

FIȘA DISCIPLINEI

Caracterizarea materialelor solide prin difracție de raze X

Anul universitar 2026-2027

1. Date despre program

1.1. Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai
1.2. Facultatea	Facultatea de Chimie și Inginerie Chimică
1.3. Departamentul	Departamentul de Chimie
1.4. Domeniul de studii	Chimie
1.5. Ciclu de studii	Master
1.6. Programul de studii / Calificarea	Chimie criminalistică / master în chimie
1.7. Forma de învățământ	Învățământ cu frecvență

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	Caracterizarea materialelor solide prin difracție de raze X			Codul disciplinei	CMR6237
2.2. Titularul activităților de curs	Conf. dr. ing. Liliana BIZO/ Conf. dr. habil. Richard A. VARGA				
2.3. Titularul activităților de seminar	Conf. dr. ing. Liliana BIZO/ Conf. dr. habil. Richard A. VARGA				
2.4. Anul de studiu		2.5. Semestrul		2.6. Tipul de evaluare	Examen
2.7. Regimul disciplinei	Opțional		2.8. Tipul disciplinei		Disciplină de specializare (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. laborator	2
3.4. Total ore din planul de învățământ	56	din care: 3.5. curs	28	3.6. laborator	28
Distribuția fondului de timp pentru studiul individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					20
Tutoriat (consiliere profesională)					5
Examinări					4
Alte activități					
3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)				69	
3.8. Total ore pe semestru				125	
3.9. Numărul de credite				5	

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1. de curriculum	-
4.2. de competențe	-

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 laboratorului	<ul style="list-style-type: none">• Studenții se vor prezenta la laborator cu telefoanele mobile închise• Rezolvarea temelor de casă (referatele) se face pentru ședința următoare în care aceasta a fost enunțată• Predarea cu întârziere se penalizează cu 0,5 puncte/zi

6.1. Competențele dobândite în urma absolvirii programului de studii (se preiau din planul de învățământ)¹

Competențe profesionale	
Codul competenței	Competență
CP2	Aplică metode și tehnici științifice pentru investigarea fenomenelor, dobândind noi cunoștințe sau corectând și integrând cunoștințele anterioare
CP6	Utilizează echipamente de laborator, software-uri pentru sisteme de date și instrumente informatice
CP10	Citește, interpretează și rezumă în mod critic informații noi și complexe din diverse surse
Competențe transversale	
Codul competenței	Competență
CT2	Caută informații utilizând baze de date
CT4	Demonstrează disponibilitatea de a învăța
CT5	Gândește creativ și inovativ

6.2. Rezultatele învățării specifice programului de studii (se preiau din planul de învățământ)²

Rezultatele învățării vizate prin disciplină		
Codul competenței	Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)	Abilități academice specifice (Specific academic skills)
CP1, CP2, CP6, CP7, CP8, CP9, CP10	1. Cunoaște și gestionează metodele avansate de analiză și caracterizare, echipamentele utilizate pentru analiza probelor criminalistice și procedurile de control al substanțelor periculoase pentru sănătate	1. Aplică metode și tehnici moderne de analiză și caracterizare, folosește echipamentele specifice și utilizează procedurile de control al substanțelor periculoase pentru sănătate
CP1, CP2, CP3, CP4, CP5, CP6, CP7, CP8, CP10	2. Cunoaște conceptele, metodele și teoriile avansate pentru dezvoltarea de abordări teoretice și practice în activitatea de cercetare și de selectare a celor mai adecvate metode și echipamente utilizate la analizele criminalistice	2. Utilizează concepte, metode și teoriile avansate pentru dezvoltarea de abordări teoretice și practice în activitatea de cercetare și de selectare a celor mai adecvate metode și echipamente utilizate la analizele criminalistice

7. Rezultatele învățării specifice disciplinei

Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)
1. Studentul cunoaște noțiunile, conceptele, teoriile și modelele din domeniul chimiei criminalistice și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională.
2. Studentul înțelege, identifică și aplică conceptele, metodele și teoriile avansate pentru rezolvarea problemelor specifice chimiei criminalistice.
3. Studentul are cunoștințele necesare pentru efectuarea unui studiu bibliografic extins aferent temei de cercetare alese, organizarea și sintetizarea datelor cu însușirea terminologiei specifice domeniului, cunoașterea metodelor generale și specifice de cercetare.
4. Studentul cunoaște, selectează și utilizează adecvat metodele de cercetare pentru o interpretare corectă a rezultatelor și formularea de concluzii pertinente.
Abilități academice specifice (Specific academic skills)

¹ Se vor prelua din Planul de învățământ al programului de studii acele competențe profesionale și/sau transversale la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fișa disciplinei. Pentru fiecare competență se va prelua întregul enunț, inclusiv codul competenței, cu formularea care apare în planul de învățământ, fără modificări. Dacă nu se preia nici o competență din oricare din cele două categorii, se șterge linia din tabel aferentă acelei categorii.

