

# STUDIUL ENERGETICII PROCESULUI DE SUBSTITUȚIE A UNOR LIGANZI DIN COMPUȘI COORDINATIVI

**Sergiu Codreanu**, lector universitar, catedra Chimie, UST

**Ion Arsene**, dr., conf. univ., catedra Chimie, UST

**Eduard Coropceanu**, dr., prof. univ. interim., catedra Chimie, UST

**Rezumat.** În scopul realizării unui învățământ modern, formativ, considerăm procesul de predare-învățare-evaluare interdisciplinară la chimie ca un factor important și determinant. Studiarea interdisciplinară a conținuturilor de la diferite discipline de învățământ va contribui substanțial la educarea studenților chimiști, la formarea și dezvoltarea competențelor specifice chimiei, a unei gândiri logice și flexibile, la o fixare și sistematizare mai bună a cunoștințelor teoretice și a capacității lor de aplicare în practică. În acest scop, utilizarea diferitor programe de calcul a energiei moleculare, a unor procese chimice ce decurg în sistemele analizate, de vizualizare a structurii ș.a., necesită o abordare interdisciplinară a cunoștințelor, aptitudinilor și abilităților din domeniul chimiei în special, cât și din informatică, fizică, matematică. Această abordare interdisciplinară prezintă o provocare și în același timp o necesitate pentru studenții chimiști ca viitori specialiști în domeniul educațional.

**Abstract.** In order to achieve a modern, formative education, we consider the process of interdisciplinary teaching-learning-chemistry as an important and determinant factor. Interdisciplinary study of content from different educational disciplines will substantially contribute to the education of chemistry students, to the formation and development of chemistry-specific skills, logical and flexible thinking, to a better fixation and systematization of theoretical knowledge and their ability to apply practice. To this end, the use of various molecular energy computational programs, chemical processes flowing into the analyzed systems, visualization of the structure, a., requires an interdisciplinary approach to knowledge, skills and abilities in the field of chemistry in particular as well as in mathematics, computer science, and physics. This interdisciplinary approach presents both a challenge and a necessity for both chemists and prospective specialists in the field.

**Cuvinte cheie:** interdisciplinaritate, studiu energetic, competență specifică, ligand, compus coordinativ, substituție.

**Keywords:** interdisciplinarity, energy study, specific competence, ligand, coordinating compound, substitution.

## Introducere

În învățământul contemporan apar tot mai multe tendințe de interconexiune a unor domenii din conținutul curricular. Această necesitate de integrare apare reieșind din imposibilitatea uneia dintre discipline (de ex.: biologia, chimia, fizica, matematica, geografia etc.) să rezolve sau să explice unele probleme complexe ale proceselor și fenomenelor ce țin de conținutul unitar al vieții și al lumii înconjurătoare.

Interrelaționarea conținuturilor disciplinei *Chimia* cu biologia, fizica, matematica, geografia, informatica în procesul educațional se bazează pe formarea la studenții chimiști a competențelor necesare pentru adaptarea eficientă a viitorilor specialiști la diferite situații sociale. Cunoștințele obținute vor avea o valoare mai mare dacă vor fi integrate cu anumite competențe în diferite situații de aplicare, în rezolvări de probleme etc. În context interdisciplinar apar transferuri orizontale ale cunoștințelor dintr-o disciplină în alta la nivel metodologic și conceptual.

Interdisciplinaritatea reprezintă un principiu metodologic de abordare interdisciplinară a chimiei prin formarea la elevi a unui sistem integrat de cunoștințe pe baza unor metode și principii de investigare pentru dezvoltarea unei gândiri integratoare, unitare [1].

Procesul predării-învățării-evaluării chimiei la treapta universitară este unul complex și are ca scop formarea competențelor într-un anumit domeniu, independent de realizările obținute anterior în alte domenii ale cunoașterii. Așadar, abordarea interdisciplinară a conținuturilor de la diferite discipline de studii conduce la crearea unui mediu favorabil și necesar pentru formarea competenței profesionale inițiale a studenților chimiști în context inter/transdisciplinar [2].

Instruirea la chimie va fi mult mai eficientă dacă se va face referire la interdisciplinaritate. În cadrul studierii disciplinei *Chimia anorganică*, spre exemplu, la etapă universitară de predare-învățare se stabilesc conexiuni interdisciplinare cu alte discipline înrudite, cum ar fi: geochimia, chimia fizică, chimia coordinativă, chimia organică, chimia analitică ș.a. [3].

