

## 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	Masterat
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Tehnici moderne de sinteză în chimie / chimist

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Proprietățile magnetice și spectrale ale compușilor coordinativi și organometalici - CMM6639</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	Lector Dr. Noémi DEAK						
2.3 Titularul activităților de laborator	Lector Dr. Noémi DEAK						
2.4 Anul de studiu	II	2.5 Semestrul	3	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	DS

### 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					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					21
Tutoriat					4
Examinări (scris)					4
Alte activități: -					-
3.7 Total ore studiu individual	69				
3.8 Total ore pe semestru	125				
3.9 Numărul de credite	5				

### 4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> <li>Nu este cazul</li> </ul>
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> <li>Cunoștințe de bază în chimie anorganică și organometalică</li> </ul>

### 5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Se va stimula participarea interactivă</li> <li>Se pune la dispoziția studenților suportul de curs în format electronic</li> <li>Sală prevăzută cu tablă și echipament tehnic pentru prezentări (calculator, software adecvat, videoproiector)</li> </ul>
-------------------------------	--

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții au acces la baze de date (baze de date de specialitate la care universitatea și bibliotecă centrală au abonament)</li> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Laborator echipat pentru desfășurarea lucrărilor – apă, curent, nișă, sticlărie de laborator, reactivi</li> <li>• Sală de seminar prevăzută cu tablă</li> <li>• Prezența este obligatorie în condițiile stabilite prin regulament</li> <li>• Respectarea normelor de conduită și a normelor de protecție a muncii este obligatorie. Studenții se vor prezenta la laborator cu echipament de protecție corespunzător (halat, ochelari de protecție, mănuși). Este interzis accesul cu mâncare/băutură în laborator</li> <li>• Sarcinile pe care trebuie să le îndeplinească studentul pe parcursul ședinței de laborator sunt bine definite și repetate cu studenții la începutul activității.</li> <li>• Studenții se vor prezenta la laborator cu referatul lucrării elaborat și cu informațiile referitoare la modul de lucru însușite, având la dispoziție materialul bibliografic necesar.</li> <li>• Nu va fi acceptată întârzierea</li> <li>• Studenții nu pot lăsa nesupravegheată o instalație în funcțiune</li> <li>• La sfârșitul fiecărei ședințe studenții vor nota în caietul de laborator observațiile la lucrarea efectuată.</li> <li>• Predarea referatului de laborator se va face conform graficului stabilit la începutul semestrului</li> <li>• Studenții se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închise</li> </ul>

## 6. Competențele specifice acumulate

<b>Competențe profesionale</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Caracterizarea structurală complexă de compuși anorganici, bioanorganici, organici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• Identificarea metodelor adecvate și specifice pentru caracterizarea structurală a compușilor anorganici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• Stabilirea modalităților de atribuire a structurii și corelarea informației oferite de diverse metode</li> <li>• Utilizarea corectă și adecvată a metodelor specifice de caracterizare structurală a compușilor anorganici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• Analiza critică a metodelor de caracterizare structurală a compușilor anorganici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• Elaborarea unui proiect bazat pe date de literatură și experimentale pentru caracterizarea structurală completă a unui reprezentant din clasele de compuși studiate</li> <li>• Studiul relației structură-proprietăți în design-ul, obținerea și caracterizarea unor materiale cu diverse aplicații</li> <li>• Descrierea și utilizarea de concepte, teorii și metode avansate în identificarea particularităților structurale care conferă unor compuși potențial aplicativ</li> <li>• Stabilirea modalităților teoretice și experimentale de corelare structură-proprietăți</li> <li>• Utilizarea relației structură-proprietăți în determinarea potențialului aplicativ al compușilor anorganici, organometalici și supramoleculari</li> <li>• Analiza critică a diverselor abordări teoretice și experimentale în determinarea proprietăților care recomandă un compus/o clasă de compuși pentru utilizarea ca material</li> </ul>
<b>Competențe transversale</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Informarea și documentarea permanentă în domeniul de activitate</li> </ul>

## 7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Dobândirea de cunoștințe teoretice și practice referitoare la relația structură-proprietăți în chimia coordinativă și organometalică</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Însușirea cunoștințelor referitoare la investigarea structurală a compușilor anorganici și organometalici prin spectroscopie RMN, spectrometrie de masă, RES, spectroscopie electronică și vibrațională, difracție de raze X</li> <li>• Dobândirea de abilități în interpretarea datelor spectroscopice</li> <li>• Relația structură-proprietăți – aplicații</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Structura și reactivitatea moleculelor anorganice, organometalice, coordinative. Relația structură – proprietăți, clase de compuși anorganici. Metode de caracterizare	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea	2 ore / săptămână
8.1.2. Spectroscopie RMN. RMN multinuclear	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea	2 ore / săptămână
8.1.3. Spectroscopie RMN. RMN multinuclear (continuare)	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	2 ore / săptămână

