

## 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 și Inginerie Chimică Linia Maghiara
1.4 Domeniul de studii	Inginerie Chimică, Chimie
1.5 Ciclu de studii	Licență
1.6 Programul de studiu / Calificarea	<b>CISOPC maghiara</b> /Inginier Chimist <b>Chimie maghiara</b> /Chimist

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Analiză Structurală Chimică</b>						
Codul disciplinei	<b>CLM2075</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	<b>Lect.Dr.Emese Gal</b>						
2.3 Titularul activităților de seminar	<b>Lect.Dr.Emese Gal</b>						
2.4 Anul de studiu	IV	2.5 Semestrul	7	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/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					10
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					4
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat					4
Examinări					6
Alte activități: .....					
3.7 Total ore studiu individual	38				
3.8 Total ore pe semestru	100				
3.9 Numărul de credite	5				

### 4. Precondiții (acolo unde este cazul)

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

### 5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Studentii vor pastra închise telefoanele mobile pe durata prelegerilor și seminariilor</li> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Studentii se vor prezenta la seminar cu suportul bibliografic indicat în cadrul seminariilor anterioare.</li> </ul>

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>Să își însușească noțiunile, teoriile și modelele de bază utilizate în analiza prin metode fizice (spectroscopie IR, UV-Viz, RMN și Spectrometrie de masă-MS) a compușilor organici, anorganici și de coordinare</li> <li>Să utilizeze cunoștințele de bază din domeniul chimiei generale și a chimiei organice pentru explicarea și interpretarea datelor experimentale obținute în urma analizei prin metode spectroscopice (IR, UV-Viz, RMN și MS) a compusilor organici, anorganici și de coordinare.</li> <li>Să dezvolte deprinderi de utilizare corectă a metodelor de analiza prin metode fizice (spectroscopie IR, UV-Viz, RMN și Spectrometrie de masă) în determinarea structurii compusilor organici, anorganici și de coordinare.</li> <li>Să demonstreze capacitatea de a selecta criterii și metode adecvate în vederea alegerii și aplicării unor metode de analiza prin metode spectroscopice a compusilor organici, anorganici și de coordinare.</li> <li>Să formuleze, să dezvolte și să aplice creativ soluții pentru probleme de analiza fizico-chimică prin metode spectroscopice a compusilor organici, anorganici și de coordinare, în contexte bine definite.</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>Rezolvarea sarcinilor profesionale în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru</li> <li>Informarea și documentarea în limba maghiară, română și într-o limbă de circulație internațională, cu utilizarea metodelor moderne de informare și comunicare (soft specific, căutare în baze de date)</li> </ul>

## 7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>Acumularea cunoștințelor de specialitate referitoare la analiza structurală a compusilor organici, anorganici și de coordinare prin metode spectroscopice.</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>Să înțeleagă principiul fizico-chimic al interacțiunii radiației electromagnetice cu structuri moleculare.</li> <li>Să învețe conceptele de bază ale spectroscopiei în domeniul infraroșu (IR), ale spectroscopiei în domeniul ultraviolet-vizibil (UV-Viz), ale rezonanței magnetice nucleare (RMN) și ale spectrometriei de masă (MS).</li> <li>Să înțeleagă principiul aparaturii utilizate în spectroscopia IR, UV-Viz, RMN și în MS</li> <li>Să dezvolte abilități de interpretare a spectrelor IR, UV-Viz, RMN și MS în scopul atribuirilor structurale ale compușilor organici, anorganici și de coordinare</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Etape de cercetare științifică în Chimia Organică. Studiul termodinamic și cinetic al reacțiilor chimice. Metode de separare și purificare a substanțelor organice. Analiza GC și 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 analitică	prelegere	2 ore/curs

