

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	Chimie și Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie/ chimist

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Chimie Anorganică Teoretică – CLM1151						
2.2 Titularul activităților de curs	Lector Dr. Ing. Attila-Zsolt Kun						
2.3 Titularul activităților 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 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					29
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					8
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					22
Tutoriat					6
Examinări					2
Alte activități:					-
3.7 Total ore studiu individual	67				
3.8 Total ore pe semestru	125				
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 • Studentii trebuie sa participe la seminar. Rezolvarea temelor pe parcursul semestrului este obligatorie. • Studenții se vor prezenta în laborator cu halat si vor respecta normele de protectie a muncii.

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • C1. Operarea cu noțiuni de structura și reactivitate a compusilor chimici • C1.2 Explicarea și interpretarea unor proprietăți, concepte, abordări, teorii, modele și noțiuni fundamentale de structura și reactivitate a compusilor chimici. • C1.3 Aplicarea noțiunilor fundamentale pentru rezolvarea problemelor asociate structurii și reactivității compusilor chimici. • C1.4 Analiza critică a modelelor și teoriilor existente cu privire la structura și reactivitatea compusilor chimici. • C2. Determinarea compoziției, structurii și proprietăților fizico-chimice a unor compusi chimici • C2.1 Identificarea conceptelor și a metodelor utilizate pentru determinarea compoziției, structurii și a proprietăților fizico-chimice ale compusilor chimici. • C2.2 Descrierea și interpretarea metodelor și tehnicilor folosite la determinarea structurii și a proprietăților compusilor chimici; prelucrarea și interpretarea rezultatelor • C2.3 Utilizarea corectă a metodelor specifice de analiză a structurii și proprietăților compusilor chimici • C2.4 Analiza critică a metodelor aplicate pentru determinarea compoziției, structurii și a proprietăților fizico-chimice ale unor compusi chimici • C2.5 Realizarea unor rapoarte științifice cu privire la determinarea structurii și stabilirea proprietăților fizico-chimice ale compusilor chimici.
--------------------------------	--

