

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 de seminar	lect. dr. Ionuț Tudor Moraru						
2.4 Anul de studiu	II	2.5 Semestrul	IV	2.6. Tipul de evaluare	C	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	2(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. Nu va fi acceptată întârzierea.
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> Studentii trebuie să participe la seminar/laborator, prezența fiind obligatorie conform normelor în vigoare. Rezolvarea temelor pe parcursul semestrului este obligatorie. Studentii 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 structură 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>
Competențe digitale	<p>Competențe în utilizarea spectroscopiei IR pentru studiul interacțiunilor necovalente în soluție și în stare solidă</p> <p>Competențe în utilizarea spectroscopiei IR pentru determinarea structurii moleculare și corelarea dintre datele spectroscopice cu informațiile obținute din aplicația teoriei grupurilor în chimie</p> <p>Competențe în utilizarea spectrometrelor UV-Vis pentru obținerea de informații privind structura electronică compușilor coordinativi.</p> <p>Prelucrarea datelor cu ajutorul tehnicilor digitate.</p>

7. Obiectivele disciplinei (reiesind 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 în 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. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Operatii proprii si improprii de simetrie. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Grupuri de simetrie. Grupuri de simetrie inalta, grupuri de simetrie scazuta, grupurile Cn, Cnv, Dn, Dnh, Dnd 2 ore		
Reprezentari ireductibile. Tabela de caractere. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Reducerea reprezentarilor reductibile. Aplicatii. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Clase de simetrie. 2 ore		
Produs de simetrie. Aplicatii. 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. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Determinarea activitatii IR si Ramann utilizand notiunile invatate. Baze de reprezentare 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Stabilirea bazei reprezentarii, determinarea reprezentarii reductibile si reducerea acesteia in reprezentari ireductibile. Simetria vibratiilor normale active IR si Ramann. 2 ore		
Termeni spectrali. Calculul termenilor. Scindarea termenilor spectrali in campuri de diferite simetrii. Factori care influențeaza taria scindarii. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Tranzitii electronice. Spectroscopia UV-VIS. Corelarea	Prelegerea, Explicația,	

produsului operatiilor de simetrie cu tranzitiile electronice, reguli de selectie, Determinarea tranzitiilor permise si interzise de simetrie. 2 ore	Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
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. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Diagrame de orbitali moleculari-continuare. Contruirea unor diagrame de orbitali moleculari pentru compusi cu geometrie octaedrica (Oh), tetraedica (Td), plan patratica (D _{4h}) etc. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
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, Princilpes 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	Observații
1. Determinarea elementelor de simetrie. Exerciții. Aplicatii utilizand computerul si programele specifice aferente.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
2. Operatii de simetrie. Aplicatii utilizand computerul si programele specifice aferente	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
3. Operatii de simetrie proprii si improprii. Clase de simetrie. Exerciții si aplicatii utilizand computerul si programele specifice aferente	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
4. Determinarea grupurilor de simetrie. Exerciții si aplicatii.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
5. Stabilirea chiralitatii 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 reprezentarilor reductibile.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8. Reducerea reprezentarilor reductibile in reprezentari ireductibile.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
9. Baze de reprezentare. Reducerea reprezentarilor in diverse baze de reprezentare.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
10. Determinarea activității IR si Ramann utilizând metoda teoriei grupurilor. Exerciții si aplicatii	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
11. Termeni spectrali. Tranzitii electronice permise/interzise. Reguli de selectie.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
12. Determinarea activității UV-Vis utilizând metoda teoriei grupurilor. Exerciții si Aplicatii.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
13. Calculul produsului de simetrie. Simetria orbitalilor moleculari.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
14. Construirea diagramelor de orbitali moleculari pentru compusi de diferite simetrii.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8.3 Laborator	Metode de predare	Observații
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,

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; Explicația; Exercițiu, modelarea, problematizare	in cele patru unitati, cu numarul de ore indicat la fiecare unitate.
3. Sinteza unor compleci ai cuprului cu aminer. Inregistrarea spectrelor IR pentru complexii sintetizati, prelucrarea spectrelor prin utilizarea programelor specifice si a tehnicilor digitate. 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; Explicația; Problematizarea, exercitiul.	
4. Sinteza unor compleci ai cuprului $Cu(H_2O)_n(NH_3)_6-n$ si ai nichelului NiL_6 . Inregistrarea spectrelor UV-VIS pentru complexii sintetizati, prelucrarea spectrelor. Determinarea simetriei compusilor sintetizati si a activitatii UV-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) prin utilizarea programelor specifice si a tehnicilor digitate. Compararea rezultatelor experimentale cu cele obtinute teoretic utilizand teoria grupurilor. (3 ore)	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	

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, Princilpes of the Structure and Reactivity, E. Huheey, E.A. Keiter, L. Keiter, ISBN 2-8041-2112-7, HarperCollins, 1993
5. 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

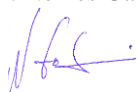
- Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice si abordarea aspectelor practice incluse in disciplina *Chimie Anorganica Teoretica*, studentii dobandesc un bagaj de cunostinte consistent, in concordanta cu competentele parțiale cerute pentru competentele prevazute in suplimentul la diploma si ocupatiile 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 si problemelor.	Examinare scrisa – accesul la examen este condiționat de rezolvarea temelor de seminar si prezenta la activitatile practice, conform regulamentului. Intenția de fraudă si fraudă la examen se pedepsește conform regulamentului ECST al UBB.	80%
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar si laborator. Rezolvarea sarcinilor practice si a temelor.	Temele de seminar/laborator 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
15 aprilie 2023

Semnătura titularului de curs
Prof. dr. Nemes Gabriela



Semnătura titularului de seminar
Lect. dr. Ionut Tudor Moraru

Data avizării în departament
27.04.2023

Semnătura directorului de departament
Acad. Cristian Sorin Silvestru

