

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
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 – CLR1151						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. dr. Gabriela Nicoleta Nemeș						
2.3 Titularul activităților practice (S+L)	Asist. Drd. Ionut Moraru						
2.4 Anul de studiu	3	2.5 Semestrul	6	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	Ob/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	1+1
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					12
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					14
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat					2
Examinări					2
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"> Se pune la dispoziția studenților suportul de curs-fisier pdf. Acesta se va prezenta la orele de curs cu suportul de curs tipărit. 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 să participe la seminar/laborator. Rezolvarea temelor pe parcursul semestrului este obligatorie. Studenții se vor prezenta în laborator cu halat și vor respecta normele de protecție a muncii. Orele de laborator se efectuează modular în sedințe de 4-6 ore, conform conținutului prezentat mai jos.

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<p>C1. Operarea cu noțiuni de structură și reactivitate a compusilor chimici</p> <p>C1.2 Explicarea și interpretarea unor proprietăți, concepte, abordări, teorii, modele și noțiuni fundamentale de structură și reactivitate a compusilor chimici.</p> <p>C1.3 Aplicarea noțiunilor fundamentale pentru rezolvarea problemelor asociate structurii și reactivității compusilor chimici.</p> <p>C1.4 Analiza critică a modelelor și teoriilor existente cu privire la structura și reactivitatea compusilor chimici.</p> <p>C2. Determinarea compoziției, structurii și proprietăților fizico-chimice a unor compusi chimici</p> <p>C2.1 Identificarea conceptelor și a metodelor utilizate pentru determinarea compoziției, structurii și a proprietăților fizico-chimice ale compusilor chimici.</p> <p>C2.2 Descrierea și interpretarea metodelor și tehnicilor folosite la determinarea structurii și a proprietăților compusilor chimici; prelucrarea și interpretarea rezultatelor</p> <p>C2.3 Utilizarea corectă a metodelor specifice de analiză a structurii și proprietăților compusilor chimici</p> <p>C2.4 Analiza critică a metodelor aplicate pentru determinarea compoziției, structurii și a proprietăților fizico-chimice ale unor compusi chimici</p> <p>C2.5 Realizarea unor rapoarte științifice cu privire la determinarea structurii și stabilirea proprietăților fizico-chimice ale compusilor chimici.</p>
-------------------------	---

Competențe transversale	<p>Executarea sarcinilor solicitate conform cerintelor precizate si în termenele impuse, cu respectarea normelor de etica profesionala si de conduita morala, urmând un plan de lucru prestabilit</p> <p>Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanta cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru</p> <p>Informarea si documentarea permanenta în domeniul sau de activitate în limba româna</p> <p>Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate.</p>
--------------------------------	--

