

**FIȘA DISCIPLINEI**  
**Ciclul III, DOCTORAT**

|   |  |  |                          |                       |                          |
|---|--|--|--------------------------|-----------------------|--------------------------|
| Domeniul studii de doctorat                         |  | <b>14. Științe chimice</b>   |                          |                       |                          |
| Programul de doctorat/ specialitatea                |  | <b>141.02. Chimie coordinativă</b>   |                          |                       |                          |
| Codul și Denumirea disciplinei                      |  | <b>S.02.O.5 Conceptul de chimie supramoleculară în structurile cristaline ca o punte între chimia organică, anorganică și organometalică</b> |                          |                       |                          |
| Titularul disciplinei                               |  | <b>FONARI Marina, cerc. șt. coord., dr. în științe chimice</b>   |                          |                       |                          |
| <b>Numărul de ore</b>                               |  |  |                          |                       |                          |
| <b>Total</b>  | <b>Prelegeri</b>   | <b>Seminare</b>  | <b>Lucrul individual</b> | <b>Nr. de credite</b> | <b>Forma de evaluare</b> |
| <b>180</b>  | <b>4</b>   | <b>6</b>   | <b>170</b>               | <b>6</b>              | <b>Examen</b>            |
| <b>Fundamentare</b>                                 | Autoasamblarea supramoleculară, care creează structuri ordonate ca urmare a organizării spontane a elementelor structurale sub influența interacțiunilor necovalente (NCI), este de natură universală. Cursul își propune să obțină cunoștințe generale și speciale despre ierarhia și interacțiunea diferitelor tipuri de interacțiuni intra- și intermoleculare în compușii de coordinativi, ca sursă pentru obținerea de materiale funcționale cu proprietăți specifice.  |  |                          |                       |                          |
| <b>Conținutul disciplinei</b>                       | <ol style="list-style-type: none"> <li>Asamblare supramoleculară; ierarhia interacțiunilor necovalente (INC), natura dinamică a legăturilor de coordonare și a INC pentru ansambluri cu funcții care răspund la stimuli. Energetica legăturilor de coordonare și a interacțiunilor necovalente, interacțiuni hidrofobe și hidrofile, forțe van der Waals, legături de hidrogen, interacțiuni CH-π și π-π, interacțiuni gazdă-oaspete, interacțiuni halogen-π.</li> <li>Compuși coordinativi. Definiția compușilor coordinativi, clasificarea liganzilor, posibili izomeri întâlniți cu tipurile de liganzi descrise. Compuși coordinativi în întregul tabel periodic al elementelor, diversitatea modurilor de coordonare pentru ionii metalelor alcaline și alcalino-pământoase, elementele grupului principal, metalele de tranziție și pământurile rare. Teoriile coordonării și legăturilor, proprietățile chimice și fizice ale compușilor coordinativi, adică stabilitatea, selectivitatea sterică, reactivitatea care cuprinde oxidarea și reducerea, fotochimia și magnetismul.</li> <li>Aplicații ale compușilor coordinativi. Rolul acestor compuși în procesele industriale, precum și potențialele aplicații în cercetare. Dimensiunile compușilor coordinativi. Ingineria cristalelor și predicția structurii cristaline. Arhitecturi 0D (discrete). Polimeri coordinativi. Polimeri coordinativi 1D. Abordarea nod-și-spacer. Abordarea de jos în sus. Stoichiometria metal-ligand. Polimeri coordinativi 2D. Grile pătrate. Alte arhitecturi 2D. Polimeri coordinativi 3D. Rețele diamantate. Alte rețele 3D. Structuri hibride. Rețele cu legături de hidrogen. Izomerie și polimorfism supramolecular. Tipuri de izomerie supramoleculară. Aplicații potențiale.</li> <li>Ingineria cristalină a materialelor funcționale bazată pe rețele de coordonare metal-organice. Cadre metal-organice (Metal-organic frameworks MOF) – noi materiale de adsorbție. Sorbția hidrogenului și a altor gaze. Purtători de carbon cu porozitate ridicată. Zeoliți. Structura MOF-urilor. Terminologie. Aplicarea MOF-urilor ca sorbenți. Suprafață specifică. Forma și dimensiunea porilor. Problema interpenetrării. Natura ligandul organic. Flexibilitatea ligandul organic. Nesaturație coordinativă (centre deschise la ionul metalic). Cadre organice covalente..</li> </ol> |  |                          |                       |                          |
| <b>Competențele obținute/ Rezultatele învățării</b> | <p><b>CP1.</b> Cunoașterea conceptelor teoretice, a metodelor de sinteză moderne și a tehnicilor de preparare a compușilor coordinativi.</p> <p><b>CP2.</b> Utilizarea conceptelor de inginerie cristalelor, resursa bazei de date structurale Cambridge și literatura științifică pentru fabricarea dirijată de materiale noi cu proprietățile așteptate. Dezvoltarea capacității de a aplica cunoștințele și abilitățile dobândite pentru rezolvarea unor probleme concrete.</p> <p><b>CP3.</b> Asimilarea metodelor de studiu a proprietăților materialelor cu aplicații în domeniul senzori.</p> <p><b>CP4.</b> Studiul proprietăților fizico-chimice ale compușilor supramoleculari și polimeri coordinativi pe bază de liganzi amino.</p>  |  |                          |                       |                          |
| <b>Bibliografia selectivă/ minimală</b>             | <ol style="list-style-type: none"> <li>G. R. Desiraju, The supramolecular concept as a bridge between organic, inorganic and organometallic crystal chemistry J. Mol. Str, 1996, 374, 191-198, <a href="https://doi.org/10.1016/0022-2860(95)08932-2">https://doi.org/10.1016/0022-2860(95)08932-2</a></li> <li>S. Kitagawa, K. Uemura, Dynamic porous properties of coordination polymers inspired by hydrogen bonds, Tutorial Review, <i>Chem. Soc. Rev.</i>, <b>2005</b>,34, 109-119 <a href="https://doi.org/10.1039/B313997M">https://doi.org/10.1039/B313997M</a></li> <li>V. A. Russell, C. C. Evans, W. Li, M. D. Ward, Nanoporous Molecular Sandwiches: Pillared Two-Dimensional Hydrogen-Bonded Networks with Adjustable Porosity, <i>Science</i>, 1997, 276, 575-579, <a href="https://doi.org/10.1126/science.276.5312.575">https://doi.org/10.1126/science.276.5312.575</a></li> <li>L.-J. Chen, H.-B. Yang, Construction of Stimuli-Responsive Functional Materials via Hierarchical Self-Assembly Involving Coordination Interactions, <i>Acc. Chem. Res.</i> 2018, 51, 2699–2710 <a href="https://doi.org/10.1021/acs.accounts.8b00317">https://doi.org/10.1021/acs.accounts.8b00317</a></li> <li>L.T.Glasby, J. L.Cordiner, J.C.Cole, P.Z.Moghadam, Topological Characterization of Metal–OrganicFrameworks:A Perspective, <i>Chem.Mater.</i> 2024, 36, 9013–9030 <a href="https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.4c00762">https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.4c00762</a></li> </ol>  |  |                          |                       |                          |