

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 Chimică						
Codul disciplinei	CLR2074						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. Dr. Ing. Castelia CRISTEA (modul organică) Lect. Dr. Ciprian I. RAȚ (modul anorganică)						
2.3 Titularul activităților de seminar	Conf. Dr. Ing. Castelia CRISTEA (modul organică) Lect. Dr. Ciprian I. RAȚ (modul anorganică)						
2.4 Anul de studiu	III	2.5 Semestrul	5	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	Ob

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	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					31
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					10,5
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					22
Tutoriat					1,5
Examinări					4
Alte activități:					
3.7 Total ore studiu individual		69			
3.8 Total ore pe semestru		125			
3.9 Numărul de credite		5			

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> Chimie Generală Chimie Coordinativă și Organometalică Chimie Organică
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> Nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> Studentii vor primi suportul de curs Se va stimula participarea interactivă Studentii vor păstra închise telefoanele mobile pe durata prelegerilor și seminariilor
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> Studentii se vor prezenta la seminar cu suportul bibliografic indicat in cadrul seminariilor anterioare.

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> Să își însușească noțiunile, teoriile și modelele de bază utilizate în analiza prin metode fizice (de ex. spectroscopie IR, UV-Viz, RMN, spectrometrie de masă, etc.) 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 datelor experimentale obținute în urma analizei prin metode spectroscopice Să dezvolte abilitatea de a determina structura moleculară în soluție sau 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 Abilitatea de a utiliza datele structurale ale compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici și organometalici simpli, obținute prin difracție de raze X pe monocristal 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	<ul style="list-style-type: none"> 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)

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> Dobândirea de noțiuni privind caracterizarea structurală a compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici și organometalici simpli
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Să înțeleagă principiul fizic al interacțiunii radiației electromagnetice cu substanța 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 spectroscopiile UV-Viz, CD și MCD pentru investigarea și identificarea structurii moleculare în soluție Utilizarea tehnicilor RMN și EPR pentru caracterizarea structurală în soluție și stare solidă 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 Dobândirea cunoștințelor teoretice privind difracția de raze X pe monocristal și a tehnicilor spectroscopice bazate pe absorbția și emisia de radiație X

8. Conținuturi

8.1 Curs (modul organică)	Metode de predare	Observații
Interacțiunea radiației electromagnetice cu structuri moleculare	prelegere	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	1 prelegere (2 ore)
Spectroscopie UV-Viz (principii și reguli de selecție, principiul aparaturii, tipuri de tranziții electronice, factori structurali care determină poziția benzilor de absorbție)	prelegere	1 prelegere (2 ore)
Rezonanța Magnetică Nucleară (principii și reguli de selecție, principiul aparaturii, parametri spectrali în ^1H -, ^{13}C -RMN).	prelegere	3 prelegeri (6 ore)
Spectrometrie de Masă (principiul de bază, principiul aparaturii, procese de fragmentare)	prelegere	1 prelegere (2 ore)
Bibliografie Obligatorie: 1. L. David, C. Cristea, O. Cozar, L. Găină, „ <i>Identificarea structurii moleculare prin metode spectroscopice</i> ”, Editura Presa Universitară Clujeană, 2004. Opțională: 2. I. Pogany, M. Banciu, „ <i>Metode fizice în chimia organică</i> ”, Ed. Științifică, București, 1972. 3. S. Mager, „ <i>Analiza Structurală Organică</i> ”, Ed St. Enciclopedică, București, 1979. 4. B. Stuart, „ <i>IR spectroscopy fundamentals and applications</i> ”, John Wiley and Sons, 2004.		
8.1 Curs (modul anorganica)		
Metode spectroscopice și aplicații ale acestora	Prelegerea / Explicația Conversația / Descrierea Problematizarea	1 curs (2 ore)
Spectroscopie RMN. Spectroscopie EPR	Prelegerea / Explicația Conversația / Descrierea Problematizarea	1 curs (2 ore)
Spectroscopie IR și Raman	Prelegerea / Explicația Conversația / Descrierea Problematizarea	1 curs (2 ore)
Spectroscopie UV-Viz. Dicroism circular	Prelegerea / Explicația Conversația / Descrierea Problematizarea	1 curs (2 ore)
Spectroscopie de absorbție și emisie de raze X (XAS, XES, EXAFS). Spectroscopie Mössbauer	Prelegerea / Explicația Conversația / Descrierea Problematizarea	1 curs (2 ore)
Difracție de raze X pe monocristal	Prelegerea / Explicația Conversația / Descrierea Problematizarea	1 curs (2 ore)
Spectrometrie de masă	Prelegerea / Explicația Conversația / Descrierea Problematizarea	1 curs (2 ore)
Bibliografie obligatorie: 1. R. Micu Semeniuc, <i>Structura combinațiilor anorganice</i> , Cluj-Napoca, 1978. 2. A. Pui, N. Cornei, D. G. Dănuț, <i>Analiză structurală anorganică</i> , Perfomantica, 2008. Bibliografie opțională: 1. E. A. V. Ebsworth, D. W. H. Rankin, S. Cradock, <i>Structural Methods in Inorganic Chemistry</i> , 2nd Ed.,		

- Blackwell, 1991.
2. R. V. Parish, *NMR, NQR, EPR and Moessbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry*, Ellis Horwood, 1990.
 3. J. H. Gross, *Mass Spectrometry*, Springer, 2004.
 4. K. Nakamoto, *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Part A – Theory and Applications in Inorganic Chemistry*, 6th Ed., John Wiley & Sons, 2008.
 5. B. Stuart, *Infrared Spectroscopy - Fundamentals and Applications*, John Wiley & Sons, 2004.
 6. E. D. Solomon, A. B. P. Lever, *Inorganic Electronic Structure and Spectroscopy*, Vol. 1 – Methodology, John Wiley & Sons, 2006.
 7. W. Massa, *Crystal Structure Determination*, Springer, 2004.
 8. G. Bunker, *Introduction to XAFS: A Practical Guide to X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy*, Cambridge University Press, 2010.

