

## 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 Departamentul	Departamentul de Chimie și Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclu de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Technici Moderne de Sinteză în Chimie (TMSC) /master in Chimie

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Analiza retrosintetică					
Codul disciplinei	CMM6132					
2.2 Titularul activităților de curs	Lector dr. Tamas Lovasz					
2.3 Titularul activităților de laborator	Lector dr. Tamas Lovasz					
2.4 Anul de studiu	II	2.5 Semestrul	III	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei
						Obligatorie, DS

### 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					28
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					14
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					20
Tutoriat					3
Examinări					4
Alte activități: .....					-
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"> <li>Stereochimia compușilor organici</li> <li>Sinteza organică fină a compușilor chirali</li> </ul>
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> <li>nu este cazul</li> </ul>

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

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Dotări tehnice necesare susținerii prelegerilor (calculator, soft-uri necesare, videoproiector)</li> </ul>
-------------------------------	---

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Prezența studenților la cursuri</li> <li>• Studenții vor păstra închise telefoanele mobile pe durata prelegerilor și seminariilor</li> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Prezența obligatorie a studenților la orele de seminar</li> </ul>

## 6. Competențele specifice acumulate

<b>Competențe profesionale</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Să își însușească concepte teoretice de analiză rațională a căilor de sinteză în mai multe etape a compușilor organici.</li> <li>• Să utilizeze cunoștințele de bază din domeniul chimiei în abordarea teoretică de reducere sistematică a complexității moleculare a compușilor țintă.</li> <li>• Să demonstreze capacitatea de a selecta reacții plauzibile din punct de vedere sintetic în vederea elaborării unor strategii de sinteză a compușilor organici cu structuri complexe.</li> <li>• Să formuleze, să dezvolte și să aplice creativ soluții pentru probleme de strategie de sinteză a compușilor organici, în contexte bine definite.</li> </ul>
<b>Competențe transversale</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Rezolvarea sarcinilor profesionale în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru</li> <li>• Informarea și documentarea în limba maghiară, română și într-o limbă de circulație internațională, cu utilizarea: metodelor moderne de informare și comunicare (căutare în baze de date), respectiv prin utilizarea bibliografiei propuse.</li> </ul>

## 7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

<b>7.1 Obiectivul general al disciplinei</b>	Acumularea de cunoștințe teoretice de specialitate prin învățarea, înțelegerea și aplicarea conceptelor legate de analiza rațională a căilor de sinteză în mai multe etape a compușilor organici cu complexitate moleculară avansată.
<b>7.2 Obiectivele specifice</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Să înțeleagă conceptele care stau la baza metodelor teoretice de reducere sistematică a complexității moleculare a compușilor organici.</li> <li>• Să dezvolte abilități de utilizare a conceptelor analizei retrosintetice în planificarea sintezei compușilor organici.</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Definirea termenilor specifici analizei retrosintetice (target, transformare, retron, sinton).	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului alternativ cu utilizarea tablei	Prelegere (2 ore/prelegere)
8.1.2. Clasificarea transformărilor. Clasificarea sintonilor. Modelul Corey-Seebach.	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului alternativ cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative, insistarea pe cuvintele cheie și încurajarea	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului și răspunsuri directe la întrebările studenților.