Interdisciplinaritatea reprezintă o modalitate eficientă de organizare curriculară la toate nivelurile, care depășește zona conținuturilor disciplinare și care vizează zona de metode/atitudini. Procedeele de obținere a unui model interdisciplinar decurge prin intersecția unor arii disciplinare diferite, fiind ignorate limitele stricte ale disciplinelor. Printr-o abordare interdisciplinară se pot realiza obiective de învățare/competențe specifice de ordin mai înalt (capacități metacognitive). Principiul organizator nu mai este focalizat pe conținuturi (cazul multidisciplinarității), ci se trece la centrarea pe competențe-cheie [4].

Reforma învățământului din RM a creat premise pentru unele transformări la nivelul curriculum-ului, unde se distinge perspectiva interdisciplinară. Societatea are nevoie de specialiști care să aibă capacitatea de a gândi interdisciplinar și să poată trece cu ușurință de la un domeniu la altul. Studiul corelărilor interdisciplinare a fost mereu în vizorul didacticilor științelor, pe când studiul integrat al disciplinelor de studii ridică problema dată la un nivel mult mai superior. Integrarea disciplinelor este importantă în procesul de pregătire al specialiștilor de înaltă calificare. Pe plan mondial, tendința de pregătire a cadrelor este orientată spre formarea specialiștilor de înaltă calificare cu potențial de angajare în mai multe domenii adiacente.

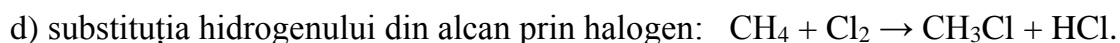
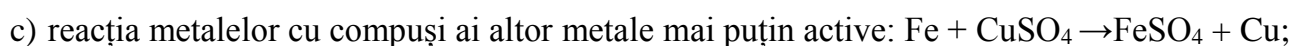
La nivelul curriculum-ului școlar/universitar există resurse suficiente de realizare a unui învățământ cu caracter interdisciplinar, unde se pot stabili obiective comune cu mai multe discipline. Un învățământ interdisciplinar vizează stabilirea unui curriculum integrat, adică o organizare a procesului instructiv-educativ, în care elevul/studentul să efectueze activități ce necesită competente dobândite nu numai la o disciplină școlară/universitară. Corelarea dintre discipline se poate realiza la nivelul conținuturilor, obiectivelor, creând un mediu favorabil pentru ca fiecare elev/student să se exprime liber, să lucreze în echipă sau individual.

În cadrul studierii Chimiei, studentul se cunoaște cu diferite procese chimice ce decurg între compușii ce interacționează, unul din ele fiind *procesul de substituție*. Substituția

(înlocuire) este o reacție chimică prin care un atom sau un radical dintr-un compus este înlocuit de alt atom sau radical, provenit de la alt corp chimic [5].

În chimia anorganică, cât și chimia organică se studiază diferite reacții de substituție, care se deosebesc după compușii ce interacționează, substituenții folosiți, mecanismele de decurgere a reacției ș.a.

Exemple de reacții de substituție:



Prin studierea reacțiilor de substituție poate fi stabilit rezultatul sau produsele ce trebuie să se obțină, mecanismul reacției (scindarea unui tip de legătură chimică cu formarea altui tip), reactivitatea diferită a compușilor cercetați cu diverși reactanți, starea de agregare a sistemului în care poate decurge reacția. Pentru eficientizarea procesului instructiv-educativ la chimie pot fi folosite diferite *metode* de cunoaștere științifică (problematizarea, modelarea, schematizarea, experimentul chimic, analiza, sinteza, generalizarea etc.), cât și diverse *resurse didactice*, inclusiv calculatorul și soft-urile digitale necesare pentru selectarea, vizualizarea, prelucrarea și prezentarea informației noi obținute.

