

## 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	Inginerie chimică
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Inginerie chimică / Inginer chimist

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Analiză Structurală în Chimie - <b>CLR2074</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. Dr. Ing. Castelia Cristea (modul organică) Conf. Dr. Ciprian I. Raț (modul anorganică)						
2.3 Titularul activităților de seminar	Vacant (modul organică) Conf. Dr. Ciprian I. Raț (modul anorganică)						
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	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					17
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					7
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat					2
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"> <li>Chimie Generală</li> <li>Chimie Anorganică</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>• Studenții vor primi suportul de curs</li><li>• Se va stimula participarea interactivă</li><li>• Studenții vor păstra închise telefoanele mobile pe durata prelegerilor și seminariilor</li></ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"><li>• Studenții 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, spectrometrie de masă)</li><li>• Identificarea metodelor spectroscopice (care fac obiectului cursului) aplicabile în analiza structurală a compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici și organometalici</li><li>• 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</li><li>• Să dezvolte abilitatea de a determina structura moleculară în soluție sau stare solidă a compușilor anorganici, organici și organometalici simpli cu ajutorul datelor spectroscopice</li><li>• 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</li><li>• Abilitatea de utiliza datele structurale ale compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici și organometalici simpli, obținute prin difracție de raze X pe monocristal</li><li>• Procesarea și interpretarea datelor spectroscopice</li><li>• 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</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 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>Dobândirea de noțiuni privind caracterizarea structurală a compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici și organometalici simpli</li></ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"><li>Să înțeleagă principiul fizic al interacțiunii radiației electromagnetice cu substanța</li><li>Să identifice metodele spectroscopice adecvate pentru caracterizarea structurală a compușilor anorganici, organometalici și a compușilor coordinativi simpli</li><li>Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază privind spectroscopia IR și Raman pentru investigarea și identificarea structurii moleculare în soluție și în stare solidă</li><li>Dobândirea cunoștințelor teoretice privind spectroscopia UV-Viz pentru investigarea și identificarea structurii moleculare în soluție</li><li>Utilizarea tehnicilor RMN pentru caracterizarea structurală în soluție a compușilor organici, organometalici și a compușilor coordinativi</li><li>Dobândirea cunoștințelor teoretice privind spectrometria de masă pentru investigarea și identificarea structurii moleculare, precum și utilizarea datelor structurale obținute prin această metodă</li><li>Dobândirea cunoștințelor teoretice privind difracția de raze X pe monocristal</li></ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs (modul organică)	Metode de predare	Observații
Interacțiunea radiației electromagnetice cu structuri moleculare	Prelegere 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 Suport PowerPoint	1 prelegere (2 ore)
Spectroscopie UV-Viz (principii și reguli de selecție, principiul aparaturii, tipuri de tranziții electronice în compuși organici nesaturați și aromatici, factori structurali care determină poziția benzilor de absorbție)	Prelegere Suport PowerPoint	1 prelegere (2 ore)
Rezonanța Magnetică Nucleară (principiul fizic principiul aparaturii) <sup>1</sup> H-RMN (parametri spectrali: deplasarea chimică)	Prelegere Suport PowerPoint	1 prelegere (2 ore)
<sup>1</sup> H-RMN: Cuplajul spin-spin și integrala semnalelor în spectre ale compușilor organici	Prelegere Suport PowerPoint	1 prelegere (2 ore)
<sup>13</sup> C-RMN (deplasare chimică, spectre cu decuplare de bandă largă, cu decuplare parțială, APT, DEPT)	Prelegere Suport PowerPoint	1 prelegere (2 ore)
Spectrometrie de masă (principiul de bază, principiul aparaturii, procese de fragmentare în EI-MS)	Prelegere Suport PowerPoint	1 prelegere (2 ore)
Bibliografie: Suportul PPT al prelegerii de la curs în format pdf.		

Obligatorie:

1. L. David, C. Cristea, O. Cozar, L. Găină, „Identificarea structurii moleculare prin metode spectroscopice”, Ed. Presa Universitară Clujeană, Cluj-Napoca 2004.

Opțională:

2. I. Pogany, M. Banciu, „Metode fizice în chimia organică” Ed. Științifică, București 1972.

3. S. Mager, „Analiza Structurală Organică”, Ed. St. Enciclopedică, București 1979.

4. B. Stuart, „IR spectroscopy fundamentals and applications”, John Wiley and Sons, Chichester 2004.

5. J. Keeler, „Understanding NMR spectroscopy”, Ed. Wiley, editia 2, 2011.

6. B. C. Smith, „Fundamentals of FT-IR spectroscopy”, Ed. CRC Press, editia 2, 2011.

7. K. Hiraoka „Fundamentals of Mass Spectrometry”, Ed. Springer, 2013.

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  
Conversația / Descrierea  
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 Tanabe-Sugano pentru configurații  $d^2$  și  $d^8$ ; calculul  $\Delta_o$  și B; benzi de transfer de sarcină ligand-metal și metal ligand)

Prelegerea / Explicația  
Conversația / Descrierea  
Problematizarea

2 cursuri (4 ore)

Spectroscopie RMN și RES (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; 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  
Conversația / Descrierea  
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  
Conversația / Descrierea  
Problematizarea

1 curs (2 ore)

Difracție de raze X (principiul metodei și instrumentația; difracția; simetrie; sisteme cristaline și grupuri spațiale de simetrie; factori structurali; structuri determinate prin difracție de raze X pe monocristal)

Prelegerea / Explicația  
Conversația / Descrierea  
Problematizarea

1 curs (2 ore)