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 • 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 (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • 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 derivatilor anorganici cum ar fi chiralitate, moment de dipol, activitate IR și Raman
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • 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. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
1-2. Introducere – Chiralitate, simetrie, elemente de simetrie Definirea și explicarea elementelor de simetrie, axa, plan, centru de inversie, elemente improprii de simetrie.	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea	
3-4. Operații proprii și improprii de simetrie, tabela de caractere Operațiile generate de elementele de simetrie, operațiile generate de elementele improprii (axe S_n) Operații proprii și improprii. Generarea operațiilor de simetrie	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea	
5-6. Grupuri de simetrie. Grupuri de simetrie înaltă, grupuri de simetrie scăzută, grupurile C_n , C_{nv} , D_n , D_{nh} , D_{nd}	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea	
7-8. Chiralitate și moment de dipol. Definirea chiralității și a momentului de dipol. Stabilirea elementelor de simetrie care permit sau nu prezenta acestor proprietăți	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea	
9-10. Reprezentări reducibile și ireducibile. Produs de simetrie. Definirea reprezentărilor și a produsului acestora. Determinarea reprezentărilor reducibile și reducerea lor.	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea	
11-12. Determinarea activității IR și Raman utilizând noțiunile învățate. Stabilirea bazei reprezentării, determinarea reprezentării reducibile și reducerea acesteia în reprezentări ireducibile. Stabilirea reprezentărilor prezintă activitate IR și Raman	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea	
13-14. Tranzitii electronice . Spectroscopia UV-VIS. Corelarea produsului operațiilor de simetrie cu tranzițiile electronice, reguli de selecție, Determinarea tranzițiilor permise și interzise de simetrie cu ajutorul noțiunilor învățate inclusiv TCC.	Prelegerea Explicația Conversația 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.Schrive, 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, Principles of the Structure and Reactivity</i> , ISBN 2-8041-2112-7, HarperCollins, 1993 5. J. Zsakó, L.D. Boboş, 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	Observații
1. Determinarea elementelor de simetrie. Exerciții. Aplicații utilizând computerul și programele specifice aferente	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
2. Operații de simetrie. Aplicații utilizând computerul și programele specifice aferente	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
3. Operații de simetrie proprii și improprii. Clase de simetrie. Exerciții și aplicații utilizând computerul și programele specifice aferente	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
4. Determinarea grupurilor de simetrie. Exerciții și aplicații.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
5. Stabilirea chiralității cunoscând apartenența unei molecule la un grup de simetrie sau elementele de simetrie specifice.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
6. Determinarea momentului de dipol a unor molecule, pe baza teoriei grupurilor.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
7. Tabela de caractere. Calculul reprezentărilor reducibile.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8. Reducerea reprezentărilor reducibile în reprezentări ireducibile.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
9. Baze de reprezentare. Reducerea reprezentărilor în diverse baze de reprezentare.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
10. Determinarea activității IR și Ramann utilizând metoda teoriei grupurilor. Exerciții și aplicații	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
11. Calculul produsului de simetrie. Simetria orbitalilor moleculari.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
12. Termeni spectrali. Tranzitii electronice permise/interzise. Reguli de selecție	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
13. Determinarea activității UV-Vis utilizând metoda teoriei grupurilor. Exerciții și Aplicații	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
14. Recapitulare generală	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8.3 Laborator	Metode de predare	Observații
1. Modelarea unor sisteme chimice uzuale cu ajutorul programelor de modelare moleculară (Spartan). Determinarea elementelor de simetrie și a apartenenței moleculelor modelate al grupul de simetrie. Determinarea geometriei celei mai stabile, vizualizarea orbitalilor moleculari, simularea spectrelor IR. (4 ore)	Experimentul; Explicația; Exercițiu, modelarea, problematizare	Lucrările se vor efectua în cele trei unități, cu numărul de ore indicat la fiecare unitate.
2. Sinteza unor complecși ai cuprului cu amine. Înregistrarea spectrelor IR pentru complecșii sintetizați, prelucrarea spectrelor. Determinarea simetriei compusilor sintetizați și a spectrelor lor IR (pe baza elementelor de simetrie). Compararea rezultatelor experimentale cu cele obținute teoretic utilizând teoria grupurilor. (4 ore)	Experimentul; Explicația; Problematizarea, exercitiul.	
3. Sinteza unor complecși ai cuprului $\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_n(\text{NH}_3)_{6-n}$ și ai nichelului NiL_6 . Înregistrarea spectrelor UV pentru complecșii sintetizați, prelucrarea spectrelor. Determinarea simetriei compusilor sintetizați și a activității UV-VIS (pe baza elementelor de simetrie). Calculul parametrilor spectrali (lungime, număr de undă, parametru de scindare în câmp cristalin, parametru nefelauxetic, gradul de covalență al legăturii) Compararea rezultatelor experimentale cu cele obținute teoretic utilizând teoria grupurilor. (6 ore)	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	

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.Schrive, P.W. Atkins, C.H. Langford, *Chimie Anorganica*, Editura tehnica, Bucuresti, 1998.
4. E. Huheey, E.A. Keiter, L. Keiter, *Inorganic Chemistry, Principles 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. Boboş, I.O. Marian, *Atom- és molekulaszerkezet*. litografiat Cluj-Napoca, 1995.
8. Referate si fise de lucru pentru activitatile de laborator

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 *Chimie Anorganica III*, studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 1 – 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 – înțelegerea și aplicarea corectă a problematicei tratate la curs Rezolvarea corectă a exercițiilor și problemelor.	Examen scris – accesul la examen este condiționat de rezolvarea temelor de seminar Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	80%
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar și laborator. Rezolvarea corectă a temelor pe parcursul semestrului. Rezolvarea sarcinilor practice	Temele de seminar se predau la datele stabilite de comun acord cu studenții.	20%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> • Nota 5 (cinci) la examen conform baremului. 			

Data completării
16.04.2019

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



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



Data avizării în departament
24.04.2019

Semnătura directorului de departament
Lector Dr. SZABÓ Gabriella Stefănia

