

## 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	Chimie
1.4 Domeniul de studii	Inginerie Chimică
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	<b>IPOB / MSc</b>

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Analiză Retrosintetică</b>						
Codul disciplinei	<b>CMR6132</b>						
2.2 Titularul activităților de curs	<b>Conf. Dr. Ing. CRISTEA CASTELIA</b>						
2.3 Titularul activităților de seminar	Conf. Dr. Ing. CRISTEA CASTELIA						
2.4 Anul de studiu	<b>II</b>	2.5 Semestrul	<b>III</b>	2.6. Tipul de evaluare	<b>E</b>	2.7 Regimul disciplinei	DF/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	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar	28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					21
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					28
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat					3
Examinări					3
Alte activități: .....					
3.7 Total ore studiu individual		69			
3.8 Total ore pe semestru		125			
3.9 Numărul de credite		<b>5</b>			

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

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> <li>Chimie organică</li> <li>Stereochimia compusilor organici</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>Studentii primesc suportul de curs</li> <li>Se stimulează participarea interactivă</li> <li>Nu este permisă înregistrarea cursului <i>on-line</i></li> </ul>
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Nu este cazul</li> <li>Nu este permisă înregistrarea seminarului <i>on-line</i></li> </ul>

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"><li>Să își însușească concepte teoretice de analiza rațională a căilor de sinteză în mai multe etape a compușilor organici cu complexitate moleculară avansată.</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>
Competențe transversale	<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 română și într-o limbă de circulație internațională, cu utilizarea metodelor moderne de informare și comunicare (căutare în baze de date).</li></ul>

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

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"><li>Să familiarizeze studenții cu principalele abordări în analiza rațională a căilor de sinteză în mai multe etape a compușilor organici cu complexitate moleculară avansată.</li></ul>
7.2 Obiectivele specifice	<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
Definirea termenilor specifici analizei retrosintetice (compus tinta, transformare, retron, disconexie, sintoni).	Prelegere Suport PPT	1 prelegere
Strategii bazate pe transformări și grupări funcționale. Transformări de simplificare structurală bazate pe disconexia scheletului molecular: disconexia catenelor (sintoni pentru formarea catenelor de carbon).	Prelegere Suport PPT	1 prelegere
Transformări de simplificare structurală bazate pe identificarea unui retron de tip rest alifatic difuncționalizat (disconexia derivatilor 1,2-, 1,3-difuncționali).	Prelegere Suport PPT	1 prelegere
Transformări de simplificare structurală bazate pe identificarea unui retron de tip rest alifatic difuncționalizat (disconexia derivatilor 1,4-, 1,5- și 1,6- difuncționali).	Prelegere Suport PPT	1 prelegere

Transformări de simplificare structurală bazate pe identificarea unui retron de tip inel. Disconexia inelelor mici (3, 4 (hetero)atomi)	Prelegere Suport PPT	1 prelegere
Transformări de simplificare structurală bazate pe identificarea unui retron de tip inel mediu. Disconexia inelelor medii (5,6 atomi).	Prelegere Suport PPT	1 prelegere
Transformări fără simplificarea scheletului molecular (transpoziții ale scheletului molecular, transpoziții ale grupărilor funcționale, inversarea configurației stereocentrilor).	Prelegere Suport PPT	1 prelegere
Transformări bazate pe mecanisme de reacție.	Prelegere Suport PPT	1 prelegere
Strategii bazate pe similitudinea structurii compusului tinta cu structuri ale unor materii prime.	Prelegere Suport PPT	1 prelegere
Strategii topologice: pentru sisteme aciclice și sisteme policiclice (inele izolate, spiranice sau cu punte).	Prelegere Suport PPT	1 prelegere
Strategia abordărilor stereochemice și a modificării grupărilor funcționale	Prelegere Suport PPT	1 prelegere
Analiza retrosintetică multistrategică a unor structuri macrociclice.	Prelegere Suport PPT	1 prelegere
Analiza retrosintetică multistrategică a unor structuri heterociclice	Prelegere Suport PPT	1 prelegere
Analiza retrosintetică multistrategică a unor structuri policiclice.	Prelegere Suport PPT	1 prelegere

#### Bibliografie

##### Obligatorie:

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

##### Optională:

2. P. Laszlo, «Logique de la synthese organique», Ed. Marketing, Paris, 1993
3. M. B. Smith, "Organic Synthesis", Ed. McGraw-Hill, 1994
4. R. O. C. Norman, "Principles of organic Synthesis", Ed. Chapman and Hall, 1981