	Problematizarea	
8.1.4. Spectroscopie RMN. RMN bidimensional	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea	2 ore / săptămâna
8.1.5. Spectroscopie RMN. RMN dinamic, parametri cinetici și termodinamici	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea	2 ore / săptămâna
8.1.6. Spectrometrie de masă. Aplicații	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea	2 ore / săptămâna
8.1.7. Spectroscopie IR	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea	2 ore / săptămâna
8.1.8. Proprietăți magnetice	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea	2 ore / săptămâna
8.1.9. Spectroscopie Raman. Spectroscopie Mössbauer	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea	2 ore / săptămâna
8.1.10. Proprietăți spectrale ale combinațiilor coordinative: tranziții electronice, spectre electronice	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea	2 ore / săptămâna
8.1.11. Difracție de raze X pe monocristal și pe pulbere	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea	2 ore / săptămâna
8.1.12. Difracție de raze X pe monocristal și pe pulbere (continuare)	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea	2 ore / săptămâna
8.1.13. Descrierea structurii și atribuirea proprietăților compușilor pe baza datelor spectrale complementare	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea	2 ore / săptămâna
8.1.14. Descrierea structurii și atribuirea proprietăților compușilor pe baza datelor spectrale complementare (continuare)	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea Problematizarea	2 ore / săptămâna
<b>Bibliografie</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. E. A. V. Ebswoth, D. W. H. Rankin, S. Cradock, K. Raymond, Structural Methods in Inorganic Chemistry, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1999.</li> <li>2. K. Nakamoto, Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds: Part A: Theory and Applications in Inorganic Chemistry, John Wiley &amp; Sons inc., 2009.</li> <li>3. A. Silvestru, Spectrometrie de masă, Editura Casa Cărții de Știință: Cluj-Napoca, 2005.</li> <li>4. R. V. Parish, NMR, NQR, EPR and Moessbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry, Ellis Horwood: Chichester, 1990.</li> <li>5. J. Huheey, E. Keiter, R. Keiter, Inorganic Chemistry, Principles of Structure and Reactivity, Harper Collins College Publishers 1993</li> <li>6. K. Nakamoto, Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Part A – Theory and Applications in Inorganic Chemistry, 6th Ed., John Wiley &amp; Sons: New York, 2008.</li> </ol>		
<b>8.2 Seminar / laborator</b>	<b>Metode de predare</b>	<b>Observații</b>
8.2.1-6 Aplicații în analiza structurală a compușilor organometalici și coordinativi prin spectroscopie RMN.	Experimentul; Explicația;	Lucrările se vor efectua în mai

Aplicații RMN în studiul unor procese dinamice. Simularea spectrelor RMN. Utilizarea software specific (Topspin, MestReNova) (12h)	Conversația; Descrierea; Problematizarea;	multe unități, cu numărul de ore indicat la fiecare unitate. Organizarea lucrărilor se va discuta la începutul semestrului.
8.2.7-8 Analiza și interpretarea spectrelor de masă. Utilizarea software specific (Maspec, MestReNova, Xcalibur) (4h)	Conversația; Descrierea; Dezbateră Problematizarea;	
8.2.9-10. Aplicații în analiza structurală a compușilor organometalici și coordinativi prin IR, Raman, RES, Mössbauer (4h)	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.11-12 Analiza și interpretarea datelor de difracție de raze X. Utilizarea software specific (Diamond, Mercury, Platon, etc.) și baze de date specifice (CSD, ICSD, COD, etc.) (4h)	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	
8.2.13-14 Studii structurale asupra unor compuși organometalici și coordinativi prin metode complementare (4h)	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea;	

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

<ul style="list-style-type: none"> <li>Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina <i>Proprietățile magnetice și spectrale ale compușilor coordinativi și organometalici</i> studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele din Suplimentul la diploma și calificările din ANC</li> </ul>
---

## 10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	<ul style="list-style-type: none"> <li>corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs</li> <li>rezolvarea corectă a problemelor</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Examen scris – accesul la examen este condiționat de realizarea lucrărilor practice</li> <li>Conform regulamentului ECST al UBB, intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen iar fraudă la examen se pedepsește prin exmatriculare.</li> </ul>	50%
10.5 Seminar/laborator	<ul style="list-style-type: none"> <li>corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la lucrările practice</li> <li>activitatea desfășurată în cadrul lucrărilor practice</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Realizarea tuturor lucrărilor practice conform graficului stabilit la începutul semestrului.</li> <li>Realizarea unui raport/studiu de caz</li> </ul>	50%

	• calitatea referatelor pregătite	• Elaborarea și prezentarea raportului	
10.6 Standard minim de performanță			
• Nota 5 (cinci) atât la raportul de laborator cât și la examen conform baremului			

Data completării  
04.04.2023

Semnătura titularului de curs  
Lector Dr. Noémi DEAK



Semnătura titularului de seminar  
Lector Dr. Noémi DEAK



Data avizării în departament

10.04.2023

Semnătura directorului de departament

Prof. Habil. Dr. Ing. Paizs Csaba

