FIȘA DISCIPLINEI

Chimie Combinatorial Dinamică: Principii și Aplicații

Anul universitar **2025-2026**

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	Școala Doctorală de Chimie
1.4. Domeniul de studii	Chimie
1.5. Ciclul de studii	Doctorat
1.6. Programul de studii / Calificarea	Doctorat/Doctor în Chimie
1.7. Forma de învățământ	Cu frecvență

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	Chimie Combinatorial Dinamică: Principii și Aplicații			Codul disciplinei	**SDC-19-05**
2.2. Titularul activităților de curs	Prof. dr. Hădade Niculina Daniela				
2.3. Titularul activităților de seminar	Prof. dr. Hădade Niculina Daniela				
2.4. Anul de studiu	I	2.5. Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	Examen
2.7. Regimul disciplinei	Opțional		2.8. Tipul disciplinei		Disciplină de specializare (DS)

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/ proiect	1
3.4. Total ore din planul de învățământ	36	din care: 3.5. curs	24	3.6 seminar/laborator	12
Distribuția fondului de timp pentru studiul individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)					**ore**
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe (AI)					50
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					90
Pregătire seminare/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					65
Tutoriat (consiliere profesională)					4
Examinări					2
Alte activități					3
3.7. Total ore studiu individual (SI) și activități de autoinstruire (AI)					**214**
3.8. Total ore pe semestru					**250**
3.9. Numărul de credite					**10**

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1. de curriculum	Cunoștințe fundamentale de Chimie Organică și Supramoleculară
4.2. de competențe	Nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1. de desfășurare a cursului	▪ Cursurile se vor desfășura în sală echipată cu videoproiector sau tablă inteligentă și acces la internet ▪ Studenții vor avea acces la baze de date științifice ▪ Se va încuraja participarea activă a studenților ▪ Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise
5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului	▪ Seminariile se vor desfășura în sală echipată cu videoproiector sau tablă inteligentă și acces la internet ▪ Studenții se vor prezenta la seminar cu telefoanele mobile închise

6.1. Competențele dobândite în urma absolvirii programului de studii[1]

Competențe profesionale	
Codul competenței	**Competență**
CP1	Cunoștințe avansate și aprofundate în domeniul chimiei și a temei de doctorat.
CP4	Planificarea, proiectarea și implementarea unui proiect de cercetare științifică originală, cu respectarea eticii și integrității academice.
CP5	Aplicarea și dezvoltarea metodelor avansate de cercetare și analiză; interpretarea critică a datelor și formularea de soluții inovative.
Competențe transversale	
Codul competenței	**Competență**
CT2	Comunicare științifică avansată în română și engleză; colaborare în contexte interdisciplinare și multiculturale.
CT3	Competențe digitale avansate pentru documentare, analiză de date și diseminare; utilizarea responsabilă a instrumentelor informatice.

6.2. Rezultatele învățării specifice programului de studii[2]

Rezultatele învățării vizate prin disciplină		
Codul competenței	**Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)**	**Abilități academice specifice (Specific academic skills)**
CP1	Cunoștințe avansate și actuale în domeniul chimiei constituțional dinamice (CCD); înțelegerea critică a literaturii de specialitate.	Integrează și aplică concepte/teorii avansate pentru formularea ipotezelor de cercetare; argumentează alegerea abordărilor științifice.
CP4	Metodologii de cercetare avansată: proiectare experimentală, tehnici de sinteză și caracterizare specifice CCD, analiză și validare; principii de management al proiectelor de cercetare.	Proiectează, planifică și implementează un proiect de cercetare; aplică proceduri de calitate și siguranță și documentează trasabil etapele și datele.
CP5	Strategii avansate de analiză, interpretare și integrare a datelor; evaluarea limitărilor, reproductibilității și a impactului științific;	Analizează critic date complexe, estimează gradul de incertitudine și formulează concluzii; propune îmbunătățiri metodologice și direcții de cercetare/inovare.
CT2	Terminologia și comunicarea științifică în română și engleză; structura articolelor și a prezentărilor științifice; bune practici de citare.	Redactează și prezintă coerent rezultate științifice în româna și engleză; răspunde argumentat la observații și la recenzii
CT3	Instrumente digitale pentru documentare, citare și prelucrarea datelor (baze de date, software specializat, aplicații de gestionare a referințelor bibliografice); utilizarea responsabilă a resurselor informatice	Utilizează eficient instrumente digitale specifice; gestionează citările; folosește responsabil resurse informatice în activitatea de cercetare.

