FIŞA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituţia de învăţământ superior	Universitatea „Babeş-Bolyai” Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Facultatea de Chimie şi Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Chimie si Inginerie Chimica Linia Maghiara
1.4 Domeniul de studii	Inginerie Chimică, Chimie
1.5 Ciclul de studii	Licenţă
1.6 Programul de studiu / Calificarea	**CISOPC maghiara**/Inginer Chimist **Chimie maghiara**/Chimist

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei			**Analiză Structurală in Chimie**				
Codul disciplinei			**CLM2076**				
2.2 Titularul activităţilor de curs			**Conf. Dr. Emese Gál**				
2.3 Titularul activităţilor de seminar			**Conf. Dr. Emese Gál**				
2.4 Anul de studiu	IV, III	2.5 Semestrul	5	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	DF

3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităţilor 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 învăţământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuţia fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie şi notiţe					17
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate şi pe teren					7
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii şi eseuri					14
Tutoriat					3
Examinări					3
Alte activităţi:					

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

4. Precondiţii (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	• Chimie Generală • Chimie Organică
4.2 de competenţe	• Nu este cazul

5. Condiţii (acolo unde este cazul)

5.1 De desfăşurare a cursului	• Studenţii vor primi suportul de curs • Se va stimula participarea interactivă • Nu va fi acceptată întârzierea
5.2 De desfăşurare a seminarului/laboratorului	• Studenţii se vor prezenta la seminar cu suportul bibliografic indicat in cadrul seminariilor anterioare.

6. Competenţele specifice acumulate

Competenţe profesionale	• Să îşi însuşească noţiunile, teoriile şi modelele de bază utilizate în analiza prin metode fizice (spectroscopie IR, UV-Viz, RMN si Spectrometrie de masă-MS) a compuşilor organici. • Să utilizeze cunoştinţele de bază din domeniul chimiei generale şi a chimiei organice pentru explicarea si interpretarea datelor experimentale obtinute în urma analizei prin metode spectroscopice (IR, UV-Viz, RMN şi MS) a compușilor organici. • Să dezvolte deprinderi de utilizare corectă a metodelor de analiza prin metode fizice (spectroscopie IR, UV-Viz, RMN si Spectrometrie de masă) în determinarea structurii compușilor organici. • Să demonstreze capacitatea de a selecta criterii si metode adecvate în vederea alegerii şi aplicarii unor metode de analiza prin metode spectroscopice a compușilor organici. • Să formuleze, să dezvolte şi să aplice creativ solutii pentru probleme de analiza fizico-chimica prin metode spectroscopice a compușilor organici în contexte bine definite.
Competenţe transversale	• Rezolvarea sarcinilor profesionale în concordanţă cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru • Informarea şi documentarea în limba maghiară, română şi într-o limbă de circulaţie internaţională, cu utilizarea metodelor moderne de informare şi comunicare (soft specific, căutare in baze de date)

7. Obiectivele disciplinei (reieşind din grila competenţelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	• Acumularea cunoştinţelor de specialitate referitoare la analiza structurală a compuşilor organici prin metode spectroscopice.
7.2 Obiectivele specifice	• Să înţeleagă principiul fizico-chimic al interacţiunii radiaţiei electromagnetice cu structuri moleculare. • Să înveţe conceptele de bază ale spectroscopiei în domeniul infraroşu (IR), ale spectroscopiei în domeniul ultraviolet-vizibil (UV-Vis), ale rezonanţei magnetice nucleare (RMN) şi ale spectrometriei de masă (MS). • Să înţeleagă principiul aparaturii utilizate în spectroscopia IR, UV-Vis, RMN si în MS • Să dezvolte abilităţi de interpretatre a spectrelor IR, UV-Viz, RMN si MS în scopul atribuirilor structurale ale compuşilor organici, anorganici şi de coordinare

8. Conţinuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observaţii
8.1.1. Etape de cercetare științifică în Chimia Organica. Metode de separare si purificare a substanțelor organice. Analiza GC si HPLC. Analiza elementală	prelegere	2 ore/curs
8.1.2. Determinarea masei moleculare. Spectrometrie de Masă - MS (principiul de bază, principiul aparaturii, reguli de fragmentare). Metoda analitica GC-MS	prelegere	2 ore/curs
8.1.3. Determinarea structurii prin metode de difracție (raze X, neutroni si electroni) si prin metoda fotoelectronica (PES prin XPS si UPS)	prelegere	2 ore/curs
8.1.3. Determinarea structurii moleculare prin metode de absorpție (UV-Vis, IR, MW si NMR). Interacţiunea radiaţiei electromagnetice cu structuri moleculare	prelegere	2 ore/curs

8.1.4. Spectroscopie UV-Vis (principii si reguli de selecţie, principiul aparaturii, tipuri de tranziţii electronice, factori structurali care determină poziţia benzilor de absorbţie)	prelegere	2 ore/curs
8.1.5. Corelarea spectrelor UV-Vis cu efectele electronice, corelarea spectrelor UV-Vis cu efectele sterice.	prelegere	2 ore/curs
8.1.6. Spectroscopie IR (principii si reguli de selecţie, principiul aparaturii, tipuri de vibraţii, factori structurali care influențează frecvenţele caracteristice de grup)	prelegere	2 ore/curs
8.1.7. Corelarea spectrelor IR cu structura moleculara. Tabele de corelare IR. Interpretarea spectrelor IR.	prelegere	2 ore/curs
8.1.8. Spectroscopia MW si ESR.	prelegere	2 ore/curs
8.1.9. Spectrometrie de masă (principiul de bază, principiul aparaturii)	prelegere	2 ore/curs
8.1.9. Spectrometrie de masă, procese de fragmentare în EI-MS.	prelegere	2 ore/curs
8.1.10. Spectroscopia de Rezonanţa Magnetică Nucleară - principii si reguli de selecţie	prelegere	2 ore/curs
8.1.11. Spectroscopia de Rezonanţa Magnetică Nucleară – deplasarea chimică, factori care acționează asupra constantei de ecranare	prelegere	2 ore/curs
8.1.12. Spectroscopia de Rezonanţa Magnetică Nucleară – cuplajul spin-spin, tipuri de cuplaje, sisteme de spin, simplificarea spectrelor ^{1}H-RMN complexe	prelegere	2 ore/curs
8.1.14. Atribuirea structurii moleculare prin interpretarea combinată a spectrelor MS, UV-Vis, IR și RMN	prelegere	2 ore/curs

Bibliografie

Obligatorie:

1. J. Bodis, A szerves kémia alapjai, Editura Presa Universitară Clujeană, 2006

2. L. David, C. Cristea, O. Cozar, L. Găină, *"Identificarea structurii moleculare prin metode spectroscopice"*, Editura Presa Universitară Clujeană, 2004

Optională:

1. I. Pogany, M. Banciu, "*Metode fizice în chimia organică*" ed. Stiinţifică, Bucureşti 1972.

2. S. Mager, «*Analiza Structurală Organică» Ed St. Enciclopedică, Bucureşti 1979.*

3. B. Stuart „*IR spectroscopy fundamentals and applications"* John Wiley and Sons, 2004

4. K. Nakamoto, „*Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds"* John Wiley and Sons, 1986.

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observaţii
8.2.1. Caracteristici ale radiatiei electromagnetice	Studiu de caz	1 seminar
8.2.2. Spectrometrie UV-Vis, condiționarea probelor, înregistrarea spectrelor, atribuiri structurale bazate pe absorbţii caracteristice înregistrate în spectrele UV-Vis.	Interpretare spectre UV-Vis compusi organici	1 laborator
8.2.3. Spectrometre FT-IR, condiţionarea probelor şi înregistrarea spectrelor IR.	Interpretare spectre IR compusi organici.	1 laborator

