

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

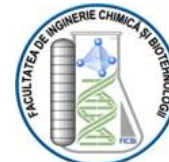
1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Națională de Știință și Tehnologie POLITEHNICA București
1.2 Facultatea	Facultatea de Inginerie Chimică și Biotehnologii
1.3 Departamentul	Departamentul de Chimie Organică "Costin Nenițescu"
1.4 Domeniul de studii	Inginerie Chimică
1.5 Programul de studii universitare	Chimia și ingineria substanțelor organice, petrochimie și carbochimie
1.6 Ciclul de studii universitare	Licență
1.7 Limba de predare	Română
1.8 Locația geografică de desfășurare a studiilor	București, Romania

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei (ro) (en)	Predictia proprietăților fizico-chimice Prediction of physicochemical properties						
2.2 Titularul/ii activităților de curs	S.l. dr. ing. Sima Sergiu						
2.3 Titularul/ii activităților de seminar / laborator/proiect	-						
2.4 Anul de studiu	2	2.5 Semestrul	II	2.6. Tipul de evaluare	V	2.7 Statutul disciplinei	Op
2.8 Categoria formativă	DS		2.9 Codul disciplinei	UPB.11.S.04.Op.008			

3. Timpul total (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	2	Din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar / laborator / proiect	0
3.4 Total ore din planul de învățământ	28	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar / laborator / proiect	0
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					47
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate					
Pregătire seminarii/ laboratoare/proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					
Tutorat					4
Examinări					4
Alte activități (dacă există):					x
3.7 Total ore studiu individual					47
3.8 Total ore pe semestru					75
3.9 Numărul de credite					3



4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	Parcursarea și/sau promovarea următoarelor discipline: <ul style="list-style-type: none">• Termodinamică chimică,• Matematica,• Fizica• Informatică aplicată
4.2 de rezultate ale învățării	Acumularea următoarelor cunoștințe: <ul style="list-style-type: none">• Utilizarea elementara a calculatorului personal• Elemente elementare de termodinamica

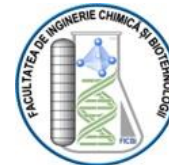
5. Condiții necesare pentru desfășurarea optimă a activităților didactice (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none">• Cursul se va desfășura într-o sală dotată cu videoproiector și computer. Studentii au nevoie sa poată lucra pe calculatoare personale
5.2 de desfășurare a seminarului / laboratorului / proiectului	-

6. Obiectiv general

Cerințele științei și tehnologiei moderne, ale proiectării proceselor industriale, fac necesară cunoașterea proprietăților materialelor (gaze, lichide, solide). Cercetarea și proiectarea industrială nu mai pot fi imaginate în absența unor colecții bogate de date fizico - chimice pentru materialele supuse diferitelor transformări. Problema a devenit de maximă importanță o dată cu dezvoltarea tehnicilor moderne de calcul și cu punerea la punct a unor sofisticate programe de simulare a proceselor, acestea necesita în mod obligatoriu multiple date primare pentru a putea efectua calculele.

Disciplina “ **Predicția proprietăților fizico-chimice**” își propune prezentarea unor metode de estimare a proprietăților fizico - chimice ale materialelor, utilizând modele teoretice cu baze molecular - statistice sau empirice. Din punct de vedere ingineresc, o importantă condiție impusă acestor modele este ca ele să permită calculul unor valori ale proprietăților în concordanță cât mai bună cu valorile experimentale. Pe cat posibil, aceste proceduri de evaluare a proprietăților trebuie să păstreze o relativă simplitate pentru a fi accesibile unui număr cât mai larg de utilizatori. Introducerea lor pe calculator face posibil accesul mai rapid la proprietatea dorită pentru un fluid sau un amestec de fluide.

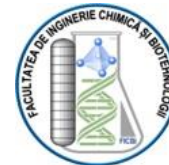


7. Rezultatele învățării

Cunoștințe	<ul style="list-style-type: none">• Inusirea unor cunoștințe fundamentale de chimie-fizica, necesare oricărui specialist
Abilități	<ul style="list-style-type: none">• Să demonstreze capacitatea de utilizare adecvată a noțiunilor de chimie fizică;• Capacitatea de a prezenta rezultatele prin metode computerizate;• Rezolvă aplicații practice.• Interpretează adecvat relații de cauzalitate.• Utilizarea metodelor numerice în rezolvarea problemelor de structură specifică;• Capacitatea de a interpreta date și rezultate fizico-chimice;• Interpretarea proceselor fizico-chimice din punct de vedere termodinamic;• Utilizarea pachetului MS Office pentru efectuarea de calcule, prezentari și elaborarea de texte științifice;• Capacitatea de autoevaluare obiectivă;• Abilitati de comunicare orală și scrisă;• Capacitatea de a face conexiuni și a interpreta fenomene fizico-chimice.• Abilitatea de a rezolva probleme interdisciplinare;
Responsabilitate și autonomie	<ul style="list-style-type: none">• Selectează surse bibliografice potrivite și le analizează.• Respectă principiile de etică academică, citând corect sursele bibliografice utilizate.• Demonstrează receptivitate pentru contexte noi de învățare.• Demonstrează autonomie în organizarea situației/contextului de învățare sau a situației problemă de rezolvat

