

**CURSURI DE SPECIALITATE PENTRU PREGĂTIREA BAZATĂ PE STUDII
UNIVERSITARE DE DOCTORAT, ORGANIZATE ÎN
INSTITUTUL DE CHIMIE FIZICĂ „ILIE MURGULESCU”**

A. CURSURI GENERALE

1. Chimia fizică a materialelor nanostructurate și aplicații ale acestora

1. Mecanismul și cinetica proceselor de sinteză a materialelor nanostructurate
2. Echilibre de fază în sistemele de sinteză a nanomaterialelor cu structură controlată
3. Procese de interfață nanoparticule oxidice-soluție și modelarea acestora
4. Mecanisme ale formării speciilor ionice hidratate și echilibrul soluție-solid în procese de sinteză a nanomaterialelor
5. Termodinamica sistemelor oxidice micro și nanostructurate
6. Particularități în aplicarea conceptelor de bază ale termodinamicii în sisteme micro și nanostructurate
7. Simularea la scală atomică în știința materialelor și aplicațiile acestora
8. Efecte ale structurii poroase și gradului de ordonare a nanomaterialelor asupra unor proprietăți (catalitice, electrochimice, fotochimice, senzitive, etc.)
9. Modelarea procesor catalitice realizate cu structuri nanostructurate. Corelații structură-reactivitate-cinetică
10. Corelarea proprietăților fizico-chimice ale materialelor obținute la scară nano sau micrometrică
11. Aspecte fizico-chimice ale unor sinteze verzi
12. Proprietăți fizico-chimice ale surfactanților în soluție

2. Metode de caracterizare a materialelor

1. Spectroscopie de electroni pentru analize chimice ESCA (XPS)
2. Difracție de raze X
3. Spectroscopie IR, UV-Vis și RMN
4. Spectroscopie moleculară de fluorescență
5. Spectroscopie Raman
6. Microscopie electronică TEM și SEM
7. Microscopia forței atomice
8. Metoda rezonanței electrice de spin
9. Metode de determinare a proprietăților magnetice
10. Metode de analiză termică

3. Metode de calcul și modelare în sisteme cu spin

1. Teoria funcționalului densității (DFT): elemente introductive și principii
2. Funcții atomice radiale și seturi de bază
3. Tipuri de orbitali
4. Teoria legăturii de valență
5. Orbitali extinși; Efectul Jahn Teller

4. Sisteme supramoleculare “gazda-oaspete”

1. Interactii necovalente
2. Tipuri de sisteme supramoleculare
3. Molecule gazda naturale
4. Molecule gazda de sinteza
5. Caracterizarea sistemelor supramoleculare “gazda-oaspete”

5. Principii si aplicatii ale spectroscopiei RES

1. Introducere in spectroscopia rES in bada continua, parametrii spectrali RES
2. Spectrele RES izotrope ale radicalilor organici (monoradicali, biradicali)
3. Anizotropia spectrelor RES in stare solida
4. Obținerea parametrilor RES; programe de simulare
5. Metoda captarii radicalilor reactivi
6. Metoda sondelor de spin
7. Metoda marcarii cu spin

6. Caracterizarea hidrogelurilor polimerice

1. Definitie si clasificare geluri polimerice
2. Metode de preparare
3. Caracterizare reologica
4. Metode spectroscopice utilizate pentru caracterizarea hidrogelurilor polimerice

7. Etică și integritate academică

1. Reguli generale de realizare a cercetarii
2. Norme generale de redactare a unei lucrari stiintifice
3. Pregatirea unei prezentari orale
4. Pregatirea unui poster

B. CURSURI OPȚIONALE

1. Chimia proceselor sol-gel

1. Considerații generale privind procesul sol-gel. Definiții, istoric, comparație cu alte metode chimice în soluție
2. Chimia proceselor sol-gel, ruta polimerică
3. Precursori utilizați în metoda sol-gel. Prepararea și proprietățile chimice ale alcoxizilor
4. Etapele procesului sol gel, ruta alcoxidică

5. Particularități ale procesului sol-gel în cazul sistemelor conținând metale tranziționale. Probleme specifice proceselor sol-gel în sistemele bicomponente
6. Transformarea gelurilor în nanomateriale vitroase sau cristalizate
7. Chimia proceselor sol-gel, în mediu apos
8. Aplicații ale proceselor sol-gel

2. Structuri compozite induse în procesul de sinteză a solidelor și activitatea lor catalitică

1. Metode de sinteză a solidelor compozite

- 1.1 Procese de condensare și precipitare în faza lichidă.
- 1.2 Cinetica formării solidului și modelarea condensării cationilor în soluție apoasă
- 1.3 Poli- cationi și anioni în faza solidă- condensarea prin olatie
- 1.4 Procese de interfață oxid soluție- modelarea interfeței oxid –soluție
- 1.5 Controlul agregării particulelor, morfologiei și dispersiei acestora
- 1.6 Intercalarea polimerilor organici printre staturile de material anorganic
- 1.7 Procese hidrotermale
- 1.8 Structuri oxidice polimetalice
- 1.9 Structuri ierarhizate

