

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

| | |
|---------------------------------------|---|
| 1.1 Instituția de învățământ superior | Universitatea BABES-BOLYAI Cluj-Napoca |
| 1.2 Facultatea | Chimie si Inginerie Chimica |
| 1.3 Departamentul | Chimie |
| 1.4 Domeniul de studii | Inginerie Chimica |
| 1.5 Ciclul de studii | Master |
| 1.6 Programul de studiu / Calificarea | Inginerie chimică – inginer: Ingineria Proceselor Organice si Biochimice (I.P.O.B.) |

2. Date despre disciplină

| | | | | | | | |
|--|--------------------------------------|---------------|----|------------------------|---|-------------------------|----|
| 2.1 Denumirea disciplinei | CMR7227-Sinteza asimetrica | | | | | | |
| 2.2 Titularul activităților de curs | Prof. Dr. Ing. Mircea DARABANTU, HDR | | | | | | |
| 2.3 Titularul activităților de seminar | Conf. Dr. Anamaria TEREK | | | | | | |
| 2.4 Anul de studiu | I | 2.5 Semestrul | II | 2.6. Tipul de evaluare | E | 2.7 Regimul disciplinei | Ob |

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 | | | | | 10 |
| Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri | | | | | 20 |
| Tutoriat | | | | | 10 |
| Examinări | | | | | 9 |
| Alte activități: nu este cazul | | | | | 0 |
| 3.7 Total ore studiu individual | | 69 | | | |
| 3.8 Total ore pe semestru | | 125 | | | |
| 3.9 Numărul de credite | | 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 |
| 5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului | <ul style="list-style-type: none"> Studentii vor fi prezenti echipati corespunzator. |

6. Competențele specifice acumulate

| | |
|-------------------------|--|
| Competențe profesionale | <p>C1. Descrierea, analiza și utilizarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul chimiei organice, biochimiei, microbiologiei, geneticii și biologiei moleculare</p> <p>C1.3. Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor pentru rezolvarea problemelor ingineresti în condiții de asistență calificată</p> <p>C1.4 Analiza critică și utilizarea principiilor, metodelor și tehnicilor de lucru avansate pentru evaluarea cantitativă și calitativă a proceselor din ingineria (bio)chimică de proces</p> <p>C1.5 Aplicarea conceptelor și teoriilor avansate din domeniul chimie si ingineriei chimice pentru elaborarea unui (bio)proces, in vederea obtinerii unui produs util</p> <p>C2. Descrierea, analiza și utilizarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul științelor ingineresti si al biotehnologiilor</p> <p>C2.5 Formularea, dezvoltarea și elaborarea creativă de soluții pentru dezvoltarea unor solutii (bio)tehnologice, pentru obtinerea unor compusi organici valorosi</p> <p>C3. Descrierea, analiza și utilizarea metodelor de analiză, caracterizare și control specifice produselor naturale și a produselor de biosinteză</p> <p>C3.1. Definirea limbajului și identificarea conceptelor avansate in domeniul sintezei stereoselective, a metodelor de analiză, caracterizare și control specifice produselor chirale, naturale și de sinteză</p> <p>C3.2. Aplicarea principiilor de baza ale sintezei stereoselective pentru obtinerea unui produs util (biologic activ) si a metodelor de analiză specifice.</p> |
| Competențe transversale | <p>CT1 Executarea cu independență a sarcinilor profesionale complexe și desfășurarea autonomă de activități de cercetare-proiectare, utilizând tehnici asistate de calculator și respectând normele de etică profesională și de conduită morală</p> <p>CT2 Planificarea, monitorizarea și asumarea sarcinilor profesionale ale unui grup profesional subordonat. Demonstrarea capacității de coordonare a activității, gândire analitică, adaptabilitate și flexibilitate, colaborare cu membrii echipei</p> |