8. Metode de predare

Pornindu-se de analiza caracteristicilor de învățare ale studenților și de la nevoile lor specifice, procesul de predare va explora metode de predare atât expositive (prelegerea, expunerea), cât și conservative-



interactive, bazate pe modele de învățare prin descoperire facilitate de explorarea directă și indirectă a realității (experimentul, demonstrația, modelarea), dar și pe metode bazate pe acțiune, precum exercițiul, activitățile practice și rezolvarea de probleme.

În activitatea de predare vor fi utilizate prelegeri, în baza unor prezentări Power Point sau diferite filmulețe care vor fi puse la dispoziția studenților. Fiecare curs va debuta cu recapitularea capitolelor deja parcurse, cu accent asupra noțiunilor parcurse la ultimul curs.

Prezentările utilizează imagini și scheme, astfel încât informațiile prezentate să fie ușor de înțeles și asimilat.

Această disciplină acoperă informații și activități practice menite să-i sprijine pe studenți în eforturile de învățare și de dezvoltare a unor relații optime de colaborare și comunicare într-un climat favorabil învățării prin descoperire.

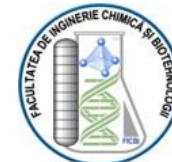
Se va avea în vedere exersarea abilităților de ascultare activă și de comunicare asertivă, precum și a mecanismelor de construcție a feedback-ului, ca modalități de reglare comportamentală în situații diverse și de adaptare a demersului pedagogic la nevoile de învățare ale studenților.

9. Conținuturi

CURS		
Capitolul	Conținutul	Nr. ore
I	Introducere. Noțiuni generale. Definiții. Ce este un fluid? Diagrama de faze a unui compus pur. Proprietăți fizico-chimice	2
II	Baze de date. Metode de estimare a proprietăților fizico-chimice. Legea stărilor corespondente. Factorul acentric. Metoda Klincewicz. Metoda Tsonopoulos-Tan. Exercițiu	2
III	Metode de contribuții de grup. Metoda Joback-Lydersen. Exercițiu	2
IV	Metoda lui Constantinou și Gani. Exercițiu	4
V	Funcții de deviație. Capacitatea calorică a lichidelor - Ecuația Rowlinson. Exercițiu	2
VI	Proprietăți de transfer: capacitatea calorică și viscozitatea gazelor la presiuni joase. Exercițiu	2
VII	Ecuații de stare (EoS) cubice. Calculul presiunii de vapori și a densității fazelor (lichid-vapori) la echilibru pentru o substanță pură folosind EoS și un script Octave/Matlab. Exercițiu	6
VIII	Calculul presiunii de vapori și a densității fazelor (lichid-vapori) la echilibru pentru un amestec folosind EoS și un script Octave/Matlab. Exercițiu	8
		Total:
		28

Bibliografie:

1. Sima Sergiu, *Predicția proprietăților fizico-chimice, suport electronic de curs*, <https://curs.upb.ro/2024/course/view.php?id=9015>
2. C. Secuianu, *Proprietăți fizico-chimice ale materialelor, Note de curs*
3. V. Feroiu, D. Geana, *Proprietăți fizico-chimice ale fluidelor pure. Exemple de calcul, Litografia Universității "Politehnica" din București, 2001*



4. D. Geana, V. Feroiu, *Proprietati fizico-chimice ale amestecurilor de fluide. Exemple de calcul, Litografia Universitatii "Politehnica" din Bucuresti, 2001*
5. B.E. Poling, J.M. Prausnitz, J.P. O'Connell, *The properties of gases and liquids, McGraw-Hill, New York, 2002*
6. M. Reinhard, A. Drefahl, *Handbook for estimating physicochemical properties of organic compounds, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1999*

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	- gradul de asimilare a noțiunilor specifice și a limbajului de specialitate	Prezentarea in PowerPoint a rezultatelor obținute pentru calculul unor proprietăți din teme individuale	20
	- corectitudinea cunoștințelor asimilate;	Observarea sistematică a studenților prin rezolvarea de teme de casă	80
10.5 Seminar / laborator / proiect	-		
	-		
10.6 Condiții de promovare			
<ul style="list-style-type: none">• Obținerea a 50% din punctajul total• Participarea la evaluarea finala			

Data completării

Titular de curs

Titulari de aplicații

S.l. dr. ing. Sima Sergiu

-

26.06.2025

Data avizării în

Director de departament

departament

Conf. dr. ing. Daniela Istrati

01.07.2025

Data aprobării în
Consiliul Facultății

Decan

04.07.2025

Prof. dr. ing. Cristina ORBECI