

## 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
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclu de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie Clinica / master degree

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Metode de caracterizare structurală a materialelor și precursorilor (Methods for structural characterization of materials) – CMR7145</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. dr. Ion Grosu Conf. dr. Radu Silaghi-Dumitrescu Conf. dr. Gabriela Nemeș Conf. dr. Richard Varga Dr. Cosmin Coteț Conf. dr. Adrian Nicoara						
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof. dr. Ion Grosu Conf. dr. Radu Silaghi-Dumitrescu Conf. dr. Gabriela Nemeș Conf. dr. Richard Varga Dr. Cosmin Coteț Conf. dr. Adrian Nicoara						
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	DF*

\*DF, disciplina fundamentală

### 3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	3	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					28
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					16
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					16
Tutoriat					6
Examinări					3
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>Nu este cazul</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>• Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise</li><li>• Nu va fi acceptată întârzierea</li></ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"><li>• Studenții se vor prezenta la seminar cu telefoanele mobile închise</li><li>• Rezolvarea temelor de casă (referatele) se face pentru ședința următoare în care aceasta a fost enunțată</li><li>• Predarea cu întârziere se penalizează cu 0,5 puncte/zi</li></ul>

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"><li>• Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor din domeniul ingineriei materialelor și protecției mediului și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională</li><li>• Utilizarea cunoștințelor aprofundate din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru explicarea și interpretarea proceselor specifice ingineriei materialelor și protecției mediului</li><li>• Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor avansate pentru rezolvarea problemelor specifice ingineriei materialelor și protecției mediului</li><li>• Aplicarea conceptelor și teoriilor avansate din domeniul ingineriei materialelor și protecției mediului pentru elaborarea proiectelor și rezolvarea problemelor</li><li>• Abilitatea de a înțelege și interpreta date complementare pentru caracterizarea materialelor, de a exprima și argumenta interpretarea datelor pe baza corelării rezultatelor și a comparării cu date din literatura de specialitate</li><li>• Abilitatea de a înțelege tehnicile, de a utiliza și interpreta informațiile obținute cu ajutorul metodelor spectroscopice de investigare a structurii compușilor chimici, rezonanța magnetică nucleară și spectrometrie de masă</li><li>• Abilitatea de a identifica problemele de analiză unde metoda RES este aplicabilă, și de a extrage informații utile în privința identității și proprietăților materialelor</li><li>• Abilitatea de a identifica problemele de analiză unde metoda UV-VIS este aplicabilă, și de a extrage informații utile în privința identității și proprietăților materialelor</li><li>• Abilitatea de a explica și interpreta principiile și metodele electrochimice utilizate în caracterizarea structurală a materialelor</li><li>• Familiarizarea cu metoda BET și variantele ei pentru determinarea suprafeței specifice și a distribuției porilor; abilitatea de a înțelege relația structura-proprietăți (exemple pentru materiale catalitice), prin corelarea rezultatelor BET cu rezultate SEM</li></ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"><li>• Executarea sarcinilor solicitate conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit</li><li>• Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru</li><li>• Informarea și documentarea permanentă în domeniul sau de activitate în limba română</li><li>• Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate</li><li>• Abilitatea de a întocmi referate scrise și de a susține public aceste referate</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 materialelor și precursorilor utilizând tehnici specifice</li></ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"><li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice privind utilizarea metodei de rezonanță magnetică nucleară pentru investigarea structurii compușilor chimici</li><li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice privind utilizarea spectrometriei de masă pentru investigarea și identificarea structurii compușilor chimici</li><li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice și practice necesare pentru aplicarea spectroscopiei RES în studiul materialelor și precursorilor</li></ul>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice necesare și aplicarea acestora în utilizarea tehnicilor UV-VIS</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice necesare și aplicarea acestora în utilizarea tehnicilor de dicroism circular (DC) și dicroism circular vibrational (DCV)</li> <li>• Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază privind principalele metode electrochimice de investigare a structurii materialelor</li> <li>• Dobândirea de noțiuni privind caracterizarea suprafețelor prin metoda adsorbției de gaze și prin microscopie electronica.</li> </ul>
--	---

