

## 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	Departamentul de Inginerie Chimică
1.4 Domeniul de studii	Inginerie Chimică
1.5 Ciclu de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Ingineria Proceselor Organice și Biochimice / inginer chimist

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei		Metode de caracterizare structurală a materialelor– CMX7142						
2.2 Titularul activităților de curs			Prof. dr. Ion Grosu Conf. dr. Radu Silaghi-Dumitrescu Lector dr. Gabriela Nemeș Lector dr. Richard Varga Prof. dr. Liana Mureșan Conf. dr. ing. Sanda Andrada Măicăneanu					
2.3 Titularul activităților de seminar			Prof. dr. Ion Grosu Conf. dr. Radu Silaghi-Dumitrescu Lector dr. Gabriela Nemeș Lector dr. Richard Varga Prof. dr. Liana Mureșan Conf. dr. ing. Sanda Andrada Măicăneanu					
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	Op	

### 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	1
3.4 Total ore din planul de învățământ	42	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	14
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					30
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					28
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					42
Tutoriat					5
Examinări					3
Alte activități: .....					-
3.7 Total ore studiu individual	108				
3.8 Total ore pe semestru	150				
3.9 Numărul de credite	6				

### 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	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise</li> <li>• Nu va fi acceptată întârzierea</li> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții se vor prezenta la seminar cu telefoanele mobile închise</li> <li>• Rezolvarea temelor de casă (referatele) se face pentru ședința următoare în care aceasta a fost enunțată</li> <li>• Predarea cu întârziere se penalizează cu 0,5 puncte/zi</li> </ul>

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor din domeniul ingineriei materialelor și protecției mediului și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională</li> <li>• Utilizarea cunoștințelor aprofundate din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru explicarea și interpretarea proceselor specifice ingineriei materialelor și protecției mediului</li> <li>• Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor avansate pentru rezolvarea problemelor specifice ingineriei materialelor și protecției mediului</li> <li>• Analiza critică și utilizarea metodelor și tehnicilor avansate pentru evaluarea cantitativă și calitativă a proceselor din ingineria materialelor și protecția mediului</li> <li>• Aplicarea conceptelor și teoriilor avansate din domeniul ingineriei materialelor și protecției mediului pentru elaborarea proiectelor și rezolvarea problemelor</li> <li>• Abilitatea de a înțelege și interpreta date complementare pentru caracterizarea materialelor, de a exprima și argumenta interpretarea datelor pe baza corelării rezultatelor și a comparării cu date din literatura de specialitate</li> <li>• Abilitatea de a înțelege tehnicile, de a utiliza și interpreta informațiile obținute cu ajutorul metodelor spectroscopice de investigare a structurii compușilor chimici, rezonanța magnetică nucleară și spectrometrie de masă</li> <li>• Abilitatea de a identifica problemele de analiză unde metoda RES este aplicabilă, și de a extrage informații utile în privința identității și proprietăților materialelor</li> <li>• Abilitatea de a identifica problemele de analiză unde metoda UV-VIS este aplicabilă, și de a extrage informații utile în privința identității și proprietăților materialelor</li> <li>• Descrierea și interpretarea metodelor și tehnicilor folosite la determinarea structurii și a proprietăților compusilor chimici; prelucrarea și interpretarea rezultatelor obținute în urma analizei de difracție cu raze X</li> <li>• Abilitatea de a explica și interpreta principiile și metodele electrochimice utilizate în caracterizarea structurală a materialelor</li> <li>• Familiarizarea cu metoda BET și variantele ei pentru determinarea suprafeței specifice și a distribuției porilor; abilitatea de a înțelege relația structura-proprietăți (exemple pentru materiale catalitice), prin corelarea rezultatelor BET cu rezultate SEM</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 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</li> <li>• Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru</li> <li>• Informarea și documentarea permanentă în domeniul sau de activitate în limba română</li> <li>• Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate</li> <li>• Abilitatea de a întocmi referate scrise și de a susține public aceste referate</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 noțiuni privind caracterizarea structurală a materialelor și precursorilor utilizând tehnici specifice</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice privind utilizarea metodei de rezonanță magnetică nucleară pentru investigarea structurii compușilor chimici</li> </ul>