7. Rezultatele disciplinei învățării specifice

Cunoștințe și înțelegere (Knowledge and understanding)
1. Definirea și însușirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor avansate ale chimiei constituțional dinamice (CCD); înțelegerea principiului controlului termodinamic, a reversibilității legăturilor covalente și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională.

[1] Se vor prelua din Planul de învățământ al programului de studii acele competențe profesionale și/sau transversale la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fișa disciplinei. Pentru fiecare competență se va prelua întregul enunț, inclusiv codul competenței, cu formularea care apare în planul de învățământ, fără modificări. Dacă nu se preia nici o competență din oricare din cele două categorii, se șterge linia din tabel aferentă acelei categorii.

[2] Se menționează rezultatele învățării specifice programului de studiu la dezvoltarea cărora contribuie disciplina pentru care se elaborează fișa. Enunțurile, preluate fără modificări din Planul de învățământ în funcție de tipul disciplinei (DF/DS/DC) se trec în dreptul competenței asociate.

2. Utilizarea cunoștințelor aprofundate din domeniul chimiei pentru explicarea și interpretarea reacțiilor covalente dinamice (formarea de imine, hidrazone, disulfuri, esteri boronici etc.) și a bibliotecilor combinatoriale dinamice.
3. Dezvoltarea abilității de a proiecta și analiza sisteme bazate pe chimie combinatorial dinamică: macrocicluri, cuști moleculare organice, polimeri dinamici și materiale auto-reparabile.
4. Înțelegerea și aplicarea conceptelor de reacții ortogonale, auto-sortare și mașini moleculare bazate pe CCD.
5. Cunoștințe avansate privind aplicațiile emergente ale DCC în biotehnologie, electronică organică, captarea gazelor și știința materialelor.
Abilități academice specifice (Specific academic skills)
1. Abilitatea de a integra și corela date din literatura de specialitate pentru caracterizarea și evaluarea sistemelor bazate pe CCD.
2. Executarea sarcinilor solicitate conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală.
3. Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru.
4. Abilitatea de a întocmi referate scrise și de a susține public aceste referate.
5. Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate.

8. Conținuturi

8.1 Curs	**Metode de predare - învățare**	**Observații[3]**
8.1.1. Introducere în chimia covalent dinamică (CCD). Ce este CCD? Importanța CCD. Concepte de bază: control termodinamic, reversibilitate, auto-corectare. Criterii pentru sisteme reversibile.	Prelegerea, explicația, conversația	2 ore / săptămână
8.1.2. Legătura covalent dinamică. Cerințe pentru legăturile covalente dinamice. Metode de confirmare a reversibilității.	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
8.1.3. Reacții covalente dinamice polare - Legături C-N și C-C. Formarea și schimbul de imine, hidrazone, oxime. Condensare aldolică reversibilă, reacția Knoevenagel.	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
8.1.4. Reacții covalente dinamice polare - Legături C–O, C–S, S–S, B–O. Esteri boronici, tioesteri, disulfuri, diselenuri. Reacții pericliclice și radicalice dinamice	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
8.1.5. Biblioteci combinatorial dinamice (BCD) Istoric și terminologie BCD. Considerații teoretice. BCD controlate de template: receptori pentru molecule mici și ioni.	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
8.1.6. Biblioteci combinatoriale dinamice - Aplicații. Liganzi pentru biomolecule. Cataliză. Auto-template și replicare. Controlul BCD prin metode fizice.	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
8.1.7. Macrocicluri rigide prin reacții covalente dinamice. Abordarea termodinamică vs. cinetică. Macrocicluri obținute prin metateza alchinelor, iminelor, olefinelor.	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
8.18. Cuști moleculare organice prin reacții covalente dinamice. Sinteza prin reacția de formare de imine și	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână

[3] De exemplu aspecte organizatorice, recomandări pentru studenți, aspecte specifice legate de curs/seminar cum ar fi invitarea unor practicieni în domeniu etc.

condensarea acizilor boronici. Funcționalizarea și aplicațiile cuștilor moleculare organice.		
8.1.9. Reacții covalent dinamice ortogonale. Combinarea reacțiilor covalent dinamice ortogonale: imină-disulfură, imină-ester boronic. CCD și legături de hidrogen, interacțiuni π-stacking	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
8.1.10. Auto-sortare prin CCD și mașini moleculare sintetice. Control termodinamic vs. cinetic al auto-sortării. Navete moleculare, motoare, *walkers* moleculari.	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
8.1.11. Polimeri covalent dinamici responsivi și polimeri auto-reparabili. Polimeri termoresponsivi, fotoresponsivi, mecanoresponsivi, responsivi la pH. Mecanisme de auto-reparare prin CCD	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână
8.1.12. Aplicații emergente ale CCD. Rețele polimerice rearanjabile. Aplicații biotehnologice. Electronică organică, captare gaze, cataliză, separări moleculare. Perspective.	Prelegerea, explicația, conversația.	2 ore / săptămână

Bibliografie:

1. Dynamic Covalent Chemistry: Principles, Reactions, and Applications, W. Zhang, Y. Jin, , John Wiley & Sons, Chichester, 2018.
2. Dynamic Combinatorial Chemistry Directed by Proteins and Nucleic Acids. M. Kieffer, J. F. Miron, J. G. Rudick, *Chem. Soc. Rev.* 2025, 54, 1234–1290.
3. Constitutional Dynamic Selection at Low Reynolds Number in a Triple Dynamic System: Covalent Dynamic Adaptation Driven by Double Supramolecular Self-Assembly. J. Rubio-Merino, J.-M. Lehn,* *J. Am. Chem. Soc.* 2021, 143, 15050–15063.
4. Smart Healable Polyurethanes: Sustainable Problem Solvers Based on Constitutional Dynamic Chemistry. X. Zhou, L. Zhang, Y. Chen, *Mater. Chem. Front.* 2023, 7, 3200–3235
5. Naphthalenediimide – A Unique Motif in Macrocyclic and Interlocked Supramolecular Structures. A. Diac, M. Matache, I. Grosu. N. D. Hădade,***** *Adv. Synth. Catal*. **2018**, *360*, 817–845
6. Selective Host Molecules Obtained by Dynamic Adaptive Chemistry. M. Matache, E. Bogdan, N. D. Hădade,* *Chem. Eur. J.* **2014**, *20*, 2106–2131.
7. From Supramolecular Chemistry Towards Constitutional Dynamic Chemistry and Adaptive Chemistry. J.-M. Lehn, *Chem. Soc. Rev.* 2007, 36, 151–160.

