FIŞA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituţia de învăţământ superior	Universitatea Babeş-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie şi Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Chimie
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Licenţă
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie/chimist

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Chimie anorganică teoretica – CLR1151						
2.2 Titularul activităţilor de curs	Prof. dr. Gabriela Nicoleta Nemeş						
2.3 Titularul activităţilor de seminar	lect. dr. Ionut Tudor Moraru						
2.4 Anul de studiu	II	2.5 Semestrul	III	2.6. Tipul de evaluare	C	2.7 Regimul disciplinei	Ob/Ds

3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităţilor 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 învăţământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuţia fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie şi notiţe					12
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate şi pe teren					14
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii şi eseuri					14
Tutoriat					2
Examinări					2
Alte activităţi:					-

3.7 Total ore studiu individual	44
3.8 Total ore pe semestru	100
3.9 Numărul de credite	4

4. Precondiţii (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	• Nu este cazul
4.2 de competenţe	• Nu este cazul

5. Condiţii (acolo unde este cazul)

5.1 De desfăşurare a cursului	• Se pune la dispozitia studentilor suportul de curs-fisier pdf. Acestia se vor prezenta la orele de curs cu suportul de curs tiparit. • Nu va fi acceptată întârzierea.
5.2 De desfăşurare a seminarului/laboratorului	• Studentii trebuie sa participe la seminar/laborator, prezenta fiind obligatorie conform normelor in vigoare. Rezolvarea temelor pe parcursul semestrului este obligatorie. • Studenţii se vor prezenta în laborator cu halat si vor respecta normele de protectie a muncii. • Orele de laborator se efectueaza modular in sedinte de 4-6 ore, conform continutului prezentat mai jos.

6. Competenţele specifice acumulate

Competenţe profesionale	**C1. Operarea cu noţiuni de structura şi reactivitate a compusilor chimici** C1.2 Explicarea si interpretarea unor proprietati, concepte, abordări, teorii, modele si notiuni fundamentale de structura si reactivitate a compuşilor 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 şi tehnicilor folosite la determinarea structurii si a proprietatilor compusilor chimici; prelucrarea şi interpretarea rezultatelor C2.3 Utilizarea corecta a metodelor specifice de analiză 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 cerintelor precizate si în termenele impuse, cu respectarea normelor de etica profesionala si de conduita morala, urmând un plan de lucru prestabilit Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanta cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru Informarea si documentarea permanenta în domeniul sau de activitate în limba româna Preocuparea pentru perfecţionarea rezultatelor activităţii profesionale prin implicarea în activităţile desfăşurate.
Competențe digitale	Competențe în utilizarea spectroscopiei IR pentru studiul interacțiunilor necovalente în soluție și în stare solidă Competențe în utilizarea spectroscopiei IR pentru determinarea structurii moleculare și corelarea dintre datele spectroscopice cu informațiile obținute din aplicația teoriei grupurilor în chimie Competențe în utilizarea spectrometrelor UV-Vis pentru obținerea de informații privind structura electronică compușilor coordinativi. Prelucrarea datelor cu ajutorul tehnicilor digitate.

7. Obiectivele disciplinei (reieşind din grila competenţelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	• 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	• 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. Conţinuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observaţii
Introducere – Simetrie, elemente de simetrie. Definirea si explicarea elementelor de simetrie, axa, plan, centru de inversie, elemente improprii de simetrie. 2 ore	Explicaţia, Conversaţia, Descrierea, Problematizarea.	
Operatii proprii si improprii de simetrie. 2 ore	Problematizare, Explicaţia, Conversaţia, Descrierea.	
Grupuri de simetrie. Grupuri de simetrie inalta, grupuri de simetrie scazuta, grupurile Cn, Cnv, Dn, Dnh, Dnd 2 ore	Problematizare, Explicaţia, Conversaţia, Descrierea.	
Reprezentar ireductibile. Tabela de caractere. 2 ore	Prelegerea, Explicaţia, Conversaţia, Descrierea, Problematizarea.	
Reducerea reprezentarilor reductibile. Aplicatii. 2 ore	Prelegerea, Explicaţia, Conversaţia, Descrierea, Problematizarea.	
Clase de simetrie. 2 ore	Prelegerea, Explicaţia, Conversaţia, Descrierea, Problematizarea.	
Produs de simetrie. Aplicatii. 2 ore	Prelegerea, Explicaţia, Conversaţia, Descrierea, Problematizarea.	
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	Explicaţia, Conversaţia, Descrierea, Problematizarea.	
Determinarea activitatii IR si Ramann utilizand notiunile invatate. Baze de reprezentare 2 ore	Explicaţia, Conversaţia, 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 influenţeaza taria scindarii. 2 ore	Problematizare, Explicaţia, Conversaţia, Descrierea.	
Tranzitii electronice. Spectroscopia UV-VIS. Corelarea	Explicaţia,	

