FIȘA DISCIPLINEI

RMN și difracție de raze X în chimia organometalică

Anul universitar 2025-2026

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	Școala Doctorală de Chimie
1.4. Domeniul de studii	Chimie
1.5. Ciclul de studii	Doctorat
1.6. Programul de studii / Calificarea	Doctorat
1.7. Forma de învățământ	Cu frecvență

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	RMN și difracție de raze X în chimia organometalică			Codul disciplinei	**SDC-19-01**
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	2	2.6. Tipul de evaluare	Examen
2.7. Regimul disciplinei	Opțional	2.8. Tipul disciplinei		Disciplină de specializare (DS)	

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

3.1. Număr de ore pe săptămână	3	din care: 3.2. curs	2	3.3. seminar/ laborator/ proiect	1
3.4. Total ore din planul de învățământ	36	din care: 3.5. curs	24	3.6 seminar/laborator	12
Distribuția fondului de timp pentru studiul individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)					**ore**
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					100
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					50
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					40
Tutoriat (consiliere profesională)					8
Examinări					6
Alte activități (de ex.: comunicare bidirecțională cu titularul de disciplină)					10
3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)				**214**	
3.8. Total ore pe semestru				**250**	
3.9. Numărul de credite				**10**	

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1. de curriculum	Nu este cazul
4.2. de competențe	Nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1. de desfășurare a cursului	• Cursurile se desfășoară în condiții de acces la internet și baze de date • Studenții vor avea acces la baze de date (baze abonate de facultate / universitate, biblioteca centrală) • Se va stimula participarea interactivă • Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise
5.2. de desfășurare a seminarului	• Seminarele se desfășoară în condiții de acces la internet și baze de date • Studenții se vor prezenta la seminar cu telefoanele mobile închise

6.1. Competențele dobândite în urma absolvirii programului de studii[1]

Competențe profesionale	
Codul competenței	**Competență**
CP1	Cunoștințe avansate și aprofundate în domeniul chimiei și a temei de doctorat.
CP4	Planificarea, proiectarea și implementarea unui proiect/articol de cercetare științifică originală, cu respectarea eticii și integrității academice.
CP5	Aplicarea și dezvoltarea metodelor de avansate de cercetare și analiză; interpretarea critică a datelor și formularea de soluții inovative.
Competențe transversale	
Codul competenței	**Competență**
CT2	Comunicare științifică avansată în română și engleză; colaborare în contexte interdisciplinare și multiculturale.
CT3	Competențe digitale avansate pentru documentare, analiză de date și diseminare; utilizarea responsabilă a instrumentelor informatice.

6.2. Rezultatele învățării specifice programului de studii[2]

Rezultatele învățării vizate prin disciplină		
Codul competenței	**Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)**	**Abilități academice specifice (Specific academic skills)**
CP1	Cunoștințe avansate și actuale în domeniul chimiei și în aria de specializare; înțelegerea critică a literaturii de specialitate.	Integrează și aplică concepte/teorii avansate pentru formularea ipotezelor de cercetare; argumentează alegerea abordărilor științifice.
CP4	Metodologii de cercetare avansată: proiectare experimentală, tehnici moderne de sinteză și caracterizare, analiză și validare; principii de management al proiectelor de cercetare.	Proiectează, planifică și implementează un proiect de cercetare; aplică proceduri de calitate și siguranță și documentează trasabil etapele și datele.
CP5	Strategii avansate de analiză, interpretare și integrare a datelor; evaluarea limitărilor, reproductibilității și a impactului științific;	Analizează critic date complexe, estimează gradul de incertitudine și formulează concluzii; propune îmbunătățiri metodologice și direcții de cercetare/inovare.
CT2	Terminologia și comunicarea științifică în română și engleză; structura articolelor și a prezentărilor științifice; bune practici de citare.	Redactează și prezintă coerent rezultate științifice în româna și engleză; răspunde argumentat la observații și la recenzii
CT3	Instrumente digitale pentru documentare, citare și prelucrarea datelor (baze de date, software specializat, aplicații de gestionare a referințelor bibliografice); utilizarea responsabilă a resurselor informatice	Utilizează eficient instrumente digitale specifice; gestionează citările; folosește responsabil resurse informatice în activitatea de cercetare.

