

## 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 Scoala Doctorala	Chimie
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclu de studii	Doctorat
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Doctorat

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	RMN in Chimia Organica <b>SDC-19-6</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. Dr. Ing. Mircea DARABANTU						
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof. Dr. Ing. Mircea DARABANTU						
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	II	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	Op

# doctorandul poate opta pentru participare la activitati fara examen sau cu examen

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	2	Din care: 3.2 curs	1	3.3 seminar	1
3.4 Total ore din planul de învățământ	24	Din care: 3.5 curs	12	3.6 seminar	12
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					100
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					100
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					18
Tutoriat					8
Examinări					
Alte activități: .....					-
3.7 Total ore studiu individual	226				
3.8 Total ore pe semestru	250				
3.9 Numărul de credite	10				

### 4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	Nu este cazul
4.2 de competențe	Nu este cazul

### 5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	Cursurile si Seminariile se desfasoara in conditii de acces individual la Internet si Baze de Date
-------------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>Definirea notiunilor, teoriilor și modelelor din domeniul Rezonanței Magnetice Nucleare (RMN) în cadrul Analizei Structurale Organice și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională, scrisă și orală</li> <li>Utilizarea cunoștințelor aprofundate de Chimie Organică în scopul explicării și interpretării corecte a fenomenelor ondulatorii specifice RMN</li> <li>Analiza oportunității în utilizarea metodelor și tehnicilor RMN avansate</li> <li>Aplicarea tehnicilor RMN avansate în scopul rezolvării unor probleme structurale complexe</li> <li>Deprinderea de a înțelege și interpreta informații spectrale complementare RMN-ului, necesare caracterizării structurale complete a compusilor organici și a stereodinamismului acestora, pe baza corelării logice a rezultatelor precum și a comparării datelor proprii față de cele din Literatură</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 de activitate în Limba Română</li> <li>Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate</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 compusilor organici prin tehnicile specifice RMN-ului</li> </ul>
7.2. Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază privind analiza structurală organică prin RMN</li> <li>Dezvoltarea capacității de rezolvare a problemelor structurale</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 CURS	Metode de predare	Observații
8.1.1. RECAPITULATIV (I). Fenomenul RMN, generalități. Rezonanța Magnetică Nucleară a nucleului atomului de hidrogen: protonul "izolat". Ecranarea nucleară și deplasarea chimică: influența electronilor $\sigma$ . Noțiunea de deplasare chimică. Deplasarea chimică și structura moleculară. Deplasarea chimică datorată influenței electronilor $\pi$ .	Prelegerea; explicația; conversația	Cursuri cu durată de 1 ora/săptămână
8.1.2. RECAPITULATIV (II). Interpretarea spectrelor RMN în cazul nucleelor de hidrogen (proton, $^1\text{H}$ RMN). Testul de substituție în interpretarea spectrelor $^1\text{H}$ RMN. Cuplajul spin-spin în spectroscopia $^1\text{H}$ RMN: structura fină a spectrelor $^1\text{H}$ RMN. Modelele de cuplaj AX, AX <sub>2</sub> și A <sub>2</sub> X <sub>3</sub> .	Prelegerea; explicația; conversația	
8.1.3. RECAPITULATIV (III). Modelul de cuplaj AMX. (Stereo)specificitatea constantelor de cuplaj. Identificarea protonilor „mobili” prin spectroscopia $^1\text{H}$ RMN. Noțiuni introductive despre spectroscopia $^{13}\text{C}$ RMN.	Prelegerea; explicația; conversația	
8.1.4. Noțiuni practice despre analiza RMN. Prepararea și conservarea probelor. Alegerea și conservarea solventilor. RMN de "brut" de reacție. Practica înregistrării spectrelor $^1\text{H}$ RMN. Noțiuni specifice: <i>locking</i> , <i>shimming</i> , <i>delay time</i> . Reprezentarea energetic-vectorială a rezonanței magnetice a nucleului de H (proton).	Prelegerea; explicația; conversația	

