

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Chimie și Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Inginerie chimică
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimia și ingineria nano- și biomaterialelor

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Nanomateriale și nanostructuri de carbon (Cod disciplină: CMM8213)						
2.2 Titularul activităților de curs	Lect. dr. NAGY Levente Csaba						
2.3 Titularul activităților de seminar	Lect. dr. NAGY Levente Csaba						
2.4 Anul de studiu	II	2.5 Semestrul	4	2.6. Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	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					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					20
Tutoriat					6
Examinări					3
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"> 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"> Sală cu proiector multimedia, ecran de proiecție, acces la internet. Studentii se prezintă la curs cu telefoanele mobile pe modul silențios.
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> Proiector multimedia, ecran de proiecție, acces la internet. Laborator dotat cu tehnică de calcul și software specific. Studentii lucrează fiecare pe câte o stație de lucru. Studentii se vor prezenta la laborator cu telefoanele mobile pe modul silențios. Nu se permite întârzierea.

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază din domeniul nanomaterialelor de carbon și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională. Utilizarea cunoștințelor aprofundate din domeniul chimiei pentru explicarea și interpretarea unor variate tipuri de concepte referitoare la nanomateriale de carbon. Utilizarea conceptelor fundamentale și aplicative în dezvoltarea de proiecte de cercetare.
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> Executarea sarcinilor solicitate conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit și cu îndrumare calificată. Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru și distribuirea de sarcini pentru nivelurile subordonate. Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba maternă, limba română și într-o limbă de circulație internațională, cu utilizarea metodelor moderne de informare și comunicare

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> Să familiarizeze studenții cu concepte, teorii și modele fundamentale, respectiv noțiuni avansate, privind structura, sinteza, funcționalizarea, și aplicabilitatea nanomaterialelor și nanostructurilor de carbon.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Dobândirea cunoștințelor teoretice privind aromaticitatea nanostructurilor de carbon. Dobândirea cunoștințelor teoretice privind utilizarea chimiei cuantice în modelarea structurii și proprietăților nanostructurilor de carbon. Dobândirea cunoștințelor privind metode de obținere, reactivitatea și funcționalizarea nanostructurilor de carbon.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1 Prezentarea disciplinei, cunoștințelor și abilităților dobândite, cerințelor pentru promovare. Noțiuni recapitulative legate de carbon: formele alotropice, tipuri de hibridizare. Nanomateriale și nanostructuri.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore
8.1.2 Fullerene: descoperire, structură, izomeri, simetrie, reguli empirice de stabilitate. Formula Euler.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore
8.1.3 Fullerene: metode de obținere, reactivitatea fullerenelor, proprietăți. Heterofullerene: structură, proprietăți.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore
8.1.4 Fullerene endohedrale și metalofullerene: metode de obținere, structură, proprietăți.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore

8.1.5 Fullerene funcționalizate exohedral: metode de obținere, structură, proprietăți. Regioizomeria adității multiple.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore
8.1.6 Aromaticitatea nanostructurilor de carbon. Aromaticitatea sferică. Teoria Huckel simplu.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore
8.1.7 Nanotuburi de carbon: structură, metode de obținere, reactivitate, proprietăți. Vectorul de chiralitate și de translație.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore
8.1.8 Joncțiuni multiterminale de nanotuburi de carbon. Joncțiuni de tip Y. Joncțiuni cu simetrie înaltă: tetraedrale, octaedrale.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore
8.1.9 Fullerene și nanotuburi de carbon multistrat. Nanotuburi de carbon dublu strat. Polimeri de fullerenă. Coalescența fullerenelor.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore
8.1.10 Nanostructuri cu defecte structurale. Nanotuburi ondulate și spiralate. Structuri toroidale. Izomeria Stone-Wales.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore
8.1.11 Chimia supramoleculară a fullerenelor și nanotuburilor de carbon. Interacțiuni intermoleculare.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore
8.1.12 Aplicațiile fullerenelor și nanotuburilor de carbon: biomedicale, materiale compozite, microelectronică.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore
8.1.13 Aplicații ale topologiei moleculare în studiul nanostructurilor de carbon.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore
8.1.14 Modelarea moleculară a nanostructurilor de carbon.	Prelegerea; Explicația; Conversația.	2 ore
Bibliografie 1. Nagy, L.C. <i>Suport de curs în format electronic</i> . 2022. 2. Sattler, K.D. <i>Carbon nanomaterials sourcebook. Volume I: graphene, fullerenes, nanotubes, and nanodiamonds</i> . CRC Press, 2016. 3. De La Puente, F.L.; Nierengarten, J.-F. <i>Fullerenes: principles and applications</i> , 2nd ed. RSC, 2011. 4. Martín, N.; Nierengarten, J.-F. <i>Supramolecular chemistry of fullerenes and carbon nanotubes</i> . Wiley-VCH, 2012. 5. Guldi, D.M.; Martin, N. <i>Carbon nanotubes and related structures: synthesis, characterization, functionalization, and applications</i> . Wiley, 2010-VCH. 6. Jorio, A.; Dresselhaus, G.; Dresselhaus M.S. <i>Carbon nanotubes</i> . Springer, 2008. 7. Diudea, M.V.; Nagy, L.C. <i>Periodic nanostructures</i> . Springer, 2007. 8. Diudea, M.V.; Nagy, L.C. <i>Diamond and related nanostructures</i> . Springer, 2013.		

