

**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 ANTOANETA DANAC					
2.3 Titularul activităților de seminar			Prof. Dr. RAMONA ANTOANETA DANAC					
2.4 An de studiu	II	2.5 Semestrul	III	2.6 Tip de evaluare*	VP	2.7 Regimul disciplinei**	Op	

*E – Examen / C – Colocviu / VP – Verificare pe parcurs

**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 și biochimici;
 Determinarea compoziției, structurii și proprietăților fizico-chimice a unor compusi organici (incluzând compusi biochimici și compusi naturali cu potențial farmaceutic sau în chimia cosmetică) folosind metode spectrale de analiză (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 și să utilizeze metodele fizice (IR, MS, RMN), respectiv tehnicile necesare corespunzătoare acestor metode, în scopul determinării structurii compusilor organici cu potențial farmaceutic sau pentru chimia cosmetică;
 -Analizeze și interpreteze spectre IR, MS și RMN ale compusilor organici cu diverse funcțiuni, precum și a compusilor biochimici (aminoacizi, peptide, proteine, acizi nucleici, compusi naturali) și compușilor naturali / cu potențial farmaceutic sau pentru chimia cosmetică.

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 ¹ H-RMN: Exemple de spectre ale unor compusi organici din diferite clase. Rezonanța magnetică nucleară dinamică. Spectre ¹ H-RMN ale compusilor biochimici. Efectul NOE	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	8 ore
2. Spectroscopie de ¹³ C-RMN: Factori care influențează deplasările chimice ale ¹³ C. Deplasările chimice ale ¹³ C din heterociclii organici. Cuplaje spin – spin 2JCH și 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 și 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), ¹³ C- ¹³ C correlations: INADEQUATE (Incredible Natural Abundance Double Quantum Transfer Experiment) Exemple de utilizare a acestor tehnici în analiza organică și cea a compusilor biochimici.	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	7 ore
4. Introducere în imagistica prin rezonanță magnetică nucleară	Prelegerea, Explicația, Conversația, Descrierea, Problematizarea.	2 ore

8.1 Curs	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
5. Spectroscopie RMN de ¹⁹ F, ³¹ P, ²⁹ Si și ¹⁵ N	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 și fenolilor, eterilor, aminelor, mercaptanilor, sulfonelor și sulfurilor, compusilor halogenati, aldehydilor și cetonelelor, 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 științifice (R. Bitar, G. Leung, R. Perng, S. Tadros, A. R. Moody, J. Sarrazin, C. McGregor, M. Christakis, S. Symons, A. Nelson, T. P. Roberts, Radiographys, 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, Aplicații ale RMN în analiza structurală organică, Cluj University Press, 1996.
2. A. Silvestru, Spectrometrie de masa, Casa cartii de știință, Cluj, 2005.
3. R. Danac, M. Roman, Probleme de analiză structurală organică, Ed Sedcomlibris, 2006, Iasi.

8.2 Seminar / Laborator	Metode de predare	Observații (ore și referințe bibliografice)
1. Efectuarea și interpretarea spectrelor de ¹ H- RMN, ¹³ C-RMN și spectre bidimensionale în cazul diverselor clase de compusi organici (incluzând compusi naturali și compusi biochimici sau compusi cu potențial farmaceutic sau pentru chimia cosmetică).	Experiment, conversație, problematizare	12 ore
2. Efectuarea și analiza spectrelor de masa a compusilor organici (incluzând compusi naturali și compusi biochimici sau compusi cu potențial farmaceutic sau pentru chimia cosmetică).	Experiment, conversație, problematizare	4 ore
3. Probleme de identificare și determinare a structurii unor compusi organici. Identificarea unor particularități structurale utilizând tehnici speciale RMN. Determinări de structură prin corelarea de spectre de RMN, IR și SM – exerciții și probleme.	Experiment, conversație, 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 analiză structurală organică, Ed Sedcomlibris, 2006, Iasi.
3. F. W. McLafferty, F. Turecek, Interpretation of Mass Spectra, University Science Books, 1993.
4. E. Pretsch, P. Bühlmann, 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 științifice 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, având ca scop aprofundarea cunoștințelor privind alegerea și 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	Nu
		Verificare orală periodică	25	Nu

10.2 Mențiuni (situații speciale în evaluare)

--	--

10.3 Standard minim de performanță

Studentul stăpânește noțiunile de bază aferente conținutului cursului și laboratorului.

Data completării,
29.09.2025

Titular de curs,
Prof. Dr. RAMONA ANTOANETA DANAC

Titular de seminar,
Prof. Dr. RAMONA ANTOANETA DANAC

Data avizării în departament,

Director de departament,
Prof. Dr. MIHAIL LUCIAN BIRSA