

**FIȘA DISCIPLINEI****1. Date despre program**

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași
1.2 Facultatea	Facultatea de Chimie
1.3 Departamentul	DEPARTAMENTUL DE CHIMIE
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclu de studii	Masterat
1.6 Programul de studii / Calificarea	Chimia produselor cosmetice și farmaceutice

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Metode spectrale de analiză					
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. Dr. RAMONA DANAC					
2.3 Titularul activităților de laborator	Prof. Dr. RAMONA DANAC					
2.4 An de studiu	II	2.5 Semestrul	III	2.6 Tip de evaluare*	V	2.7 Regimul disciplinei** Op

*E – Examen / C – Colocviu / V – Verificare

**OB – Obligatoriu / OP – Opțional / F – Facultativ

3. Timpul total estimat (ore pe semestru și activități didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuția fondului de timp					ore
Studiu după manual, suport de curs, bibliografie și altele					54
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					10
Pregătire seminare/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					10
Tutoriat					10
Examinări					10
Alte activități					0
3.7 Total ore studiu individual*					94
3.8 Total ore pe semestru					150
3.9 Numărul de credite					6

4. Precondiții - De curriculum (dacă este cazul)

Fundamentele chimiei, Chimia hidrocarburilor și funcțiunilor simple, Chimia funcțiunilor mixte, Analiza structurală organică, Chimia heterociclicilor

5. Condiții (dacă este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	Nu este cazul
-------------------------------	---------------

5.2 De desfășurare a seminarului/ laboratorului	Prezenta obligatorie
--	----------------------

6. Obiective

Operarea cu noțiuni de structura și reactivitate a compusilor chimici si biochimici; Determinarea compozitiei, structurii si proprietatilor fizico-chimice a unor compusi organici (incluzand compusi biochimici si compusi naturali cu potential farmaceutic sau in chimia cosmetica) folosind metode spectrale de analiza (IR, RMN, MS) Efectuarea de experimente, aplicarea riguroasă a metodelor de analiză și interpretarea rezultatelor, cu respectarea normelor de securitate și sănătate în muncă. La finalizarea cu succes a acestei discipline, studenții vor fi capabili să: -Aleaga si sa utilizeze metodele fizice (IR, MS, RMN), respectiv tehnicile necesare corespunzatoare acestor metode, in scopul determinarii structurii compusilor organici cu potential farmaceutic sau pentru chimia cosmetica; -Analizeze si interpreteze spectre IR, MS si RMN ale compusilor organici cu diverse functiuni, precum si a compusilor biochimici (aminoacizi, peptide, proteine, acizi nucleici, compusi naturali) si compușilor naturali / cu potențial farmaceutic sau pentru chimia cosmetica.

7. Competențe/Rezultate ale învățării

• Utilizarea adecvată a cunoștințelor, deprinderilor și abilităților practice de muncă în laborator. • Cunoașterea și operarea cu noțiuni specifice de structură, proprietăți și reactivitate a compușilor chimici, farmaceutici și cosmetici. • Efectuarea de analize specifice în laboratoare medicale, cosmetice și farmaceutice. • Efectuarea de experimente, aplicarea riguroasă a metodelor de analiză și interpretarea rezultatelor, elaborarea protocoalelor pentru analiza fizico-chimică a unor produși chimici, farmaceutici și cosmetici. • Identificarea materialelor, substanțelor și aparaturii, analiza critică a metodelor și tehnicilor, interpretarea rezultatelor experimentale și corelarea cu acțiunea farmacologică și biologică a produselor chimice, farmaceutice și cosmetice.
--

8. Conținut

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
1. Spectroscopie de 1H-RMN: Exemple de spectre ale unor compusi organici din diferite clase. Rezonanta magnetica nucleara dinamica. Spectre 1-H-RMN ale compusilor biochimici. Efectul NOE	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	8 ore
2. Spectroscopie de 13C-RMN: Factori care influenteaza deplasările chimice ale 13C. Deplasările chimice ale 13C din heterociclii organici. Cuplaje spin – spin 2JCH si 3JCH. Tehnici de decuplare a spinilor. Exemple de spectre ale unor compusi organici din diferite clase.	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	5 ore
3. Tehnici speciale mono si bidimensionale de RMN: APT (Attached Proton Test), DEPT (Distorsionless Enhancement by Polarization Transfer), Efectul NOE (Nuclear Overhauser Effect), COSY (CORrelation SpectroscopY), HETCOR (Heteronuclear CORrelated SpectroscopY), alte tehnici: NOESY (Nuclear Overhauser Exchange Spectroscopy), ROESY (Rotating frame Overhauser Effect Spectroscopy), HMQC (Heteronuclear Multiple-Quantum Coherence Experiment)/HMBC (Heteronuclear Multiple Bond Correlation Experiment), 13C-13C correlations: INADEQUATE (Incredible Natural Abundance Double Quantum Transfer Experiment) Exemple de utilizare a acestor tehnici in analiza organica si cea a compusilor biochimici.	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	7 ore
4. Introducere in imagistica prin rezonanta magnetica nucleara	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	2 ore
5. Spectroscopie RMN de 19F, 31P, 29Si si 15N	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	3 ore
6. Spectrometrie de masa: Spectre de masa ale unor clase de compusi organici: Spectre de masa ale hidrocarburilor, alcoolilor si fenolilor, eterilor, aminelor, mercaptanilor, sulfonelor si sulfurilor, compusilor halogenati, aldehydelor si cetoneleor, acizilor carboxilici, esterilor, amidelor, nitrililor. Spectre de masa ale compusilor biochimici.	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	3 ore

Bibliografie

Referințe principale:

1. R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, D. L. Bryce, Spectrometric Identification of Organic Compounds (8th edition), John Wiley & Sons, Ltd, 2014.
2. F. W. McLafferty, F. Turecek, Interpretation of Mass Spectra, University Science Books, 1993.
3. E. De Hoffmann, V. Stroobant, Mass Spectrometry. Principles and Applications (3rd Edition), Wiley, 2007.
4. L. M. Harwood, T. D. W. Claridge, Introduction to Organic Spectroscopy, Oxford University Press, Oxford, 1997.
5. J. N. S. Evans, Biomolecular NMR Spectroscopy, Oxford University Press, New York, 1995.
6. T. D. W. Claridge, High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry (3rd edition), Elsevier Science, 2016.
7. Christine K. F. Hermann, Terence C. Morrill, Ralph L. Shriner, Reynold C. Fuson, The Systematic Identification of Organic Compounds, 9th Edition, Wiley, 2023.
8. Fatemeh Khashami, Fundamentals of NMR and MRI; From Quantum Principles to Medical Applications, Springer, 2024.
9. Articole știintifice (R. Bitar, G. Leung, R. Perng, S. Tadros, A. R. Moody, J. Sarrazin, C. McGregor, M. Christakis, S. Symons, A. Nelson, T. P. Roberts, Radiographycs, 26, (2006), 513-537; L.N. Tanenbaum, A.J. Tsiouris, A.N. Johnson, T.P. Naidich, M.C. DeLano, E.R. Melhem, P. Quarterman, S.X. Parameswaran, A. Shankaranarayanan, M. Goyen, A.S. Field, AJNR Am J Neuroradiol., (2017). (doi.org/10.3174/ajnr.A5227); A. Mayer, H. Greenspan, IEEE Trans. Med. Imag., 28(8), (2009), 1238-1250.

Referințe suplimentare:

1. I. Grosu, S. Mager, G. Ple, M. Darabantu, Aplicatii ale RMN in analiza structurala organica, Cluj University Press, 1996.
2. A. Silvestru, Spectrometrie de masa, Casa cartii de stiinta, Cluj, 2005.
3. R. Danac, M. Roman, Probleme de analiza structurala organica, Ed Sedcomlibris, 2006, Iasi.

8.2 Seminar / Laborator	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
1. Efectuarea si interpretarea spectrelor de 1H- RMN, 13C-RMN si spectre bidimensionale in cazul diverselor clase de compusi organici (incluzand compusi naturali si compusi biochimici sau compusi cu potential farmaceutic sau pentru chimia cosmetica).	Experiment, conversatie, problematizare	12 ore
2. Efectuarea si analiza spectrelor de masa a compusilor organici (incluzand compusi naturali si compusi biochimici sau compusi cu potential farmaceutic sau pentru chimia cosmetica).	Experiment, conversatie, problematizare	4 ore
3. Probleme de identificare si determinare a structurii unor compusi organici. Identificarea unor particularitati structurale utilizand tehnici speciale RMN. Determinari de structura prin corelarea de spectre de RMN, IR si SM – exercitii si probleme.	Experiment, conversatie, problematizare	12 ore

Bibliografie

1. R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, D. L. Bryce, Spectrometric Identification of Organic Compounds (8th edition), John Wiley & Sons, Ltd, 2014.
2. R. Danac, M. Roman, Probleme de analiza structurala organica, Ed Sedcomlibris, 2006, Iasi.
3. F. W. McLafferty, F. Turecek, Interpretation of Mass Spectra, University Science Books, 1993.
4. E. Pretsch, P. Buhlmann, C. Affolter, M. Badertscher, Spectroscopic data for the structure of organic compounds enlightenment, Springer, 2001.
5. Stefan Berger, Dieter Sicker, Classics in Spectroscopy, Wiley-VCH, 2009.
6. T. D. W. Claridge, High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry (3rd edition), Elsevier Science, 2016.
7. Christine K. F. Hermann, Terence C. Morrill, Ralph L. Shriner, Reynold C. Fuson, The Systematic Identification of Organic Compounds, 9th Edition, Wiley, 2023.
8. Fatemeh Khashami, Fundamentals of NMR and MRI; From Quantum Principles to Medical Applications, Springer, 2024.
9. Articole știintifice 2020-2025.

9. Coroborarea conținutului disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității, asociațiilor profesionale și angajatorilor reprezentativi din domeniul aferent programului

Disciplina “Metode spectrale de analiza” oferă studenților cunoștințe și deprinderi esențiale în domeniul din care face parte, avand ca scop aprofundarea cunoștințelor privind alegerea si utilizarea metodelor spectrale de analiza a compușilor organici.

10. Evaluare

10.1 Evaluare continuă	Pondere (min. 30%)	100
Curs	Forma de evaluare	Verificare scrisă

	Pondere		50	
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale		Da	
	Metode de evaluare	Detalii	Pondere	cu reexaminare
		Verificare scrisă periodică	100	Da
Seminar / Laborator	Forma de evaluare		Verificare mixtă	
	Pondere		50	
	Nepromovarea Evaluării continue determină nepromovarea Evaluării finale		Da	
	Metode de evaluare	Detalii	Pondere	cu reexaminare
		Verificare scrisă periodică	75	Da
		Verificare orală periodică	25	Da

10.2 Mențiuni (situații speciale în evaluare)

10.3 Standard minim de performanță

Studentul stapaneste notiunile de baza aferente continutului cursului si laboratorului.

Data completării,
29.09.2025

**Titular de curs,
Prof. Dr. RAMONA DANAC**

**Titular de seminar/laborator,
Prof. Dr. RAMONA DANAC**

Data avizării în departament,

**Director de departament,
Prof. Dr. MIHAIL LUCIAN BIRSA**