8.2 Seminar / laborator (modul organică)	Metode de predare	Observații
Atribuirii structurale bazate pe absorbții caracteristice înregistrate în spectrele IR	Interpretare spectre IR compuși organici	1 seminar (2 ore)
Atribuirii structurale bazate pe absorbții caracteristice înregistrate în spectrele UV-Viz	Interpretare spectre UV-Viz compuși organici	1 seminar (2 ore)
Atribuirii structurale bazate pe interpretarea deplasării chimice din spectrele ^1H -RMN	Interpretare spectre ^1H -RMN	1 seminar (2 ore)
Atribuirii structurale bazate pe interpretarea cuplajelor și valorii integralelor din spectrele ^1H -RMN	Interpretare spectre ^1H -RMN	1 seminar (2 ore)
Atribuirii structurale bazate pe interpretarea spectrelor ^{13}C -RMN	Interpretare spectre ^{13}C -RMN	1 seminar (2 ore)
Atribuirii structurale bazate pe interpretarea spectrelor de masă	Interpretare spectre EI-MS	1 seminar (2 ore)
Atribuirea structurii compușilor organici și organometalici prin interpretarea combinată a spectrelor IR, UV-Viz, SM și RMN	Studii de caz	1 seminar (2 ore)
Bibliografie 1. A. T. Balaban, M. Banciu, I. Pogany, „ <i>Aplicații ale metodelor fizice în chimia organică</i> ”, Ed. Științifică și Enciclopedică, București, 1983. L. D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, „ <i>Organic structures from spectra</i> ”, John Wiley and Sons, 2007.		
8.2 Seminar / laborator (modul anorganică)		
Spectrul radiației electromagnetice. Interacțiunea radiației cu substanța. Metode spectroscopice și scara de timp asociată acestor metode. Informații structurale obținute cu ajutorul metodelor spectroscopice	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Spectre ale compușilor elementelor blocului <i>d</i> și ale elementelor grele ale blocului <i>p</i> . Corelații între geometria de coordonare și deplasarea chimică. Atribuirea structurii moleculare cu ajutorul spectrelor RMN multinucleare. Interpretare de spectre RMN	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Tipuri de vibrații. Frecvențe caracteristice vibrațiilor de grup. Spectre IR ale metal carbonililor și hidrurilor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)

Reguli de selecție pentru spectre electronice. Diagrame Tanabe-Sugano. Spectre ale compușilor hexacoordinați octaedrici ai ionilor d^1 și d^9 . Benzi de transfer de sarcină ligand-metal și metal-ligand	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Aplicații ale tehnicilor spectroscopice XAS, EXAFS și Mössbauer	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Metode de difracție. Simetrie. Sisteme cristaline și grupuri spațiale de simetrie. Structuri determinate prin difracție de raze X pe monocristal	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Metode de ionizare. Clasificarea elementelor în funcție de numărul de izotopi. Calcularea distribuției izotopice Interpretare de spectre de masă	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (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

<ul style="list-style-type: none"> Conținutul acestei discipline este foarte util în 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 și utilizarea metodelor spectroscopice de caracterizare a compușilor anorganici, organici, organometalici sau a complexilor este în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 1 – RNCIS.

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 si de masă.	Examen scris Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB. <i>Contestațiile se rezolvă de către titularul de disciplină.</i>	70%
	Cunoașterea parametrilor spectrali tipici fiecărei metode spectroscopice studiate.		
	Capacitatea de a efectua atribuirii structurale corecte bazate pe analiza combinată a parametrilor spectrali specifici fiecărei metode spectroscopice studiate.		
10.5 Seminar / laborator	Înțelegerea și însușirea problematicei tratate la curs si seminar	Rezolvare teme pe parcurs	30%
	Capacitatea de utilizare adecvată a conceptelor si metodelor		
10.6 Standard minim de performanță			
• Cunoașterea parametrilor spectrali tipici fiecărei metode spectroscopice (IR, UV-Viz, ¹ H-RMN și SM)			

Modul anorganică

10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs	Examen scris Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB. <i>Contestațiile se rezolvă de către titularul de disciplină.</i>	70%
10.5 Seminar / laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar	Rezolvarea temelor corespunzătoare tuturor seminariilor – se predau conform graficului stabilit la începutul semestrului	30%
	Calitatea referatelor pregătite		
10.6 Standard minim de performanță			
• Nota 5 (cinci) atât la rezolvarea temelor, a testele primite la curs în timpul semestrului, respectiv la examen.			
Nota finală			
Media notelor obtinute la cele 2 module (organică, respectiv anorganică)			

Data completării

10.05.2015

Semnătura titularului de curs



Semnătura titularului de seminar



Data avizării în departament

.....

Semnătura directorului de departament

Prof. Dr. Cristian Silvestru



11 mai 2015