	participării active a studenților la curs	
8.1.3. Noțiuni de teoria reactivității compușilor organici. Modelul Lapworth-Evans.	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului.	Prelegere (2 ore/prelegere)
8.1.4. Transformări de simplificare structurală bazate pe disconexia scheletului molecular: - disconexia catenelor (sintoni pentru formarea catenelor de carbon).	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului alternativ cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare.	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului și răspunsuri directe la întrebările studenților.
8.1.5. Transformări de simplificare structurală bazate pe disconexia scheletului molecular: - disconexia inelelor (sintoni pentru formarea inelelor de 3-6 atomi)	Prelegere cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative, insistarea pe cuvintele cheie .	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților
8.1.6. Transformări de simplificare structurală bazate pe disconexia scheletului molecular: - disconexia grupărilor funcționale (sintoni pentru formarea regioselectivă a derivatilor 1-6 difuncționalizați).	Prelegere cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative, insistarea pe cuvintele cheie .	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților
8.1.7. Transformări fără simplificarea scheletului molecular -transpoziții ale scheletului molecular,	Prelegere cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative, insistarea pe cuvintele cheie .	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților.
8.1.8. Transformări fără simplificarea scheletului molecular -transpoziții ale grupărilor funcționale, -inversarea configurației stereocentrilor.	Prelegere cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative, insistarea pe cuvintele cheie .	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților
8.1.9. Strategii de sinteză bazate pe mecanisme de reacție	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului alternativ cu utilizarea tablei.	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților
8.1.10. Strategii de sinteză bazate pe tipuri de structuri ale intermediarilor sau ale materiilor prime.	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului, având la bază slide-urile și sursele bibliografice alternativ cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative.	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților.
8.1.11. Strategii topologice: -pentru sisteme aciclice -pentru sisteme policiclice (inele izolate, spiranice sau cu punte).	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului alternativ cu utilizarea tablei. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative.	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților, încurajarea participării active a studenților la curs
8.1.12. Strategia abordărilor stereochemice și a modificării grupărilor funcționale	Prelegere. Metoda interactivă de predare bazată pe exemple alternative.	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților
8.1.13. Combinații de strategii (I) -analiza retrosintetică a unor structuri macrociclice	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproectorului, având la bază slide-urile și sursele bibliografice alternativ cu utilizarea	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților, încurajarea participării active a studenților la curs

	tablei.	
8.1.14. Combinații de strategii (II) -analiza retrosintetică a unor structuri heterociclice -analiza retrosintetică a unor structuri policiclice.	Prelegere: prezentarea cursului cu ajutorul videoproietorului, având la bază slide-urile și sursele bibliografice alternativ cu utilizarea tablei.	Prelegere (2 ore/prelegere) Participarea la discuții privind tematica cursului. și răspunsuri directe la întrebările studenților, încurajarea participării active a studenților la curs

### Bibliografie:

#### Obligatorie

1. E. J. Corey, Xue-Min Cheng, "The Logic of Chemical Synthesis", Ed. Wiley 1995

#### Opțională

2. Stuart Warren, Paul Wyatt, Organic Synthesis: The Disconnection Approach, 2nd Edition, Ed. Wiley 2008

3. M. B. Smith, "Organic Synthesis", Ed. McGraw-Hill, 1994

4. K. C. Nicolaou, D. Vourloumis, N. Winssinger, P. S. Baran, The Art and Science of Total Synthesis at the Dawn of the Twenty-First Century, Angew. Chem. Int. Ed. 2000, 39, 44-122

5. R. O. C. Norman, "Principles of organic Synthesis", Ed. Chapman and Hall, 1981

6. Antus Sándor, Mátyus Péter, Szerves kémia I-III., Ed. Nemzedékek Tudása Tankönyvkiadó, 2010

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Recapitularea mecanismelor de reacție din chimia organică	Exemplificare	2 ore/seminar
8.2.2. Analiza retrosintetică și strategia sintezei compușilor aromatici	Studiu de caz	2 ore/seminar
8.2.3. Analiza retrosintetică și strategia sintezei compușilor 1,2-difuncționali (1,2-dioli, $\alpha$ -hidroxi-carbonil, $\alpha$ -dicetone, $\alpha$ -cetoacizi)	Studiu de caz, Exemplificare	2 ore/seminar
8.2.4. Analiza retrosintetică și strategia sintezei compușilor 1,3-difuncționali (Condensare Claisen, $\beta$ -hidroxi-carbonil, $\beta$ -dicetone, $\beta$ -cetoacizi)	Studiu de caz, Exemplificare	2 ore/seminar
8.2.5. Analiza retrosintetică și strategia sintezei compușilor 1,4-; 1,5-; 1,6-difuncționali (hidroxi-carbonil, hidroxi-acizi, acizi nesaturați).	Studiu de caz, Exemplificare	2 ore/seminar
8.2.6. Analiza retrosintetică și strategia sintezei compușilor monociclici. (ciclopropan, ciclobutan, ciclopentan, ciclohexan)	Studiu de caz, Exemplificare	2 ore/seminar
8.2.7. Strategii de sinteză – utilizarea unor baze de date: Reaxys, SciFinder	Studiu de caz, Exemplificare	2 ore/seminar
8.2.8. Tipuri de transformări, identificarea retronului	Studiu de caz, Exemplificare, rezolvare de probleme	2 ore/seminar
8.2.9. Strategii de sinteză - bazate pe mecanisme de reacție	Studiu de caz, Exemplificare, rezolvare de probleme	2 ore/seminar
8.2.10. Strategii de sinteză - bazate pe tipuri de structuri	Studiu de caz, Exemplificare, rezolvare de probleme	2 ore/seminar
8.2.11. Strategii topologice	Studiu de caz, Exemplificare, rezolvare de probleme	2 ore/seminar
8.2.12. Analiza retrosintetică a unor structuri complexe I.	Studiu de caz	2 ore/seminar
8.2.13. Analiza retrosintetică a unor structuri complexe II.	Studiu de caz	2 ore/seminar
8.2.14. Analiza retrosintetică a unor structuri complexe III.	Studiu de caz	2 ore/seminar