2. Procese de funcționalizare a suprafeței solidelor

- 2.1 Funcționalizarea solidelor structurate prin complexarea și condensarea cationilor metalici
- 2.2 Funcționalizarea materialelor oxidice cu molecule organice
- 2.3 Imobilizarea și incorporarea complexilor organometalici și biopolimerilor

3. Proprietăți care determină proprietățile catalitice și aplicații ale materialelor compozite

- 3.1 Proprietăți redox și acido-bazice ale solidelor compozite
- 3.2 Proprietăți electrochimice care determină aplicațiile solidelor compozite în celulele de combustie
- 3.3 Proprietăți fotochimice și aplicațiile materialelor în procesele de depoluare
- 3.4 Proprietăți catalitice cu aplicații în procese de oxidare realizate în faza gazoasă sau lichidă

3. Proprietăți fizico-chimice ale soluțiilor de polimeri

1. Noțiuni generale despre polimeri
2. Polimeri în soluție

3. Polimeri superficial activi
4. Reologia soluțiilor de polimeri
5. Sisteme polimer-surfactant

4. Principii si aplicatii ale metodelor spectroscopice de fluorescenta, RES si dicroism circular

1. Principiile tehnicilor de fluorescență statică și rezolvată temporal
2. Caracteristicile emisiei de fluorescență și efectul proceselor fotofizice intermoleculare
3. Metoda sondei fluorescente pentru estimarea micropolarității, microvâscozității și a mobilității moleculare
4. Fluorescența în sisteme polimerice și nanostructurate
5. Monitorizarea microseparării de fază și a microstructurii macromoleculor marcate cu piren
6. Principii ale spectroscopiei RES in banda X
7. Spectrele RES isotrope ale radicalilor organici
8. Anizotropia spectrelor RES in stare solida
9. Metoda captarii radicalilor reactivi
10. Principii ale spectroscopiei de dicroism circular

5. Elipsometrie

1. Modelarea spectrelor elipsometrice cu modelul “General Oscillator”: condiții specifice de aplicabilitate a fiecărui oscilator
2. Determinarea proprietăților electrice (conductivitate, mobilitate, concentrație de purtători) din măsurători elipsometrice
3. Compararea informațiilor obținute din FTIR cu cele obținute din măsurători elipsometrice în domeniul infraroșu (IRSE)
4. Determinarea porozității și densității filmelor cu ajutorul elipsometriei

6. Obținerea de nanomateriale prin metode ale “chimiei blande”

1. Directii noi de sinteza dirijata a nanomaterialelor. Clasificare. Analiza comparativa:avantaje si dezavantaje
2. Sinteza materialelor prin metoda complexarii din precursori - combinatii complexe mono si polinucleare. Selectarea precursorilor.
3. Sinteza si caracterizarea precursorilor - compusi coordinativi.
4. Combinatii complexe: termoreactivitatea in faza solida.
5. Combinatii complexe: reactii in faza solida.
6. Sisteme oxidice cu aplicatii biomedicale. – 2 ore
7. Precursori - combinatii complexe in sinteza sulfurilor, metalelor si materiale compozite.
8. Corelatii intre proprietatile combinatiilor complexe, termoreactivitate si proprietatile materialelor oxidice.

7. Aplicații ale spectroscopiei RES în domeniul sistemelor biologice

1. Metoda sondelor de spin a spectroscopiei RES

- 1.1. Tipuri de sonde de spin
- 1.2. Dinamica sondelor de spin
- 1.3. Aplicații ale metodei sondelor de spin în studiul macromoleculor
- 1.4. Aplicații ale metodei sondelor de spin în studiul sistemelor supramoleculare

2. Metoda marcării cu spin a spectroscopiei RES

- 2.1 Radicali utilizați pentru marcarea sistemelor diamagnetice
- 2.2 Dinamica grupării paramagnetice atașate covalent unei macromoleculor
- 2.3 Aplicații ale metodei marcării cu spin în studiul sistemelor biologice
- 2.4 Aplicații ale metodei marcării cu spin în studiul polimerilor
- 2.5 Aplicații ale metodei marcării cu spin în studiul gelurilor
- 2.6 Analiza spectrelor RES pentru compuși marcați cu spin

8. Sisteme cuplate de spin în chimia coordinativă

1. Magnetism – generalități
2. Susceptibilitate magnetică
3. Ecuația Van Vleck; Legea Curie
4. Proprietăți magnetice ale compușilor coordinativi
5. Estimarea parametrului de cuplaj în compuși coordinativi

9. Proprietăți fizico-chimice ale polizaharidelor

1. Clasificarea polizaharidelor
2. Proprietăți și funcții ale polizaharidelor
3. Caracterizarea fizico-chimică a soluțiilor și gelurilor polizaharidelor

10. Simulare și modelare computațională a nanomaterialelor

1. Simulări de dinamică la scară atomică pentru proteine și biopolimeri
2. Utilizarea programelor și pachetelor de simulare computațională pentru modelarea structurală a sistemelor cu relevanță biologică.
3. Metode de dezvoltare a modelelor reduse la scară pentru biomateriale.