² Se menționează rezultatele învățării specifice programului de studiu la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fișa. Enunțurile, preluate fără modificări din Planul de învățământ în funcție de tipul disciplinei (DF/DS/DC) se trec în dreptul competenței asociate.

1. Studentul are abilitatea de a înțelege și interpreta date complementare pentru caracterizarea structurală a materialelor, de a exprima și argumenta interpretarea datelor pe baza corelării rezultatelor și a comparării cu date din literatura de specialitate.
2. Studentul are abilitatea de a înțelege tehnicile, de a utiliza și interpreta informațiile obținute cu ajutorul metodelor de investigare a structurii compușilor chimici prin difracție de raze X.
3. Studentul are abilitatea de a întocmi referate scrise și de a susține public aceste referate.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare - învățare	Observații ³
Modul 1. Difracția de raze X pe pulberi		
8.1.1. Introducere. Prezentare generală a difracției pe pulberi. Domenii care utilizează difracția pe pulberi. Avantaje și limite. Comparatie cu difracția pe monocristal. Aplicații care utilizează difracția pe pulberi.	Prelegerea; Explicația; Conversația	2h
8.1.2. Structuri cristaline. Rețeaua cristalină. Celula elementară. Plane cristaline. Indici Miller. Elemente de simetrie și grupuri spațiale. Rețeaua reciprocă.	Prelegerea; Explicația; Conversația	2h
8.1.3. Generarea de raze X: concepte generale și terminologie. Setări experimentale tipice de laborator. Detectarea radiațiilor X. Colectarea datelor.	Prelegerea; Explicația; Conversația	2h
8.1.4. Tehnici de difracție în studiul structurii cristaline. Difracția de raze X, difracția de electroni, difracția de neutroni.	Prelegerea; Explicația; Conversația	2h
8.1.5. Metode și echipamente în difracția de raze X pe pulberi (XRPD).	Prelegerea; Explicația; Conversația	2h
8.1.6. Identificarea de faze și metode cantitative. Pregătirea probei pentru identificarea fazelor și analiza cantitativă. Colectare de date. XRPD ca metodă de amprentare.	Prelegerea; Explicația; Conversația	2h
8.1.7. Identificarea de faze și metode cantitative. Identificarea de faze utilizând fișierul XRPD.	Prelegerea; Explicația; Conversația	2h
8.1.8. Metode cantitative. Analiza Rietveld. Utilizarea cunoștințelor dobândite în analiza Rietveld - exemple anorganice.	Prelegerea; Explicația; Conversația	2h
Modul 2. Difracția de raze X monocristal		
8.1.9. Cristalul – metode de obținere și selecție. Experimentul – difracția și aparatura	Prelegerea; Explicația; Conversația	2h
8.1.10. Date experimentale – reducerea datelor obținute și corecția acestora. Prepararea datelor pentru prelucrare – simetria Laue și alegerea grupului spațial	Prelegerea; Explicația; Conversația	2h
8.1.11. Soluția – metode de obținere a soluției	Prelegerea; Explicația; Conversația, Problematizarea	2h
8.1.12. Rafinarea – crearea unui model și rafinarea	Prelegerea; Explicația; Conversația, Problematizarea	2h
8.1.13. Probleme comune și rezolvări	Prelegerea; Explicația; Conversația, Problematizarea	2h
8.1.14. Validarea și pregătirea pentru publicare	Prelegerea; Explicația; Conversația, Problematizarea	2h
Bibliografie Modul I 1. C. Kittel, Introduction to solid state physics, 8 th ed., 2005, John Wiley & Sons, ISBN 0-471-41526-X 2. A. Clearfield, J. H. Reibenspies, N. Bhuvanesh, Principles and Applications of Powder Diffraction, 2008, Blackwell Publishing Ltd., ISBN: 978-1-405-16222-7		

³ De exemplu aspecte organizatorice, recomandări pentru studenți, aspecte specifice legate de curs/seminar cum ar fi invitarea unor practicieni în domeniu etc.

3. R. E. Dinnebier, S. J. L. Billinge, Powder Diffraction Theory and Practice, 2008, RSC Publishing, ISBN: 978-0-85404-231-9

Modul II

4. W. Borchardt-Ott, Crystallography: An Introduction, 3rd ed., 2011, Springer. ISBN 978-3-642-16451-4

5. C. Hammond, The Basics of Crystallography and Diffraction, 3rd ed., 2009, Oxford University Press. ISBN 978-0-19-954644-2

6. W. Massa, Crystal Structure Determination, 1999, Springer. ISBN 978-3-642-05841-7

Bibliografia este disponibilă la titularii de curs.

