

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Chimie
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Masterat
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie avansată / master în chimie

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Proprietăți magnetice și spectrale ale combinațiilor coordinative și organometalice - CMR6126						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. Dr. Ciprian I. Raț						
2.3 Titularul activităților de seminar	Conf. Dr. Ciprian I. Raț						
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	C	2.7 Regimul disciplinei	DS

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					17
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					24
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat					12
Examinări					2
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	• Nu este cazul
4.2 de competențe	• Cunoștințe de bază în chimie anorganică și analiză structurală

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise • Nu va fi acceptată întârzierea
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții se vor prezenta la seminar/laborator cu telefoanele mobile închise • Predarea referatului de laborator/seminar se va face cel târziu în săptămâna următoare desfășurării efective a lucrării • Pentru predarea cu întârziere se penalizează cu 0,5 puncte/zi

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<p>Caracterizarea structurală complexă de compuși anorganici, bioanorganici, organici, organometalici respectiv a asociațiilor supramoleculare</p> <ul style="list-style-type: none"> • Identificarea metodelor adecvate și specifice pentru caracterizarea structurală complexă a compușilor anorganici, organometalici și a asociațiilor supramoleculare • Stabilirea modalităților de atribuire a structurii și corelarea informației oferite de diverse metode de caracterizare • Utilizarea adecvată a metodelor specifice de caracterizare structurală a compușilor anorganici, organometalici și a asociațiilor supramoleculare • Analiza critică a metodelor de caracterizare structurală a compușilor anorganici, organometalici și a asociațiilor supramoleculare • Elaborarea unui proiect bazat pe date de literatură și experimentale pentru caracterizarea structurală completă a unui reprezentant din clasele de compuși studiate <p>Studiul relației structură-proprietăți în design-ul, obținerea și caracterizarea unor materiale cu diverse aplicații</p> <ul style="list-style-type: none"> • Descrierea și utilizarea de concepte, teorii și metode avansate în identificarea particularităților structurale care conferă unor compuși potențial aplicativ • Stabilirea modalităților teoretice și experimentale de corelare structură-proprietăți • Utilizarea relației structură-proprietăți în determinarea potențialului aplicativ al compușilor anorganici, organometalici și a asociațiilor supramoleculare • Analiza critică a diverselor abordări teoretice și experimentale în determinarea proprietăților care recomandă un compus/o clasă de compuși pentru utilizarea ca material <p>Utilizarea de software specific pentru prelucrarea datelor spectroscopice obținute prin diferite metode</p>
Competențe transversale	Nu este cazul

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Dobândirea de cunoștințe referitoare la relația structura-proprietăți în chimia coordinativă și cea organometalică
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Însușirea de cunoștințe referitoare la investigarea structurală a compușilor anorganici și organometalici prin spectroscopie RMN, spectrometrie de masă, RES, spectroscopie electronică și vibrațională, difracție de raze X • Dobândirea de abilități în interpretarea datelor spectroscopice și aprecierea proprietăților generate de compușilor anorganici și organometalici • Relația structură-proprietăți – aplicații

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1 Noțiuni introductive. Relația structură-proprietăți	Prelegerea; Explicația; Conversația	
8.1.2 Spectroscopie RMN. RMN multinuclear	Prelegerea; Explicația; Conversația	
8.1.3-5 Spectroscopie RMN. RMN bidimensional	Prelegerea; Explicația; Conversația	
8.1.6 Spectroscopie RMN. RMN dinamic, parametri cinetici și termodinamici	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	