8.1.5. Timpul de relaxare. Ecuatiile Bloch. Importanta cunoasterii timpului de relaxare $T_1$ in spectroscopia $^{13}\text{C}$ RMN. Experimentul QC RMN. Importanta $T_2$ in spectroscopia $^1\text{H}$ RMN. Importanta corelarii intre timpii de relaxare $T_1$ si $T_2$ in spectroscopia $^1\text{H}$ RMN. Reprezentarea energetica a cuplajului $^nJ_{\text{H,H}}$ : Relatia cuplaj vs. "timp de viata intr-o stare de spin". Aplicatii in cazul "protonilor mobili".	Prelegerea; explicatia; conversatia	
8.1.6. ANALIZE RMN IN SISTEME COMPLEXE (I). Principalele experimente RMN monodimensionale (1D) uzuale: $^1\text{H}$ RMN; $^{13}\text{C}$ RMN (tehnica BBD, QC, J-Mod si DEPT). Principalele experimente RMN bidimensionale (2D) de homocorelare (2D-COSY): 2D- $^1\text{H}, ^1\text{H}$ ; -LR; -NOESY; -ROESY; -TOCSY; -TOWNY. Cuplaj scalar, $^nJ_{\text{H,H}}$ vs. cuplaj virtual.	Prelegerea; explicatia; conversatia	
8.1.7. ANALIZA RMN IN SISTEME COMPLEXE (II). Notiuni despre experimentul 2D- $^1\text{H}$ -DOSY. Principalele experimente RMN bidimensionale (2D) de heterocorelare $^nJ_{\text{C,H}}$ : 2D- $^1\text{H}, ^{13}\text{C}$ -HETCOR; 2D- $^1\text{H}, ^{13}\text{C}$ -HETLOC; 2D- $^1\text{H}, ^{13}\text{C}$ -HSQC; 2D- $^1\text{H}, ^{13}\text{C}$ -HMBC.	Prelegerea; explicatia; conversatia	
8.1.8. ANALIZE RMN IN SISTEME COMPLEXE (III). $^1\text{H}$ RMND (Rezonanta Magnetica Nucleara Dinamica). Definirea problemei. Scala de timp $^1\text{H}$ RMN vs. radiofrecventa aparatului. Domeniile de interes pe scala de timp $^1\text{H}$ RMN: schimbul lent („echilibre inghetate”), schimbul rapid („echilibrul activ”) si schimbul intermediar („echilibrul activat”). Echilibrarea homomerică. Topomerizare. Echilibre degenerate.	Prelegerea; explicatia; conversatia	
8.1.9. ANALIZE RMN IN SISTEME COMPLEXE (IV). Estimarea Entalpiei Libere de activare $\Delta G^\ddagger$ (ecuatiile Gutowski-Holm si Eyring) si a Entalpiei de activare $\Delta H^\ddagger$ in cazul echilibrelor implicand populatii egale ale speciilor implicate. Calculul parametrilor cinetici de activare si a unora de solvatare in cazul echilibrelor implicand populatii inegale ale speciilor. Metoda Shanan-Atidi. Parametrul Gradientului de Temperatura (TG, Kessler).	Prelegerea; explicatia; conversatia	
8.1.10. UTILIZAREA $^1\text{H}$ RMN IN SINTEZA ASIMETRICA (I). Agenti de derivatizare chirali (CDA, <i>Chiral Derivatizing Agents</i> ): derivatizarea "statica". Acizii Mosher. Agenti de derivatizare achirali: derivatizarea ca si dimerizare "static-statistica".	Prelegerea; explicatia; conversatia	
8.1.11. UTILIZAREA $^1\text{H}$ RMN IN SINTEZA ASIMETRICA (II). Reactivi de deplasare chimica. Definitii. Exemple. Reactivi de deplasare chimica chirali (CSR, <i>Chemical Shift Reagents</i> ). Notiunea de derivatizare dinamica. Definirea heterotopicitatii liganzilor in functie de natura referintei (interna sau externa).	Prelegerea; explicatia; conversatia	
8.1.12. UTILIZAREA $^1\text{H}$ RMN IN SINTEZA ASIMETRICA (III). Practica analizelor care folosesc reactivi de deplasare chimica chirali (CSR).	Prelegerea; explicatia; conversatia	
<b>Bibliografie</b> <b>1.</b> S. Mager <i>Analiza structurala organica</i> , Editura Stiintifica si Enciclopedica, Bucuresti, <b>1979</b> <b>2.</b> H. Friebolin <i>Basic One- and Two Dimensional RMN Spectroscopy</i> , VCH Verlagsgesellschaft /VCH: Weinheim/New York, <b>1991</b> <b>3.</b> I. Grosu, S. Mager, G. Plé, M. Darabantu <i>Aplicatii ale RMN in analiza structurala organica</i> ; Cluj University Press, <b>1996</b> <b>4.</b> E. L. Eliel, H. S. Wilen <i>Stereochemistry of the Organic Compounds</i> ; John Wiley & Sons Inc., <b>1994</b> <b>5.</b> R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle <i>Identification spectrométrique de composés organiques</i> ; De Boeck & Larcier s.a., <b>2007</b> <b>6.</b> L. D. Field, S. Sternhell, J. R. Kalman <i>Organic Structures from Spectra (Fourth Edition)</i> ; John Wiley & Sons LTD, <b>2007</b> <b>7.</b> Articole din cercetarea proprie a titularului de curs mentionate ca si "Studii de caz"		
8.2 Seminar	Metode de predare	Observații