Bibliografie obligatorie:

1. R. Micu Semeniuc, *Structura combinațiilor anorganice*, curs litografiat: Cluj-Napoca, 1978.

2. A. Pui, N. Cornei, D. G. Dănuț, *Analiză structurală anorganică*, Performantica: Iași, 2008.

3. Suport de curs, prezentare PowerPoint.

Bibliografie opțională:

1. E. A. V. Ebsworth, D. W. H. Rankin, S. Cradock, *Structural Methods in Inorganic Chemistry*, Blackwell: Oxford, 1987.
2. D. W. Rankin, N. W. Mitzel, C. A. Morrison, *Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry*, John Wiley & Sons: Chichester, 2013.
3. R. V. Parish, *NMR, NQR, EPR and Moessbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry*, Ellis Horwood: New York, 1990.
4. J. H. Gross, *Mass Spectrometry*, Springer: Berlin, 2004.
5. W. Henderson, J. S. McIndoe, *Mass Spectrometry of Inorganic, Coordination and Organometallic Compounds*, John Wiley & Sons: Chichester, 2005.
6. 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.
7. E. D. Solomon, A. B. P. Lever, *Inorganic Electronic Structure and Spectroscopy*, Vol. 1 - Methodology, John Wiley & Sons: Hoboken, 2006.
8. W. Massa, *Crystal Structure Determination*, Springer: Berlin, 2004.
9. 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
Atribuirii structurale bazate pe absorbții caracteristice înregistrate în spectrele IR ale compușilor organici (hidrocarburi și derivați funcționali)	Interpretare spectre IR compuși organici	1 seminar (2 ore)
Atribuirii structurale bazate pe absorbții caracteristice înregistrate în spectrele UV-Viz ale compușilor organici (conținând cromoforul butadienic și carbonil $\alpha,\beta$ -nesaturat)	Interpretare spectre UV-Viz compuși organici	1 seminar (2 ore)
Atribuirii structurale bazate pe interpretarea deplasării chimice din spectrele $^1\text{H}$ -RMN ale compușilor organici	Interpretare spectre $^1\text{H}$ -RMN	1 seminar (2 ore)
Atribuirii structurale bazate pe interpretarea cuplajelor și valorii integralelor din spectrele $^1\text{H}$ -RMN ale compușilor organici	Interpretare spectre $^1\text{H}$ -RMN	1 seminar (2 ore)
Atribuirii structurale bazate pe interpretarea spectrelor $^{13}\text{C}$ -RMN ale compușilor organici.	Interpretare spectre $^{13}\text{C}$ -RMN	1 seminar (2 ore)
Atribuirii structurale bazate pe interpretarea spectrelor de masă ale compușilor organici.	Interpretare spectre EI-MS	1 seminar (2 ore)
Atribuirea structurii moleculare a unor compuși organici prin interpretarea combinată a spectrelor IR, UV-Viz, SM și RMN (studiu de caz).	Interpretare spectre	1 seminar (2 ore)
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”, 4 <sup>th</sup> Ed, John Wiley and Sons, 2007.		
8.2 Seminar / laborator (modul anorganică)		
Interpretarea de spectre IR și Raman ale unor compuși anorganici și coordinați. Atribuirea structurii pe bază de spectre IR	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	2 seminarii (4 ore)
Tabele de microstări. Deducerea termenilor simbol pentru diferite configurații electronice.	Explicația; Conversația; Descrierea;	2 seminarii (4 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	Problematizarea; Studiul de caz	
Interpretarea de spectre RMN ( $^{19}\text{F}$ , $^{31}\text{P}$ , etc.) ale unor compuși anorganici și organometalici. Atribuirea structurii în soluție pe baza spectrelor RMN multinucleare	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	2 seminarii (4 ore)
Interpretarea de spectre de masă ESI ale compușilor anorganici și organometalici	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"> <li>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 sinteză chimică.</li> <li>Cunoașterea și utilizarea metodelor spectroscopice de caracterizare a compușilor anorganici, organici, organometalici sau a complexilor este în concordanță cu competențele din Suplimentul la diplomă și calificările din ANC.</li> </ul>
--

### 10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
<b>Modul organică</b>			
10.4 Curs	Cunoașterea principiului fizic care stă la baza înregistrării spectrelor IR, UV-Viz, RMN și SM. 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.	Examen scris	90%
10.5 Seminar / laborator	Înțelegerea și însușirea problematicei tratate la curs și seminar Capacitatea de utilizare adecvată a conceptelor și metodelor	Rezolvare teme pe parcurs	10%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> <li>Cunoașterea parametrilor spectrali tipici fiecărei metode spectroscopice (IR, UV-Viz, RMN și SM)</li> </ul>			
<b>Modul anorganică</b>			
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs	Examen	90%
10.5 Seminar / laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar Calitatea referatelor pregătite	rezolvarea temelor corespunzătoare tuturor seminariilor – se predau conform graficului stabilit la începutul semestrului	10%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> <li>Nota 5 (cinci) atât la rezolvarea temelor, a testele primite la curs în timpul semestrului, respectiv la examen.</li> </ul>			
<b>Nota finală</b>			

<b>Media notelor obținute la cele 2 module (organică, respectiv anorganică)</b>
---

Data completării

18 martie 2019

Semnătura titularului de curs

Conf. Dr. Castelia Cristea



Semnătura titularului de seminar

Conf. Dr. Ciprian I. Raț



Conf. Dr. Ciprian I. Raț



Data avizării în departament

09 mai 2019

Semnătura directorului de departament

Acad. Cristian Silvestru

