**FIŞA DISCIPLINEI**

**1. Date despre program**

|  |  |
| --- | --- |
| 1.1 Instituţia de învăţământ superior | Universitatea Babeş-Bolyai, Cluj-Napoca |
| 1.2 Facultatea | Facultatea de Chimie şi Inginerie Chimică |
| 1.3 Scoala Doctorala | Chimie |
| 1.4 Domeniul de studii | Chimie |
| 1.5 Ciclul de studii | Doctorat |
| 1.6 Programul de studiu / Calificarea | Doctorat |

**2. Date despre disciplină**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 2.1 Denumirea disciplinei | | | RMN şi difracţie de raze X în chimia organometalică | | | | | | |
| 2.2 Titularul activităţilor de curs | | | | | Acad. Prof. dr. Cristian SILVESTRU | | | | |
| 2.3 Titularul activităţilor de seminar | | | | | Acad. Prof. dr. Cristian SILVESTRU | | | | |
| 2.4 Anul de studiu | I | 2.5 Semestrul | | II | | 2.6. Tipul de evaluare | E# | 2.7 Regimul disciplinei | Op |

# doctorandul poate opta pentru participare la activitati fara examen sau cu examen

**3. Timpul total estimat** (ore pe semestru al activităţilor didactice)

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 3.1 Număr de ore pe săptămână | 3 | | Din care: 3.2 curs | | 1 | 3.3 seminar | 2 |
| 3.4 Total ore din planul de învăţământ | 36 | | Din care: 3.5 curs | | 12 | 3.6 seminar | 24 |
| Distribuţia fondului de timp: | | | | | | | ore |
| Studiul după manual, suport de curs, bibliografie şi notiţe | | | | | | | 120 |
| Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate şi pe teren | | | | | | | 120 |
| Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii şi eseuri | | | | | | | 44 |
| Tutoriat | | | | | | | 30 |
| Examinări | | | | | | |  |
| Alte activităţi: .................. | | | | | | | - |
| 3.7 Total ore studiu individual | | 314 | |  | | | |
| 3.8 Total ore pe semestru | | 350 | |
| 3.9 Numărul de credite | | 14 | |

**4. Precondiţii** (acolo unde este cazul)

|  |  |
| --- | --- |
| 4.1 de curriculum | • Nu este cazul |
| 4.2 de competenţe | • Nu este cazul |

**5. Condiţii** (acolo unde este cazul)

|  |  |
| --- | --- |
| 5.1 De desfăşurare a cursului | • Cursurile si seminariile se desfasoara in conditii de acces la internet si baze de date  • Studentii vor avea acces la baze de date (baze abonate de facultate/universitate)  • Se va stimula participarea interactiva  • Studenţii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise |
| 5.2 De desfăşurare a seminarului | • Studenţii se vor prezenta la seminar cu telefoanele mobile închise |

**6. Competenţele specifice acumulate**

|  |  |
| --- | --- |
|  | • Definirea și însușirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază utilizate în  analiza structurala prin Rezonanța Magnetică Nucleară (RMN), respectiv Difracție de  Raze X pe Monocristal specifice si utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională  • Utilizarea cunoştinţelor aprofundate din domeniul chimiei pentru explicarea și  interpretarea spectrelor RMN, respectiv analiza structurală a compușilor anorganici  (inclusiv coordinativi) și organometalici  • Procesarea și interpretarea datelor spectroscopice  • Dezvoltarea abilității de a determina structura moleculară în soluție sau stare solidă a  compușilor anorganici, organici și organometalici cu ajutorul datelor obținute din  spectrele RMN  • Utilizarea spectroscopiei RMN in solutie in studierea sistemelor dinamice (inclusiv  fluxionale)  • Abilitatea de a utiliza datele structurale ale compușilor anorganici (inclusiv coordinativi),  organici si organometalici, obținute prin difracție de raze X pe monocristal  • Utilizarea datelor de difracție de raze X pe monocristal in identificarea de aspecte din  domeniul chimiei supramoleculare  • Utilizarea softurilor specifice pentru prelucrarea spectrelor RMN si a datelor de difracție  de raze X pe monocristal  • Abilitatea de a întelege şi interpreta date complementare pentru caracterizarea  compușilor anorganici (inclusiv coordinativi), organici si organometalici, de a exprima şi argumenta interpretarea datelor pe baza corelării rezultatelor şi a comparării cu date din literatura de specialitate |
|  | • Executarea sarcinilor solicitate conform cerintelor precizate si în termenele impuse, cu  respectarea normelor de etica profesionala si de conduita morala, urmând un plan de lucru  prestabilit  • Rezolvarea sarcinilor solictate în concordanta cu obiectivele generale stabilite prin  integrarea în cadrul unui grup de lucru  • 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)  • Preocuparea pentru perfecţionarea rezultatelor activităţii profesionale prin implicarea în  activităţile desfăşurate  • Abilitatea de a întocmi referate scrise şi de a susţine public aceste referate |

