

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 (IPOB)

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	CMR7227-Sinteza Asimetrica-MD				
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. Dr. Ing. Mircea DARABANTU, HDR				
2.3 Titularul activităților de seminar	Conf. Dr. Anamaria TERECE				
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					15
Examinări					4
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	• Nu este cazul
4.2 de competențe	• Nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	• Studenții se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	• Conform desfasuratorului de activitati

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 enantio(meric) 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
<p>INTRO: Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar PROCHIRALITATEA (I). NOTIUNEA DE TOPICITATE A LIGANZILOR 1. Homotopicitatea 1.1. Liganzi (substituenti) homotopici. 1.2. Fete homotopice. 2. Enantiotopicitatea. 2.1. Liganzi (substituenti) enantiotopici. 2.2. Fete enantiotopice. 3. Diastereotopicitatea. 3.1. Liganzi (substituenti) diastereotopici. 3.2. Fete diastereotopice. 4. Clasificarea topicitatii elementelor structurale din punct de vedere al prochiralitatii. 5. Testul de substitutie pentru identificarea prochiralitatii centrale si specificarea ei. 6. Testul de aditie pentru identificarea prochiralitatii faciale si specificarea ei. Cine si de ce a facut prima sinteza asimetrica ? Limitarile regulei CIP. Chloramphenicol, Chloromicetyn: sinteza configurational diastereoselectiva dar nu asimetrica. Procedeul clasic Parke-Davis. Procedeul european Boehringer (varianta). Exemplu de sinteza asimetrica a Cloramfenicolului prin cataliza asimetrica. Scandalul Thalidomidei. Ibuprofen (pentru linistea noastra).</p>	<p>Explicația</p> <p>Conversația</p> <p>Problematizarea</p> <p>Dezbaterea</p>	<p><i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i></p>
<p>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. PROCHIRALITATEA (II). 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.</p>	<p>Explicația</p> <p>Conversația</p> <p>Problematizarea</p> <p>Dezbaterea</p>	<p><i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i></p>

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.		
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. Bürgi-Dunitz (Traectorie). 4.3. Chiroptic(e) (Proprietati). 4.4. Cram. 4.4.1. Regula modelului neciclic (Felkin-Ahn). 4.4.2. Regula modelului ciclic. 4.5. Diastereomeric (Exces). 4.6. <i>E</i> (O), <i>Z</i> (O) (Enolati). 4.7. Enantiomeric (Exces). 4.8. Epimeri. 4.9. Optica (Activitate).	Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea	<i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i>
CURS III. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 4. GLOSAR MINIMAL DE TERMENI SPECIFICI SINTEZEI ASIMETRICE (II). 4.10. Stereoconvergent(a) (Sinteza). 4.11. Stereochimic (Descriptor). 4.12. Stereoelectronic (Efect). 4.13. (In)variabil (Reflexiv). Prochiralitatea (III). 5. CONTROL CINETIC SI TERMODINAMIC IN 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 enzimatice.	Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea	<i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i>
CURS IV. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 5.2.2. Rezolutia cinetica – dinamica (DKR: 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.	Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea	<i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i>
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.	Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea	<i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i>
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. Atribuire empirice ale configuratiei absolute a unui compus organic pe baza rotatiei specifice. 6.2.3. Dispersia Optica Rotatorie (DOR) si Dicroismul Circular (DC). 6.2.3.1. Fenomenul. 6.2.3.2. Aplicatii ale DOR si DC la deducerea semiempirica a configuratiei absolute.	Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea	<i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i>
CURS VII. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 6.2.3.3. Concluzii. 6.3. Rezonanta Magnetica Nucleara (RMN). 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).	Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea	<i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i>
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.	Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea	<i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i>
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.	Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea	<i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i>
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.	Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea	<i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i>
CURS XI. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar: 7.2. Formarea de noi legaturi C-heteroatom prin sinteza asimetrica. 7.1.2. Aditia produs	Explicația Conversația	<i>Citarea literaturii</i>