Utilizarea diferitor soft-uri digitale în cadrul studierii disciplinei Chimia este necesară pentru aprofundarea cunoștințelor teoretice în domeniu, pentru formarea și dezvoltarea abilităților practice de aplicare a lor, cât și pentru înțelegerea mai profundă a proceselor și fenomenelor ce decurg în sistemele analizate. Organizarea unui învățământ în context interdisciplinar vizează mai bine atât progresul științific, cât și cerințele socio-umane, referitor la formarea unei personalități contemporane, ajută la dobândirea unei viziuni de ansamblu asupra vieții și Universului, la asimilarea temeinică a valorilor fundamentale și la distingerea mai ușoară a obiectivelor.

Pentru a analiza posibilitatea de investigare cu caracter interdisciplinar, în care sunt implicate cunoștințe din domeniile chimie, fizică, informatică s-a propus studiul energetic al procesului de substituție a unor liganzi sulfanilamidici (SAM) din compuși coordinativi cu alți liganzi (L – în cazul studiat – biperidil).

Calculul cuanto-chimic au fost efectuate prin utilizarea metodelor *ab initio* Hartree-Fock-Roothaan folosind pachetul de programe moderne de calcul PC Gamess [6]. Structura electronică și geometria moleculelor de ligand și complecși au fost calculate *ab initio* ROHF cu seturile de bază standard 6-31G(d) [7]. Pentru toate sistemele studiate s-a folosit simetria  $C_1$  în stare singlet cu spinul total  $S=0$ . Parametrii geometrici calculați sunt în concordanță cu rezultatele experimentale prezentate, pe baza modelului obținut la difracția cu raze X pe monocristal [8].

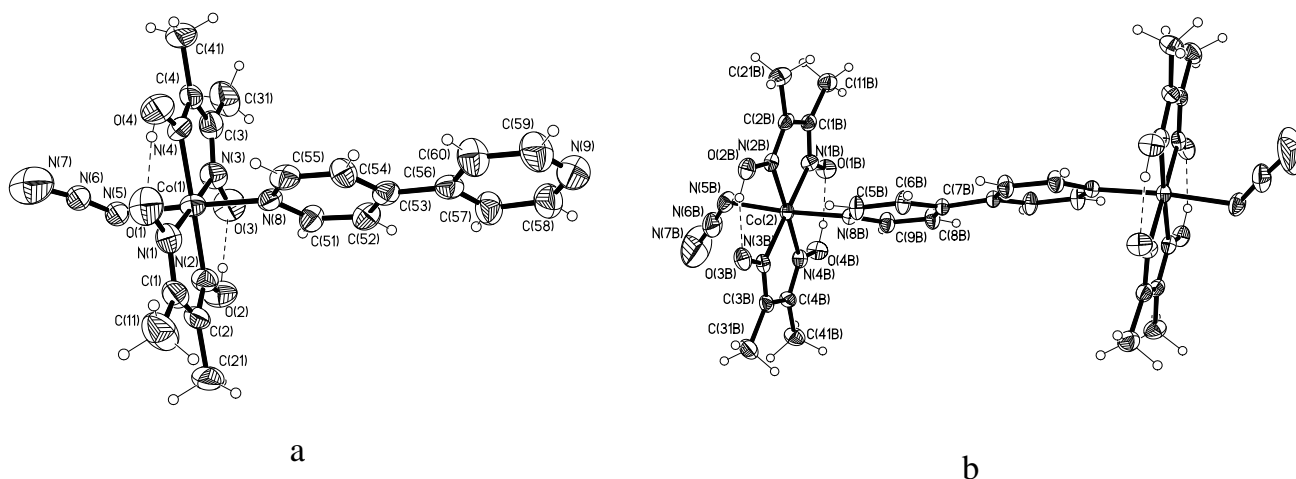
S-au efectuat calcule cuanto-chimice pentru a determina structura electronică a compușilor coordinativi și a liganzilor din compoziția lor. Parametrii geometrici calculați în

starea fundamentală a compușilor studiați și datele experimentale sunt redată în Tabelul 1. Analiza comparativă (Tabelul 1) dovedește o bună corelare a datelor teoretice cu cele experimentale referitor la lungimile legăturilor chimice formate între atomul de cobalt și atomii elementelor care coordonează la acesta pe axa apicală.