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

| | |
|---------------------------------------|---|
| 7.1 Obiectivul general al disciplinei | In(formarea) asupra sintezei organice fine, inclusiv tehnologica, avand ca obiectiv obtinerea de compusi organici cu structura complexa, chirali si enantiomeric puri: principii teoretice si strategii de sinteza, control analitic, tipuri de reactii si procese asimetrice, exemple concrete din domeniul chimico-farmaceutic. Notiunea de sinteza stereoselectiva |
| 7.2 Obiectivele specifice | Notiunea de sinteza stereoselectiva, in particular asimetrica. Motivarea necesitatii aplicarii strategiei asimetrice. Concepte de baza: structurale, cinetice, termodinamice si analitice. Nomenclatura specifica sintezei asimetrice. Reactii fundamentale in sinteza organica prin prisma abordarii asimetrice. Fezabilitati si limite ale strategiei asimetrice. |

8. Conținuturi

| 8.1 Curs 2 ore / saptamana | Metode de predare | Observații |
|--|--|--|
| CURS I. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 1. SELECTIVITATE vs. SPECIFICITATE IN REACTIILE COMPUSILOR ORGANICI. 1.1. Reactii substrat specifice – produs selective. 1.2. Reactii produs selective. 2. DEFINITII ALE SINTEZEI ASIMETRICE (Reactie produs stereoselectiva). 3. TIPURI DE COMPUSI ORGANICI IN RAPORT CU SINTEZA ASIMETRICA. 3.1. Compusi organici simetrici achirali care nu pot fi desimetrizati. 3.2. Compusi organici simetrici achirali care pot fi desimetrizati. 3.3. Compusi simetrici nechirali (non-chirali) prin desimetrizare (ne)selectiva. 3.4. Compusi asimetrici, chirali si enantiomeric puri fara elemente structurale diastereotope (liganzi si /sau fete): conservarea si cumularea asimetriei moleculare. 3.5. Compusi asimetrici, chirali si enantiomeric puri cu elemente structurale diastereotope (liganzi si /sau fete): extinderea asimetriei moleculare. | Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea | Citarea literaturii primare este obligatorie |
| CURS II. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 4. GLOSAR MINIMAL DE TERMENI SPECIFICI SINTEZEI ASIMETRICE (I) 4.1. <i>Anti-Syn</i> (Formule). 4.2. <i>Bürgi-Dunitz</i> (Traietorie). 4.3. <i>Chiroptic(e)</i> (Proprietati). 4.4. <i>Cram</i> . 4.4.1. Regula modelului neciclic (Felkin-Ahn). 4.4.2. Regula modelului ciclic. 4.5. <i>Diastereomeric</i> (Exces). 4.6. <i>E(O)</i> , <i>Z(O)</i> (<i>Enolati</i>). 4.7. <i>Enantiomeric</i> (Exces). 4.8. <i>Epimeri</i> . 4.9. <i>Optica</i> (Activitate). | Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea | Citarea literaturii primare este obligatorie |
| CURS III. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 4. GLOSAR MINIMAL DE TERMENI SPECIFICI SINTEZEI ASIMETRICE (II). 4.10. <i>Stereoconvergent(a)</i> (Sinteză). 4.11. <i>Stereochimic</i> (Descriptor). 4.12. <i>Stereoelectronic</i> (Efect). 4.13. (In)variabil (<i>Reflexiv</i>). 5. CONTROL CINETIC SI TERMODINAMIC IN | Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea | Citarea literaturii primare este obligatorie |