8.2 Laborator	Metode de predare - învățare	Observații
Modul I. Difrakția de raze X pe pulberi		
8.2.1. Structuri cristaline. Rețeaua cristalină. Celula elementară. Plane cristaline. Indici Miller.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2h
8.2.2. Caracterizarea structurală a solidelor cristaline cu ajutorul difracției de raze X pe pulberi (XRPD). Principiul metodei și efectuarea de experimente.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2h
8.2.3. Caracterizarea structurală a solidelor cristaline cu ajutorul XRPD. Colectarea, prelucrarea și interpretarea datelor obținute experimental.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2h
8.2.4 Caracterizarea structurală a solidelor cristaline cu ajutorul XRPD. Identificarea fazelor cristaline.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2h
8.2.5 Caracterizarea structurală a solidelor cristaline cu ajutorul XRPD. Determinarea parametrilor celulei elementare. Determinarea dimensiunii cristalitelor (formula Scherrer).	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2h
8.2.6. Caracterizarea structurală a solidelor cristaline cu ajutorul XRPD. Introducere în calcule de structură folosind analiza Rietveld.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	2h
8.2.7. Recuperare lucrări/Aplicații/Concluzii	Conversația; Descrierea	2h
8.2.8. Evaluarea rezultatelor finale	Test	2h
Modul II. Difractia de raze X monocristal		
8.1.9. Metode de creștere practică a monocristalelor. Preselecția și selecția monocristalelor. Mânuierea monocristalelor sensibile.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea, Explorarea	2h
8.1.10. Difractometre de raze X pe monocristal. Componente și mod de utilizare. Achiziția datelor. Integrarea și scalarea. Simetria și factorii care determină grupul spațial. Exemple.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea, Explorarea	2h
8.1.11. Variante de a obține soluția pentru determinarea structurii cristaline. Metoda directă, metoda Patterson, charge flipping. Exemple.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea, Explorarea	2h
8.1.12. Rafinarea datelor. Metoda least squares. Rafinarea pe baza datelor F0 sau F02. Valori cristalografice R. Tehnici de rafinare. Exemple.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea, Explorarea	2h
8.1.13. Dezordini, erori și capcane. Atribuirea greșită a tipului de atomi, twins, erori de grup spațial. Exemple.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea, Explorarea	2h
8.1.14. Tabele de lungimi și unghiuri de legătură. Geometria și simetria structurală. Diagrama structurală. Densitatea de electroni. Exemple.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea, Explorarea	2h

Bibliografie

Modul I

1. M. Aluș, S. Simon, Metode experimentale avansate pentru studiul și analiza bio-nano-sistemelor, 2012, Casa Cărții de Știință, Cluj-Napoca, ISBN 9786061701155

2. Software Match! (<https://www.crystalimpact.com/match/>)

Modul II

3. W. Massa, Crystal Structure Determination, 1999, Springer, ISBN 978-3-642-05841-7

4. Software ShelXle. (<https://www.shelxle.org/shelx/eingabe.php>)



























5. Software Platon (<https://www.platonsoft.nl/platon/>)

6. Software Diamond. (<https://www.crystalimpact.com/diamond/>)

9. Evaluare

Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare ⁴	9.2 Metode de evaluare ⁵	9.3 Pondere din nota finală
9.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor- însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs Modul de gândire, corectitudinea și argumentarea soluțiilor propuse	Examen scris – accesul la examen este condiționat de predarea referatelor. Intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen. Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB	60%
9.5 Laborator	Corectitudinea răspunsurilor- însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la laborator Calitatea referatelor pregătite și utilizarea corectă a literaturii de specialitate Activitatea desfășurată la laborator	Referatele de laborator se predau cel târziu în ultima săptămână de activitate didactică. Testul de laborator se susține în ultima săptămână de activitate didactică.	40%
9.6 Standard minim de promovare			
<ul style="list-style-type: none"> • Condiție minimă de promovare a examenului: nota 5(cinci) la testul de laborator și nota 5(cinci) la examen. • Cunoașterea unei tehnici de caracterizare corespunzătoare fiecărui modul și interpretarea rezultatelor corespunzătoare acelei tehnici 			

10. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)⁶

		Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă						
								
								
								Nu se aplică nici o etichetă
								

⁴ Criteriile de evaluare trebuie să reflecte direct rezultatele învățării vizate la nivel de program de studii, respectiv la nivel de disciplină. Mai concret, se evaluează achizițiile de învățare menționate în rezultatele anticipate ale învățării.

⁵ Se recomandă stabilirea atât a metodelor de evaluare finală, cât și a strategiei de evaluare pe parcurs.

⁶ Selectați o singură etichetă, cea care, în conformitate cu [Procedura de aplicare a etichetelor ODD în procesul academic](#), se potrivește cel mai bine disciplinei. Dacă disciplina tratează tema dezvoltării durabile la modul general (de ex. prin prezentarea/introducerea cadrului general al dezvoltării durabile etc.) atunci se poate alocă eticheta generală de Dezvoltare Durabilă. Dacă niciuna dintre etichete nu descrie disciplina, selectați ultima opțiune: „Nu se aplică nici o etichetă”.

Data completării:

21.04.2026

Semnătura titularului de curs

Conf. dr. ing. Liliana BIZO

Semnătura titularului de seminar

Conf. dr. ing. Liliana BIZO

Conf. dr. habil. Richard A. Varga

Conf. dr. habil. Richard A. Varga

Data avizării în departament:

28.04.2026

Semnătura directorului de departament

Prof dr. habil. Monica Ioana Toşa