

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 – CLM51 | | | | | | |
| 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 | VP | 2.7 Regimul disciplinei | Ob. |

3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

| | | | | | |
|--|-----|--------------------|----|-----------------------|-----|
| 3.1 Număr de ore pe săptămână | 3 | Din care: 3.2 curs | 2 | 3.3 seminar/laborator | 2 |
| 3.4 Total ore din planul de învățământ | 42 | 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 | | | | | 20 |
| 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 | 58 | | | | |
| 3.8 Total ore pe semestru | 128 | | | | |
| 3.9 Numărul de credite | 5 | | | | |

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 și vor respecta normele de protecție a muncii. |

6. Competențele specifice acumulate

| | |
|-------------------------|--|
| Competențe profesionale | <ul style="list-style-type: none"> • C1. Operarea cu noțiuni de structură și reactivitate a compusilor chimici • C1.2 Explicarea și interpretarea unor proprietăți, concepte, abordări, teorii, modele și noțiuni fundamentale de structură 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 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 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 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 |
| 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 |
|--|--|------------|
| 1-2. Introducere – Chiralitate, simetrie, elemente de simetrie Definirea si explicarea elementelor de simetrie, axa, plan, centru de inversie, elemente improprii de simetrie. | Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea | |
| 3-4. Operatii proprii si improprii de simetrie, tabela de caractere Operatiile generate de elementele de simetrie, operatiile generate de elementele improprii (axe Sn) Operatii proprii si improprii. Generarea operatiilor de simetrie | Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea | |
| 5-6. Grupuri de simetrie. Grupuri de simetrie inalta, grupuri de simetrie scazuta, grupurile Cn, Cnv, Dn, Dnh, Dnd | Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea | |
| 7-8. Chiralitate si moment de dipol. Definirea chiralitatii si a momentului de dipol. Stabilirea elementelor de simetrie care permit sau nu prezenta acestor proprietati | Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea | |
| 9-10. Reprezentari reductibile si ireductibile. Produs de simetrie. Definirea reprezentarilor si a produsului acestora. Determinarea reprezentarilor reductibile si reducerea lor. | Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea | |
| 11-12. Determinarea activitatii IR si Ramann utilizand notiunile invatate. Stabilirea bazei reprezentarii, determinarea reprezentarii reductibile si reducerea acesteia in reprezentari ireductibile. Stabilirea reprezentarilor prezinta activitate IR si Ramann | Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea | |
| 13-14. Tranzitii electronice . Spectroscopia UV-VIS. Corelarea produsului operatiilor de simetrie cu tranzitiile electronice, reguli de selectie, Determinarea tranzitiilor permise si interzise de simetrie cu ajutorul notiunilor invatate incluziv 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.Schrifer, 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 molekulaszervezet*. 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

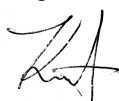
- Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina *Chimie Anorganica III*, studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 1 – RNCIS.

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
15.05.2015

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



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



Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament
Lector Dr. SZABÓ Gabriella Stefănia