| | | |
|---|--|--|
| <p>SINTEZELE ASIMETRICE. 5.1. Interactia intre un amestec racemic si un reactant achiral. 5.2. Interactia intre un amestec racemic si un reactant enantiomeric pur. 5.2.1. Rezolutia cinetica a unui amestec racemic ("deracemizarea"). 5.2.1.1. Rezolutia cinetica in conditii abiotice. 5.2.1.2. Rezolutia cinetica in conditii enzimactice.</p> | | |
| <p>CURS IV. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 5.2.2. Rezolutia cinetica – dinamica (D.K.R. Dynamic kinetic resolution). 5.3. Influenta parametrilor cinetici si termodinamici. 5.3.1. Principiul lui Curtin & Hammet in cazul controlului cinetic. 5.3.2. Cazuri in care principiul lui Curtin & Hammet nu se aplica.</p> | <p>Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea</p> | <p><i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i></p> |
| <p>CURS V. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 5.4. Stereodiferentierea in sinteza asimetrica. 5.4.1. Problema. 5.4.2. Simpla sinteza asimetrica: stereodiferentierea simpla. 5.4.2. Dubla sinteza asimetrica: stereodiferentierea dubla. 6. METODE ANALITICE IN PRACTICA SINTEZELOR ASIMETRICE. 6.1. Importanta analizei si metodei alese. 6.2. Polarimetria. Proprietati chiroptice moleculare.6.2.1. Fenomenul.</p> | <p>Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea</p> | <p><i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i></p> |
| <p>CURS VI. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 6.2.2. Aplicatii ale polarimetriei. 6.2.2.1. Utilizarea relatiei de definitie si variante. 6.2.2.2. Fluctuatii ale valorii rotatiei specifice. 6.2.2.3. Atribuirii empirice ale configuratiei absolute a unui compus organic pe baza rotatiei specifice. 6.2.3. Dispersia Optica Rotatorie (D.O.R.) si Dicroismul Circular (D.C.). 6.2.3.1. Fenomenul. 6.2.3.2. Aplicatii ale D.O.R. si D.C. la deducerea semiempirica a configuratiei absolute.</p> | <p>Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea</p> | <p><i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i></p> |
| <p>CURS VII. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 6.2.3.3. Concluzii. 6.3. Rezonanta Magnetica Nucleara (R.M.N.). 6.3.1. Agenti de derivatizare chirali (CDA, Chiral Derivatizing Agents): derivatizarea "statica". 6.3.1.1. Problema. 6.3.1.2. Utilizarea acizilor Mosher in analiza rezultatelor unei sinteze asimetrice. 6.3.2. Agenti de derivatizare achirali: derivatizarea "static-statistica". 6.3.2.1. Metoda dimerizarii. 6.3.2.2. Metoda ciclizarii. 6.3.3. Reactivi de deplasare chimica (Chemical Shift Reagents, CSR): derivatizarea "dinamica". 6.3.3.1. Reactivi de deplasare chimica chirali (Chiral Shift Reagents, CSR).</p> | <p>Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea</p> | <p><i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i></p> |
| <p>CURS VIII. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 6.3.3.2. Utilitatea reactivilor de deplasare chimica (CSR). 6.3.4. Agenti de solvatare chirali (Chiral Solvating Agents, CSA): derivatizarea "dinamica". 6.3.4.1. Problema. 6.3.4.2. Utilizarea agentilor de solvatare chirali si enantiopuri. 6.3.4.3. Concluzii. 6.4. Cromatografia. 6.4.1. Problema in contextul sintezei asimetrice. 6.4.2. Aspecte generale. 6.4.3. Mecanisme generale de separare cromatografica a enantiomerilor.</p> | <p>Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea</p> | <p><i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i></p> |
| <p>CURS IX. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 6.4.4. Tipuri de faze stationare chirale si enantiopure. 6.4.4.1. Pentru cromatografia de gaz (GC). 6.4.4.2. Pentru cromatografia de lichid (HPLC). 6.4.4.3. Concluzii generale. 6.5. Recapitularea principalelor metode de determinare a compozitiei enantiomerice. 7. PRINCIPALELE METODE SI STRATEGII IN SINTEZA ASIMETRICA. 7.1. Formarea de noi legaturi C-C prin sinteza asimetrica. 7.1.1. Sinteze asimetrice mediate de auxiliari chirali. 7.1.1.1. Reactii Diels-Alder asimetrice. 7.1.1.2. Reactii de α-C-alkilare asimetrica a oxienolatilor.</p> | <p>Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea</p> | <p><i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i></p> |
| <p>CURS X. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 7.1.1.3. Reactii de α-C-alkilare asimetrica a azaenolatilor. 7.1.1.3. Concluzii. 7.1.2. Aditii nucleofile asimetrice la gruparea carbonilica. 7.1.2.1. Aditia produs diastereoselectiva a reactivilor organomagnezieni la compusi carbonilici enantiopuri. 7.1.2.2. Condensarea aldolica produs diastereoselectiva. 7.1.3. Transpozitii produs diastereoselective.</p> | <p>Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea</p> | <p><i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i></p> |
| <p>CURS XI. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 7.2. Formarea de noi legaturi C-heteroatom prin sinteza asimetrica. 7.1.2. Aditia produs diastereoselectiva a hidrurilor la compusi carbonilici enantiopuri. 7.1.3. Reactivi si catalizatori chirali. 7.1.4. Epoxidare Sharpless. 7.1.5. Dihidroxilarea asimetrica. 7.1.6. Oxidarea asimetrica a sulfurilor.</p> | <p>Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea</p> | <p><i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i></p> |
| <p>CURS XII. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 8. NOTIUNI DE PRACTICA INDUSTRIALA A SINTEZEI ORGANICE FINE SI ASIMETRICE (I). MATERILE PRIME: SOLVENTI, REACTIVI, AUXILIARI: notiunea "scale up", sinteza industriala in regim discontinuu, prepararea si purificarea unor solventi si reactivi in sinteza organica fina la scara industriala (exemple), risc tehnologic normal in sinteza organica fina la scara industriala, prepararea unor catalizatori specifici (Ni Raney, Pd/C), practica sintezelor Grignard la scara industriala.</p> | <p>Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea</p> | <p><i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i></p> |