8.2 Seminar	Metode de predare	Observații
Transformări simplificatoare, disconexii, sintoni și echivalenții lor chimici.	Rezolvare de probleme	1 seminar (2ore)
Interconversii ale grupărilor funcționale din structura compusilor organici.	Rezolvare de probleme	1 seminar (2ore)
Analiza retrosintetică și strategii bazate pe transformări pentru retron 1,2-difuncțional (1,2-dioli, $\alpha$ -hidroxi-carbonil, $\alpha$ -dicetone, $\alpha$ -oxoacizi)	Rezolvare de probleme	1 seminar (2ore)
Analiza retrosintetică și strategii bazate pe transformări pentru retron 1,3-difuncțional ( $\beta$ -hidroxi-carbonil, $\beta$ -dicetone, $\beta$ -oxoacizi)	Rezolvare de probleme	1 seminar (2ore)
Analiza retrosintetică și strategii bazate pe transformări pentru retron 1,4-difuncțional (hidroxi-carbonil, hidroxi-acizi, acizi nesaturați).	Rezolvare de probleme	1 seminar (2ore)
Analiza retrosintetică și strategii bazate pe transformări pentru retron 1,5-difuncționali (hidroxi-carbonil, hidroxi-acizi, acizi nesaturați).	Rezolvare de probleme	1 seminar (2ore)
Analiza retrosintetică și strategii bazate pe transformări	Rezolvare de	1 seminar (2ore)

pentru retron 1,6-difuncțional (hidroxi-carbonil, hidroxi-acizi, acizi nesaturați).	probleme	
Analiza retrosintetică și strategii bazate pe transformări pentru compuși monociclici. (retron: ciclopropan)	Rezolvare de probleme	1 seminar (2ore)
Analiza retrosintetică și strategii bazate pe transformări pentru compuși monociclici (retron: ciclobutan)	Rezolvare de probleme	1 seminar (2ore)
Analiza retrosintetică și strategii bazate pe transformări pentru compuși monociclici (retron: ciclopentan)	Rezolvare de probleme	1 seminar (2ore)
Analiza retrosintetică și strategii bazate pe transformări pentru compuși monociclici (retron: ciclohexan)	Rezolvare de probleme	1 seminar (2ore)
Analiza retrosintetică și strategii bazate pe transformări pentru compuși monociclici policiclici (cu inele izolate și spiranice)	Rezolvare de probleme	1 seminar (2ore)
Analiza retrosintetică și strategia sintezei compușilor policiclici (cu inele condensate)	Rezolvare de probleme	1 seminar (2ore)
Analiza retrosintetică multistrategică	Rezolvare de probleme	1 seminar (2ore)
<b>Bibliografie</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. I. Schiketanz, I. Costea, “<i>Retrosinteza Organica</i>”, Ed. Printech, 2006.</li> <li>2. M. E. Alonso “<i>The art of Problem solving in organic chemistry</i>” John Wiley &amp; Sons, 1987.</li> <li>3. C. Cristea, I. Hopârtean, I. A. Silberg, “<i>Chimia organică a produșilor naturali</i>”, Ed. Risoprint 2002</li> </ol>		

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

<ul style="list-style-type: none"> <li>• Conținutul acestei discipline este aferent produșilor de sinteză cu structuri complexe, (analogi ai produșilor naturali, medicamente, coloranți, aromatizanti, 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)</li> </ul>
--

## 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 retrosintetice în planificarea sintezei compușilor organici.	Examen oral -Referat scris în care se descrie <i>in extenso</i> analiza retrosintetică a unui compus organic țintă cu structura complexă și planificarea etapelor de sinteză chimică. -Prezentare orală cu suport PPT a elementelor cheie din analiza retrosintetică a compusului organic cu structura complexă și planificarea etapelor de sinteză. -Raspunsuri la întrebări formulate de examinator	50%   20%  20%

10.5 Seminar	Înțelegerea și însușirea problematicei tratate la curs si seminar	Participare activa la rezolvare probleme Rezolvare teme pe parcurs	10%
	Capacitatea de utilizare adecvată a conceptelor si metodelor teoretice.		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"><li>• Reducerea sistematică a complexității moleculare a unui compus organic cu structura ciclica, catene laterale si grupari functionale.</li></ul>			

Data completării

Semnătura titularului de curs

Semnătura titularului de seminar

10.04.2021




Data avizării în departament

26.04.2021

Semnătura directorului de departament

Acad. Cristian Silvestru

