

FIȘA DISCIPLINEI

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

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	CMR6237-Characterizarea materialelor solide prin difracție de raze X						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. dr. ing. Liliana BIZO/Conf. dr. Richard A. VARGA						
2.3 Titularul activităților de seminar	Conf. dr. ing. Liliana BIZO/ Conf. dr. Richard A. VARGA						
2.4 Anul de studiu	2	2.5 Semestrul	4	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	DS/Opt.

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					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					20
Tutoriat					5
Examinări					4
Alte activități:					-
3.7 Total ore studiu individual	69				
3.8 Total ore pe semestru	125				
3.9 Numărul de credite ECTS	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"> Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise Nu va fi acceptată întârzierea
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> Studentii se vor prezenta la seminar/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. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor din domeniul chimiei criminalistice și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională Utilizarea cunoștințelor aprofundate din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru explicarea și interpretarea proceselor specifice ingineriei materialelor și protecției mediului Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor avansate pentru rezolvarea problemelor specifice chimiei criminalistice. Aplicarea conceptelor și teoriilor avansate din domeniul chimiei criminalistice pentru elaborarea proiectelor și rezolvarea problemelor 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 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.
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> Executarea sarcinilor profesionale conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit și cu îndrumare calificată Rezolvarea sarcinilor profesionale în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru și distribuirea de sarcini pentru nivelurile subordonate Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba română și într-o limbă de circulație internațională, cu utilizarea metodelor moderne de informare și comunicare Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate Abilitatea de a întocmi referate scrise și de a susține public aceste referate

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> Dobândirea de noțiuni privind caracterizarea structurală prin difracție de raze X
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Dobândirea de noțiuni privind caracterizarea structurală a solidelor cristaline prin difracție de raze X pe pulberi și pe monocristal

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
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).		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*, 8th 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. 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 Seminar/laborator	Metode de predare	Observații
Modul 1		
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.	Experimentul; 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 2. 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 F_0 sau F_0^2 . 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, <i>Metode experimentale avansate pentru studiul și analiza bio-nano-sistemelor</i> , 2012, Casa Cărții de Știință, Cluj-Napoca, ISBN 9786061701155 2. Software Match! (https://www.crystalimpact.com/match/) Modul II 3. W. Massa, <i>Crystal Structure Determination</i> , 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. 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 disciplină 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	Examen scris – accesul la examen este condiționat	60%

	a problematicii tratate la curs Modul de gândire, corectitudinea și argumentarea soluțiilor propuse	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	
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor- înșușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar/laborator Calitatea referatelor pregătite și utilizarea corectă a literaturii de specialitate Activitatea desfășurată la seminar/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%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> • Condiție minimă de promovare a examenului: nota 5(cinci) la testul de laborator/seminar și nota 5(cinci) la examen. • Cunoașterea unei tehnici de caracterizare corespunzătoare fiecărui modul și interpretarea rezultatelor corespunzătoare acelei tehnici 			

Data completării

12.04.2023

Semnătura titularului de curs



Semnătura titularului de seminar



Data avizării în departament

28.04.2023

Semnătura directorului de departament

Acad. Prof. Dr. Cristian Silvestru

