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 Departamentul	Chimie
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			Analiză Structurală în Chimie - **CLR2076**					
2.2 Titularul activităților de curs			Conf. Dr. Ing. Castelia Cristea (modul organică) Conf. Dr. Ciprian I. Rat (modul anorganică)					
2.3 Titularul activităților de seminar			Lect. Dr. Andreea Crișan (modul organică) Conf. Dr. Ciprian I. Rat (modul anorganică)					
2.4 Anul de studiu	**III**	2.5 Semestrul	**5**	2.6. Tipul de evaluare	**E**	2.7 Regimul disciplinei		**DF**

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					5
Pregătire seminare/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat					2
Examinări					3
Alte activități:					

3.7 Total ore studiu individual	44
3.8 Total ore pe semestru	100
3.9 Numărul de credite	4

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	• Chimie Generală • Chimie Anorganică • Chimie Organică
4.2 de competențe	• Nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	• Studenții vor primi suportul de curs în format pdf. • Se va stimula participarea interactivă. • Studenții vor păstra închise telefoanele mobile pe durata prelegerilor, seminarelor și a examenului.
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	• Studenții se vor prezenta la seminar cu suportul bibliografic indicat în cadrul seminarelor anterioare.

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	• Să își însușească noțiunile, teoriile și modelele de bază utilizate în analiza compușilor chimici prin metode fizice (spectroscopie IR, UV-Viz, RMN și spectrometrie de masă) • Identificarea metodelor spectroscopice (care fac obiectului cursului) aplicabile în analiza structurală a compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici și organometalici • Să utilizeze cunoștințele de bază din domeniul chimiei generale, chimiei anorganice (inclusiv coordinative), chimiei organice și chimiei organometalice pentru explicarea și interpretarea parametrilor spectrali obținuți în urma analizei prin metode spectroscopice • Să dezvolte abilitatea de a determina structura moleculară în soluție sau în stare solidă a compușilor anorganici, organici și organometalici simpli cu ajutorul datelor spectroscopice • Să demonstreze capacitatea de a selecta criterii și metode adecvate în vederea alegerii și aplicării unor metode de analiză prin metode spectroscopice a compușilor anorganici, organici și organometalici simpli • Procesarea și interpretarea datelor spectroscopice • Să formuleze, să dezvolte și să aplice creativ soluții pentru probleme de analiză fizică prin metode spectroscopice a compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici și organometalici, în contexte bine definite
Competențe transversale	• Rezolvarea sarcinilor profesionale 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)
Competențe digitale	• Competențe în utilizare spectrometrelor UV-Vis și IR • Competențe în utilizarea unor pachete software specifice pentru înregistrarea de spectre UV-Vis, IR • Competențe în utilizarea pachetelor software pentru vizualizarea și analiza spectrelor UV-Vis, IR, RMN și MS • Competențe în utilizarea unor baze de date cu date spectroscopice pentru interpretarea spectrelor

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	• Dobândirea de noțiuni privind caracterizarea structurală a compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici și organometalici simpli
7.2 Obiectivele specifice	• Să înțeleagă principiul fizic al interacțiunii radiației electromagnetice cu compușii chimici • Să identifice metodele spectroscopice adecvate pentru caracterizarea structurală a compușilor anorganici, organometalici și a compușilor coordinativi simpli • Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază privind spectroscopia IR și Raman pentru investigarea și identificarea structurii moleculare în soluție și în stare solidă

	• Dobândirea cunoștințelor teoretice privind spectroscopia UV-Viz pentru investigarea și identificarea structurii moleculare în soluție • Utilizarea tehnicilor RMN pentru caracterizarea structurală în soluție a compușilor organici, organometalici și a compușilor coordinativi • Dobândirea cunoștințelor teoretice privind spectrometria de masă pentru investigarea și identificarea structurii moleculare, precum și utilizarea datelor structurale obținute prin această metodă