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
<b>MODUL 1 Metode spectroscopice de caracterizare structurala a compusilor organici și organometalici</b>		
8.1.1. Caracterizarea structurala prin metoda RMN – principii. RMN pe solide. Interpretarea datelor și aplicații (RMN dinamic, RMN bazat pe alte nuclee decât H și C) (2 ore)	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	4 ore de curs
8.1.2. Caracterizarea structurala prin spectrometrie de masă. Tehnici de ionizare blande și studiul ionilor cu sarcini multiple (2 ore)		
8.1.3. Spectroscopia RES (rezonanță electronică de spin) – principiu, domenii de aplicabilitate (2 ore)	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	4 ore de curs
8.1.4. Spectroscopia RES - experimente concrete în analiza materialelor, aplicații biomedicale (2 ore)		
8.1.5. Spectroscopia UV-VIS aspecte teoretice și principii. Utilizarea spectroscopiei UV-VIS în determinarea structurii moleculare și a structurii în faza solidă. Interpretarea spectrelor (2 ore)	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	4 ore de curs
8.1.6 Dicroism circular (DC) și dicroism circular vibrational (DCV) (2 ore)		
<b>MODUL 2 Caracterizarea structurala prin DRX</b>	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	4 ore de curs
8.1.7. Difractia de raze X pe monocristal și pe pulberi. (2 ore).		
8.1.8. Interpretarea datelor primare. Parametri atomici, tabele cristalografice, interacțiuni intra și intermoleculare. (2 ore).		
<b>MODUL 3. Caracterizarea structurala prin metode electrochimice</b>	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	6 ore de curs
8.1.9. Principiul investigării electrochimice; clasificarea metodelor după natura și forma perturbației și a funcției de răspuns. Celula electrochimică, instrumentația utilizată. Etape elementare și definiția regimului proceselor de electrod. Mărimi termodinamice și cinetice care pot fi determinate și importanța lor (2 ore).		
8.1.10. Polarografia clasică și neconventională: principii, instrumentație,. Voltametrie hidrodinamică: principii, instrumentație, parametri. Relația Levich și Koutecky-Levich și utilitatea acestora (2 ore).		
8.1.11. Voltametrie ciclică, cronoamperometria și spectroscopia de impedanță. Criterii de reversibilitate. Parametrii experimentali și modul de determinare a mărimilor fizico-chimice caracteristice (2 ore).		

<b>MODUL 4 - Caracterizarea materialelor și precursorilor prin evaluarea suprafeței specifice, distribuției de pori și a structurii superficiale prin tehnici microscopice (SEM, TEM)</b>	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Studiul de caz; Problematizarea	6 ore de curs
8.1.12. Adsorbția. Structura poroasă a solidelor. Determinarea suprafeței specifice, distribuției de pori (2 ore)		
8.1.13. Caracterizarea structurii solidelor prin microscopie electronica (2 ore)		
8.1.14. Analiza si analiza diferentiala termogravimetrica si Differential Scanning Calorimetry.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea; Studiul de caz; Problematizarea	
Bibliografie Suportul de curs MODUL 1 1. N. E. Jacobsen, <i>NMR Spectroscopy Explained</i> , Ed Wiley-Interscience, 2007. 2. H Friebolin, <i>Basic One- and Two-dimensional NMR Spectroscopy</i> , Wiley-VCH, 2004. 3. S. Mager, <i>Analiza Structurala Organică</i> , Ed. Științifică și Enciclopedică, București 1979. 4. David L., Crăciun C., Cozar O., Chiș V., <i>Rezonanță Electronică de Spin. Principii, metode, aplicații</i> , Presa Univ. Clujeană, Cluj-Napoca, 2001. 5. H.H. Perkampus, <i>UV-VIS spectroscopy and its applications</i> , Springer-Verlag, 1992. Bibliography MODULE 2 1. W. Massa, <i>Crystal Structure Determination</i> , Editura Springer, Berlin, 2000. (accessible at the module holder) Bibliografie MODUL 3 1. Oniciu L., Mureșan L., <i>Electrochimie aplicată</i> , Presa Universitară Clujeana, 1998. 2. A. J. Bard și L. R. Faulkner, <i>Electrochemical Methods. Fundamentals and Applications</i> , John Wiley and Sons, New-York, 1980. Bibliografie MODUL 4 1. E. Rouquerol, J. Rouquerol, K. Sing, <i>Adsorption by Powders and Porous Solids. Principles, Methodology and Applications</i> , Academic Press, San Diego, 1999. 2. J. M. Thomas, W. J. Thomas, <i>Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis</i> , VCH, Weinheim, 1997. 3. J.W. Niemantsverdriet, <i>Spectroscopy in Catalysis. An introduction</i> , VCH, Weinheim, 1993.		
8.2 Laborator	Metode de predare	Observații
<b>MODUL 1</b>		
- Interpretarea spectrelor <sup>1</sup> H-RMN, <sup>13</sup> C-RMN, COSY, HMQC, HMBC, DNMR și a spectrelor cu alte elemente și a celor de corelare heteronucleară - Analiza și interpretarea spectrelor de masă EI, CI, ESI, APCI, MALDI	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	Total 4 ore
- Spectre RES, condiționare probă, înregistrare spectru, interpretarea parametrilor spectrali	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	Total 4 ore
- Interpretarea spectrelor UV-VIS pentru diverse combinații chimice. Interpretarea spectrelor DC și DCV pentru materiale chirale	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	Total 4 ore
<b>MODUL 2</b>		
Utilizarea programelor specifice și pregătirea datelor pentru publicare.	Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	Total 4 ore
<b>MODUL 3</b>		
- Investigarea sistemelor redox prin voltametrie ciclică	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea;	Total 6 ore
- Spectroscopia de impedanță electrochimică		

