

## 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
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclu de studii	Licență
1.6 Programul de studiu / Calificarea	<b>Chimie</b> / Chimist

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Analiză Structurală Anorganică</b>						
Codul disciplinei	<b>CLR2473</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. Dr. Cristian Silvestru (post vacant)						
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof. Dr. Cristian Silvestru (post vacant)						
2.4 Anul de studiu	III	2.5 Semestrul	5	2.6. Tipul de evaluare	C	2.7 Regimul disciplinei	Op

### 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					15
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					5
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					33
Tutoriat					8
Examinări					8
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"> <li>Chimie Generală</li> <li>Chimie Anorganică</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>Studentii vor păstra închise telefoanele mobile pe durata prelegerilor și seminariilor</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</li> <li>Studentii se vor prezenta la seminar cu telefoanele mobile închise</li> </ul>

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>Identificarea metodelor și tehnicilor de caracterizare structurală a compușilor anorganici, organometalici și a compușilor coordinativi simpli</li> <li>Identificarea domeniului de aplicabilitate a metodelor spectroscopice care fac obiectului cursului și a informațiilor cu privire la structura compușilor care pot fi obținute din aceste metode</li> <li>Abilitatea de a determina structura moleculară în soluție sau stare solidă a compușilor anorganici, organometalici și a compușilor coordinativi simpli cu ajutorul datelor spectroscopice (RMN, IR, Raman, UV-Viz, spectrometrie de masă)</li> <li>Abilitatea de utiliza datele structurale ale compușilor anorganici, organometalici și a compușilor coordinativi simpli obținute prin difracție de raze X pe monocristal</li> <li>Procesarea și interpretarea datelor spectroscopice</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>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)</li> </ul>

## 7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>Dobândirea de noțiuni privind caracterizarea structurală a compușilor anorganici, organometalici și a compușilor coordinativi simpli</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>Înțelegerea principiul fizic al interacțiunii radiației electromagnetice cu substanța</li> <li>Identificarea a metodelor spectroscopice adecvate pentru identificare a compușilor anorganici, organometalici și a compușilor coordinativi simpli</li> <li>Utilizarea rezonanței magnetice nucleare (RMN) pentru caracterizarea structurală în soluție a compușilor organometalici și a compușilor coordinativi</li> <li>Dobândirea cunoștințelor teoretice privind spectrometria de masă pentru investigarea și identificarea structurii moleculare</li> <li>Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază privind spectroscopia IR și Raman pentru investigarea și identificarea structurii moleculare în soluție și în stare solidă</li> <li>Dobândirea cunoștințelor teoretice privind spectroscopia UV-Viz pentru investigarea și identificarea structurii moleculare în soluție</li> <li>Dobândirea cunoștințelor teoretice privind difracția de raze X pe monocristal și utilizarea datelor structurale obținute prin această metodă</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
Metode spectroscopice și aplicații ale acestora	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea	2 cursuri (4 ore)
Rezonanța magnetică nucleară	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea	4 cursuri (8 ore)
Spectrometrie de masă	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea	2 cursuri (4 ore)
Spectroscopie IR și Raman	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea	2 cursuri (4 ore)
Spectroscopie UV-Viz	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea	2 cursuri (4 ore)
Difracție de raze X pe monocristal	Prelegerea Explicația Conversația Descrierea Problematizarea	2 cursuri (4 ore)

### Bibliografie obligatorie:

1. R. Micu Semeniciu, *Structura combinațiilor anorganice*, Cluj-Napoca, 1978.
2. A. Pui, N. Cornei, D. G. Dănuț, *Analiză structurală anorganică*, Perfomantica, 2008.

### Bibliografie opțională:

1. E. A. V. Ebsworth, D. W. H. Rankin, S. Craddock, *Structural Methods in Inorganic Chemistry*, 2nd Ed., Blackwell, 1991.
2. H. Friebolin, *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*, Wiley-VCH, 1998.
3. R.V. Parish, *NMR, NQR, EPR and Moessbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry*, Ellis Horwood, 1990.
4. J. H. Gross, *Mass Spectrometry*, Springer, 2004.
5. C. G. Herbert, R. A. W. Johnstone, *Mass Spectrometry Basics*, CRC Press, 2002.
6. K. Nakamoto, *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*, Part A – Theory and Applications in Inorganic Chemistry, 6th Ed., John Wiley & Sons, 2008.
7. B. Stuart, *Infrared Spectroscopy - Fundamentals and Applications*, John Wiley & Sons, 2004.
8. E. D. Solomon, A. B. P. Lever, *Inorganic Electronic Structure and Spectroscopy*, Vol. 1 – Methodology, John Wiley & Sons, 2006.
9. W. Massa, *Crystal Structure Determination*, Springer, 2004.

