	?	Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate.

7. Obiectivele disciplinei (reiesind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	?	Aplicarea teoriei grupurilor în determinarea structurii chimice
	?	Cunoașterea noțiunilor fundamentale legate de: simetrie, elemente și operații de simetrie, teoria grupurilor.
	?	Aplicarea elementelor și operațiilor de simetrie în determinarea unor proprietăți structurale ale derivaților anorganici cum ar fi chiralitate, moment de dipol, activitate IR și Raman
7.2 Obiectivele specifice	?	Îmbogățirea cunoștințelor de chimie structurală, prin adăugarea de noi cunoștințe, noi explicații la bagajul deja existent; îmbogățirea limbajului chimic. Utilizarea corectă a noțiunilor de chimie.
	?	Dezvoltarea capacităților de sinteză a unor noțiuni fundamentale de chimie.
	?	Capacitate de înțelegere a fenomenelor și proceselor chimice și de aplicare a acestora în cazuri concrete.
	?	- Abilitatea de aplicare a cunoștințelor de chimie structurală în ramuri înrudite.

8. Continuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observatii
1. Introducere – Chiralitate, simetrie, elemente de simetrie Definirea și explicarea elementelor de simetrie, axa, plan, centru de inversie, elemente improprii de simetrie.	Prelegerea. Explicatia Conversatia. Descrierea. Problematizarea	
2. Operații de simetrie. Operațiile generate de elementele de simetrie, operațiile generate de elementele improprii (axe S_n).	Prelegerea. Explicatia Conversatia. Descrierea. Problematizarea	
3. Operații de simetrie. Operații proprii și improprii. Generarea operațiilor de simetrie.	Prelegerea. Explicatia Conversatia. Descrierea. Problematizarea	
4. Grupuri de simetrie. Grupuri de simetrie înaltă, grupuri de simetrie scăzută, grupurile C_n , C_{nv} , D_n , D_{nh} , D_{nd} .	Prelegerea. Explicatia Conversatia. Descrierea. Problematizarea	
5. Grupuri de simetrie. Grupuri de simetrie înaltă, grupuri de simetrie scăzută, grupurile cubice	Prelegerea. Explicatia Conversatia. Descrierea. Problematizarea	
6. Chiralitate și moment de dipol. Definirea chiralității și a momentului de dipol. Stabilirea elementelor de simetrie care permit sau nu prezența acestor proprietăți	Prelegerea. Explicatia Conversatia. Descrierea. Problematizarea	
7. Reprezentări reducibile și ireducibile. Proprietățile reprezentărilor. Determinarea reprezentărilor reducibile și reducerea lor.	Prelegerea. Explicatia Conversatia. Descrierea. Problematizarea	
8. Reprezentări reducibile și ireducibile Produs de simetrie. Definirea reprezentărilor și a produsului acestora.	Prelegerea. Explicatia Conversatia. Descrierea. Problematizarea	
9. Determinarea activității IR și Raman utilizând noțiunile învățate. Stabilirea bazei reprezentării, determinarea reprezentării reducibile și reducerea acesteia în reprezentări ireducibile.	Prelegerea. Explicatia Conversatia. Descrierea. Problematizarea	
10. Determinarea activității IR și Raman utilizând noțiunile învățate. Stabilirea reprezentărilor care prezintă activitate IR și Raman	Prelegerea. Explicatia Conversatia. Descrierea. Problematizarea	
11. Tranziții electronice. Spectroscopia UV-VIS. Corelarea produsului operațiilor de simetrie cu tranzițiile electronice, reguli de selecție.	Prelegerea. Explicatia Conversatia. Descrierea. Problematizarea	
12. Tranziții electronice. Spectroscopia UV-VIS. Determinarea tranzițiilor permise și interzise de simetrie cu ajutorul noțiunilor învățate inclusiv TCC.	Prelegerea. Explicatia Conversatia. Descrierea. Problematizarea	