8.2 Seminar / laborator	**Metode de predare - învățare**	**Observații**
8.2.1. Identificarea reacțiilor covalente reversibile. Exerciții de identificare a tipurilor de legături covalente dinamice.	Problematizarea, studiul de caz, conversația.	1 oră / săptămână
8.2.2. Mecanismul reacțiilor de schimb covalent dinamic. Probleme mecanistice: cataliză acid-bază, metateza.	Problematizarea, studiul de caz, conversația.	1 oră / săptămână
8.2.3. Reacții de condensare reversibilă. Exerciții de formare/hidroliză de imine, hidrazone, oxime.	Problematizarea, studiul de caz, conversația.	1 oră / săptămână
8.2.4. Legături disulfurice și esteri boronici. Probleme privind formarea/schimbul legăturilor S-S și esteri boronici	Problematizarea, studiul de caz, conversația.	1 oră / săptămână
8.2.5. Analiza bibliotecilor combinatoriale dinamice. Studii de caz: proiectarea unei BCD.	Problematizarea, studiul de caz, conversația.	1 oră / săptămână

8.2.6. *Template* și amplificare în BCD. Probleme de selectivitate indusă de template.	Problematizarea, studiul de caz, conversația.	1 oră / săptămână
8.2.7. Sinteza macrociclurilor – studii de caz. Analiza strategiilor de sinteză: monomer la macrociclu vs. polimer la macrociclu.	Problematizarea, studiul de caz, conversația.	1 oră / săptămână
8.2.8. Cuști moleculare organice – design și aplicații. Exerciții de design a cuștilor moleculare.	Problematizarea, studiul de caz, conversația.	1 oră / săptămână
8.2.9. Sisteme ortogonale – design. Exerciții de combinare a reacțiilor CCD ortogonale.	Problematizarea, studiul de caz, conversația.	1 oră / săptămână
8.2.10. Auto-sortare și mașini moleculare. Analiza exemplelor de auto-sortare	Problematizarea, studiul de caz, conversația.	1 oră / săptămână
8.2.11. Polimeri dinamici – caracterizare și proprietăți. Analiza proprietăților mecanice și de auto-reparare	Problematizarea, studiul de caz, conversația.	1 oră / săptămână
8.2.12. Aplicații și perspective – prezentări individuale studenți și discuție finală.	Problematizarea, studiul de caz, conversația.	1 oră / săptămână

Bibliografie:

1. Dynamic Covalent Chemistry: Principles, Reactions, and Applications, W. Zhang, Y. Jin, , John Wiley & Sons, Chichester, 2018.
2. From Supramolecular Chemistry Towards Constitutional Dynamic Chemistry and Adaptive Chemistry. J.-M. Lehn,* *Chem. Soc. Rev.* 2007, 36, 151–160.
3. Recent Progress in Polymers with Dynamic Covalent Bonds. H. Li, X. Zhang, *Macromol. Chem. Phys.* 2023, 224, 2300224.
4. Self-Healing and Shape-Shifting Polymers Controlled by Dynamic Covalent Chemistry. L. Zhao, *Macromol. Rapid Commun.* 2023, 44, 2300401.
5. Targeting Biomolecules with Reversible Covalent Chemistry. J. Li, *Acc. Chem. Res.* 2016, 49, 1144–1156.
6. Structural diversity ranging from oligonuclear complexes to 1-D and 2-D coordination polymers generated by tetrasubstituted adamantane and spirobifluorene derivatives. T. Mocanu, L. Pop, N.D. Hădade, S. Shova, L. Sorace, I. Grosu, M. Andruh, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2019**, 5025–5038.
7. Examination of Structure-Activity Relationship of New *N*-Acylhydrazones A. G. Coman, A. Paun, C. C Popescu, N. D Hădade, A. Hanganu, A. M Mădălan, M. Matache *Rev. Roum. Chim.* **2020**, *65***,** 109-114.
8. Exploring Arylazo-3,5-Bis(trifluoromethyl)pyrazole Switches B. C. Enache, A. Hanganu, C. Tablet, C. C. Anghel, C. C. Popescu, A. Paun, N. D. Hădade, A. M. Mădălan, M. Matache *ACS Omega* **2022**, *7*, 39122–39135.
9. Planar Chiral p,p′-Terphenyl-Based Cyclophanes with Remarkable Enantiomer Stability: Synthesis, Theoretical Investigations, and Complexation Studies I. Stroia, M. E. Moisă, A. Pop, B. Legrand, A. Hanganu, N. D. Hădade,* Ion Grosu* *J. Org. Chem.* **2023**, *88*, 15647–15657.
10. Pillar [n] arenes– adaptive artificial water/ion/proton channels in membranes S. Daakour, N. D. Hădade, M. Barboiu *Tetrahedron Lett.*, **2024**, *145*, 155178.
11. Synthesis of dynamic N-acylhydrazone-based macrocycles N. Sandu, A. Hanganu, C. Popescu, A. M Demeter, A. G Mirea, A. Kuncser, C. Tăblet, N. D Hădade, M. Florea, D. P Funeriu, M. Matache, *J. Mat. Chem. A*, **2025**, *13,* 10232-10242.
12. Alte articole din literatura recentă