	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice privind utilizarea spectrometriei de masă pentru investigarea și identificarea structurii compușilor chimici</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice și practice necesare pentru aplicarea spectroscopiei RES în studiul materialelor și precursorilor</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice necesare și aplicarea acestora în utilizarea tehnicilor UV-VIS</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază privind difracția de raze X pe monocristal ca metode de investigare a structurii cristaline</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază privind principalele metode electrochimice de investigare a structurii materialelor</li> <li>• Dobândirea de noțiuni privind caracterizarea suprafețelor prin metoda adsorbției de gaze și prin microscopie electronică.</li> </ul>
--	---

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
<b>MODUL 1 Metode spectroscopice de caracterizare structurală a compusilor organici și organometalici</b>		
8.1.1. Caracterizarea structurală prin metoda RMN – RMN heteronuclear, RMN bidimensional, RMN de solide (2 ore)	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	6 ore de curs
8.1.2. Metoda RMN – interpretare date, aplicații (2 ore)		
8.1.3. Caracterizarea structurală prin spectrometrie de masă - tehnici de ionizare blândă (2 ore)		
8.1.4. Spectroscopia RES (rezonanță electronic de spin) – principiu, domenii de aplicabilitate, experimente concrete în analiza materialelor (2 ore)	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	4 ore de curs
8.1.5 Metoda RES - interpretare date, aplicații (2 ore)		
8.1.6. Spectroscopia UV-VIS aspecte teoretice și principii. Utilizarea spectroscopiei UV-VIS în determinarea structurii (2 ore)	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	4 ore de curs
8.1.7. Interpretarea spectrelor UV-VIS (2 ore)		
<b>MODUL 2 Caracterizarea structurală prin DRX</b>	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	4 ore de curs
8.1.8. Difracția de raze X. Metode experimentale. difracția de raze X ca și metode de analiza, monocristal, simetrie (2 ore).		
8.1.9. Interpretarea datelor obținute prin difracția de raze X pe monocristal. Descrierea și interpretarea fișierelor cif, parametrilor atomici, tablelelor cristalografice, interacțiunilor intra- și intermoleculare, legăturilor de hidrogen, razelor covalente, razelor Van der Waals (2 ore).		
<b>MODUL 3. Caracterizarea structurală prin metode electrochimice</b>	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	6 ore de curs
8.1.10. Principiul investigării electrochimice; clasificarea metodelor după natura și forma perturbației și a funcției de răspuns. Celula electrochimică, instrumentația utilizată. Etape elementare și definiția regimului proceselor de electrod. Mărimi termodinamice și cinetice care pot fi determinate și importanța lor (2 ore).		
8.1.11. Polarografia clasică și neconventională: principii, instrumentație,. Voltametria hidrodinamică: principii, instrumentație, parametrii. Relația Levich și		



Koutecky-Levich și utilitatea acestora (2 ore).		
8.1.12. Voltametria ciclică, cronoamperometria și spectroscopia de impedanță. Criterii de reversibilitate. Parametrii experimentali și modul de determinare a mărimilor fizico-chimice caracteristice (2 ore).		
<b>MODUL 4 - Caracterizarea materialelor prin evaluarea suprafeței specifice, distribuției de pori și a structurii superficiale prin tehnici microscopice (SEM, TEM)</b>	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Studiul de caz; Problematizarea	Modulul este structurat pe cele două teme care vor fi parcurse în două cursuri (4 ore)
8.1.13. Adsorbția. Structura poroasă a solidelor. Determinarea suprafeței specifice, distribuției de pori (2 ore)		
8.1.14. Caracterizarea structurii solidelor prin microscopie electronica (2 ore)		
Bibliografie MODUL 1 1. N. E. Jacobsen, <i>NMR Spectroscopy Explained</i> , Ed Wiley-Interscience, 2007. 2. H Friebolin, <i>Basic One- and Two-dimensional NMR Spectroscopy</i> , Wiley-VCH, 2004. 3. S. Mager, <i>Analiza Structurala Organică</i> , Ed. Științifică si Enciclopedica, București 1979. 4. David L., Crăciun C., Cozar O., Chiș V., <i>Rezonanță Electronică de Spin. Principii, metode, aplicații</i> , Presa Univ. Clujeană, Cluj-Napoca, 2001. 5. H.H. Perkampus, <i>UV-VIS spectroscopy and its applications</i> , Springer-Verlag, 1992. Bibliografie MODUL 2 1. W. Massa, <i>Crystal Structure Determination</i> , Editura Springer, Berlin, 2000. (accesibila la titularul de modul) Bibliografie MODUL 3 1. Oniciu L., Mureșan L., <i>Electrochimie aplicată</i> , Presa Universitară Clujeana, 1998. 2. A. J. Bard și L. R. Faulkner, <i>Electrochemical Methods. Fundamentals and Applications</i> , John Wiley and Sons, New-York, 1980. Bibliografie MODUL 4 1. E. Rouquerol, J. Rouquerol, K. Sing, <i>Adsorption by Powders and Porous Solids. Principles, Methodology and Applications</i> , Academic Press, San Diego, 1999. 2. J. M. Thomas, W. J. Thomas, <i>Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis</i> , VCH, Weinheim, 1997. 3. J.W. Niemantsverdriet, <i>Spectroscopy in Catalysis. An introduction</i> , VCH, Weinheim, 1993.		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
MODUL 1		
- Interpretarea spectrelor monodimensionale heteronucleare și bidimensionale (COSY, HMQC, HMBC, NOESY, ROESY) - Analiza si interpretarea spectrelor de masa ESI, APCI, MALDI	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	Total 3 ore
- Spectre RES, condiționare probă, înregistrare spectru, interpretarea parametrilor spectrali	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	Total 2 ore
- Interpretarea spectrelor UV-VIS pentru diverse combinații chimice	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	Total 2 ore
MODUL 2		
- Utilizarea programelor specifice pentru pregatire datelor pentru publicare	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	Total 2 ore
MODUL 3		
- Investigarea sistemelor redox prin voltametrie ciclică - Spectroscopia de impedanță electrochimica	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	Total 3 ore