| | | |
|---|--|--|
| CURS XIII. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar. 8. NOTIUNI DE PRACTICA INDUSTRIALA A SINTEZEI ORGANICE FINE SI ASIMETRICE (II). SINTEZE MULTIETAPA. Hormoni steroizi, reduceri, oxidari, epoxidari, aditii nucleofile stereocontrolate la gruparea >C=O, aditii electrophile stereocontrolate la legatura >C=C< la scara pilot si industrial. | Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea | Citarea literaturii primare este obligatorie |
| CURS IV. Concepte de baza, cuvinte-cheie, sumar. 9. LITERATURA DE SPECIALITATE IN SINTEZA ASIMETRICA. 9.1. Principalele reviste de profil. 9.1.1. Standarde si conventii. 9.1.2. Cum se citește un articol din domeniul sintezei asimetrice. 9.2. Principalele monografii in sinteza asimetrica. 9.2.1. Autori reprezentativi. 9.2.2. Locul sintezei asimetrice in domeniul stereochemiei. | Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea | Citarea literaturii primare este obligatorie |
| Bibliografie 1. S. Mager, M. Horn <i>Stereochimia compusilor organici</i> , Editura Dacia, Cluj-Napoca 1984 . 2. S. Mager, L. David, I. Grosu <i>Stereochimia compusilor organici</i> , Editura Dacia, Cluj-Napoca, 2006 . 3. E. L. Eliel, H. S. Wilen <i>Stereochemistry of the Organic Compounds</i> ; John Wiley & Sons, Inc. 1994 . 4. R. E. Gawley, J. Aubé, <i>Principles of Asymmetric Synthesis</i> , Pergamon (Tetrahedron Organic Chemistry Series) Elsevier Science Ltd. 1996 . 5. M. Nógrádi <i>Stereoselective Synthesis</i> VCH Verlagsgesellschaft mbH, D-69451 Weinheim (Germany) 1995 . 6. A. Collet, J. Crassous, J. P. Dutasa, L. Guy, <i>Molécules chirales (Stéréochimie et Propriétés)</i> E.D.P. Science / C.N.R.S. Editions 2006 . 7. J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers <i>Organic Chemistry</i> , De Boeck Diffusion s.a., 2003 , Oxford University Press 2001 . 8. Colectiile de Publicatii (titluri reprezentative): <i>Journal of the American Chemical Society</i> , <i>Organic Letters</i> , <i>Journal of the Organic Chemistry</i> , <i>Tetrahedron</i> , <i>Tetrahedron Asymmetry</i> , <i>Tetrahedron Letters</i> , <i>Chemistry an European Journal</i> , <i>European Journal of the Organic Chemistry</i> . | | |