9. Evaluare

Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare[4]	9.2 Metode de evaluare[5]	9.3 Pondere din nota finală
9.4 Curs	Cunoașterea și înțelegerea conceptelor fundamentale ale chimiei covalent	Examen oral	60 %

[4] Criteriile de evaluare trebuie să reflecte direct rezultatele învățării vizate la nivel de program de studii, respectiv la nivel de disciplină. Mai concret, se evaluează achizițiile de învățare menționate în rezultatele anticipate ale învățării.

[5] Se recomandă stabilirea atât a metodelor de evaluare finală, cât și a strategiei de evaluare pe parcurs.

	dinamice; capacitatea de sinteză, analiză și interpretare a reacțiilor și sistemelor CCD		
9.5 Seminar/laborator	Participare activă la discuții; calitatea referatelor și prezentărilor; capacitatea de aplicare a cunoștințelor la rezolvarea problemelor.	Evaluare continuă (referate, prezentări, participare la discuții)	40 %
9.6 Standard minim de promovare			
Nota 5 (cinci)			

10. Etichete ODD (Obiective de Dezvoltare Durabilă / Sustainable Development Goals)[6]

	○ Eticheta generală pentru Dezvoltare durabilă							
1 FĂRĂ SĂRĂCIE	2 FOAMETE „ZERO"	3 SĂNĂTATE ȘI BUNĂSTARE	4 EDUCAȚIE DE CALITATE	5 EGALITATE DE GEN	6 APĂ CURATĂ ȘI SANITAȚIE	7 ENERGIE CURATĂ ȘI LA PREȚURI ACCESIBILE	8 MUNCĂ DECENTĂ ȘI CREȘTERE ECONOMICĂ	9 INDUSTRIE, INOVAȚIE ȘI INFRASTRUCTURĂ
○	○	○	X	○	○	○	○	○
10 INEGALITĂȚI REDUSE	11 ORAȘE ȘI COMUNITĂȚI DURABILE	12 CONSUM ȘI PRODUCȚIE RESPONSABILE	13 ACȚIUNE CLIMATICĂ	14 VIAȚA ACVATICĂ	15 VIAȚA TERESTRĂ	16 PACE, JUSTIȚIE ȘI INSTITUȚII EFICIENTE	17 PARTENERIATE PENTRU REALIZAREA OBIECTIVELOR	Nu se aplică nici o etichetă
○	○	○	○	○	○	○	○	○

Data completării:

26.01.2026

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

Data avizării în CSDC:

...

Semnătura directorului SDC

Prof. dr. Niculina Daniela Hădade

[6] Selectați o singură etichetă, cea care, în conformitate cu *Procedura de aplicare a etichetelor ODD în procesul academic*, se potrivește cel mai bine disciplinei. Dacă disciplina tratează tema dezvoltării durabile la modul general (de ex. prin prezentarea/introducerea cadrului general al dezvoltării durabile etc.) atunci se poate aloca eticheta generală de Dezvoltare Durabilă. Dacă niciuna dintre etichete nu descrie disciplina, selectați ultima opțiune: „*Nu se aplică nici o etichetă*".