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Aplicarea teoriei grupurilor in determinarea structurii chimice • Cunoasterea notiunilor fundamentale legate de: simetrie, elemente si operatii de simetrie, teoria grupurilor. • Aplicarea elementelor si operatiilor de simetrie in determinarea unor proprietati structurale ale derivatilor anorganici cum ar fi chiralitate, moment de dipol, activitate IR si Ramman, UV-VIS.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Imbogatirea cunostintelor de chimie structurala, prin adaugarea de noi cunostinte, noi explicatii la bagajul deja existent; imbogatirea limbajului chimic. Utilizarea corecta a notiunilor de chimie. • Dezvoltarea capacitatilor de sinteza a unor notiuni fundamentale de chimie. • Capacitate de intelegere a fenomenelor si proceselor chimice si de aplicare a acestora in cazuri concrete. • Abilitatea de aplicare a cunostintelor de chimie structurala in ramuri inrudite.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
Introducere – Simetrie, elemente de simetrie. Definirea si explicarea elementelor de simetrie, axa, plan, centru de inversie, elemente improprii de simetrie.	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematicizarea.	2 ore
Operatii proprii si improprii de simetrie.	Explicația, Problematicizarea, Conversația, Descrierea.	2 ore
Grupuri de simetrie. Grupuri de simetrie inalta, grupuri de simetrie scazuta, grupurile Cn, Cnv, Dn, Dnh, Dnd	Explicația, Problematicizarea, Conversația, Descrierea.	2 ore
Reprezentar ireductibile. Tabela de caractere.	Explicația, Problematicizarea, Conversația, Descrierea.	2 ore
Reducerea reprezentarilor reductibile. Aplicatii.	Explicația, Problematicizarea, Conversația, Descrierea.	2 ore
Clase de simetrie.	Explicația, Problematicizarea, Conversația, Descrierea.	2 ore
Produs de simetrie. Aplicatii.	Explicația, Problematicizarea, Conversația, Descrierea.	2 ore
Chiralitate si moment de dipol. Stabilirea chiralitatii si a momentului de dipol cu ajutorul teoriei grupurilor. Stabilirea elementelor de simetrie care permit sau nu prezenta acestor proprietati.	Problematicizarea, Explicația, Conversația, Descrierea.	2 ore
Determinarea activitatii IR si Ramann utilizand notiunile invatate. Baze de reprezentare	Problematicizarea, Explicația, Conversația, Descrierea.	2 ore
Stabilirea bazei reprezentarii, determinarea reprezentarii reductibile si reducerea acesteia in reprezentari ireductibile. Simetria vibratiilor normale active IR si Ramann.	Problematicizarea, Explicația, Conversația, Descrierea.	2 ore
Termeni spectrali. Calculul termenilor. Scindarea termenilor spectrali in campuri de diferite simetrii. Factori care influențeaza taria scindarii	Problematicizarea, Explicația, Conversația, Descrierea..	2 ore
Tranzitii electronice. Spectroscopia UV-VIS. Corelarea produsului operatiilor de simetrie cu tranzitiile electronice, reguli de selectie, Determinarea tranzitiilor permise si interzise de simetrie.	Problematicizarea, Explicația, Conversația, Descrierea.	2 ore
Simetria orbitalilor moleculari. Construirea diagramelor de OM pentru sisteme chimice simple homoatomice H ₂ , H ₃ , A ₂ si heteroatomice AH ₂ , AH ₃ etc.	Problematicizarea, Explicația, Conversația, Descrierea.	2 ore
Diagrame de orbitali moleculari-continuare. Contruirea unor diagrame de orbitali moleculari pentru compusi cu geometrie octaedrica (Oh), tetraedica (Td), plan patratica (D _{4h}) etc.	Problematicizarea, Explicația, Conversația, Descrierea.	2 ore
Bibliografie		
1. Principles of Chemistry, A Textbook of General Chemistry, Ioan Baldea, Cluj University Press , 2005		

