

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	Conf. dr. Gabriela Nicoleta Nemeș						
2.3 Titularul activităților de seminar	Conf. dr. Gabriela Nicoleta Nemeș						
2.4 Anul de studiu	III	2.5 Semestrul	VI	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					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. Aceștia se vor 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. 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 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 cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit</p> <p>Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru</p> <p>Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba română</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 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 Ramman, UV-VIS.
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
Introducere – Simetrie, elemente de simetrie. Definirea și explicarea elementelor de simetrie, axa, plan, centru de inversie, elemente improprii de simetrie. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Operații proprii și improprii de simetrie. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Grupuri de simetrie. Grupuri de simetrie înaltă, grupuri de simetrie scăzută, grupurile C_n , C_{nv} , D_n , D_{nh} , D_{nd} 2 ore		
Reprezentări ireductibile. Tabela de caractere. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Reducerea reprezentărilor reductibile. Aplicații. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Clase de simetrie. 2 ore		
Produs de simetrie. Aplicații. 2 ore		
Chiralitate și moment de dipol. Stabilirea chiralității și a momentului de dipol cu ajutorul teoriei grupurilor. Stabilirea elementelor de simetrie care permit sau nu prezenta acestor proprietăți. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Determinarea activității IR și Ramann utilizând noțiunile învățate. Baze de reprezentare 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Stabilirea bazei reprezentării, determinarea reprezentării reductibile și reducerea acesteia în reprezentări ireductibile. Simetria vibrațiilor normale active IR și Ramann. 2 ore		
Termeni spectrali. Scindarea termenilor spectrali în câmpuri de diferite simetrii. Factori care influențează taria scindării. Diagrame de termeni spectroscopici (Orgel și Tanabe-Sugano) 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Tranziții electronice. Spectroscopia UV-VIS. Corelarea produsului operațiilor de simetrie cu tranzițiile electronice, reguli de selecție, Determinarea tranzițiilor permise și interzise de simetrie. 2 ore	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	
Simetria orbitalilor moleculari. Construirea diagramelor de OM pentru sisteme chimice simple homoaomice H_2 , H_3 , A_2 și 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 <ol style="list-style-type: none"> 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.Schrive, 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. Aplicatii ale teoriei grupurilor in chimie, G.N. Nemes, Editura Presa Universitara Clujeana, 2013, ISBN: 978-973-595-619-6. 8. Bazele chimiei compusilor coordinativi, Aurel Pui, Danut-Gabriela Cozma, Editura Matrix Rom, Bucuresti, 2003, ISBN: (10)973-755-116-8. 		
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 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 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 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; determinarea barierei de inversie, calculul si vizualizarea orbitalilor moleculari, simularea spectrelor IR. (8 ore)	Experimentul; Explicația; Exercițiu, 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.	Experimentul; Explicația; Problematizarea, exercitiul.	

(3 ore)		
2. Sinteza unor compleci ai cuprului $\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_n(\text{NH}_3)_{6-n}$ si ai nichelului NiL_6 . Inregistrarea spectrelor UV-VIS pentru complecsii 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) Compararea rezultatelor experimentale cu cele obtinute teoretic utilizand teoria grupurilor. (3 ore)	Experimentul; Explicatia; Conversatia; 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, 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

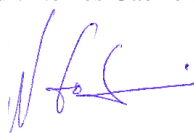
- Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice si abordarea aspectelor practice incluse in disciplina *Chimie Anorganica III*, studentii dobandesc un bagaj de cunostinte consistent, in concordanta cu competentele parțiale cerute pentru ocupatiile posibile prevazute in Grila 1 – RNCIS.

10. Evaluare

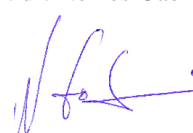
Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – înțelegerea și aplicarea corectă a problematicei tratate la curs. Rezolvarea corectă a exercițiilor si problemelor.	Examen scris – accesul la examen este condiționat de rezolvarea temelor de seminar si prezenta la activitatile 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 si laborator. Rezolvarea corecta 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
20 martie 2018

Semnătura titularului de curs
Conf. dr. Nemes Gabriela



Semnătura titularului de seminar
Conf. dr. Nemes Gabriela



Data avizării în departament
21 martie 2018

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

