

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Scoala Doctorala	Chimie
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Doctorat
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Doctorat

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	RMN și difracție de raze X în chimia organometalică						
2.2 Titularul activităților de curs	Acad. Prof. dr. Cristian SILVESTRU						
2.3 Titularul activităților de seminar	Acad. Prof. dr. Cristian SILVESTRU						
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	II	2.6. Tipul de evaluare	E#	2.7 Regimul disciplinei	Op

doctorandul poate opta pentru participare la activitati fara examen sau cu examen

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	3	Din care: 3.2 curs	1	3.3 seminar	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	36	Din care: 3.5 curs	12	3.6 seminar	24
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					120
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					120
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					44
Tutoriat					30
Examinări					
Alte activități:					-
3.7 Total ore studiu individual		314			
3.8 Total ore pe semestru		350			
3.9 Numărul de credite		14			

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> Nu este cazul
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> Nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> Cursurile si seminariile se desfasoara in conditii de acces la internet si baze de date Studentii vor avea acces la baze de date (baze abonate de facultate/universitate) Se va stimula participarea interactiva Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise
5.2 De desfășurare a seminarului	<ul style="list-style-type: none"> Studentii se vor prezenta la seminar cu telefoanele mobile închise

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> Definirea și însușirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază utilizate în analiza structurală prin Rezonanța Magnetică Nucleară (RMN), respectiv Difracție de Raze X pe Monocristal specifice și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională Utilizarea cunoștințelor aprofundate din domeniul chimiei pentru explicarea și interpretarea spectrelor RMN, respectiv analiza structurală a compușilor anorganici (inclusiv coordinativi) și organometalici Procesarea și interpretarea datelor spectroscopice Dezvoltarea abilității de a determina structura moleculară în soluție sau stare solidă a compușilor anorganici, organici și organometalici cu ajutorul datelor obținute din spectrele RMN Utilizarea spectroscopiei RMN în soluție în studierea sistemelor dinamice (inclusiv fluxionale) Abilitatea de a utiliza datele structurale ale compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici și organometalici, obținute prin difracție de raze X pe monocristal Utilizarea datelor de difracție de raze X pe monocristal în identificarea de aspecte din domeniul chimiei supramoleculare Utilizarea softurilor specifice pentru prelucrarea spectrelor RMN și a datelor de difracție de raze X pe monocristal Abilitatea de a înțelege și interpreta date complementare pentru caracterizarea compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici și organometalici, de a exprima și argumenta interpretarea datelor pe baza corelării rezultatelor și a comparării cu date din literatura de specialitate
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 în limba română și într-o limbă de circulație internațională, cu utilizarea metodelor moderne de informare și comunicare (soft specific, căutare în baze de date) Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate Abilitatea de a întocmi referate scrise și de a susține public aceste referate

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> Dobândirea de noțiuni privind caracterizarea structurală a compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici și organometalici
7.2. Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Dobândirea cunoștințelor teoretice privind spectroscopia RMN și difracția de raze X pe monocristal pentru investigarea și identificarea structurii moleculare în soluție și în stare solidă Utilizarea tehnicilor RMN pentru caracterizarea structurală în soluție a compușilor organici, organometalici și a compușilor coordinativi, inclusiv studierea de procese dinamice în soluție Utilizarea difracției de raze X pe monocristal, inclusiv în investigarea aspectelor de chimie supramoleculară

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații:
8.1.1. Rezonanța Magnetică Nucleară - principiul metodei; izotopi activi RMN, standarde interne și externe, parametri spectrali	Prelegerea; Explicația; Conversația	1 ora

