

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 – CLM1151						
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	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					14
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					6
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat					6
Examinări					2
Alte activități:					-
3.7 Total ore studiu individual	42				
3.8 Total ore pe semestru	98				
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"> • 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 si vor respecta normele de protectie a muncii.

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • C1. Operarea cu noțiuni de structura și reactivitate a compusilor chimici • C1.2 Explicarea și interpretarea unor proprietati, concepte, abordări, teorii, modele și notiuni fundamentale de structura și reactivitate a compusilor chimici. • C1.3 Aplicarea notiunilor 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 cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit • Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru • Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba română • 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 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 Raman
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
1. Introducere – Chiralitate, simetrie, elemente de simetrie Definirea și explicarea elementelor de simetrie, axă, plan, centru de inversie, elemente improprii de simetrie.	Prelegerea. Explicația. Conversația. Descrierea. Problematizarea	
2. Operații de simetrie. Operațiile generate de elementele de simetrie, operațiile generate de elementele improprii (axe S_n).	Prelegerea. Explicația. Conversația. Descrierea. Problematizarea	
3. Operații de simetrie. Operații proprii și improprii. Generarea operațiilor de simetrie.	Prelegerea. Explicația. Conversația. Descrierea. Problematizarea	
4. Grupuri de simetrie. Grupuri de simetrie înaltă, grupuri de simetrie scăzută, grupurile C_n , C_{nv} , D_n , D_{nh} , D_{nd} .	Prelegerea. Explicația. Conversația. Descrierea. Problematizarea	
5. Grupuri de simetrie. Grupuri de simetrie înaltă, grupuri de simetrie scăzută, grupurile cubice.	Prelegerea. Explicația. Conversația. Descrierea. Problematizarea	
6. Chiralitate și moment de dipol. Definirea chiralității și a momentului de dipol. Stabilirea elementelor de simetrie care permit sau nu prezența acestor proprietăți	Prelegerea. Explicația. Conversația. Descrierea. Problematizarea	
7. Reprezentări reducibile și ireducibile. Proprietățile reprezentărilor. Determinarea reprezentărilor reducibile și reducerea lor.	Prelegerea. Explicația. Conversația. Descrierea. Problematizarea	
8. Reprezentări reducibile și ireducibile. Produs de simetrie. Definirea reprezentărilor și a produsului acestora.	Prelegerea. Explicația. Conversația. Descrierea. Problematizarea	
9. Determinarea activității IR și Raman utilizând noțiunile învățate. Stabilirea bazei reprezentării, determinarea reprezentării reducibile și reducerea acesteia în reprezentări ireducibile.	Prelegerea. Explicația. Conversația. Descrierea. Problematizarea	
10. Determinarea activității IR și Raman utilizând noțiunile învățate. Stabilirea reprezentărilor care prezintă activitate IR și Raman	Prelegerea. Explicația. Conversația. Descrierea. Problematizarea	
11. Tranziții electronice. Spectroscopia UV-VIS. Corelarea produsului operațiilor de simetrie cu tranzițiile electronice, reguli de selecție.	Prelegerea. Explicația. Conversația. Descrierea. Problematizarea	
12. Tranziții electronice. Spectroscopia UV-VIS. Determinarea tranzițiilor permise și interzise de simetrie cu ajutorul noțiunilor învățate inclusiv TCC.	Prelegerea. Explicația. Conversația. Descrierea. Problematizarea	

13. Simetria orbitalilor moleculari. Construirea diagramelor de OM pentru sisteme chimice simple homootomice H ₂ , H ₃ , A ₂ si heteroatomice AH ₂ , AH ₃ etc.	Prelegerea. Explicația. Conversația. Descrierea. Problematizarea	
14. Simetria orbitalilor moleculari. Construirea unor diagrame de orbitali moleculari pentru compusi cu geometrie octaedrica (Oh), tetraedica (Td), plan patratică (D4h) etc.	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, Princilpes of the Structure and Reactivity</i> , ISBN 2-8041-2112-7, HarperCollins, 1993 5. J. Zsakó, L.D. Boboș, I.O. Marian, <i>Atom- és molekulaszerkezet</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. G.-N. Nemeș, <i>Aplicații ale teoriei grupurilor în chimie</i> , Presa Universitară Clujeană, 2013		
8.2 Seminar	Metode de predare	Observații
1. Determinarea elementelor de simetrie. Exerciții. Aplicații utilizând modele tridimensionale, computerul și programe specifice aferente	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
2. Operații de simetrie. Exerciții. Aplicații utilizând modele tridimensionale, computerul și programe specifice aferente	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
3. Operații de simetrie proprii și improprii. Clase de simetrie. Exerciții și aplicații utilizând modele tridimensionale, computerul și programe specifice aferente	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
4. Determinarea grupurilor de simetrie. Exerciții și aplicații utilizând modele tridimensionale, computerul și programe specifice aferente	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 si Raman 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. Tranziții 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 la grupuri de simetrie. Determinarea geometriei celei mai stabile, vizualizarea orbitalilor moleculari, simularea spectrelor IR. (4 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 complecși ai cuprului cu amine. Înregistrarea spectrelor IR pentru complecși sintetizați, prelucrarea spectrelor. Determinarea simetriei compușilor 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 complecși sintetizați, prelucrarea spectrelor. Determinarea simetriei compușilor 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 Anorganică*, 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. Boboș, I.O. Marian, *Atom- és molekulaszerkezet*. litografiat Cluj-Napoca, 1995.
8. Gy. Tasi *Számítógépes kémia*, JATEPress Szeged, 2010
9. G.-N. Nemeș, *Aplicații ale teoriei grupurilor în chimie*, Presa Universitară Clujeană, 2013
10. Referate și fișe de lucru pentru activitățile 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 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
10.04.2020

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



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



Data avizării în departament
27.04.2020

Semnătura directorului de departament
Prof. habil. dr. ing. Csaba PAIZS