2. The Nature of Atoms and Molecules, A General Chemistry, E.C. Scott, F.A. Kanda, Harper & Row Publishers, New York & Evanston, 1962. 3. Chimie Anorganica, D.F. Schriver, P.W. Atkins, C.H. Langford, Editura tehnica, Bucuresti, 1998. 4. Inorganic Chemistry, Principles of the Structure and Reactivity, E. Huheey, E.A. Keiter, L. Keiter, ISBN 2-8041-2112-7, HarperCollins, 1993 5. Aplicatii ale teoriei grupurilor in chimie, G.N. Nemes, Editura Presa Universitara Clujeana, 2013, ISBN: 978-973-595-619-6. (suport de curs) 6. Bazele chimiei compusilor coordinativi, Aurel Pui, Danut-Gabriela Cozma, Editura Matrix Rom, Bucuresti, 2003, ISBN: (10)973-755-116-8. 7. Inorganic Chemistry, Gary L. Miessler, Paul J. Fischer, Donald A. Tarr, Editura Pearson, 2014, ISBN-13: 978-0-321-81105-9 (student edition)		
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 improprii. 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 cunoscand 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 reducibile.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
8. Reducerea reprezentarilor reducibile in reprezentari ireducibile.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
9. Reducerea reprezentarilor reducibile in reprezentari ireducibile utilizand diverse baze de reprezentare.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
10. Exercitii si aplicatii pentru determinarea activitatii IR si Ramann utilizand metoda teoriei grupurilor si programe de modelare moleculara.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
11. Calculul produsului de simetrie. Aplicatii pentru grupurile de C _{2v} , T _d , D _{4h} si O _h .	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
12. Exercitii si aplicativ pentru determinarea activitatii UV-Vis utilizand metoda teoriei grupurilor.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
13. Calculul produsului de simetrie. Simetria orbitalilor moleculari. Aplicatii	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
14. Construirea diagramelor de orbitali moleculari pentru compusi de diferite simetrii. Aplicatii ML ₄ , ML ₆ in diferite grupuri de simetrie.	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
8.3 Laborator	Metode de predare	Observatii
1. Modelarea unor sisteme chimice uzuale (apa, amoniac, etan, etena, ciclohexan) cu ajutorul programelor de modelare moleculara (Spartan). Determinarea elementelor de simetrie si a apartenentei moleculelor modelate al grupul de simetrie. (4 ore)		Lucrarile se vor efectua modular, in cele patru unitati, cu numarul de ore indicat la fiecare unitate.
2. Determinarea geometriei celei mai stabile pentru moleculele de apa, amoniac, etan, etena, ciclohexan, complexi metalici etc; determinarea barierei de inversie, calculul si vizualizarea orbitalilor moleculari, simularea spectrelor IR. (4 ore)	Experimentul; Explicatia; Exerciitiu, modelarea, problematizare	
3. 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. (3 ore)	Experimentul; Explicatia; Problematizarea, exercitiul.	
4. Sinteza unor compleci ai cuprului Cu(H ₂ O) _n (NH ₃) _{6-n} si ai nichelului NiL ₆ . Inregistrarea spectrelor UV-VIS pentru complexii sintetizati/prelucrarea spectrelor. Determinarea simetriei compusilor sintetizati si a activitatii UV-	Experimentul; Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	

VIS (pe baza elementelor de simetrie). Calculul parametrilor spectrali (lungime, numar de unda, parametru de scindare in camp cristalin, parametru nefelauetic, gradul de covalenta al legaturii) Compararea rezultatelor experimentale cu cele obtinute teoretic utilizand teoria grupurilor. (3 ore)		
--	--	--

Bibliografie

1. Principles of Chemistry, A Textbook of General Chemistry, Ioan Baldea, Cluj University Press , 2005
2. The Nature of Atoms and Molecules, A General Chemistry, E.C. Scott, F.A. Kanda, Harper & Row Publishers, New York & Evanston, 1962.
3. Chimie Anorganica, D.F.Schrifer, P.W.Atkins, C.H. Langford, Editura tehnica, Bucuresti, 1998.
4. Inorganic Chemistry, Principles of the Structure and Reactivity, E. Huheey, E.A. Keiter, L. Keiter, ISBN 2-8041-2112-7, HarperCollins, 1993
5. www.chemweb.com
6. www.webelements.com
7. 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 Anorganică Teoretică*, studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru competențele prevăzute în suplimentul la diploma și ocupațiile din ANC.

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.	Colocviu – accesul la colocviu este condiționat de rezolvarea temelor de seminar și prezenta la activitățile practice, conform regulamentului. 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.	Sarcinile de laborator și temele se predau la datele stabilite.	20%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> • Nota 5 (cinci) la examen conform baremului. 			

Data completării
13 aprilie 2022

Semnătura titularului de curs
Prof. dr. Nemes Gabriela



Data avizării în departament
12.05.2022

Semnătura directorului de departament
Acad. Prof. Dr. Cristian Silvestru

