

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	Departamentul de Chimie și Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Technici Moderne de Sinteză în Chimie (TMSC) /master in Chimie

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei		Analiză structurală avansată					
Codul disciplinei		CMM6641					
2.2 Titularul activităților de curs				Lect. dr. Tamas Lovasz			
2.3 Titularul activităților de laborator/seminar				Lector dr. Tamas Lovasz			
2.4 Anul de studiu	II	2.5 Semestrul	IV	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	Opțional, 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					34
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					10
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					18
Tutoriat					3
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"> nu este cazul
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"> Dotări tehnice necesare susținerii prelegerilor (calculator, soft-uri necesare, videoproiector) Prezența studenților la cursuri
-------------------------------	--

	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții vor păstra închise telefoanele mobile pe durata prelegerilor și seminariilor
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> • Prezența obligatorie a studenților la orele de seminar • Studenții vor păstra închise telefoanele mobile pe durata seminariilor

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • Să își însușească noțiunile, teoriile și modelele utilizate în analiza prin metode fizice (spectroscopie IR, RMN, RES, Difrakție raze X și Spectrometrie de masă-MS) a compușilor organici, anorganici și de coordinare • Să utilizeze cunoștințele din domeniul chimiei generale și a chimiei organice pentru explicarea și interpretarea datelor experimentale obținute în urma analizei prin metode spectroscopice (IR, RMN, RES, Difrakție raze X și MS) a compușilor organici, anorganici și de coordinare. • Să dezvolte deprinderi de utilizare corectă a metodelor de analiza structurală avansată prin metode fizice (spectroscopie IR, RMN, RES și Spectrometrie de masă, Difrakție raze X) în determinarea structurii compușilor organici, anorganici și de coordinare. • Să demonstreze capacitatea de a selecta metode și criterii în vederea alegerii și aplicării unor metode de analiză structurală adecvate • Să formuleze, să dezvolte și să aplice creativ soluții pentru probleme de analiză fizico-chimică prin metode spectroscopice moderne a compușilor organici, anorganici și de coordinare, 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 maghiară, română și într-o limbă de circulație internațională, cu utilizarea: metodelor moderne de informare și comunicare (căutare în baze de date), respectiv prin utilizarea bibliografiei propuse.

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Acumularea cunoștințelor de specialitate referitoare la analiza structurală a compușilor organici, anorganici și de coordinare prin metode spectroscopice avansate
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Să înțeleagă principiul fizico-chimic al interacțiunii radiației electromagnetice cu structuri moleculare. Să înțeleagă principiul aparaturii utilizate în spectroscopia IR, RMN, RES, Difrakție de raze X și în MS. • Să învețe și să aplice conceptele de bază ale spectroscopiei IR, ale RMN, RES, Difrakție de raze X și ale spectrometriei de masă MS. • Să înțeleagă principiul aparaturii utilizate în spectroscopia IR, RMN, RES, Difrakție de raze X și în MS • Să dezvolte abilități de interpretare a datelor obținute prin: Difrakție de raze X precum și a spectrelor IR, RMN, RES și MS în scopul atribuirilor structurale ale compușilor organici, anorganici și de coordinare • Să dezvolte abilități de utilizare a unor programe de calculator specifice în scopul prelucrării datelor obținute prin metode spectroscopice

