

## 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	Inginerie Chimică
1.4 Domeniul de studii	Inginerie Chimică
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Ingineria și Informatica Proceselor Chimice și Biochimice / Inginer

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	<b>Metode numerice de calcul cu aplicații în chimie fizică – CLX2383</b>				
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. dr. ing. Alexandra Csavdári Lect. dr. ing. Adrian Nicoară				
2.3 Titularul activităților de seminar/laborator	Conf. dr. ing. Alexandra Csavdári Lect. dr. ing. Adrian Nicoară				
2.4 Anul de studiu	IV	2.5 Semestrul	8	2.6. Tipul de evaluare	VP
2.7 Regimul disciplinei					Opț

### 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	0/2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	0/28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					46
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					16
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri: nu este cazul					0
Tutoriat					4
Examinări					3
Alte activități: nu este cazul					0
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"> <li>Cursurile obligatorii de chimie fizica (termodinamica, cinetica chimica si electrochimie)</li> </ul>
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> <li>Cele specifice cursurilor mai sus mentionate</li> </ul>

### 5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> <li>Studentii se vor prezenta la curs cu telefoanele mobile închise</li> <li>Nu va fi acceptată întârzierea</li> </ul>
-------------------------------	---

5.2 De desfășurare a lucrarilor practice	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Studenții se vor prezenta la lucrari practice cu telefoanele mobile închise si cu tehnică de calcul adecvată</li> <li>• Nu va fi acceptată întârzierea</li> </ul>
--	--

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională;</li> <li>• Utilizarea cunoștințelor de bază din domeniul chimiei și ingineriei chimice pentru explicarea și interpretarea fenomenelor ingineresti;</li> <li>• Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor pentru rezolvarea problemelor tipice ingineriei chimice de proces în condiții de asistență calificată;</li> <li>• Analiza critică și utilizarea principiilor, metodelor și tehnicilor de lucru pentru evaluarea cantitativă și calitativă a proceselor din ingineria chimică;</li> <li>• Aplicarea conceptelor și teoriilor fundamentale din domeniul chimiei și ingineriei chimice și de proces pentru elaborarea de proiecte profesionale.</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Executarea sarcinilor solicitate conform cerintelor precizate si în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit;</li> <li>• Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanta cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru;</li> <li>• Informarea și documentarea permanentă în domeniul sau de activitate în limba româna;</li> <li>• Preocuparea pentru perfecționarea rezultatelor activității profesionale prin implicarea în activitățile desfășurate.</li> </ul>

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

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Completarea noțiunilor dobândite în cadrul cursurilor de bază de chimie fizică cu modele complexe/sofisticate de calcul ce se regăsesc în mediile software uzuale în proiectarea, automatizarea, simularea și conducerea instalațiilor chimice industriale.</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Formarea deprinderilor de operare cu modele/expresii matematice complexe (valori numeice si unitati de măsură);</li> <li>• Formarea deprinderilor de calcul în estimarea parametrilor gazelor și a lichidelor pure și în amestecuri (densități, vâscozități, fugacități, coeficienți de activitate, capacități calorice, coeficienți e difuzie, etc) în situatii întâlnite în industria chimică;</li> <li>• Calculul parametrilor mai sus menționați în cadrul mediilor software precum Chemcad, Apsen Plus, Pro/II, Hysys și/sau altele.</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Tipuri de modele și corelații între mărimile fizico-chimice. Modele liniare și neliniare. Tipuri de abordare a determinării unui parametru.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.2. Ecuatii de stare pentru gaze reale. Ecuatia Redlich-Kwong, dezvoltări ulterioare. Ecuatii cu parametrii viriali. Proprietăți critice și pseudocritice:	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	

modele de calcul în funcție de structura moleculară. Factorul acentric. Mărimi critice reale pentru amestecuri gazoase.		
8.1.3. Modele de calcul pentru coeficientul de difuzie pentru gaze și lichide. Difuzia liberă la presiune redusă: ecuația Stiel-Thodos, ecuația Chapman-Enskog, ecuația Wilke-Lee. Modele ce exprimă efectul presiunii. Difuzia în amestecuri binare la diluție infinită: modelul Wilke-Chang, Tyn-Calus, Hayduk-Minhas. Difuzia în amestecuri policomponente.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.4. Modele de calcul pentru densitatea gazelor: componenți puri, amestecuri de gaze reale. Modele de calcul pentru densitatea lichidelor: componenți puri (relația Tyn-Calus, folosind parametri critici). Densitatea lichidelor comprimate. Densitatea amestecurilor lichide.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.5. Modele de estimare a temperaturilor de fierbere și de topire a compușilor organici în funcție de structura moleculară. Modele pentru influența temperaturii asupra presiunii de vapori pentru lichide pure și amestecuri.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.6. Modele de calcul pentru vâscozitate gazelor pure și a amestecurilor: influența temperaturii și a presiunii. Vâscozitatea lichidelor: modele pentru temperaturi scăzute și ridicate.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.7. Modele de calcul pentru căldura specifică. Metoda contribuțiilor de legătură, metoda Rihani-Doraiswamy, metoda Joback. Aplicații la gaze reale. Modele de calcul pentru căldura specifică a amestecurilor de gaze reale. Călduri specifice pentru lichide pure și amestecuri.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.8. Modele de calcul pentru călduri latente: căldura de vaporizare, căldura de solidificare, căldura de sublimare. Modele de calcul pentru entalpia standard de formare a substantelor complexe: corelația cu structura moleculară. Modele de calcul pentru entalpia și entropia de reacție.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.9. Modele pentru calculul factorului de activitate pentru soluții de electroliți și neelectroliți. Modele semi-empirice ce perfecționează modelul Debye-Hueckel. Calculul parametrului adimensional. Modele de calcul pentru conductivitatea electrică a soluțiilor: efectul concentrației și a temperaturii.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.10. Legi de viteză empirice bazate pe date experimentale. Diverse modele cinetice.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
8.1.11. Calculul constantelor de viteză pe baza teoriilor cinetice (teoria ciocnirilor; teoria complexului activat).	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	