GC-MS		
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-Viz, IR, MW si NMR). Interacțiunea radiației electromagnetice cu structuri moleculare	prelegere	2 ore/curs
8.1.4. Spectroscopie UV-Viz (principii si reguli de selecție, principiul aparaturii, tipuri de tranziții electronice, factori structurali care determină poziția benzilor de absorbție)	prelegere	2 ore/curs
8.1.5. Corelarea spectrelor UV-Viz cu efectele electronice, corelarea spectrelor UV-Viz cu efectele sterice.	prelegere	2 ore/curs
8.1.6. Spectroscopie IR (principii si reguli de selecție, principiul aparaturii, tipuri de vibrații, factori structurali care influențează frecvențele 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. Spectroscopia de Rezonanță Magnetică Nucleară - principii si reguli de selecție	prelegere	2 ore/curs
8.1.10. Spectroscopia de Rezonanță Magnetică Nucleară - principiul aparaturii, parametri spectrali in $^1\text{H}$ -, $^{13}\text{C}$ -, $^{19}\text{F}$ - si $^{31}\text{P}$ -RMN)	prelegere	2 ore/curs
8.1.11. Spectroscopia de Rezonanță Magnetică Nucleară – deplasarea chimică, factori care acționează asupra constantei de ecranare	prelegere	2 ore/curs
8.1.12. Spectroscopia de Rezonanță Magnetică Nucleară – cuplajul spin-spin, tipuri de cuplaje, sisteme de spin, simplificarea spectrelor $^1\text{H}$ -RMN complexe	prelegere	2 ore/curs
8.1.13. Spectroscopia $^{13}\text{C}$ -RMN, spectroscopia $^1\text{H}$ -RMN bidimensională, experimente bidimensionale de corelare heteronucleară (HETCOR)	prelegere	2 ore/curs
8.1.14. Atribuirea structurii moleculare prin interpretarea combinată a spectrelor MS, UV-Viz, 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, “ <i>Identificarea structurii moleculare prin metode spectroscopice</i> ”, Editura Presa Universitară Clujeană, 2004 Optională: 2. I. Pogany, M. Banciu, “ <i>Metode fizice în chimia organică</i> ” ed. Stiințifică, 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 5. K. Nakamoto, „ <i>Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds</i> ” John Wiley and Sons, 1986.		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații

Caracteristici ale radiației electromagnetice	Studiu de caz	1 seminar
Spectrometre FT-IR, condiționarea probelor și înregistrarea spectrelor IR.	Studiu de caz	1 laborator
Atribuiți structurale bazate pe absorbții caracteristice înregistrate în spectrele IR	Interpretare spectre IR compusi organici/anorganici	1 seminar
Spectrometre UV-Viz, condiționarea probelor, înregistrarea spectrelor UV-Viz	Studiu de caz	1 laborator
Atribuiți structurale bazate pe absorbții caracteristice înregistrate în spectrele UV-Viz	Interpretare spectre UV-Viz compusi organici/anorganici	1 seminar
Spectrometre RMN, condiționarea probelor, înregistrarea spectrelor RMN.	Studiu de caz	1 laborator
Atribuiți structurale bazate pe interpretarea deplasării chimice din spectrele $^1\text{H}$ -RMN	Interpretare spectre $^1\text{H}$ -RMN	1 seminar
Atribuiți structurale bazate pe interpretarea cuplajelor și valorii integralelor din spectrele $^1\text{H}$ -RMN	Interpretare spectre $^1\text{H}$ -RMN	1 seminar
Atribuiți structurale bazate pe interpretarea spectrelor $^{13}\text{C}$ - $^{19}\text{F}$ , $^{31}\text{P}$ - RMN	Interpretare spectre $^{13}\text{C}$ -RMN	1 seminar
Spectrometre de masă, condiționarea probelor, înregistrarea spectrelor de masă	Studiu de caz	1 laborator
Atribuiți structurale bazate pe interpretarea spectrelor de masă	Interpretare spectre EI-MS	1 seminar
Atribuirea structurii compușilor organici și organometalici prin interpretarea combinată a spectrelor IR, UV-Viz, SM și RMN.	Studii de caz	3 seminarii
Bibliografie 1. A. T. Balaban, M. Banciu, I. Pogany, “Aplicații ale metodelor fizice în chimia organică”, ed. Științifică și Enciclopedică, București, 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 conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului**

- Conținutul acestei discipline este foarte util în evaluarea/asigurarea calității produselor de sinteză chimică și a materialelor, medicamente și alimente, venind în întâmpinarea nevoilor angajatorilor situați atât în sfera producției cât și în cea a desfacerii produselor de sinteză chimică.

**10. Evaluare**

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Cunoașterea principiului fizico-chimic care stă la baza înregistrării spectrelor IR, UV-Viz, RMN și de masă.	Examen scris din 3 subiecte teoretice + atribuirea structurii moleculare pentru	90%
	Cunoașterea parametrilor spectrali tipici fiecărei metode spectroscopice studiate.		

	Capacitatea de a efectua atribuire structurale corecte bazate pe analiza combinată a parametrilor spectrali specifici fiecărei metode spectroscopice studiate.	doi compuși uzuali, pe baza interpretării spectrelor lor IR, UV-Viz, RMN si MS	
10.5 Seminar/laborator	Înțelegerea și însușirea problematicii tratate la curs si seminar	Rezolvare teme pe parcurs	10%
	Capacitatea de utilizare adecvată a conceptelor si metodelor		
10.6 Standard minim de performanță			
Cunoașterea parametrilor spectrali tipici fiecărei metode spectroscopice (IR, UV-Viz, <sup>1</sup> H-RMN si MS)			

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

Lect.Dr.Emese Gal

Lect.Dr.Emese Gal

16.04.2019

Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

25.04.2019

Dr. Szabó Gabriella-Stefânia