8. Conținuturi

8.1 Curs (modul organică)	Metode de predare	Observații
Interacțiunea radiației electromagnetice cu structuri moleculare	Prelegere Suport PowerPoint	1 prelegere (2 ore)
Spectroscopie IR (principii și reguli de selecție, principiul aparaturii, tipuri de vibrații, factori structurali care influențează frecvențele caracteristice de grup)	Prelegere Suport PowerPoint	1 prelegere (2 ore)
Rezonanța Magnetică Nucleară (principiul fizic principiul aparaturii) ^{1}H-RMN (parametri spectrali: deplasarea chimică)	Prelegere Suport PowerPoint	1 prelegere (2 ore)
^{1}H-RMN: Cuplajul spin-spin și integrala semnalelor în spectre ale compușilor organici	Prelegere Suport PowerPoint	1 prelegere (2 ore)
^{13}C-RMN (deplasare chimică, spectre cu decuplare de bandă largă, cu decuplare parțială, APT, DEPT)	Prelegere Suport PowerPoint	1 prelegere (2 ore)
Spectrometrie de masă (principiul de bază, principiul aparaturii, procese de fragmentare în EI-MS)	Prelegere Suport PowerPoint	1 prelegere (2 ore)
Spectroscopie UV-Viz (principii si reguli de selecție, principiul aparaturii, tipuri de tranziții electronice în compuși organici nesaturați si aromatici, factori structurali care determină poziția benzilor de absorbție)	Prelegere Suport PowerPoint	1 prelegere (2 ore)
Bibliografie: Suportul PowerPoint al prelegerii de la curs în format pdf. Obligatorie: 1. L. David, C. Cristea, O. Cozar, L. Găină, „*Identificarea structurii moleculare prin metode spectroscopice*”, Ed. Presa Universitară Clujeană, Cluj-Napoca 2004. Opțională: 2. I. Pogany, M. Banciu, „*Metode fizice în chimia organică*” Ed. Științifică, București 1972. 3. S. Mager, „*Analiza Structurală Organică*”, *Ed. St. Enciclopedică*, București 1979. 4. B. Stuart, „*IR spectroscopy fundamentals and applications*”, John Wiley and Sons, Chichester 2004.		
8.1 Curs (modul anorganică)		
Spectroscopie IR și Raman (spectroscopie Raman – principiul aparaturii; moduri de vibrație active IR și/sau Raman pentru compuși și anioni anorganici cu diferite simetrii)	Prelegerea / Explicația Conversația / Descrierea Problematizarea	2 cursuri (4 ore)
Spectroscopie UV-Viz (tabele de microstări; termeni simbol pentru diferite configurații electronice; energia stărilor; scindarea termenilor ionilor în câmp O_h; spectre ale compușilor cu ioni cu configurații d^1 și d^9; diagrame Tanabe-Sugano pentru configurații d^2 și d^8; calculul Δ_o și B; benzi de transfer de sarcină ligand-metal și metal ligand)	Prelegerea / Explicația Conversația / Descrierea Problematizarea	2 cursuri (4 ore)
Spectroscopie RMN (izotopi activ RMN ai altor	Prelegerea / Explicația	1 curs (2 ore)

elemente decât ^{1}H și ^{13}C; deplasări chimice în spectrele RMN ale altor elemente decât ^{1}H și ^{13}C; corelații între geometria de coordinare, numărul de semnale și deplasarea chimică în spectrele compușilor anorganici și coordinativi)	Conversația / Descrierea Problematizarea	
Spectroscopie RMN (continuare) și RES (cuplajul spin-spin cu nuclee cu abundență 100% sau mai mică de <100% - sateliți; spectroscopie RES – principiul metodei; cuplajul hiperfin – constanta de cuplaj hiperfin)	Prelegerea / Explicația Conversația / Descrierea Problematizarea	1 curs (2 ore)
Spectrometrie de masă (clasificarea elementelor în funcție de numărul de izotopi; tehnici de ionizare ESI, APCI, APPI și MALDI; spectre de înaltă rezoluție; utilizarea ESI pentru caracterizarea compușilor anorganici, coordinativi și organometalici)	Prelegerea / Explicația Conversația / Descrierea Problematizarea	1 curs (2 ore)
Bibliografie obligatorie: 1. R. Micu Semeniuc, *Structura combinațiilor anorganice*, curs litografiat: Cluj-Napoca, 1978. 2. A. Pui, N. Cornei, D. G. Dănuț, *Analiză structurală anorganică*, Performantica: Iași, 2008. 3. Suport de curs, prezentare PowerPoint. Bibliografie opțională: 1. E. A. V. Ebsworth, D. W. H. Rankin, S. Cradock, *Structural Methods in Inorganic Chemistry*, Blackwell: Oxford, 1987. 2. D. W. Rankin, N. W. Mitzel, C. A. Morrison, *Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry*, John Wiley & Sons: Chichester, 2013. 3. R. V. Parish, *NMR, NQR, EPR and Moessbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry*, Ellis Horwood: New York, 1990. 4. W. Henderson, J. S. McIndoe, *Mass Spectrometry of Inorganic, Coordination and Organometallic* Compounds, John Wiley & Sons: Chichester, 2005. 5. K. Nakamoto, *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Part A – Theory and Applications in Inorganic Chemistry*, 6th Ed., John Wiley & Sons: New York, 2008. 6. E. D. Solomon, A. B. P. Lever, *Inorganic Electronic Structure and* Spectroscopy, Vol. 1 - Methodology, John Wiley & Sons: Hoboken, 2006. 7. M. T. Weller, N. A. Young, *Characterisation Methods in Inorganic Chemistry*, Oxford University Press: Oxford, 2018.		
8.2 Seminar / laborator (modul organică)	Metode de predare	Observații
Atribuiri structurale bazate pe absorbții caracteristice înregistrate în spectrele IR ale compușilor organici (hidrocarburi și derivați funcționali)	Interpretare spectre IR compuși organici folosind date spectrale din bazele de date	1 seminar (2 ore)
Atribuiri structurale bazate pe interpretarea deplasării chimice din spectrele ^{1}H-RMN ale compușilor organici	Interpretare spectre ^{1}H-RMN	1 seminar (2 ore)
Atribuiri structurale bazate pe interpretarea cuplajelor spin-spin homonucleare și a valorilor integralelor din spectrele ^{1}H-RMN ale compușilor organici	Interpretare spectre ^{1}H-RMN	1 seminar (2 ore)
Atribuiri structurale bazate pe interpretarea spectrelor ^{13}C-RMN ale compușilor organici (deplasare chimica, spectre cu decuplare parțială, APT, DEPT).	Interpretare spectre ^{13}C-RMN	1 seminar (2 ore)
Atribuiri structurale bazate pe interpretarea spectrelor de masă ale compușilor organici (ion molecular, peak de	Interpretare spectre EI-MS	1 seminar (2 ore)