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1 Modele de fullerene. Proiecția Schlegel a fullerenelor. Simetria fullerenelor. Teorema poliedrală Euler.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.2 Modele de fullerene. Metoda Coxeter. Fullerene IPR și non-IPR. Izomeria Stone-Wales. Fullerene tip <i>leapfrog</i> .	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore

8.2.3 Studiu de caz. Structura și energia izomerilor fullerenei C ₄₀ . Modelarea cu ajutorul mecanicii moleculare și metodei semiempirice.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.4 Fragmente structurale în fullere. Evaluarea stabilității prin corelații liniare.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.5 Coalescența fullerene. Dimerii fullerenei C ₆₀ .	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.6 Structura nanotuburilor de carbon. Vectorul de chiralitate și translație. Celula elementară a nanotuburilor.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.7 Metoda Huckel simplu și extinsă. Evaluarea aromaticității.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.8 Joncțiuni de nanotuburi de carbon. Nanostructuri complexe de tip diamant, primitiv și dodecaedral.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.9 Nanostructuri de carbon multistrat.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.10 Heterofullerene cu N, P și Si.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.11 Fullerene funcționalizate exohedral. Regioizomeria adiției multiple.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.12 Structura nanomaterialelor toroidale. Defecte structurale.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.13 Studiu de caz. Asamblări supramoleculare fullere C ₆₀ și porfirina.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.14 Fullerene endohedrale. Transfer de sarcină. Studiu de caz: Sc ₃ N@C ₈₀ .	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore

Bibliografie

1. Sattler, K.D. *Carbon nanomaterials sourcebook. Volume I: graphene, fullerenes, nanotubes, and nanodiamonds*. CRC Press, 2016.
2. De La Puente, F.L.; Nierengarten, J.-F. *Fullerenes: principles and applications*, 2nd ed. RSC, 2011.
3. Martín, N.; Nierengarten, J.-F. *Supramolecular chemistry of fullerenes and carbon nanotubes*. Wiley-VCH, 2012.
4. Guldi, D.M.; Martin, N. *Carbon nanotubes and related structures: synthesis, characterization, functionalization, and applications*. Wiley, 2010-VCH.
5. Jorio, A.; Dresselhaus, G.; Dresselhaus M.S. *Carbon nanotubes*. Springer, 2008.

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

- Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina **Nanomateriale și nanostructuri de carbon**, studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele din Suplimentul la diplomă și calificările 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 problematicii tratate la curs	Examen oral.	70%
	Rezolvarea corectă a problemelor		
10.5 Seminar/ laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicii tratate la seminar/laborator	Prezentarea problemelor date ca temă de casă. Activitatea desfășurată la seminar.	30%
	Calitatea referatelor pregătite. Activitatea desfășurată în laborator		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none">• Nota 5 (cinci) la examen, conform baremului• Cunoașterea noțiunilor introductive; caracterizarea structurală a fullerenelor și nanotuburilor de carbon.			

Data completării

5 aprilie 2024

Semnătura titularului de curs

Lect. dr. NAGY Levente Csaba



Semnătura titularului de seminar

Lect. dr. NAGY Levente Csaba



Data avizării în departament

15 aprilie 2024

Semnătura directorului de departament

Prof. Habil. dr. ing. PAIZS Csaba

