

## FIȘA DISCIPLINEI

<b>Universitatea Academiei de Științe a Moldovei</b> <b>Facultatea Științe exacte</b>			<b>Denumirea cursului:</b> Aplicarea teoriei grupurilor în chimie <b>Codul cursului în planul de studii:</b> F.02.O.013				
<b>Nivelul calificării ISCED:</b> 7 <b>Domeniul de formare profesională:</b> 44 Științe Exacte <b>Specialitatea:</b> Chimie			<b>Catedra responsabilă de curs:</b> Fizică și Chimie <b>Titular/Responsabil de curs:</b> Arion Vladimir, dr. hab., prof. univ.				
Total ore			Număr de ore pe tipuri de activități			Forma de evaluare	Număr de credite
total	contact direct	studiu individual	curs	seminar	laborator		
<b>150</b>	<b>40</b>	<b>110</b>	<b>30</b>	<b>10</b>	<b>0</b>	<b>E</b>	<b>5</b>

### Descrierea succintă a corelării cursului cu programul de studii

Programa disciplinei *Aplicarea teoriei grupurilor în chimie* este destinată, în primul rând studenților ce fac studii de masterat la specialitatea Chimie. Cursul vizează familiarizarea viitorilor specialiști cu elementele și operațiile de simetrie ale moleculelor, grupa matematică, aplicarea teoriei grupelor în interpretarea spectrelor IR și Raman ale unor molecule simple și a altor proprietăți a moleculelor, ecuația Schrödinger pentru sisteme cu un electron și ioni cu mai mulți electroni, termi energetici, scindarea termelor în câmpuri cristaline cu diferită simetrie, diagramele stărilor energetice și spectrele de absorbție a complexilor octaedrici, diagramele Orgel și Tanabe-Sugano și folosirea lor la interpretarea spectrelor vizibile de absorbție.

### Competențe dezvoltate în cadrul cursului

#### Competențe generale:

- aprofundarea, analiza și sinteza cunoștințelor din domeniul chimiei;
- analiza critică a literaturii științifice;
- aplicarea cunoștințelor teoretice din domeniul chimiei și fizicii în rezolvarea sarcinilor științifice practice;
- definirea unui subiect de cercetare din domeniul nanocompozitelor și elaborarea unui plan de realizare a obiectivelor propuse;
- argumentarea scopurilor, obiectivelor și rezultatelor cercetărilor proprii;
- rezolvarea problemelor de cercetare prin identificarea și folosirea tehnologiilor informaționale;
- organizarea și realizarea activității în grup în scopul derulării activității științifice de cercetare a proprietăților fizico-chimice a nanocompozitelor;
- aplicarea strategiilor de muncă eficientă și responsabilă, de punctualitate, seriozitate și răspundere personală.

#### Competențe specifice:

- aplicarea conceptelor, teoriilor, principiilor, metodelor și modelelor contemporane ale chimiei.
- evidențierea posibilităților de sinteză a compușilor chimici de interes, reieșind din cunoștințele privind corelația structură – proprietăți chimice.
- modernizarea și optimizarea procedeelelor și tehnicilor existente pentru sinteza și analiza substanțelor în funcție de sarcinile propuse;
- inițierea și dezvoltarea unor proiecte inovative în domeniul profesional cu importanță teoretică-fundamentală și aplicativă.
- identificare posibilităților de utilizare a metodelor specifice chimiei și nespecifice, din alte domenii științifice în realizarea proiectelor de cercetare.

### Finalități de studii ale cursului

#### La nivel de aplicare studenții vor:

- explica legătura dintre simetria moleculelor și energia lor;
- aplica cunoștințele teoretice în analiza spectrelor IR și Raman al unor molecule simple;
- aplica cunoștințele teoretice și procedeele teoriei grupelor la construirea orbitalilor moleculari pentru complecși octaedrici, tetraedrici și a celor cu geometrie planar-pătrată;
- folosi cunoștințele despre simetria moleculelor individuale pentru explicarea proprietăților moleculelor (chiralitatea, posesia momentelor dipolice etc.);
- utiliza cunoștințele despre structura electronică a atomilor și ionilor pentru determinarea termilor energetici;
- explica spectrele electronice de absorbție a complexilor de metale cu simetrie octaedrică și tetraedrică.