MODUL 4		
- Determinarea $S_{sp}$ a unor materiale zeolitice	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	O întâlnire de 2 ore în care funcție de situație va fi realizată una dintre temele propuse
- Preluare și interpretarea imaginii SEM/TEM pentru caracterizarea unor adsorbanți naturali		
Bibliografie MODUL 1		
1. David L., Crăciun C., Cozar O., Chiș V., <i>Rezonanță Electronică de Spin. Principii, metode, aplicații</i> , Presa Univ. Clujeană, Cluj-Napoca, 2001		
2. R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle <i>Spectrometric Identification of Organic Compounds</i> , Wiley, New-York, 2005.		
3. N. E. Jacobsen, <i>NMR Spectroscopy Explained</i> , Wiley-Interscience, 2007.		
4. H.H. Perkampus, <i>UV-VIS spectroscopy and its applications</i> , Springer-Verlag, 1992.		
5. Referate laborator și fișe de lucru.		
Bibliografie MODUL 2		
1. W. Massa, <i>Crystal Structure Determination</i> , Editura Springer, Berlin, 2000. (accesibila la titularul de modul)		
Bibliografie MODUL 3		
1. I.C. Popescu, G. Turdean, A. Nicoara, P. Ilea și L. Muresan, <i>Lucrări practice pentru Ciclul de Studii Aprofundate în Electrochimie</i> , Lito. UBB, Cluj-Napoca, 1998.		
Bibliografie MODUL 4		
1. E. Rouquerol, J. Rouquerol, K. Sing, <i>Adsorption by Powders and Porous Solids. Principles, Methodology and Applications</i> , Academic Press, San Diego, 1999.		
2. J. M. Thomas, W. J. Thomas, <i>Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis</i> , VCH, Weinheim, 1997.		
3. J.W. Niemantsverdriet, <i>Spectroscopy in Catalysis. An introduction</i> , VCH, Weinheim, 1993.		
4. referate de laborator		

**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 <b>Metode de caracterizare structurală a materialelor și precursorilor</b> studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 1 – RNCIS.</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	<p>Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate</p> <p>Modul de gândire, corectitudinea și argumentarea soluțiilor propuse</p>	<p>Examen scris – accesul la examen este condiționat de predarea referatelor.</p> <p>Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen.</p> <p>Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB</p>	60%
10.5 Seminar/laborator	<p>Predarea referatelor</p> <p>Calitatea referatului, utilizarea corectă a literaturii de specialitate</p> <p>Activitatea desfășurată în laborator/ la seminar</p>	<p>Referatele se predau cel târziu în ultima săptămână de activitate didactică</p>	40%
10.6 Standard minim de performanță			



- Nota 5 (cinci) pentru fiecare modul în parte
- Cunoașterea unei tehnici de caracterizare corespunzătoare fiecărui modul și interpretarea rezultatelor corespunzătoare acelei tehnici

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

6 iunie 2014....

.....

.....

Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

.....

Prof. dr. Cristian Silvestru



.....06.06.2014.....