produsului operatiilor de simetrie cu tranzitiile electronice, reguli de selectie, Determinarea tranzitiilor permise si interzise de simetrie. 2 ore	Conversaţia, Descrierea, Problematizarea.	
Simetria orbitalilor moleculari. Construirea diagramelor de OM pentru sisteme chimice simple homoatomice H2, H3, A2 si heteroatomice AH2, AH3 etc. 2 ore	Explicaţia, Conversaţia, 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	Explicaţia, Conversaţia, 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.Schriver, 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	Observaţii
1. Determinarea elementelor de simetrie. Exercitii. Aplicatii utilizand computerul si programele specifice aferente.	Experimentul;Explicaţia; Conversaţia;Descrierea; Problematizarea	
2. Operatii de simetrie. Aplicatii utilizand computerul si programele specifice aferente	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	
3. Operatii de simetrie proprii si improprii. Clase de simetrie. Exercitii si aplicatii utilizand computerul si programele specifice aferente	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	
4. Determinarea grupurilor de simetrie. Exercitii si aplicatii.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	
5. Stabilirea chiralitatii cunoscând apartenenţa unei molecule la un grup de simetrie sau elementele de simetrie specifice.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	
6. Determinarea momentului de dipol a unor molecule, pe baza teoriei grupurilor.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	
7. Tabela de caractere. Calculul reprezentarilor reductibile.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	
8. Reducerea reprezentarilor reductibile in reprezentari ireductibile.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	
9. Baze de reprezentare. Reducerea reprezentarilor in diverse baze de reprezentare.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	
10. Determinarea activităţii IR si Ramann utilizând metoda teoriei grupurilor. Exercitii si aplicatii	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	
11. Termeni spectrali. Tranzitii electronice permise/interzise. Reguli de selectie.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	
12. Determinarea activităţii UV-Vis utilizând metoda teoriei grupurilor. Exercitii si Aplicatii.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	
13. Calculul produsului de simetrie. Simetria orbitalilor moleculari.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	
14. Construirea diagramelor de orbitali moleculari pentru compusi de diferite simetrii.	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea	
8.3 Laborator	Metode de predare	Observaţii
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)	Experiment computational, Explicaţia; Exercitiu, modelarea, problematizare	Lucrarile se vor efectua modular,

2. Determinarea geometriei celei mai stabile pentru moleculele de apa, amoniac, etan, etena, ciclohexan, complecsi metalici etc; determinarea barierei de inversie, calculul si vizualizarea orbitalilor moleculari, simularea spectrelor IR. (4 ore)	Experimentul; Explicaţia; Exercitiu, modelarea, problematizare	in cele patru unitati, cu numarul de ore indicat la fiecare unitate.
3. Sinteza unor compleci ai cuprului cu amine. Inregistrarea spectrelor IR pentru complecsii 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; Explicaţia; 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 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) prin utilizarea programelor specifice si a tehnicilor digitate. Compararea rezultatelor experimentale cu cele obtinute teoretic utilizand teoria grupurilor. (3 ore)	Experimentul; Explicaţia; Conversaţia; 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.Schriver, 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 conţinuturilor disciplinei cu aşteptările reprezentanţilor comunităţii epistemice, asociaţiilor profesionale şi 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 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 – înţelegerea şi aplicarea corectă a problematicii tratate la curs. Rezolvarea corectă a exerciţiilor si problemelor.	Colocviu – accesul la colocviu este condiționat de rezolvarea temelor de seminar si prezenta la activitatile practice, conform regulamentului. Intenţia de frauda la examen se pedepseşte cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepseşte prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB.	80%
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însuşirea şi înţelegerea corectă a problematicii 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. Punctajul acordat pe activitățile practice reprezintă 20% din nota finala.	20%
10.6 Standard minim de performanţă			
• Nota 5 (cinci) la examen conform baremului.			

Data completării
18 aprilie 2024

Semnătura titularului de curs
Prof. dr. Nemes Gabriela

Semnătura titularului de seminar
Lect. dr. Ionut Tudor Moraru

Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament
Prof. univ. dr. ing. Monica Ioana TOŞA