bază, procese de fragmentare)		
Atribuiri structurale bazate pe absorbții caracteristice înregistrate în spectrele UV-Viz ale compușilor organici (conținând cromoforul butadienic și carbonil *α,β*-nesaturat)	Interpretare spectre UV-Viz compuși organici	1 seminar (2 ore)
Atribuirea formulei structurale a unor compuși organici prin interpretarea combinată a spectrelor IR, SM, RMN și UV-Viz (studiu de caz).	Interpretare spectre IR, RMN, SM si UV-Vis compuși organici cu funcțiuni simple Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Bibliografie 1. A. T. Balaban, M. Banciu, I. Pogany, „*Aplicații ale metodelor fizice în chimia organică*”, Ed. Științifică și Enciclopedică, București 1983. 2. L. D. Field, S. Sternhell, J. R. Kalman, „*Organic structures from spectra*”, 4th Ed, John Wiley and Sons, 2007.		
8.2 Seminar / laborator (modul anorganică)		
Înregistrarea de spectre IR ale unor compuși anorganici și coordinativi. Prelucrarea datelor spectroscopice	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 laborator (2 ore)
Atribuirea structurii pe bază de spectre IR și Raman	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 laborator (2 ore)
Înregistrarea de spectre UV-Vis ale unor compuși anorganici și coordinativi. Prelucrarea datelor spectroscopice	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 laborator (2 ore)
Interpretarea de spectre UV-Viz ale compușilor coordinativi d^1, d^2, d^8 și d^9. Determinarea Δ_o și B pe baza spectrelor UV-Viz	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 laborator (2 ore)
Prelucrarea datelor de spectroscopie RMN	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 laborator (2 ore)
Interpretarea de spectre RMN (^{19}F, ^{31}P, etc.) ale unor compuși anorganici, coordinativi și organometalici. Atribuirea structurii în soluție pe baza spectrelor RMN multinucleare	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 laborator (2 ore)
Prelucrarea datelor de spectrometrie de masă. Interpretarea de spectre de masă ESI și APCI ale compușilor anorganici, coordinativi și organometalici	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 laborator (2 ore)
Bibliografia de la curs pentru seminar. 1. Referatele și literatura oferită de titularul de curs (modul anorganică).		

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

- Conținutul acestei discipline este foarte util in 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 sinteza chimică.
- Cunoașterea si utilizarea metodelor spectroscopice de caracterizare a compușilor anorganici,

organici, organometalici sau a complecșilor este în concordanță cu competențele din Suplimentul la diplomă și calificările conform ANC.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
Modul organică			
10.4 Curs	Cunoașterea principiului fizic care stă la baza înregistrării spectrelor IR, UV-Viz, RMN și SM.	Examen scris. Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	100%
	Identificarea parametrilor spectrali tipici fiecărei metode spectroscopice studiate.		
	Capacitatea de a efectua atribuiri structurale corecte bazate pe analiza combinată a parametrilor spectrali specifici fiecărei metode spectroscopice studiate.		
10.6 Standard minim de performanță			
• Nota 5 (cinci) la examenul scris conform punctajului din barem.			
Modul anorganică			
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la curs	Examen scris	100%
10.6 Standard minim de performanță			
• Nota 5 (cinci) la examenul scris conform baremului.			
Nota finală			
Media notelor obținute la cele 2 module (organică, respectiv anorganică)			

Data completării
14.03.2024

Semnătura titularului de curs
Conf. Dr. Castelia Cristea



Conf. Dr. Ciprian I. Rat



Semnătura titularului de seminar/laborator
Lect. Dr. Andreea Crișan



Conf. Dr. Ciprian I. Rat



Data avizării în departament

16.04.2024

Semnătura directorului de departament
Prof. Dr. habil. ing. Monica Ioana Toșa

