**FIŞA 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 | Inginerie chimică |
| 1.5 Ciclul de studii | Licență |
| 1.6 Programul de studiu / Calificarea | Inginerie chimică: CATB, CISOPC, IB, IIPCB, ISAPM, SIMON / Inginer 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)<br>Conf. Dr. Ciprian I. Rat (modul anorganică) | | | | |
| 2.3 Titularul activităților de seminar | | | Lect. Dr. Andreea Crișan (modul organică)<br>Conf. Dr. Ciprian I. Rat (modul anorganică) | | | | |
| 2.4 Anul de studiu | **IV** | 2.5 Semestrul | **7** | 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<br>• Chimie Anorganică<br>• 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.<br>• Se va stimula participarea interactivă<br>• Studenții vor păstra închise telefoanele mobile pe durata prelegerilor, seminarelor și a examenului<br>• Nu este permisă înregistrarea de către studenți a cursului *on-line.* |
| 5.2 De desfășurare a | • Studenții se vor prezenta la seminar cu suportul bibliografic indicat |

| | |
|---|---|
| seminarului/laboratorului | în cadrul seminarelor anterioare<br>• Nu este permisă înregistrarea de către studenți a seminarului *on-line* |

**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)<br>• Identificarea metodelor spectroscopice (care fac obiectului cursului) aplicabile în analiza structurală a compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici și organometalici<br>• 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<br>• 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<br>• 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<br>• Procesarea și interpretarea datelor spectroscopice<br>• 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<br>• 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<br>• Competențe în utilizarea unor pachete software specifice pentru înregistrarea de spectre UV-Vis, IR<br>• Competențe în utilizarea pachetelor software pentru vizualizarea și analiza spectrelor UV-Vis, IR, RMN și MS<br>• 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<br>• 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<br>• Dobândirea cunoștințelor teoretice privind spectroscopia UV-Viz pentru investigarea și identificarea structurii moleculare în soluție<br>• Utilizarea tehnicilor RMN pentru caracterizarea structurală în soluție a compușilor organici, organometalici și a compușilor coordinativi<br>• 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<br>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<br>Suport PowerPoint | 1 prelegere (2 ore) |
| Rezonanța Magnetică Nucleară (principiul fizic principiul aparaturii)<br>$^{1}$H-RMN (parametri spectrali: deplasarea chimică) | Prelegere<br>Suport PowerPoint | 1 prelegere (2 ore) |
| $^{1}$H-RMN: Cuplajul spin-spin și integrala semnalelor în spectre ale compușilor organici | Prelegere<br>Suport PowerPoint | 1 prelegere (2 ore) |
| $^{13}$C-RMN (deplasare chimică, spectre cu decuplare de bandă largă, cu decuplare parțială, APT, DEPT) | Prelegere<br>Suport PowerPoint | 1 prelegere (2 ore) |
| Spectrometrie de masă (principiul de bază, principiul aparaturii, procese de fragmentare în EI-MS) | Prelegere<br>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<br>Suport PowerPoint | 1 prelegere (2 ore) |
| Bibliografie: Suportul PowerPoint al prelegerii de la curs în format pdf.<br>Obligatorie:<br>1. L. David, C. Cristea, O. Cozar, L. Găină, „*Identificarea structurii moleculare prin metode spectroscopice*”, Ed. Presa Universitară Clujeană, Cluj-Napoca 2004.<br>Opțională:<br>2. I. Pogany, M. Banciu, „*Metode fizice în chimia organică*” Ed. Științifică, București 1972.<br>3. S. Mager, „*Analiza Structurală Organică*”, *Ed. St. Enciclopedică*, București 1979.<br>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<br>Conversația /<br>Descrierea<br>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 | Prelegerea / Explicația<br>Conversația /<br>Descrierea<br>Problematizarea | 2 cursuri (4 ore) |

| | | |
|---|---|---|
| Tanabe-Sugano pentru configurații $d^2$ și $d^8$; calculul $\Delta_o$ și B; benzi de transfer de sarcină ligand-metal și metal ligand) | | |
| Spectroscopie RMN (izotopi activ RMN ai altor elemente decât $^1H$ și $^{13}C$; deplasări chimice în spectrele RMN ale altor elemente decât $^1H$ și $^{13}C$; corelații între geometria de coordinare, numărul de semnale și deplasarea chimică în spectrele compușilor anorganici și coordinativi) | Prelegerea / Explicația<br>Conversația / Descrierea<br>Problematizarea | 1 curs (2 ore) |
| 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<br>Conversația / Descrierea<br>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<br>Conversația / Descrierea<br>Problematizarea | 1 curs (2 ore) |
| Bibliografie obligatorie:<br>1. R. Micu Semeniuc, *Structura combinațiilor anorganice*, curs litografiat: Cluj-Napoca, 1978.<br>2. A. Pui, N. Cornei, D. G. Dănuț, *Analiză structurală anorganică*, Performantica: Iași, 2008.<br>3. Suport de curs, prezentare PowerPoint.<br>Bibliografie opțională:<br>1. E. A. V. Ebsworth, D. W. H. Rankin, S. Cradock, *Structural Methods in Inorganic Chemistry*, Blackwell: Oxford, 1987.<br>2. D. W. Rankin, N. W. Mitzel, C. A. Morrison, *Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry*, John Wiley & Sons: Chichester, 2013.<br>3. R. V. Parish, *NMR, NQR, EPR and Moessbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry*, Ellis Horwood: New York, 1990.<br>4. W. Henderson, J. S. McIndoe, *Mass Spectrometry of Inorganic, Coordination and Organometallic* Compounds, John Wiley & Sons: Chichester, 2005.<br>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.<br>6. E. D. Solomon, A. B. P. Lever, *Inorganic Electronic Structure and* Spectroscopy, Vol. 1 - Methodology, John Wiley & Sons: Hoboken, 2006.<br>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 $^1H$-RMN ale compușilor organici | Interpretare spectre $^1H$-RMN | 1 seminar (2 ore) |
| Atribuiri structurale bazate pe interpretarea cuplajelor spin-spin homonucleare și a valorilor integralelor din spectrele $^1H$-RMN ale compușilor organici | Interpretare spectre $^1H$-RMN | 1 seminar (2 ore) |
| Atribuiri structurale bazate pe interpretarea spectrelor | Interpretare spectre | 1 seminar (2 ore) |

| | | |
|---|---|---|
| $^{13}$C-RMN ale compușilor organici (deplasare chimica, spectre cu decuplare parțială, APT, DEPT). | $^{13}$C-RMN | |
| Atribuiri structurale bazate pe interpretarea spectrelor de masă ale compușilor organici (ion molecular, peak de bază, procese de fragmentare) | Interpretare spectre EI-MS | 1 seminar (2 ore) |
| 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 | 1 seminar (2 ore) |
| Bibliografie<br>1. A. T. Balaban, M. Banciu, I. Pogany, „*Aplicații ale metodelor fizice în chimia organică*”, Ed. Științifică și Enciclopedică, București 1983.<br>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 $\Delta_o$ 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.<br>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 din ANC.

**10. Evaluare**

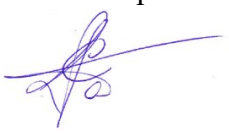
| Tip activitate | 10.1 Criterii de evaluare | 10.2 Metode de evaluare | 10.3 Pondere din nota finală |
|---|---|---|---|
| **Modul organică** | | | |
| 10.4 Curs | Cunoașterea principiului fizic care stă la baza înregistrării spectrelor IR, UV-Viz, RMN și SM. | Examen scris. Intenția de fraudă la examen 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