8.2.1-3. Identificarea rapida a unor compusi organici simpli prin RMN prin corelare cu alte tehnici spectrale (IR, UV, MS): exemple concrete din Literatura.	Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	Seminar cu durata de 1 ora/saptamana
8.2.4, -5. Studii de caz: identificarea si discriminarea „protonilor mobili” prin $^1\text{H}$ RMN; rolul si importanta deuterarii probei; echilibrari lente prin tautomerii inel $\rightarrow$ catena; spectre QC RMN ale unor dendrimeri si precursori ai acestora. Exemple concrete din Articole proprii ale titularului de Curs.	Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
8.2.6, -7. Studii de caz: stabilirea regioselectivitatii functionalizarii asimetrice in seria heteroaromatica. Precizii si limitari ale metodei RMN. Exemple concrete din Articole proprii ale titularului de Curs.	Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
8.2.8, -9. Exemple de calcul a parametrilor cinetici $k_c$ si $\Delta G^\ddagger$ prin utilizarea ecuatiilor Gutowski-Holm si Eyring in cazul echilibrelor degenerate, in absenta sau in prezenta homocuplajului $^2J_{\text{H,H}}$ . Exemple concrete clasice si studii de caz din Articole proprii ale titularului de Curs.	Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
8.2.7-8. Exemple de calcul a parametrilor cinetici $k_c$ si $\Delta G^\ddagger$ prin utilizarea ecuatiilor Gutowski-Holm si Eyring in cazul echilibrelor intre populatii inegale. Aplicarea metodei Shanan-Atidi si a Parametrului Gradientului de Temperatura (TG, Kessler). Studii de caz din Articole proprii ale titularului de Curs.	Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
8.2.9-10. Exemple clasice din Literatura privind deducerea configuratiei absolute, a puritatii enantiomerice si a compozitiei acestora prin derivatizare „statica” (CDA), „static-statistica” vs. dinamica (CSR).	Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	
8.2.11-12. Studiu de caz: discriminarea intre un racemic si mezoforma aferenta prin utilizarea CSR.	Explicatia; Conversatia; Descrierea; Problematizarea	

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

- Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice si abordarea aspectelor practice incluse în disciplina **RMN in Chimia Organica**, Doctoranzii dobandesc un bagaj de cunostinte consistent, in concordanta cu competentele partiale cerute pentru ocupatiile posibile prevazute în Grila 1 – RNCIS.

## 10. Evaluare# (doar pentru doctoranzii care solicita acest lucru)

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea raspunsurilor – însușirea si intelegerea corecta a problematicei tratate	Examen oral	60%
	Modul de gandire, corectitudinea si argumentarea solutiilor propuse		
10.5 Seminar/laborator	Activitatea desfasurată la seminar	Prezentarea de articole	40%
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"> <li>Nota 5 (cinci)</li> </ul>			

Data completării  
17.12.2018

Semnătura titularului de curs



Semnătura titularului de seminar



Data avizării în CSDC  
17.12.2018

Semnătura directorului SDC  
Prof. Dr. Ion Grosu  
Membru Corespondent al Academiei Romane