**7. Obiectivele disciplinei** (reieşind din grila competenţelor acumulate)

|  |  |
| --- | --- |
| 7.1 Obiectivul general al disciplinei | • Dobândirea de noțiuni privind caracterizarea structurală a compușilor  anorganici (inclusiv coordinativi), organici și organometalici |
| 7.2. Obiectivele specifice | • Dobândirea cunoștințelor teoretice privind spectroscopia RMN si difracția  de raze X pe monocristal pentru investigarea și identificarea structurii  moleculare în soluție și în stare solidă  • Utilizarea tehnicilor RMN pentru caracterizarea structurală în soluție a  compușilor organici, organometalici și a compușilor coordinativi, inclusiv  studierea de procese dinamice in soluție  • Utilizarea difracției de raze X pe monocristal, inclusiv in investigarea  aspectelor de chimie supramoleculară |

**8. Conţinuturi**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 8.1 Curs | Metode de predare | Observaţii: |
| 8.1.1. Rezonanța Magnetică Nucleară - principiul metodei; izotopi activi RMN, standarde interne si externe, parametri spectrali | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia | 1 ora |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 8.1.2. Spectroscopie RMN multinuclear – 1H, 13C | Prelegerea; Explicaţia;  Conversaţia | 1 ora |
| 8.1.3. Spectroscopie RMN multinuclear –19F, 31P si alti izotopi activi RMN ai unor nemetale | Prelegerea; Explicaţia;  Conversaţia | 1 ora |
| 8.1.4. Spectroscopie RMN multinuclear –izotopi activi RMN ai unor metale; cuplajul spin-spin cu nuclee cu abundență 100%  sau mai mică de <100% - sateliți | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia | 1 ora |
| 8.1.5. Spectroscopie RMN. RMN bidimensional | Prelegerea; Explicaţia;  Conversaţia | 1 ora |
| 8.1.6. Spectroscopie RMN – corelații între geometria de coordinare, numărul de semnale și deplasarea chimică în spectrele compușilor anorganici și coordinativi | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea | 1 ora |
| 8.1.7. Molecule fluxionale | Prelegerea; Explicaţia;  Conversaţia | 1 ora |
| 8.1.8. Spectroscopie RMN – RMN dinamic, parametri cinetici și termodinamici | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea | 1 ora |
| 8.1.9. Difractia de raze X pe monocristal (principiul metodei și  instrumentația) | Prelegerea; Explicaţia;  Conversaţia; Descrierea | 1 ora |
| 8.1.10. Interpretarea datelor obtinute prin difractia de raze X pe monocristal. Descrierea si interpretarea fisierelor cif, a  tabelelor cristalografice, a parametrilor atomici. Raze atomice covalente, raze Van der Waals. | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea | 1 ora |
| 8.1.11. Interactiuni intra- si intermoleculare. Interactiuni necovalente – legaturi de hidrogen, legaturi hidrogen-pi, metal- pi, pi-pi stacking, metalofilice, etc. | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea |  |
| 8.1.12. Arhitecturi supramoleculare obtinute prin autoasamblare | Prelegerea; Explicaţia; Conversaţia; Descrierea |  |
| Bibliografie  1. D. W. Rankin, N. W. Mitzel, C. A. Morrison, *Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry*, John Wiley & Sons, Chichester, 2013.  2. R. V. Parish, *NMR, NQR, EPR and Moessbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry*, Ellis Horwood, New York, 1990.  3. H. Friebolin, *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*, Wiley-VCH, Weinheim, 1998.  4. W. Massa, *Crystal Structure Determination*, Springer, Berlin, 2004.  Bibliografie opțională:  1. I. Haiduc, J. J. Zuckerman, *Basic Organometallic Chemistry*, Walter de Gruyter, Berlin, 1985.  2. Ch. Elschenbroich, A. Salzer, *Organometallics - A Concise Introduction Chemistry*, VCH Verlag,  Weinheim, 1992.  3. R. H. Crabtree, *The Organometallic Chemistry of The Transition Metals*, 3rd Ed., John Willey & Sons, New York, 2001.  4. Kin-ya Akiba (Ed.), *Chemistry of Hypervalent Compounds*, Wiley-VCH, New York, 1999.  5. E. A. V. Ebsworth, D. W. H. Rankin, S. Cradock, *Structural Methods in Inorganic Chemistry*, Blackwell,  Oxford, 1987.  6. A. F. Wells, *Structural Inorganic Chemistry, 4th Ed.*, Oxford Univ. Press, London, 1975. | | |