**La nivel de integrare studenții vor:**

- aplice cunoștințele acumulate la rezolvarea altor probleme în diferite domenii ale chimie;
- propune și realiza proiecte de cercetare științifică;
- promoveze cunoștințele acumulate, prin utilizarea tehnologiilor informaționale moderne, în catalogarea datelor, formarea bazelor de date etc.;
- aplica cunoștințele obținute pentru pregătirea tezelor de masterat.

**Condiții prerechizite:** Pentru studierea cursului *Aplicarea teoriei grupurilor în chimie* este necesară parcurgerea disciplinelor *Chimie anorganică, Chimie fizică, Chimie analitică cantitativă, Chimie coordinativă, Chimie supramoleculară, Metode fizice de cercetare.*

**Teme de bază:** Elemente de simetrie și operații de simetrie, grupe punctuale și spațiale, sistemul Schoenflies și sistemul Hermann-Mauguin sau sistemul internațional, consecințele simetriei moleculare. Operații succesive, identitate, inverse, clasa. Definiția și exemple de grupe matematice, proprietățile grupurilor, reprezentările grupei, reprezentări matematice a simetriei moleculare. Reprezentări matematice și baze matematice, reprezentările matricelor simetriei moleculare, reprezentări redutibile și ireductibile, caracterele matricelor. Tabelele caracterelor. Reprezentările matematice ireductibile. Simboluri Mulliken, formula de reducere. Ecuația Schrödinger și teoria grupelor. Utilizarea teoriei grupelor. Vibrațiile moleculare, generarea reprezentărilor redutibile, examinarea reprezentărilor ireductibile, coordonatele interne, operatorii de proiecție, regulile spectroscopice de selecție (IR și Raman). Ioni cu un electron. Funcții de undă, funcții radiale și funcții angulare, momentul angular. Ioni cu mai mulți electroni. Aproximarea câmpului self-consistent. Configurații electronice. Cuplarea momentelor angulare orbitale, cuplarea momentelor angulare de spin, cuplarea spin-orbită. Electroni echivalenți și electroni neechivalenți. Relația dintre configurații electronice și termi. Termi pentru electroni echivalenți. Regulele lui Hund și interpretarea lor, parametri de respingere electronică, parametri de interacțiune spin-orbită. Scindarea nivelelor și termenilor în înconjura chimică. Teoria electrostatică de scindare orbitală. Diagramele nivelelor energetice și spectrele complexilor octaedrici. Limitele teoriei câmpului cristalin. Teoria câmpului liganzilor. Câmp al liganzilor slab, intermediar și puternic. Metoda câmpului slab, interacțiunea de configurație. Diagramele Orgel. Metoda câmpului puternic. Metoda de simetrie descendentă. Diagramele Tanabe-Sugano. Aplicarea lor la interpretarea spectrelor complexilor octaedrici.

**Strategii de predare-învățare:** prelegeri interactive, seminare, lucrări de laborator, lucrări individuale, platforma MOODLE, proiecte, consultații.

**Strategii de evaluare:** teste de evaluare, prezentări, rapoarte, dezbateri, elaborarea portofoliilor, teze/proiecte etc. Nota finală se constituie din rezultatul evaluării finale (40%), curente (40%) și calității lucrului individual al studentului pe parcursul semestrului (20%).

**Bibliografie selectivă:**

1. Walton, P.H. *Beginning Group Theory for Chemistry*, Oxford University Press, 1998.
2. Cotton, F.A. *Chemical Applications of Group Theory*, third edition, John Wiley & Sons, 1990.
3. Drago, R. *Physical Methods in Chemistry*
4. Börgel Jonas, Campbell Michael G., Ritter Tobias., *Transition Metal d-Orbital Splitting Diagrams: An Updated Educational Resource for Square Planar Transition Metal Complexes*, 2015
5. Richardson D. E., *The Angular Overlap Model as a Unified Bonding Model for Main Group and Transition Model Compounds*, University of Florida, 1993
6. Toyahiko J. Konno; *Splitting of One-Electron Levels in a Tetrahedral Environment*, Tohoku University, Katahira, Aoba-Ku, Sendai, Japan, 2001
7. Roxanne Freitag, Jeanet Condradie; *Understanding the Jahn-Teller Effect of Octahedral Transition-Metal Complexes: A Molecular Orbital View of the Mn( $\beta$ -diketonato)<sub>3</sub> Complex*; University of the Free State, 2013

Data

Semnătura