

**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.6 Cristalografia chimică - un instrument puternic pentru identificarea, caracterizarea și interpretarea solidelor cristaline. Avantaje și limite.</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>	Cristalografia chimică, în special difracția cu raze X pe monocristal, ca un instrument puternic pentru determinarea aranjamentului precis al atomilor dintr-un solid cristalin. Identificarea, caracterizarea și înțelegerea proprietăților materialelor, oferind informații detaliate despre geometria moleculară, lungimile legăturilor și structura generală. Informațiile structurale obținute din cristalografie ajută la înțelegerea și prezicerea proprietăților fizice și chimice ale materialelor, cum ar fi punctul de topire, solubilitatea și reactivitatea. Cristalografia este o tehnică fundamentală în domeniul precum știința materialelor, chimia stării solide și cercetarea farmaceutică și poate fi utilizată pentru a analiza atât biomolecule mari (proteine, acizi nucleici), cât și molecule organice mici.				
<b>Conținutul disciplinei</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Stări de agregare ale materiei. Stare solidă. Substanță cristalină. Caracteristicile și proprietățile principale ale cristalului. Substanță cristalină și principalele caracteristici care o disting de corpurile amorfă. Factori care influențează nucleația cristalelor și morfologia cristalelor. Fundamentele teoriei creșterii cristalelor. Teoria molecular-cinetică a creșterii cristalelor. Gemeni. Diferite metodele de creștere a cristalelor clasificate în cele care utilizează vapori, topitură și soluție ca material sursă, diverse tehnici, care unele includ transportul fizic al vaporilor (PVT), transportul chimic al vaporilor (CVT) și metode bazate pe topitură, cum ar fi Czochralski și Bridgman. Creșterea în soluție împărțită în creștere la temperatură joasă, temperatură înaltă (flux), hidrotermală și în gel.</li> <li>2. Legile cristalografiei. Legea convexității. Legea Euler- Descartes. Legea constantei unghiurilor diedre. Legea raționalității indicilor. Clase de simetrie (grupuri punctuale). Deducerea claselor de simetrie. Sistemele cristalografice. Sisteme regulate de puncte. Noțiuni de grupuri spațiale.</li> <li>3. Conceptul de rețea cristalină. Derivarea a 14 tipuri de rețele Bravais. Conceptul de elemente de simetrie ale structurilor cristaline - elemente de simetrie translatională - plane de reflexie glisantă și axe șurub, interacțiunile acestora. 230 de grupuri de simetrie spațială. Indicii Miller, Elementele de simetrie simple și compuse. Centrul de simetrie. Planele de simetrie. Axe de simetrie. Transformările simetrice.</li> <li>4. Fundamentele și aplicațiile metodelor spectrale (IR, UV-vis, spectroscopia de masă, etc.).</li> <li>5. Metode structurale: difracția razelor X pe monocristal și pulbere; descifrarea structurii substanțelor cristaline utilizând software cristalografic moderne.</li> </ol>				
<b>Competențele obținute/ Rezultatele învățării</b>	<p><b>CP1.</b> Obținerea de experiență în creșterea cristalelor, având ca scop obținerea de monocristale adecvate ca dimensiuni și calitate pentru investigarea cu raze X a monocristalelor.</p> <p><b>CP2.</b> Stăpânirea tehnicilor de lucru cu difractometre cu monocristal și pulbere, efectuarea independentă a operațiilor de bază.</p> <p><b>CP3.</b> Investigarea omogenității fazei prin studiul cu raze X al pulberilor cu ajutorul difractometrului MiniFlex 600.</p> <p><b>CP4.</b> Obținerea experiența în studiul cu raze X a materialelor obținute în fază monocristalină, utilizând difractometru cu raze X Xcalibur E pentru monocristale.</p> <p><b>CP3.</b> Prelucrarea și interpretarea corectă a rezultatelor obținute pentru determinarea compoziției și structurii compusului studiat. Experiență în identificarea și caracterizarea de noi materiale prin metode spectroscopice (spectroscopie IR și UV-Vis).</p> <p><b>CP6.</b> Interpretarea structurilor cristaline ale noilor compuși ținând cont de ierarhia diferitelor tipuri de interacțiuni</p> <p><b>CP7.</b> Modelarea corelației structură-proprietate (adsorbție, luminescență) pe baza analizei structurii cristaline a obiectelor obținute</p>				
<b>Bibliografia selectivă/ minimală</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Int. Tables of Crystallography, Vols A-I, ISBN: 978-0-470-68575-4 <a href="https://doi.org/10.1107/9780955360206000001">https://doi.org/10.1107/9780955360206000001</a></li> <li>2. K Seevakan, S Bharanidharan, Different types of crystal growth methods. Int. J. Pure Appl. Math, 2 2018, 119(12) 5743-5758</li> <li>3. J. J. De Yoreo, P.G. Vekilov, Principles of Nucleation and Growth, Reviews in Mineralogy and Geochemistry, 2003, 54,(1), 57-93. <a href="https://doi.org/10.2113/0540057">https://doi.org/10.2113/0540057</a></li> <li>4. Nespolo, M. Introduction to Crystallography. Bv Franc Hoffmann. Springer, 2020. Hardback, <a href="https://doi.org/10.1107/S2053273321002795">https://doi.org/10.1107/S2053273321002795</a>. ISBN 9783030351090. 309 p</li> <li>5. <b>HAMMOND, Ch. The Basics of Crystallography and Diffraction. Fourth Edition. 2015.</b> ISBN: 9780198738688. Publisher: Oxford University Press. 544 p</li> <li>6. Sheldrick, M. A. Short History of SHELX. Acta Crystallogr. A <b>2008</b>, 64, 112. DOI: 10.1107/S0108767307043930.</li> <li>7. O. V. Dolomanov, A. J. Blake, N. R. Champness and M. Schröder, OLEX: new software for visualization and analysis of extended crystal structures J. Appl. Cryst. (2003). <a href="https://doi.org/10.1107/S0021889803015267">36</a>, 1283-1284 <a href="https://doi.org/10.1107/S0021889803015267">https://doi.org/10.1107/S0021889803015267</a></li> </ol>				