7. Rezultatele disciplinei învățării specifice

Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)
1. Definirea și însușirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază utilizate în analiza structurala prin Rezonanța Magnetică Nucleară (RMN), respectiv Difracție de Raze X pe Monocristal specifice si utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională.

[1] Se vor prelua din Planul de învățământ al programului de studii acele competențe profesionale și/sau transversale la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fișa disciplinei. Pentru fiecare competență se va prelua întregul enunț, inclusiv codul competenței, cu formularea care apare în planul de învățământ, fără modificări. Dacă nu se preia nici o competență din oricare din cele două categorii, se șterge linia din tabel aferentă acelei categorii.

[2] Se menționează rezultatele învățării specifice programului de studiu la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fișa. Enunțurile, preluate fără modificări din Planul de învățământ în funcție de tipul disciplinei (DF/DS/DC) se trec în dreptul competenței asociate.

2.	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
3.	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).
4.	Abilitatea de a utiliza datele structurale ale compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici si 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.
5.	Utilizarea softurilor specifice pentru prelucrarea spectrelor RMN și a datelor de difracție de raze X pe monocristal.
6.	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.
	Abilități academice specifice (Specific academic skills)
1.	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.
2.	Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru.
3.	Informarea și documentarea permanentă, în limba română și într-o limbă de circulație internațională, în domeniul său de activitate, cu utilizarea metodelor moderne de informare și comunicare (soft specific, căutare în baze de date).
4.	Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate.
5.	Abilitatea de a întocmi referate scrise și de a susține public aceste referate.

8. Conținuturi

8.1 Curs	**Metode de predare - învățare**	**Observații[3]**
8.1.1. Rezonanța Magnetică Nucleară - principiul metodei; izotopi activi RMN, standarde interne și externe, parametri spectrali.	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
8.1.2. Spectroscopie RMN multinuclear – ^{1}H, ^{13}C.	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
8.1.3. Spectroscopie RMN multinuclear – ^{19}F, ^{31}P și alți izotopi activi RMN ai unor nemetale.	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
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.	2 ore / săptămână
8.1.5. Spectroscopie RMN. RMN bidimensional.	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
8.1.6. Spectroscopie RMN – corelații între geometria de coordinare, numărul de semnale și deplasarea chimică în spectrele compușilor anorganici și coordinativi.	Prelegerea, explicația, conversația, descrierea, problematizarea.	2 ore / săptămână
8.1.7. Molecule fluxionale.	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
8.1.8. Spectroscopie RMN – RMN dinamic, parametri cinetici și termodinamici.	Prelegerea, explicația, conversația, descrierea, problematizarea.	2 ore / săptămână
8.1.9. Difracția de raze X pe monocristal (principiul metodei și instrumentația).	Prelegerea, explicația, conversația, descrierea.	2 ore / săptămână
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.	2 ore / săptămână

[3] De exemplu aspecte organizatorice, recomandări pentru studenți, aspecte specifice legate de curs/seminar cum ar fi invitarea unor practicieni în domeniu etc.

8.1.11. Interacțiuni intra- si intermoleculare. Interacțiuni noncovalente – legături de hidrogen, legături hidrogen-pi, metal-pi, pi-pi stacking, metalofilice, etc.	Prelegerea, explicația, conversația, descrierea, problematizarea.	2 ore / săptămână
8.1.12. Arhitecturi supramoleculare obținute prin autoasamblare.	Prelegerea, explicația, conversația, descrierea.	2 ore / săptămână

Bibliografie

1. D. W. Rankin, N. W. Mitzel, C. A. Morrison, *Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry*, John Wiley & Sons, Chichester, 2013.
2. M. T. Weller, N. A. Young, *Characterisation Methods in Inorganic Chemistry*, Oxford Univ. Press, Oxford (UK), 2017.
3. R. V. Parish, *NMR, NQR, EPR and Moessbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry*, Ellis Horwood, New York, 1990.
4. H. Friebolin, *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*, Wiley-VCH, Weinheim, 1998.
5. W. Massa, *Crystal Structure Determination*, Springer, Berlin, 2004.