8.1.2. Spectroscopie RMN multinuclear – ^1H , ^{13}C	Prelegerea; Explicația; Conversația	1 ora
8.1.3. Spectroscopie RMN multinuclear – ^{19}F , ^{31}P și alți izotopi activi RMN ai unor nemetale	Prelegerea; Explicația; Conversația	1 ora
8.1.4. Spectroscopie RMN multinuclear – izotopi activi RMN ai unor metale; cuplajul spin-spin cu nuclee cu abundență 100% sau mai mică de <100% - sateliți	Prelegerea; Explicația; Conversația	1 ora
8.1.5. Spectroscopie RMN. RMN bidimensional	Prelegerea; Explicația; Conversația	1 ora
8.1.6. Spectroscopie RMN – corelații între geometria de coordonare, numărul de semnale și deplasarea chimică în spectrele compușilor anorganici și coordinativi	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	1 ora
8.1.7. Molecule fluxionale	Prelegerea; Explicația; Conversația	1 ora
8.1.8. Spectroscopie RMN – RMN dinamic, parametri cinetici și termodinamici	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	1 ora
8.1.9. Difractia de raze X pe monocristal (principiul metodei și instrumentația)	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 ora
8.1.10. Interpretarea datelor obținute prin difracția de raze X pe monocristal. Descrierea și interpretarea fișierelor cif, a tabelelor cristalografice, a parametrilor atomici. Raze atomice covalente, raze Van der Waals.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	1 ora
8.1.11. Interacțiuni intra- și intermoleculare. Interacțiuni necovalente – legături de hidrogen, legături hidrogen-pi, metal-pi, pi-pi stacking, metalofilice, etc.	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8.1.12. Arhitecturi supramoleculare obținute prin autoasamblare	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	
<p>Bibliografie</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. D. W. Rankin, N. W. Mitzel, C. A. Morrison, <i>Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry</i>, John Wiley & Sons, Chichester, 2013. 2. R. V. Parish, <i>NMR, NQR, EPR and Moessbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry</i>, Ellis Horwood, New York, 1990. 3. H. Friebolin, <i>Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy</i>, Wiley-VCH, Weinheim, 1998. 4. W. Massa, <i>Crystal Structure Determination</i>, Springer, Berlin, 2004. <p>Bibliografie opțională:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. I. Haiduc, J. J. Zuckerman, <i>Basic Organometallic Chemistry</i>, Walter de Gruyter, Berlin, 1985. 2. Ch. Elschenbroich, A. Salzer, <i>Organometallics - A Concise Introduction Chemistry</i>, VCH Verlag, Weinheim, 1992. 3. R. H. Crabtree, <i>The Organometallic Chemistry of The Transition Metals</i>, 3rd Ed., John Wiley & Sons, New York, 2001. 4. Kin-ya Akiba (Ed.), <i>Chemistry of Hypervalent Compounds</i>, Wiley-VCH, New York, 1999. 5. E. A. V. Ebsworth, D. W. H. Rankin, S. Cradock, <i>Structural Methods in Inorganic Chemistry</i>, Blackwell, Oxford, 1987. 6. A. F. Wells, <i>Structural Inorganic Chemistry</i>, 4th Ed., Oxford Univ. Press, London, 1975. 		
8.2 Seminar	Metode de predare	Observații
8.2.1-2. Aplicații ale spectroscopie RMN în analiza structurală a compușilor organometalici și coordinativi. Utilizarea de software specific (MestRENOVA). Interpretarea spectrelor ^1H și ^{13}C – considerații structurale bazate pe deplasări chimice ^1H și ^{13}C , valoarea integralelor semnalelor de rezonanță ^1H , cuplaje spin-spin din spectrele ^1H RMN ale compușilor organometalici.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	4 ore

8.2.3-4. Aplicații ale spectroscopie RMN în analiza structurală a compușilor organometalici și coordinativi. Interpretarea spectrelor bidimensionale. Atribuirea semnalelor de rezonanță ^1H și ^{13}C .	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	4 ore
8.2.5-6. Interpretarea de spectre RMN (^{19}F , ^{31}P , etc.) ale unor compuși anorganici și organometalici. Atribuirea structurii în soluție pe baza spectrelor RMN multinucleare. Simularea spectrelor RMN.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	4 ore
8.2.7-8. Aplicații RMN în studiul unor procese dinamice. Spectre la temperatura variabilă. Parametri cinetici și termodinamici	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	4 ore
8.2.9-10. Analiza și interpretarea datelor de difracție de raze X pe monocristal. Utilizarea de software specific (Diamond, Mercury, Platon, etc.) și baze de date specifice (CSD, ICSD, etc.)	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	4 ore
8.2.11-12 Utilizarea programelor specifice pentru pregătire datelor pentru publicare	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	4 ore
Colecțiile din ultimii 5 ani ai revistelor Angew. Chem. Int. Ed.; Chem. Eur. J.; Eur. J. Inorg. Chem; Chem. Commun.; Chem. Sci.; Inorg. Chem.; Dalton Trans. și Organometallics		

9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

- Conținutul acestei discipline este foarte util în evaluarea/asigurarea calității produșilor de sinteză chimică și a materialelor, venind în întâmpinarea nevoilor angajatorilor situați atât în sfera producției, cât și în cea a desfacerii produselor de sinteză chimică.
- Cunoașterea și utilizarea acestor metode moderne și complexe de caracterizare a compușilor anorganici, organici, organometalici sau a complexilor este în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 1 – RNCIS.

10. Evaluare# (doar pentru doctoranzii care solicită acest lucru)

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate	Examen oral	60%
	Modul de gândire, corectitudinea și argumentarea soluțiilor propuse		
10.5 Seminar/laborator	Activitatea desfășurată la seminar	Prezentarea analizei de spectre și structuri	40%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> • Nota 5 (cinci) 			

Data completării
01 septembrie 2018

Semnătura titularului de curs

Cristian Filaret

Semnătura titularului de seminar

Cristian Filaret

Data avizării în CSDC
05 septembrie 2018

Semnătura directorului SDC
Prof. Dr. Ion Grosu
Membru Corespondent al Academiei Române

Ion Grosu