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Spectrometrie de Masă –SM (I) Principiul de bază, principiul aparaturii, reguli de fragmentare.	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului alternativ cu utilizarea tablei	Prelegere (2 ore/prelegere)
8.1.2. Spectrometrie de Masă –SM (II) Tehnici HRMS. Aplicații ale SM în studiul structurii proteinelor.	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului alternativ cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative încurajarea participării active a studenților la curs	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului și răspunsuri directe la întrebările studenților.
8.1.3. Spectroscopie IR (I) Principii si reguli de selecție, tipuri de vibrații, factori structurali care influențează frecvențele caracteristice de grup.	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului.	Prelegere (2 ore/prelegere)
8.1.4. Spectroscopie IR (II) Aplicații ale spectroscopiei IR în studiul proceselor catalitice. Spectroscopia IR <i>in situ</i> , spectroscopia în infraroșu de suprafață.	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului alternativ cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare.	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului și răspunsuri directe la întrebările studenților.
8.1.5. Dicroism circular vibrațional I. (VCD).	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților
8.1.6. Dicroism circular vibrațional II. (VCD).	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților
8.1.7. Spectroscopia RES (I) Principiul de bază, principiul aparaturii. Interpretarea unor spectre RES.	Prelegere cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative, insistarea pe cuvintele cheie .	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților
8.1.8. Spectroscopia RES (II) Aplicații ale spectroscopiei RES în studiul structurii unor compuși coordinativi, în studiul structurii metaloproteinelor precum și a unor radicali	Prelegere cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative, insistarea pe cuvintele cheie .	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților.
8.1.9. Spectroscopia de Rezonanță Magnetică Nucleară - Principii si reguli de selecție, principiul aparaturii, parametri spectrali. Tehnici avansate de RMN 1D și 2D – sisteme homonucleare: COSY; TOCSY; NOE, NOESY. Aplicații în domeniul biochimiei.	Prelegere cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative, insistarea pe cuvintele cheie .	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților
8.1.10. Tehnici avansate de RMN 1D și 2D – sisteme homonucleare: COSY; TOCSY; NOE, NOESY. Aplicații în domeniul biochimiei.		
8.1.11. Tehnici avansate de RMN 2D - sisteme heteronucleare: HETCOR, HMQC, HMBC, HSQC	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului alternativ cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative.	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților.
8.1.12. Utilizarea metodelor RMN in domeniul	Prelegere: prezentarea	Prelegere (2 ore/prelegere)

polimerilor. Spectroscopie RMN în stare solidă (Solid state NMR).	cursului cu ajutorul videoproietorului alternativ cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative.	Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților, încurajarea participării active a studenților la curs
8.1.13. Analiza structurală prin difracția cu raze X.(I) Rețele cristaline. Principii fizice. Tehnici de determinare. Descrierea aparaturii.	Prelegere. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative.	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților
8.1.14. Analiza structurală prin difracția cu raze X.(II) Determinarea structurii cristalelor. Rezolvarea problemei de fază. Metode de calcul.	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproietorului alternativ cu utilizarea tablei.	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților, încurajarea participării active a studenților la curs

Bibliografie:

Obligatorie:

1. P. J. Hore. Mágneses Magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004
2. L. David, C. Cristea, O. Cozar, L. Găină, "Identificarea structurii moleculare prin metode spectroscopice", Editura Presa Universitară Clujeană, 2004
3. M. J. N. Junk, "Assessing the Functional Structure of Molecular Transporters by EPR Spectroscopy", Springer Theses, Springer-Verlag, 2012
4. M. Ikeya, "New Applications of Electron Spin Resonance", World Scientific, 1993
5. H. Friebolin, Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy: 4th Ed., Wiley-VCH, Weinheim. 2005
6. W. Massa, Crystal Structure Determination, Springer, 2004

Opțională:

1. J. Bodis, A szerves kémia alapjai, Editura Presa Universitară Clujeană, 2006
2. I. Pogany, M. Banciu, "Metode fizice în chimia organică" Ed. Stiințifică, 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, 2004
5. K. Nakamoto, „Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds” John Wiley & Sons, 1986.
6. A. Bényei, V. Harmat, Röntgendifrakciós szerkezetvizsgálat, Debreceni Egyetem, 2013, (http://www.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tamop412A/2011_0025_vegy_1/ch11s04.html)
7. T. Lovasz, Suport de curs – RMN, RES, VCD – format pdf.