Bibliografie opțională

6. I. Haiduc, J. J. Zuckerman, *Basic Organometallic Chemistry*, Walter de Gruyter, Berlin, 1985.
7. Ch. Elschenbroich, A. Salzer, *Organometallics - A Concise Introduction Chemistry*, VCH Verlag, Weinheim, 1992.
8. R. H. Crabtree, *The Organometallic Chemistry of The Transition Metals*, 3rd Ed., John Willey & Sons, New York, 2001.
9. Kin-ya Akiba (Ed.), *Chemistry of Hypervalent Compounds*, Wiley-VCH, New York, 1999.
10. E. A. V. Ebsworth, D. W. H. Rankin, S. Cradock, *Structural Methods in Inorganic Chemistry*, Blackwell, Oxford, 1987.
11. A. F. Wells, *Structural Inorganic Chemistry, 4th Ed.*, Oxford Univ. Press, London, 1975.

8.2 Seminar	**Metode de predare - învățare**	**Observații**
8.2.1-2. Aplicații ale spectroscopie RMN în analiza structurală a compușilor organometalici și coordinativi. Utilizarea de software specific (MestRENova). Interpretarea spectrelor ^{1}H și ^{13}C – considerații structurale bazate pe deplasări chimice ^{1}H și ^{13}C, valoarea integralelor semnalelor de rezonanță ^{1}H, cuplaje spin-spin din spectrele ^{1}H RMN ale compușilor organometalici.	Explicația, conversația, descrierea, problematizarea	2 ore / 2 săptămâni
8.2.3-4 Aplicații ale spectroscopie RMN în analiza structurală a compușilor organometalici și coordinativi. Interpretarea spectrelor bidimensionale. Atribuirea semnalelor de rezonanță ^{1}H și ^{13}C.	Explicația, conversația, descrierea, problematizarea	2 ore / 2 săptămâni
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	2 ore / 2 săptămâni
8.2.7-8. Aplicații RMN în studiul unor procese dinamice. Spectre la temperatură variabilă. Parametri cinetici și termodinamici.	Explicația, conversația, descrierea, problematizarea	2 ore / 2 săptămâni
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	2 ore / 2 săptămâni
8.2.11-12. Utilizarea programelor specifice pentru pregatire datelor pentru publicare.	Explicația, conversația, descrierea, problematizarea	2 ore / 2 săptămâni

Bibliografie

1. 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. Evaluare

Tip activitate	**9.1 Criterii de evaluare[4]**	**9.2 Metode de evaluare[5]**	**9.3 Pondere din nota finală**
9.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate	Examen oral	60%
	Modul de gândire, corectitudinea și argumentarea soluțiilor propuse		

[4] Criteriile de evaluare trebuie să reflecte direct rezultatele învățării vizate la nivel de program de studii, respectiv la nivel de disciplină. Mai concret, se evaluează achizițiile de învățare menționate în rezultatele anticipate ale învățării.

[5] Se recomandă stabilirea atât a metodelor de evaluare finală, cât și a strategiei de evaluare pe parcurs.

9.5 Seminar	Activitatea desfășurată la seminar	Prezentarea analizei de spectre si structuri	40%
9.6 Standard minim de promovare			
Nota 5 (cinci)			

10. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)[6]

	○	Eticheta pentru Educație de calitate						
								
○	○	○	X	○	○	○	○	○
								Nu se aplică nici o etichetă
○	○	○	○	○	○	○	○	○

Data completării:

30 ianuarie 2026

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

Data avizării în CSDC:

Semnătura directorului SDC

Prof. dr. Niculina Daniela Hădade

[6] Selectați o singură etichetă, cea care, în conformitate cu *Procedura de aplicare a etichetelor ODD în procesul academic*, se potrivește cel mai bine disciplinei. Dacă disciplina tratează tema dezvoltării durabile la modul general (de ex. prin prezentarea/introducerea cadrului general al dezvoltării durabile etc.) atunci se poate aloca eticheta generală de Dezvoltare Durabilă. Dacă niciuna dintre etichete nu descrie disciplina, selectați ultima opțiune: „*Nu se aplică nici o etichetă*”.