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.	Problematizarea Dezbaterea	<i>primare este obligatorie</i>
CURS XII. Concepte de bază, cuvinte-cheie, sumar. 8. NOTIUNI DE PRACTICA INDUSTRIALA A SINTEZEI ORGANICE FINE SI ASIMETRICE (I). MATERIILE PRIME: SOLVENTI, REACTIVI, AUXILIARI: notiunea "scale up", sinteza industrială in regim discontinuu, prepararea si purificarea unor solventi si reactivi in sinteza organica fina la scara industrială (exemple), risc tehnologic normal in sinteza organica fina la scara industrială, prepararea unor catalizatori specifici (Ni Raney, Pd/C), practica sintezelor Grignard la scara industrială.	Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea	<i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i>
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	<i>Citarea literaturii primare este obligatorie</i>
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. Nográdi <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. L. Poppe, J. Nagy, G. Hornyánszky, Z. Boros <i>Stereochemistry and Stereoselective Synthesis</i> , 2016 Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Boschstr. 12, 69469 Weinheim, Germany; 9. P. Vollhardt, N. Schore <i>Organic Chemistry: Structure and Function</i> 8 th Edition, 2018 Macmillan Learning; 10. Colecțiile 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> ; Suportul Electronic al fiecarui Curs este disponibi, pentru Studenti, numai prin E-mail; Cuprinsul fiecarui Curs: http://www.chem.ubbcluj.ro/~darab		

8.2 Lucrari Practice (LP) si Laborator (L)	Metode de predare	Observatii
LP (7 × 2 = 14 ore) OBIECTIV: <i>Elaborarea, de catre fiecare Student-Masterand, a unui Eseu scris dintr-un Articol din domeniul Sintezelor Asimetrice conform Bibliografiei (poz. 9).</i> LP-1 (2 ore): atribuirea Articolelor prin tragere publica la sorti; discutarea amanuntita a cerintelor de redactare a Eseului scris. LP-2 (2 ore): identificarea tematicii articolului (titlu, abstract, introducere etc.) si localizarea Autorilor Articolului in domeniu; identificarea unor Articole similare ale Autorilor. LP-3 (2 ore): alegerea sintezelor reprezentative din Articol, redactarea chimismului acestora in Eseu prin folosirea reprezentarilor stereochemice adecvate. LP-4, -5 (2 × 2 ore): redactarea, prin explicare detaliata, a analizei structurale organice a rezultatului sintezelor asimetrice alese anterior. LP-6 (2 ore): redactarea, prin explicare detaliata, a (stereo)mecanismului de reactie. LP-7 (2 ore): verificare finala a Eseului. L (7 × 2 = 14 ore) OBIECTIV: <i>Rezoluția unui amestec racemic brut de amină liberă prin derivatizare cu un acid optic pur</i> L-1 (4 ore): purificarea materiei prime (recristalizare); L-2 (4 ore): formarea sărurilor diastereoizomere ale aminei libere (racemic) cu acidul optic pur și separarea acestora prin cristalizare fracționată; L-3 (4 ore): punerea în libertate și purificarea (prin recristalizare) a enantiomerilor aminei libere; L-4 (2 ore): investigarea proprietăților enantiomerilor (măsuratori de rotație optică)	Explicația Conversația Problematizarea Dezbaterea	Nu este cazul.

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 Asimetrica studentii masteranzi dobandesc un bagaj de cunostinte consistent, in concordanta cu competentele din Suplimentul la diploma si calificarile din ANC .

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 problematicei tratate la curs	i) redactarea unui Eseu pe marginea unui articol de literatura din domeniul si profilul Disciplinei. ii) Proba Scrisa (Grila)	Nota finala consta dintr-o medie intre doua calificative cu pondere egala: i) un calificativ (1 ÷ 10) pentru Eseu. ii) un calificativ (1 ÷ 10) la Proba Scrisa. In cazul in care nota de la Eseu este cel putin 8.00, prezenta la Proba Scrisa este facultativa si Nota finala devine cea de la Eseu.
	Rezolvarea corectă a problemelor		
10.5 Lucrari practice /	Lucrari Practice (Eseu): vezi mai sus.		
10.6 Standard minim de performanță			
<i>1. Recunoasterea, in proportie de 50%, a caracterului stereoselectiv al unui proces chimic asimetric.</i> <i>2. Recunoasterea, in proportie de 50%, a specificitatii si selectivitatii unui proces chimic asimetric.</i> <i>3. Recunoasterea, in proportie de 50%, a chiralitatii aparute in cursul unui proces chimic asimetric.</i> <i>4. Recunoasterea, in proportie de 50%, a enantiomeriei aparute in cursul unui proces chimic asimetric.</i> <i>5. Recunoasterea, in proportie de 50%, a metodei analitice celei mai adecvate pentru controlul unui proces chimic asimetric.</i> <i>6. Recunoasterea, in proportie de 50%, a conditiilor de reactie cele mai adecvate pentru realizarea unui proces chimic asimetric.</i>			

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

04.04.2020




Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament

07.04.2020

Acad. Cristian Silvestru