8.1.12. Baze de date on- și off-line. Motoare de căutare.	Prelegerea; Explicația Conversația; Descrierea	
Bibliografie 1. P.W. Atkins, „ <i>Tratat de Chimie Fizică</i> ”, Editura Tehnică, București, 1996. 2. M. Geană, A.Veis, P. Ionescu, G. Ivănuș, „ <i>Proprietățile fizice ale fluidelor. Metode de calcul</i> ”, Editura Tehnică, București, 1993. 3. G. Niac, V. Voiculescu, I. Baldea, M. Preda, „ <i>Formule tabele probleme de chimie fizică</i> ”, Editura Dacia, Cluj-Napoca, 1984. 4. Gh. Lupușor, E. Merica, C. Gorea, V. Bucea-Gorduză, „ <i>Ingineria sintezei intermediarilor aromatici</i> ”, Editura Tehnică, București, 1977. 5. J. O’M Bockris, A.K.N. Reddy, „ <i>Modern electrochemistry</i> ”, Vol.1. „ <i>Ionics</i> ”, Kluwer, New York, 2002.		
8.2 Lucrari practice	Metode de predare	Observații
8.2.1. Unitati de măsură. Corelația între unități de măsură. Analiza dimensională a unei expresii matematice.	Calcul; Explicația; Descrierea	
8.2.2. Aplicații de calcul paramentrii de stare.	Calcul; Explicația; Descrierea	
8.2.3. Aplicații de calcul coeficienți de difuzie.	Calcul; Explicația; Descrierea	
8.2.4. Aplicații de calcul densități, vâscozități, temperaturi de fierbere.	Calcul; Explicația; Descrierea	
8.2.5. Aplicații de calcul călduri specifice, călduri latente, entalpie de reacție, entropie de reacție, entalpia liberă de reacție.	Calcul; Explicația; Descrierea	
8.2.6. Calculul factorilor de activitate și aplicații ale acestora.	Calcul; Explicația; Descrierea	
8.2.7. Determinarea ordinelor parțiale și a constantelor individuale de reacție din date experimentale cinetice diverse, folosind modele cinetice complexe.	Calcul; Explicația; Descrierea	
8.2.8. Aplicații în medii software precum Chemcad, Apsen Plus, Pro/II, Hysys și/sau altele.	Calcul; Explicația; Descrierea	
8.2.9. Baze de date și motoare de căutare. Aplicații.	Calcul; Explicația; Descrierea	
Bibliografie 1. M. Geană, A.Veis, P. Ionescu, G. Ivănuș, „ <i>Proprietățile fizice ale fluidelor. Metode de calcul</i> ”, Editura Tehnică, București, 1993. 2. G. Niac, V. Voiculescu, I. Baldea, M. Preda, „ <i>Formule tabele probleme de chimie fizică</i> ”, Editura Dacia, Cluj-Napoca, 1984. 3. E.W. Washburn (Ed.), “ <i>International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology</i> ”, Knovel, New York, 2003.		

## 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 **Metode numerice de calcul cu aplicații în chimie fizică** studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 2 – RNCIS.

## 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 problematicei tratate la curs; Aplicarea corectă a noțiunilor însușite în contexte noi. Rezolvarea corectă a problemelor ca parte integrantă a subiectelor la VP	Verificare pe parcurs sub forma scrisa (2 lucrari) Intenția de fraudă si fraudă se trateaza conform regulamentului ECST al UBB.	100 % (fiecare VP scrisa cu pondere de 50%)
10.5 Lucrari practice	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la clasa; aplicarea corectă a noțiunilor însușite în contexte noi.	Se evalueaza prin probleme propuse spre rezolvare în cadrul subiectelor la VP.	-
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"><li>Nota 5 (cinci) ca medie a celor doua VP - conform baremului de corectare.</li><li>Cunoașterea si utilizarea corectă a diverselor modele de calcul discutate</li></ul>			

Data completării

25 Aprilie 2016

Semnătura titularului de curs

Conf. dr. ing. Alexandra Csavdări



Lect. dr. ing. Adrian Nicoară



Semnătura titularului de seminar

Conf. dr. ing. Alexandra Csavdări



Lect. dr. ing. Adrian Nicoară



Data avizării în departament

25 Aprilie 2016

Semnătura directorului de departament

Conf. dr. ing. Graziella Liana Turdean