**Tabelul 1.** Parametrii geometrici teoretici și experimentali (Co-ligandul axial).

Complexul	Valori teoretice, Å		Valori practice, Å	
	$R(\text{Co-E}_L)$	$R(\text{Co-N}_{\text{azid}})$	$R(\text{Co-E}_L)$	$R(\text{Co-N}_{\text{azid}})$
<b>1</b>	2,03	1,94	1,961(4)	2,031(4)
<b>2</b>	2,03	1,94	1,969(6)	2,024(6)

Deoarece pentru sinteza compușilor coordinativi **1** și **2**, ca reactanți sunt utilizați complecși din care sunt substituiți liganzii sulfanilamidici [8], s-a decis calcularea profilului energetic pentru aceste reacții. Studiind cuanto-chimic aceste două reacții de substituție, unde avem aceiași reactanți, însă în diferite condiții de reacție se obțin produși diferiți (Figura 1), au fost stabiliți parametrii energetici descriși în Tabelul 2.



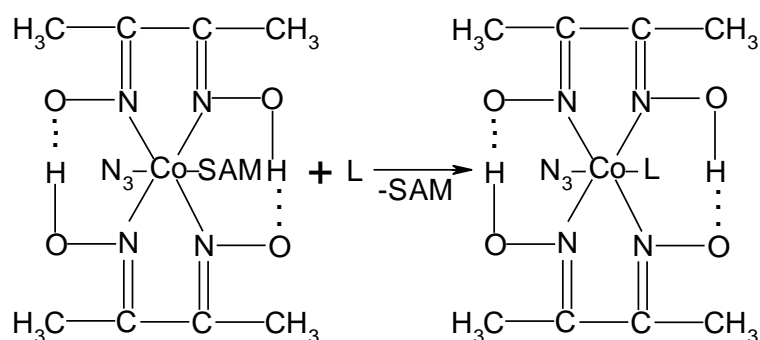
**Fig. 1.** Structura moleculară a complecșilor **1** (a) și **2** (b) [8].

Este calculată diferența de energie ( $\Delta E = \Sigma E_P - \Sigma E_R$ ) dintre reactanți și produșii de reacție pentru fiecare substituție. Rezultatele obținute indică natura exotermă a reacțiilor de substituție.

**Tabelul 2.** Profilul energetic al reacțiilor de substituție.

Nr.	Reacția de substituție	$\Delta E$ (kcal/mol)
<b>1</b>	$[\text{Co}(\text{N}_3)(\text{DH})_2\text{L}_1] + \text{bpy} \rightarrow [\text{Co}(\text{N}_3)(\text{DH})_2\text{bpy}] + \text{L}_1$	-9,22
<b>2</b>	$2[\text{Co}(\text{N}_3)(\text{DH})_2\text{L}_1] + \text{bpy} \rightarrow [(\text{Co}(\text{N}_3)(\text{DH})_2)_2\text{bpy}] + 2\text{L}_1$	-14,18

Pentru ambele reacții s-a studiat profilul energetic. În cazul primei reacții energia reacției este de -9,22 kcal/mol, iar pentru reacția 2 câștigul de reacție este de 14,18 kcal/mol. În Figura 2 este reprezentată schema reacției de substituție:



**Fig. 2.** Schema reacției de substituție a ligandului SAM din sfera internă a complexului prin L.

Deasemenea, pe baza reacțiilor de substituție, s-a decis calcularea energiei legăturii cobaltului cu ligandul sulfanilamidic înainte de substituție, precum și cu ligandul substituent în compuşii finali. În Tabelul 3 este prezentată energia de legătură în configurația geometrică optimizată, care se determină conform relației:

$$E_{\text{leg}} = (E_L + E_{\text{Co}(\text{N}_3)(\text{DH}_2)_2}) - E_{\text{Co}(\text{N}_3)(\text{DH}_2)_2\text{-L}}$$

**Tabelul 3.** Energia de legătură  $R_{\text{Co-L}}$ .

Ligandul	$E_{\text{leg.}}$ (a.e.)	$E_{\text{leg.}}$ (kcal/mol)
Sbu ( $L_1$ )	0,0678	42,54
bpy	0,0871	54,66

Metoda este propusă pentru studiul energiei proceselor de substituție și este recomandată pentru cursurile de la licență și master, în mod special pentru Bazele chimiei coordinative (ciclul I) și Chimie coordinativă și supramoleculară (ciclul II).

**Concluzii:** Un învățământ de calitate are ca scop formarea la studenți a unei gândiri sistemice, integrative asupra vieții și reieșind din aceasta apare necesitatea formării și dezvoltării unor competențe integrate, care să permită corelarea conținutului specific a mai multor discipline, transferului de cunoștințe și metode dintr-o disciplină în alta.

