

## 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 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studiu / Calificarea	<b>CISOPC maghiara</b> /Inginer Chimist <b>Chimie maghiara</b> /Chimist

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Analiză Structurală în Chimie</b>						
Codul disciplinei	<b>CLM2076</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	<b>Conf. Dr. Emese Gál</b>						
2.3 Titularul activităților de seminar	<b>Conf. Dr. Emese Gál</b>						
2.4 Anul de studiu	IV, III	2.5 Semestrul	5	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	DF

### 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					7
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat					3
Examinări					3
Alte activități: .....					
3.7 Total ore studiu individual	44				
3.8 Total ore pe semestru	100				
3.9 Numărul de credite	4				

### 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 primi suportul de curs</li> <li>Se va stimula participarea interactivă</li> <li>Nu va fi acceptată întârzierea</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

<b>Competențe profesionale</b>	<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.</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 compușilor organici.</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 compușilor organici.</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 compușilor organici.</li> <li>Să formuleze, să dezvolte și să aplice creativ soluții pentru probleme de analiza fizico-chimică prin metode spectroscopice a compușilor organici în contexte bine definite.</li> </ul>
<b>Competențe transversale</b>	<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 compușilor organici 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-Vis), ale rezonanței magnetice nucleare (RMN) și ale spectrometriei de masă (MS).</li> <li>Să înțeleagă principiul aparaturii utilizate în spectroscopia IR, UV-Vis, 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 coordonare</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Etape de cercetare științifică în Chimia Organică. 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 GC-MS	prelegere	2 ore/curs
8.1.3. Determinarea structurii prin metode de difracție (raze X, neutroni și electroni) și prin metoda fotoelectronica (PES prin XPS și UPS)	prelegere	2 ore/curs
8.1.3. Determinarea structurii moleculare prin metode de absorbție (UV-Vis, IR, MW și NMR). Interacțiunea radiației electromagnetice cu structuri moleculare	prelegere	2 ore/curs

8.1.4. Spectroscopie UV-Vis (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-Vis cu efectele electronice, corelarea spectrelor UV-Vis 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. Spectrometrie de masă (principiul de bază, principiul aparaturii)	prelegere	2 ore/curs
8.1.9. Spectrometrie de masă, procese de fragmentare în EI-MS.	prelegere	2 ore/curs
8.1.10. Spectroscopia de Rezonanță Magnetică Nucleară - principii si reguli de selecție	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 <sup>1</sup> H-RMN complexe	prelegere	2 ore/curs
8.1.14. Atribuirea structurii moleculare prin interpretarea combinată a spectrelor MS, UV-Vis, 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: 1. I. Pogany, M. Banciu, “ <i>Metode fizice în chimia organică</i> ” ed. Stiintifică, București 1972. 2. S. Mager, « <i>Analiza Structurală Organică</i> » Ed St. Enciclopedică, București 1979. 3. B. Stuart „ <i>IR spectroscopy fundamentals and applications</i> ” John Wiley and Sons, 2004 4. 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
8.2.1. Caracteristici ale radiației electromagnetice	Studiu de caz	1 seminar
8.2.2. Spectrometrie UV-Vis, condiționarea probelor, înregistrarea spectrelor, atribuire structurale bazate pe absorbții caracteristice înregistrate în spectrele UV-Vis.	Interpretare spectre UV-Vis compusi organici	1 laborator
8.2.3. Spectrometre FT-IR, condiționarea probelor și înregistrarea spectrelor IR.	Interpretare spectre IR compusi organici.	1 laborator

	Studiu de caz	
8.2.4. Atribuire structurale bazate pe absorbții caracteristice înregistrate în spectrele IR.	Studiu de caz	1 laborator
8.2.5. Spectrometre de MS, înregistrarea spectrelor, atribuire structurale bazate pe fragmentări specifice.	Interpretare spectre MS compusi organici. Interpretare spectre EI-MS	1 laborator
8.2.6. Spectrometrie MS- atribuire structurale bazate pe fragmentări specifice.	Studiu de caz	1 seminar
8.2.7. Spectrometre RMN, condiționarea probelor, înregistrarea spectrelor RMN.	Înregistrare spectre. Interpretare spectre.	1 laborator
8.2.8. Atribuire structurale bazate pe interpretarea deplasării chimice din spectrele $^1\text{H}$ -RMN	Interpretare spectre $^1\text{H}$ -RMN	1 seminar
8.2.9. Atribuire structurale bazate pe interpretarea cuplajelor și valorii integralelor din spectrele $^1\text{H}$ -RMN	Interpretare spectre $^1\text{H}$ -RMN	1 seminar
8.2.10. Atribuire structurale bazate pe interpretarea cuplajelor și valorii integralelor din spectrele $^1\text{H}$ -RMN	Studiu de caz	1 seminar
8.2.11. Atribuire structurale bazate pe interpretarea spectrelor $^{13}\text{C}$ RMN	Interpretare spectre $^{13}\text{C}$ -RMN	1 laborator
8.2.12. Atribuirea structurii compușilor organici prin interpretarea combinată a spectrelor IR, UV-Vis, MS și RMN.	Studii de caz	3 seminar
Bibliografie 1. A. T. Balaban, M. Banciu, I. Pogany, “ <i>Aplicatii ale metodelor fizice în chimia organică</i> ”, ed. Stiințifică și Enciclopedică, București, 1983; 2. L. D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, „ <i>Organic structures from spectra</i> ” 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

- Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina Analiza structurală studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, 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
10.4 Curs	Cunoașterea principiului fizico-chimic care stă la baza înregistrării spectrelor IR, UV-Vis, RMN și de masă. Cunoașterea parametrilor spectrali tipici fiecărei metode spectroscopice studiate.	Examen scris din partea teoretică, respectiv atribuirea structurii pe baza interpretării	100%

	Capacitatea de a efectua atribuire structurale corecte bazate pe analiza combinată a parametrilor spectrali specifici fiecărei metode spectroscopice studiate.	spectrelor lor FT-IR, UV-Vis, RMN si MS. Accesul la examen este condiționat de rezolvarea problemelor primite pe parcursul seminariilor. Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	
10.5 Seminar/laborator	<p>Înțelegerea și însușirea problematicii tratate la curs si seminar</p> <p>Capacitatea de utilizare adecvată a conceptelor si metodelor</p>	Atribuirea structurii moleculare pentru doi compuși uzuali, pe baza interpretării spectrelor lor IR, UV-Viz, RMN si MS. Accesul la examen este condiționat de rezolvarea problemelor primite pe parcursul seminariilor.	0%
10.6 Standard minim de performanță			
<p>Nota 5 (cinci) la examen pe partea teoretică, cât și pe partea de rezolvarea problemelor. Media notelor obținute la cele două părți (teoretică și rezolvat probleme). Cunoașterea noțiunilor de baza în identificarea compușilor organice/ anorganice.</p> <p>Cunoașterea parametrilor spectrali tipici fiecărei metode spectroscopice (FT-IR, UV-Viz, <math>^1\text{H}</math>-, <math>^{13}\text{C}</math>-RMN si MS)</p>			

Data completării

2023.03.27

Semnătura titularului de curs

Conf. Dr. Emese Gal

Semnătura titularului de seminar

Conf. Dr. Emese Gal

Data avizării în departament

2023.04.10

Semnătura directorului de departament

Prof. Dr. Ing. Paizs Csaba