| 8.2 Laborator | Metode de predare | Observatii |
|---|--|------------|
| 8.2.1. Tehnici experimentale specifice realizarii reactiilor enantioselective si evaluarii eficientei acestora. Protectia muncii si prezentarea laboratorului si a lucrarilor. | Explicația Conversația Problematizarea Experimentul | 4 ore |
| 8.2.2. Separarea enantiomerilor dintr-un racemic prin metode chimice. Se va alege un racemic pentru care exista pusa la punct o metoda de transformare in diastereoizomeri cu ajutorul unor reactivi chirali si o metoda de separare a diastereoizomerilor formati. Modul de lucru se va descrie in referat. | Explicația Conversația Problematizarea Experimentul | 6 ore |
| 8.2.3. Realizarea unei reactii de epoxidare enantioselective. Se va alege din datele din literatura o reactie care sa poata fi executata in timpul unei sedinte de laborator. Selectivitatea reactiei va fi pusa in evidenta polarimetric si prin derivatizare si apoi spectre RMN si investigatii HPLC | Explicația Conversația Problematizarea Experimentul | 6 ore |
| 8.2.4. Realizarea unei reactii de tip Michael enantioselective. Se va alege din datele din literatura o reactie care sa poata fi executata in timpul unei sedinte de laborator. Selectivitatea reactiei va fi pusa in evidenta polarimetric si prin derivatizare si apoi spectre RMN si investigatii HPLC | Explicația Conversația Problematizarea Experimentul | 6 ore |
| 8.2.5. Realizarea unei reactii de reducere (a unei grupari carbonil) enantioselective. Se va alege din datele din literatura o reactie care sa poata fi executata in timpul unei sedinte de laborator. Selectivitatea reactiei va fi pusa in evidenta polarimetric si prin derivatizare si apoi spectre RMN si investigatii HPLC | Explicația Conversația Problematizarea Experimentul | 6 ore |
| Bibliografie 1. S. Mager, M. Horn <i>Stereochimia compusilor organici</i> , Editura Dacia, Cluj-Napoca 1984 . 2. S. Mager, L. David, I. Grosu <i>Stereochimia compusilor organici</i> , Editura Dacia, Cluj-Napoca, 2006 . 3. E. L. Eliel, H. S. Wilen <i>Stereochemistry of the Organic Compounds</i> ; John Wiley & Sons, Inc. 1994 . 2. Colectia Journal of Chemical Education editata de American Chemical Society. | | |

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 in disciplina Sinteza Organica Fina a Compusilor Chirali studentii masteranzi dobandesc un bagaj de cunostinte consistent, in concordanta cu competentele parțiale cerute pentru ocupatiile posibile prevazute in Grila 2M – RNCIS . |
|---|

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 a problematicii tratate la curs | i) redactarea unui Eseu pe marginea unui articol de literatură din domeniul și profilul Disciplinei. ii) Proba Scrisă (Grila) | Nota finală constă dintr-o medie între două calificative cu pondere egală: i) un calificativ ($1 \div 10$) pentru Eseu. ii) un calificativ ($1 \div 10$) la Proba Scrisă. În cazul în care nota de la Eseu este cel puțin 8.00, prezenta la Proba Scrisă este facultativă și Nota finală devine cea de la Eseu. |
| | Rezolvarea corectă a problemelor | | |
| 10.5 Seminar/laborator | Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate în experiment Efectuarea corectă a operațiunilor din laborator Alegerea adecvată a metodelor de investigare | | |
| 10.6 Standard minim de performanță | | | |
| 1. Recunoașterea, în proporție de 50%, a caracterului stereoselectiv al unui proces chimic asimetric. 2. Recunoașterea, în proporție de 50%, a specificității și selectivității unui proces chimic asimetric. 3. Recunoașterea, în proporție de 50%, a chiralității aparute în cursul unui proces chimic asimetric. 4. Recunoașterea, în proporție de 50%, a enantiomeriei aparute în cursul unui proces chimic asimetric. 5. Recunoașterea, în proporție de 50%, a metodei analitice celei mai adecvate pentru controlul unui proces chimic asimetric. 6. Recunoașterea, în proporție de 50%, a condițiilor de reacție cele mai adecvate pentru realizarea unui proces chimic asimetric. | | | |

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar




06.03.2018

Data avizării în departament
01 martie 2018

Semnătura directorului de departament
Acad. Prof. Dr. Cristian Silvestru