13. Simetria orbitalilor moleculari. Construirea diagramelor de OM pentru sisteme chimice simple homoaomice H ₂ , H ₃ , A ₂ si heteroaomice AH ₂ , AH ₃ etc.	Prelegerea. Explicatia Conversatia.Descrierea. Problematizarea	
14. Simetria orbitalilor moleculari . Construirea unor diagrame de orbitali moleculari pentru compusi cu geometrie octaedrica (Oh), tetraedica (Td), plan patratica (D _{4h}) etc	Prelegerea. Explicatia Conversatia.Descrierea. Problematizarea	
Bibliografie 1. I. Baldea, <i>Principles of Chemistry, A Textbook of General Chemistry</i> , Cluj University Press , 2005 2. E.C. Scott, F.A. Kanda, <i>The Nature of Atoms and Molecules, A General Chemistry</i> , Harper & Row Publishers, New York & Evanston, 1962. 3. D.F.Schrifer, P.W.Atkins, C.H. Langford, <i>Chimie Anorganica</i> , Editura tehnica, Bucuresti, 1998. 4. E. Huheey, E.A. Keiter, L. Keiter, <i>Inorganic Chemistry, Princilpes of the Structure and Reactivity</i> , ISBN 2-8041-2112-7, HarperCollins, 1993 5. J. Zsakó, L.D. Bobos, I.O. Marian, <i>Atom- és molekulaszervezet</i> . litografiat Cluj-Napoca, 1995. 6. Gy. Tasi, <i>Matematikai kémia</i> , JATEPress Szeged, 2009 7. Gy.Tasi <i>Számítógépes kémia</i> , JATEPress Szeged, 2010		
8.2 Seminar	Metode de predare	Observatii
1. Determinarea elementelor de simetrie. Exercitii. Aplicatii utilizand computerul si programele specifice aferente	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
2. Operatii de simetrie. Aplicatii utilizand computerul si programele specifice aferente	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
3. Operatii de simetrie proprii si improprie. Clase de simetrie. Exercitii si aplicatii utilizand computerul si programele specifice aferente	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
4. Determinarea grupurilor de simetrie. Exercitii si aplicatii.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
5. Stabilirea chiralitatii cunoscând apartenenta unei molecule la un grup de simetrie sau elementele de simetrie specifice.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
6. Determinarea momentului de dipol a unor molecule, pe baza teoriei grupurilor.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
7. Tabela de caractere. Calculul reprezentarilor reductibile.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
8. Reducerea reprezentarilor reductibile in reprezentari ireductibile.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
9. Baze de reprezentare. Reducerea reprezentarilor in diverse baze de reprezentare.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
10. Determinarea activitatii IR si Ramann utilizând metoda teoriei grupurilor. Exercitii si aplicatii	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
11. Calcului produsului de simetrie. Simetria orbitalilor moleculari.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
12. Termeni spectrali. Tranzitii electronice eprmise/interzise. Reguli de selectie	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
13. Determinarea activitatii UV-Vis utilizând metoda teoriei grupurilor. Exercitii si Aplicatii	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
14. Recapitulare generala	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
8.3 Laborator	Metode de predare	Observatii
1. Modelarea unor sisteme chimice uzuale cu ajutorul programelor de modelare moleculara (Spartan). Determinarea elementelor de simetrie si a apartenentei moleculelor modelate al grupul de simetrie. Determinarea geometriei celei mai stabile, vizualizarea orbitalilor moleculari, simularea spectrelor IR. (4 ore)	Experimentul; Explicatia; Exerciitiu, modelarea, problematizare	Lucrarile se vor efectua in cele trei unitati, cu numarul de ore indicat la fiecare unitate.
2. Sinteza unor compleci ai cuprului cu amine. Inregistrarea spectrelor IR pentru complexii sintetizati, prelucrarea spectrelor. Determinarea simetriei compusilor sintetizati si a spectrelor lor IR (pe baza elementelor de simetrie). Compararea rezultatelor experimentale cu cele obtinute teoretic utilizand teoria grupurilor. (4 ore)	Experimentul; Explicatia; Problematizarea, exercitiul.	
3. Sinteza unor compleci ai cuprului Cu(H ₂ O) _n (NH ₃) _{6-n} si ai nichelului NiL ₆ . Inregistrarea spectrelor UV pentru complexii sintetizati, prelucrarea spectrelor.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	

Determinarea simetriei compusilor sintetizati si a activitatii UV-VIS (pe baza elementelor de simetrie). Calculul parametrilor spectrali (lungime, numar de unda, parametru de scindare in camp cristalin, parametru nefelauxetic, gradul de covalenta al legaturii)
Compararea rezultatelor experimentale cu cele obtinute teoretic utilizand teoria grupurilor. (6 ore)

Bibliografie

1. I. Baldea, *Principles of Chemistry, A Textbook of General Chemistry*, Cluj University Press , 2005
2. E.C. Scott, F.A. Kanda, *The Nature of Atoms and Molecules, A General Chemistry*, Harper & Row Publishers, New York & Evanston, 1962.
3. D.F.Schrifer, P.W.Atkins, C.H. Langford, *Chimie Anorganica*, Editura tehnica, Bucuresti, 1998.
4. E. Huheey, E.A. Keiter, L. Keiter, *Inorganic Chemistry, Princilpes of the Structure and Reactivity*, ISBN 2-8041-2112-7, HarperCollins, 1993
5. www.chemweb.com
6. www.webelements.com
7. J. Zsakó, L.D. Bobos, I.O. Marian, *Atom- és molekulaszerkezet*. litografiat Cluj-Napoca, 1995.
8. Referate si fise de lucru pentru activitatile de laborator

9. Coroborarea continuturilor disciplinei cu asteptarile reprezentantilor comunitatii epistemice, asociatiilor profesionale si angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

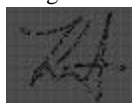
- ? Prin insusirea conceptelor teoretico-metodologice si abordarea aspectelor practice incluse in disciplina „*Chimie Anorganica Teoretica*”, studentii dobandesc un bagaj de cunostinte consistent, in concordanta cu competentele partiale cerute pentru ocupatiile posibile prevazute in Grila 1 – RNCIS.

10. Evaluare

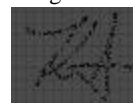
Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finala
10.4 Curs	Corectitudinea raspunsurilor – întelegerea si aplicarea corecta a problematiei tratate la curs Rezolvarea corecta a exercitiilor si problemelor.	Examen scris – accesul la examen este conditionat de rezolvarea temelor de seminar Intentia de fraudă la examen se pedepseste cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepseste prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	80%
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea raspunsurilor – însusirea si întelegerea corecta a problematiei tratate la seminar si laborator. Rezolvarea corecta a temelor pe parcursul semestrului. Rezolvarea sarcinilor practice	Temele de seminar se predau la datele stabilite de comun acord cu studentii.	20%
10.6 Standard minim de performanta			
? Nota 5 (cinci) la examen conform baremului.			

Data completarii
29.03.2017

Semnatura titularului de curs
Lector Dr. ing. Attila-Zsolt KUN



Semnatura titularului de seminar
Lector Dr. ing. Attila-Zsolt KUN



Data avizarii în departament

Semnatura directorului de departament
Lector Dr. Gabriella Stefánia SZABÓ



29.03.2017