| 8.2 Seminar | Metode de predare | Observaţii |
| 8.2.1-2. Aplicații ale spectroscopie RMN în analiza structurală a compușilor organometalici și coordinativi. Utilizarea de software specific (MestRENova). Interpretarea spectrelor 1H și 13C – considerații structurale bazate pe deplasări chimice 1H și 13C, valoarea integralelor semnalelor de rezonanța 1H, cuplaje spin-spin din spectrele 1H RMN ale compușilor organometalici. | Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea | 4 ore |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 8.2.3-4. Aplicații ale spectroscopie RMN în analiza structurală a compușilor organometalici și coordinativi. Interpretarea spectrelor bidimensionale. Atribuirea semnalelor de rezonanta 1H și 13C. | Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea | 4 ore |
| 8.2.5-6. Interpretarea de spectre RMN (19F, 31P, etc.) ale unor compuși anorganici și organometalici. Atribuirea structurii în soluție pe baza spectrelor RMN multinucleare. Simularea spectrelor RMN. | Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea | 4 ore |
| 8.2.7-8. Aplicații RMN în studiul unor procese dinamice. Spectre la temperatura variabila. Parametri cinetici și termodinamici | Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea; | 4 ore |
| 8.2.9-10. Analiza și interpretarea datelor de difracție de raze X pe monocristal. Utilizarea de software specific (Diamond, Mercury, Platon, etc.) și baze de date specifice (CSD, ICSD, etc.) | Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea; | 4 ore |
| 8.2.11-12 Utilizarea programelor specifice pentru pregatire datelor pentru publicare | Explicaţia; Conversaţia; Descrierea; Problematizarea; | 4 ore |
| **Colecțiile din ultimii 5 ani ai revistelor Angew. Chem. Int. Ed.; Chem. Eur. J.; Eur. J. Inorg. Chem; Chem. Commun.; Chem. Sci.; Inorg. Chem.; Dalton Trans. și Organometallics** | | |

**9. Coroborarea conţinuturilor disciplinei cu aşteptările reprezentanţilor comunităţii epistemice,**

**asociaţiilor profesionale şi angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului**

• Conținutul acestei discipline este foarte util in 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 sinteza chimică.

• Cunoașterea și utilizarea acestor metode moderne si complexe de caracterizare a compușilor anorganici,

organici, organometalici sau a complecșilor este în concordantă cu competentele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 1 – RNCIS.

**10. Evaluare# (doar pentru doctoranzii care solicita acest lucru)**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Tip activitate | 10.1 Criterii de evaluare | 10.2 metode de evaluare | 10.3 Pondere din  nota finală |
| 10.4 Curs | Corectitudinea răspunsurilor – însuşirea şi înţelegerea corectă a problematicii tratate | Examen oral | 60% |
| Modul de gândire, corectitudinea şi  argumentarea soluţiilor propuse |
| 10.5 Seminar/laborator | Activitatea desfăşurată la seminar | Prezentarea analizei de spectre si structuri | 40% |
| 10.6 Standard minim de performanţă | | | |
| • Nota 5 (cinci) | | | |

Data completării Semnătura titularului de curs Semnătura titularului de seminar

01 septembrie 2020

Data avizării în CSDC

Semnătura directorului SDC

05 septembrie 2020

Prof. Dr. Ion Grosu

Membru Corespondent al Academiei Romane