	Problematizarea	
MODUL 4		
- Determinarea $S_{sp}$ a unor materiale zeolitice	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	Total 6 ore
- Preluare și interpretarea imaginii SEM/TEM pentru caracterizarea unor adsorbanți naturali		
Analiza termogravimetrică a unor materiale, determinarea enrgiilor de legare prin interacțiuni secundare a unor componente.	Experimentul; Explicația; Conversația; Descrierea; Problematizarea	
Bibliografie MODUL 1		
1. David L., Crăciun C., Cozar O., Chiș V., <i>Rezonanță Electronică de Spin. Principii, metode, aplicații</i> , Presa Univ. Clujeană, Cluj-Napoca, 2001		
2. R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle <i>Spectrometric Identification of Organic Compounds</i> , Wiley, New-York, 2005.		
3. N. E. Jacobsen, <i>NMR Spectroscopy Explained</i> , Wiley-Interscience, 2007.		
4. H.H. Perkampus, <i>UV-VIS spectroscopy and its applications</i> , Springer-Verlag, 1992.		
5. Referate laborator și fișe de lucru.		
Bibliography MODULE 2		
1. W. Massa, <i>Crystal Structure Determination</i> , Editura Springer, Berlin, 2000. (accessible at the module holder)		
Bibliografie MODUL 3		
1. I.C. Popescu, G. Turdean, A. Nicoara, P. Ilea și L. Muresan, <i>Lucrări practice pentru Ciclul de Studii Aprofundate în Electrochimie</i> , Lito. UBB, Cluj-Napoca, 1998.		
Bibliografie MODUL 4		
1. E. Rouquerol, J. Rouquerol, K. Sing, <i>Adsorption by Powders and Porous Solids. Principles, Methodology and Applications</i> , Academic Press, San Diego, 1999.		
2. J. M. Thomas, W. J. Thomas, <i>Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis</i> , VCH, Weinheim, 1997.		
3. J.W. Niemantsverdriet, <i>Spectroscopy in Catalysis. An introduction</i> , VCH, Weinheim, 1993.		
4. referate de laborator		

## 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 **Metode de caracterizare structurală a materialelor și precursorilor** studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele din Suplimentul la diploma și calificările din ANC

## 10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate 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%
10.5 Laborator	Predarea referatelor Calitatea referatului, utilizarea corectă a literaturii de specialitate	Referatele se predau cel târziu în ultima săptămână de activitate didactică	40%

	Activitatea desfășurată în laborator/ la seminar		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> <li>Nota 5 (cinci) pentru fiecare modul în parte</li> <li>Cunoașterea unei tehnici de caracterizare corespunzătoare fiecărui modul și interpretarea rezultatelor corespunzătoare acelei tehnici</li> </ul>			

Data completării

06.04.2021....

.....

Semnătura titularului de curs



.....


.....

.....

.....

.....

Semnătura titularului de seminar

..... 

.....

.....

.....

.....

.....

Data avizării în departament

15.04.2021

Semnătura directorului de departament

Acad. Cristian Silvestru