	Studiu de caz	
8.2.4. Atribuiri structurale bazate pe absorbţii caracteristice înregistrate în spectrele IR.	Studiu de caz	1 laborator
8.2.5. Spectrometre de MS, înregistrarea spectrelor, atribuiri structurale bazate pe fragmentări specifice.	Interpretare spectre MS compusi organici. Interpretare spectre EI-MS	1 laborator
8.2.6. Spectrometrie MS- atribuiri structurale bazate pe fragmentări specifice.	Studiu de caz	1 seminar
8.2.7. Spectrometre RMN, condiţionarea probelor, înregistrarea spectrelor RMN.	Înregistrare spectre. Interpretare spectre.	1 laborator
8.2.8. Atribuiri structurale bazate pe interpretarea deplasării chimice din spectrele ^{1}H-RMN	Interpretare spectre ^{1}H-RMN	1 seminar
8.2.9. Atribuiri structurale bazate pe interpretarea cuplajelor si valorii integralelor din spectrele ^{1}H-RMN	Interpretare spectre ^{1}H-RMN	1 seminar
8.2.10. Atribuiri structurale bazate pe interpretarea cuplajelor si valorii integralelor din spectrele ^{1}H-RMN	Studiu de caz	1 seminar
8.2.11. Atribuiri structurale bazate pe interpretarea spectrelor ^{13}C RMN	Interpretare spectre ^{13}C-RMN	1 laborator
8.2.12. Atribuirea structurii compuşilor organici prin interpretarea combinată a spectrelor IR, UV-Vis, MS şi RMN.	Studii de caz	3 seminar
Bibliografie 1. A. T. Balaban, M. Banciu, I. Pogany, *"Aplicatii ale metodelor fizice în chimia organică"*, ed. Stiinţifică şi Enciclopedică, Bucuresti, 1983; 2. L. D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, „*Organic structures from spectra*" John Wiley and Sons, 2007; 3. E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon, Tables of Spectral Data.for Structure Determination of Organic Compounds, second edition, Springer-Verlag, 1989.		

9. Coroborarea conţinuturilor disciplinei cu aşteptările reprezentanţilor comunităţii epistemice, asociaţiilor profesionale şi angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

- Prin insusirea conceptelor teoretico-metodologice si abordarea aspectelor practice incluse in disciplina Analiza structurala studentii dobandesc un bagaj de cunostinte consistent, in concordanta cu competentele partiale cerute pentru ocupatiile posibile prevazute in Grila 1 – RNCIS.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Cunoaşterea principiului fizico-chimic care stă la baza înregistrării spectrelor IR, UV-Vis, RMN si de masă.	Examen scris din partea teoretica, respectiv atribuirea structurii pe baza interpretării	100%
	Cunoaşterea 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.	spectrelor lor FT-IR, UV-Vis, RMN si MS. Accesul la examen este condiţionat de rezolvarea problemelor primite pe parcursul seminariilor. Intenţia de frauda la examen se pedepseşte cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepseşte prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	
10.5 Seminar/laborator	Inţelegerea şi însuşirea problematicii tratate la curs si seminar Capacitatea de utilizare adecvată a conceptelor si metodelor	Atribuirea structurii moleculare pentru doi compuşi uzuali, pe baza interpretării spectrelor lor IR, UV-Viz, RMN si MS. Accesul la examen este condiţionat de rezolvarea problemelor primite pe parcursul seminariilor.	0%
10.6 Standard minim de performanţă			
Nota 5 (cinci) la examen pe partea teoretică, cât şi pe partea de rezolvarea problemelor. Media notelor obţinute la cele două părţi (teoretică şi rezolvat probleme). Cunoaşterea noţiunilor de baza în identificarea compuşilor organice/ anorganice. Cunoaşterea parametrilor spectrali tipici fiecăre metode spectroscopice (FT-IR, UV-Viz, ^{1}H-, ^{13}C-RMN si MS)			

Data completării	Semnătura titularului de curs	Semnătura titularului de seminar
2024.03.27	Conf. Dr. Emese Gal	Conf. Dr. Emese Gal

Data avizării în departament	Semnătura directorului de departament
2024.04.10	Prof. Dr. Ing. Paizs Csaba