Gradul de pregătire a studenților pentru viață este direct proporțional cu capacitatea acestora de a contextualiza și aplica cunoștințele în situații de viață concrete, de a rezolva problemele cotidiene, făcând apel la mai multe discipline. Utilizarea metodelor de calcul a energiei proceselor de substituție a liganzilor din compuşii coordinativi oferă posibilitatea studierii proceselor de concurență a diferitor molecule la coordonare cu ionul central, fapt care permite analiza ulterioară a cauzelor și formularea concluziilor referitor la gradul de probabilitate a formării unor compuşii coordinativi în baza calculelor teoretice.

Prin activitățile practice la chimie (experimentul chimic, modelarea, utilizarea calculatorului) se contribuie la identificarea și dezvoltarea cognitivă și profesională a intereselor, aptitudinilor, nevoilor și motivației studenților; formarea abilităților personale asupra subiectelor semnificative profesionale; aprofundarea și extinderea conținutului de program; dezvoltarea competențelor de a realiza studii cu caracter inter- și transdisciplinar;

dezvoltarea independenței studenților; integrarea în contexte reale, autentice; dezvoltarea propriilor achiziții intelectuale în condiții de experiență socio-culturală, cognitivă și spirituală.

## **Bibliografie**

1. Fătu S. Didactica chimiei. Ediția a II-a, București: Corint, 2008, 200 p.
2. Coropceanu E., Nedbaliuc R., Nedbaliuc B. Motivarea pentru instruire: Biologie și chimie. Chișinău: „Elena V.I.” SRL, 2011, 215 p.
3. Planuri de învățământ. Specialitățile ciclului I (licență). Specialitățile ciclului II (masterat). Facultatea de Biologie și chimie. Chișinău, 2014.
4. Ardelean A., Mândruț O. Didactica formării competențelor. Arad: „Vasile Goldiș” University Press, 2012, 212 p.
5. Dicționar universal ilustrat al limbii române. București: Editura Litera Internațional. 2011, V. 10.
6. Granovsky A.A. [www http://classic.chem.msu.su/gran/games/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/games/index.html).
7. Rassolov V.A., Pople J.A., Ratner M.A., Windus T.L. 6-31G\* basis set for atoms K through Zn. J. Chem. Phys., 1998, 109, P. 1223.
8. Коропчану Э.Б., Болога О.А., Арсене И., Витиу А., Булхак И.И., Горинчой Н., Боурош П.Н. Синтез и исследование продуктов внутрисферного замещения в азид-содержащих диоксиматах Со(III). Коорд. химия. 2016, Т. 42, N 8, С. 480-502.

## **CONSTRUCȚIA LECȚIEI DE FORMARE A PRICEPERILOR ȘI DEPRINDERILOR PRIN LUCRĂRI DE LABORATOR LA BIOLOGIE**

**Daniela Placinta**, profesor de biologie, grad didactic unu

Universitatea de Stat din Tiraspol

Didactica modernă, la etapa actuală, propune diverse tipuri de organizare a procesului instructiv–educativ, pentru formarea și valorificarea competențelor prioritare la tinerele generații. Astfel, cadrul didactic este responsabil de planificarea lecției, care va corespunde competențelor specifice disciplinei predate.

Definirea conceptului de „lecție” provine de la cuvântul grecesc „*lectio*”, care înseamnă „a citi cu glas tare, a audia, a lectura, a medita”. În prezent s-au propus mai multe criterii de definire a lecției din punct de vedere unilateral (M. Ionescu, 2000, 2001, 2005, 2007):

a) după criteriul organizatoric, lecția este o formă de activitate, care se desfășoară în clasă, sub conducerea cadrului didactic, într-un interval de timp determinat (45-50 de minute), pe baza cerințelor cuprinse în programa școlară și potrivit orarului școlar;

b) din punct de vedere al conținutului, lecția reprezintă un sistem de idei articulate logic și didactic, în conformitate cu cerințele psihopedagogice referitoare la predarea-asimilarea cunoștințelor, aplicarea lor, la verificarea, evaluarea și notarea rezultatelor; ea reprezintă o unitate logică, didactică și psihologică;