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
Spectrul radiației electromagnetice. Interacțiunea radiației cu substanța	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Metode spectroscopice și scara de timp asociată acestor metode. Informații structurale obținute cu ajutorul metodelor spectroscopice	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Fenomenul rezonanței magnetice nucleare. Nuclee măsurabile prin cu ajutorul RMN. Deplasările chimice pentru $^1\text{H}$ și heteronuclee. Interpretare de spectre $^1\text{H}$ RMN	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Cuplări între nuclee și informații obținute din constantele de cuplaj. Spectre ale nucleelor cu spin $\frac{1}{2}$ și abundență scăzută. Decuplarea. Interpretare de spectre $^1\text{H}$ RMN	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Spectre INEPT. Interpretarea spectrelor $^{13}\text{C}$ , $^{19}\text{F}$ , $^{31}\text{P}$ RMN	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Spectre ale altor elementelor blocului <i>d</i> și ale elementelor grele ale blocului <i>p</i> . Corelații între geometria de coordonare și deplasarea chimică. Atribuirea structurii moleculare cu ajutorul spectrelor RMN multinucleare	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Metode de ionizare. Clasificarea elementelor în funcție de numărul de izotopi. Calcularea distribuției izotopice.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Interpretare de spectre de masă	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Tipuri de vibrații. Frecvențe caracteristice vibrațiilor de grup	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Aspecte caracteristice ale vibrațiilor de grup. Spectre IR ale metal carbonililor și hidrurilor	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Reguli de selecție pentru spectre electronice. Diagrame Tanabe-Sugano. Spectre ale compușilor hexacoordinați octaedrici ai ionilor $d^1$	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Benzi de transfer de sarcină ligand-metal și metal ligand. Spectre ale compușilor hexacoordinați octaedrici ai ionilor $d^9$	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Metode de difracție. Simetrie. Sisteme cristaline și grupuri spațiale de simetrie. Structuri determinate prin difracție de raze X pe monocristal	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Identificarea interacțiunilor necovalente în cristale	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea; Studiul de caz	1 seminar (2 ore)
Bibliografie opțională 1. E. A. V. Ebsworth, D. W. H. Rankin, S. Craddock, <i>Structural Methods in Inorganic Chemistry</i> , 2nd Ed., Blackwell, 1991. 2. H. Friebolin, <i>Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy</i> , Wiley-VCH, 1998. 3. R.V. Parish, <i>NMR, NQR, EPR and Moessbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry</i> , Ellis Horwood, 1990. 4. J. H. Gross, <i>Mass Spectrometry</i> , Springer, 2004. 5. C. G. Herbert, R. A. W. Johnstone, <i>Mass Spectrometry Basics</i> , CRC Press, 2002. 6. K. Nakamoto, <i>Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds</i> , Part A – Theory		

and Applications in Inorganic Chemistry, 6th Ed., John Wiley & Sons, 2008.

7. B. Stuart , Infrared Spectroscopy - Fundamentals and Applications, John Wiley & Sons, 2004.

8. E. D. Solomon , A. B. P. Lever, Inorganic Electronic Structure and Spectroscopy, Vol. 1 – Methodology, John Wiley & Sons, 2006.

9. W. Massa, Crystal Structure Determination, Springer, 2004.

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

- Conținutul disciplinei este în concordanță cu așteptările angajatorilor care au domeniul de activitate conex. Cunoașterea și utilizarea metodelor spectroscopice de caracterizare a compușilor anorganici, organometalici sau a complexilor este 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	<ul style="list-style-type: none"><li>• corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la curs</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• examen oral – accesul la examen este condiționat de susținerea colocviului de laborator și prezentarea referatelor de laborator corespunzătoare tuturor lucrărilor practice</li><li>• intenția de fraudă la examen se pedepsește cu eliminarea din examen</li><li>• fraudă la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECST al UBB</li><li>• <i>contestațiile</i> se rezolvă de către titularul de disciplină</li></ul>	60%
10.5 Seminar/laborator	<ul style="list-style-type: none"><li>• corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la laborator</li><li>• calitatea referatelor pregătite</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• rezolvarea temelor corespunzătoare tuturor laboratoarelor – se predau conform graficului stabilit la începutul semestrului</li></ul>	40%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"><li>• Nota 5 (cinci) atât la rezolvarea temelor cât și la examenul oral.</li></ul>			

Data completării

....06.06.2014....

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

Data avizării în departament

.....

Semnătura directorului de departament

Prof. dr. Cristian Silvestru

.....06.06.2014.....