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Spectrometria de Masă – prezentarea aparatului HRMS, interpretarea datelor	Interpretare de spectre SM ai unor compuși organici/anorganici	2 ore/seminar
8.2.2. Spectrometria de Masă - interpretarea unor spectre de masă	Interpretare de spectre SM ai unor compuși organici/anorganici	2 ore/seminar
8.2.3. Spectroscopia IR interpretarea unor spectre.	Interpretare de spectre IR.	2 ore/seminar
8.2.4. Aplicații ale spectroscopiei IR în studiul proceselor catalitice – interpretarea unor spectre.	Interpretare de spectre IR.	2 ore/seminar
8.2.5. Determinarea configurației unor substanțe chirale cu ajutorul spectroscopiei VCD I.	Studiu de caz	2 ore/seminar
8.2.6. Determinarea configurației unor substanțe chirale cu ajutorul spectroscopiei VCD II.	Studiu de caz	2 ore/seminar
8.2.7. Spectroscopia RES - prezentarea aparatului, prezentarea programului utilizat pentru prelucrarea datelor.	Studiu de caz	2 ore/seminar
8.2.8. Interpretarea unor spectre RES a unor: radicali organici, compuși coordinativi, metaloproteine	Interpretare de spectre RES	2 ore/seminar
8.2.9. Interpretarea unor spectre RMN: ^1H , ^{13}C , ^{31}P .	Interpretare de spectre	2 ore/seminar
8.2.10. Spectroscopie RMN în stare solidă.	Interpretare de spectre	2 ore/seminar
8.2.11. Interpretarea unor spectre RMN 2D: ^1H - ^1H COSY TOCSY; NOE, NOESY	Interpretare de spectre RMN	2 ore/seminar

8.2.12. Interpretarea unor spectre RMN 2D: ^1H - ^{13}C HMQC, ^1H - ^{13}C HMBC	Interpretare de spectre RMN	2 ore/seminar
8.2.13. Utilizarea programelor de prelucrare a datelor cristalografice. Rețele cristaline.	Studiu de caz.	2 ore/seminar
8.2.14. Determinarea structurii cristalelor. Metode de calcul.	Studiu de caz.	2 ore/seminar

Bibliografie

1. P. J. Hore. Mágneses Magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004
2. A. T. Balaban, M. Banciu, I. Pogany, "Aplicatii ale metodelor fizice în chimia organică", Ed. Stiințifică și Enciclopedică, București, 1983; 3. L. D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, „Organic structures from spectra” John Wiley & Sons, 2007;
4. E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon, Tables of Spectral Data for Structure Determination of Organic Compounds, Second edition, Springer-Verlag, 1989.
5. M. Ikeya, "New Applications of Electron Spin Resonance", World Scientific, 1993
6. E. Zolotoyabko, "Basic Concepts of X-Ray Diffraction", Wiley-VCH, 2014

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 produșilor 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.
- Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina **Analiză structurală avansată** 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	Examen scris. Notarea se face de la 1-10 Participarea la examen este condiționată de prezența la seminar minim 90% din numărul total de ore.	<ul style="list-style-type: none"> • Răspunsuri la întrebări formulate de examinator • Rezolvarea unor probleme 	60%
10.5 Seminar	Înțelegerea și însușirea problematicei tratate la curs și seminar. Notarea se face de la 1-10 Capacitatea de utilizare adecvată a conceptelor și metodelor teoretice. Notarea se face de la 1-10	<ul style="list-style-type: none"> • Rezolvare de teme pe parcurs 	40%
10.6 Standard minim de performanță:			
<ul style="list-style-type: none"> • Cunoașterea parametrilor spectrali tipici fiecărei metode spectroscopice (IR, RMN, MS, RES, Difrakția cu raze X). Nota 5, atât pentru temele de la seminar cât și la examen conform baremului. 			

Data completării

6.04.2023

Semnătura titularului de curs

Lect. dr. Lovász Tamás



Semnătura titularului de seminar

Lect. dr. Lovász Tamás



Data avizării în departament

11.04.2023

Semnătura directorului de departament