8.1.7 Spectrometrie de masă. Aplicații	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea	
8.1.8 Proprietăți magnetice	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea Problematizarea;	
8.1.9 Spectroscopie Moessbauer	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea Problematizarea	
8.1.10-11 Difracție de raze X pe monocristal și pe pulbere	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea Problematizarea	
8.1.12-13 Descrierea structurii și atribuirea proprietăților compușilor pe baza datelor spectrale complementare	Prelegerea; Explicația; Conversația; Descrierea Problematizarea	
8.1.14 Colocviu		
Bibliografie 1. E. A. V. Ebswoth, D. W. H. Rankin, S. Cradock, K. Raymond, <i>Structural Methods in Inorganic Chemistry</i> , Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1991. 2. A. Silvestru, <i>Spectrometrie de masă</i> , Editura Casa Cărții de Știință: Cluj-Napoca, 2005. 3. W. Kemp, <i>NMR in Chemistry</i> , MacMillan Education: London, 1986. 4. R. V. Parish, <i>NMR, NQR, EPR and Moessbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry</i> , Ellis Horwood: Chichester, 1990. 5. J. E. Huheey, E. Keiter, R. Keiter, <i>Anorganische Chemie. Prinzipien von Struktur und Reaktivitaet</i> , Walter de Gruyter: Berlin, 1995. 6. C. L. Lepadatu, M. Andruh, <i>Forma Moleculelor Anorganice</i> , Editura Academiei Române: București, 1998. 7. H. Friebolin, <i>Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy</i> , Wiley-VCH: Weinheim, 1998. 8. M. T. Weller, N. A. Young, <i>Characterisation Methods in Inorganic Chemistry</i> , Oxford University Press: Oxford, 2018. 9. W. Massa, <i>Crystal Structure Determination</i> , Springer: Berlin, 2004. 10. Suport de curs, prezentare PowerPoint.		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1-6 Aplicații în analiza structurală a compușilor organometalici și coordinativi prin spectroscopie RMN. Aplicații RMN în studiul unor procese dinamice. Simularea spectrelor RMN. Utilizarea software specific (Topspin, MestReNova)	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8.2.7-8 Analiza și interpretarea spectrelor de masă. Utilizarea software specific (Maspec, MestReNova, Xcalibur)	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8.2.9-12 Analiza și interpretarea datelor de difracție de raze X. Utilizarea software specific (Diamond, Mercury, Platon, etc.) și baze de date specifice (CSD, ICSD, COD, etc.)	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
8.2.13-14 Studii structurale asupra unor compuși organometalici și coordinativi prin metode complementare	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
Bibliografie 1. E. A. V. Ebswoth, D. W. H. Rankin, S. Cradock, K. Raymond, <i>Structural Methods in Inorganic Chemistry</i> , Blackwell Scientific Publications: Oxford, 1991. 2. A. Silvestru, <i>Spectrometrie de masă</i> , Editura Casa Cărții de Știință: Cluj-Napoca, 2005. 3. W. Kemp, <i>NMR in Chemistry</i> , Macmillan, 1986. 4. R. V. Parish, <i>NMR, NQR, EPR and Moessbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry</i> , Ellis Horwood: Chichester, 1990.		

5. J. E. Huheey, E. Keiter, R. Keiter, *Anorganische Chemie. Prinzipien von Struktur und Reaktivitaet*, Walter de Gruyter: Berlin, 1995.
6. C. L. Lepădatu, M. Andruh, *Forma Moleculelor Anorganice*, Editura Academiei Române: București, 1998.
7. H. Friebolin, *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*, Wiley-VCH: Weinheim, 1998.

9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

- Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina Proprietăți magnetice și spectrale ale combinațiilor coordinative și organometalice studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele din Suplimentul la diplomă și calificările din ANC.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la curs Rezolvarea corectă a problemelor	Colocviu – accesul este condiționat de prezentarea referatelor corespunzătoare tuturor temelor date spre rezolvare. Intenția de fraudă la colocviu se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la colocviu se pedepsește prin exmatriculare, conform regulamentului ECST al UBB	100%
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar/laborator Rezolvarea corectă a problemelor Calitatea referatelor pregătite	Referatele corespunzătoare tuturor temelor de seminar se predau conform graficului stabilit la începutul semestrului.	
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> • Nota 5 (cinci). 			

Data completării

06 aprilie 2022

Semnătura titularului de curs

Conf. Dr. Ciprian I. Raț



Semnătura titularului de seminar

Conf. Dr. Ciprian I. Raț



Data avizării în departament

20 aprilie 2022

Semnătura directorului de departament

Acad. Dr. Cristian Silvestru