### Bibliografie

1. K. C. Nicolau, E. J. Sorensen, Classics in Total Synthesis, Ed. VCH Publishers Inc. Weinheim 1996

2. I. Schiketanz, I. Costea, "Retrosinteza Organica", Ed. Printech, 2006.

3. M. Avram "Chimie Organica", vol. 2, ed. II, Ed Zecasin, Bucuresti 1999

4. Á. Furka, „Szerves Kémia”, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1998.

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

• Conținutul acestei discipline este aferent produșilor de sinteză cu structuri complexe, (analogi ai produșilor naturali, medicamente, coloranți, aromatizanți, odoranți, pesticide, etc.), venind în întâmpinarea nevoilor angajatorilor situați atât în sfera producției, dar și în cea a desfacerii produselor de sinteză chimică. Conținutul disciplinei este foarte util în dezvoltarea profesională orientată spre cariera științifică (doctorat, cercetare).

## 10. Evaluare

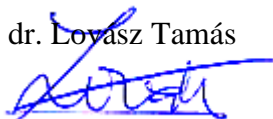
Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Cunoașterea conceptelor care stau la baza metodelor teoretice de reducere sistematică a complexității moleculare a compușilor organici. Dezvoltarea de abilități de utilizare a conceptelor analizei retro-sintetice în planificarea sintezei compușilor organici. Evaluarea se realizează pe baza unui referat scris, care obligatoriu trebuie prezentat oral și răspunsuri la întrebări formulate de examinator din tematica cursului. Notarea se face de la 1-10  Participarea la examen este condiționată de prezența la seminar minim 90% din numărul total de ore.	<ul style="list-style-type: none"><li>Referat scris în care se descrie în extenso analiza retrosintetică a unui compus organic țintă cu structura complexă și planificarea etapelor de sinteză chimică.</li></ul>	30%
		<ul style="list-style-type: none"><li>Prezentare orală cu suport PPT a elementelor cheie din analiza retrosintetică a compusului organic cu structura complexă și planificarea etapelor de sinteză.</li></ul>	20%
		<ul style="list-style-type: none"><li>Răspunsuri la două întrebări formulate de examinator</li></ul>	20%
10.5 Seminar	Înțelegerea și însușirea problematicii tratate la curs și seminar. Notarea se face de la 1-10	Rezolvare de teme pe parcurs	30%
	Capacitatea de utilizare adecvată a conceptelor și metodelor teoretice. Notarea se face de la 1-10		
10.6 Standard minim de performanță:			
<ul style="list-style-type: none"><li>Reducerea sistematică a complexității moleculare a unui compus organic cu structura complexă</li><li>Minim nota 5 la examen</li><li>Minim nota 5 pentru activitatea/temele de la seminar</li></ul>			

Data completării

11.04.2022

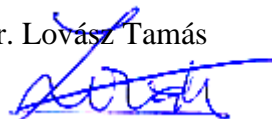
Semnătura titularului de curs

dr. Lovász Tamás



Semnătura titularului de seminar

dr. Lovász Tamás



Data avizării în departament

12.04.2022.....

Semnătura directorului de departament

