

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Națională de Știință și Tehnologie POLITEHNICA din București
1.2 Facultatea	Inginerie Chimică și Biotehnologii
1.3 Departamentul	Chimie organică „Costin Nevițescu”
1.4 Domeniul de studii universitare	Inginerie chimică
1.5 Programul de studii universitare	Chimie Alimentară și Tehnologii Biochimice
1.6 Ciclul de studii universitare	Licență
1.7 Limba de predare	Română
1.8 Locația geografică de desfășurare a studiilor	București

2. Date despre disciplină

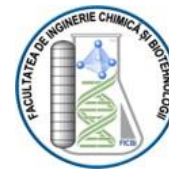
2.1 Denumirea disciplinei (ro) (en)	Termodinamică avansată Advanced Thermodynamics						
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. Dr. Maria MIHALY						
2.3 Titularul activităților de laborator	Ș.l. Dr. Ing. Sergiu SIMA						
2.4 Anul de studiu	2	2.5 Semestrul	II	2.6 Tipul de evaluare	E	2.7 Statutul disciplinei	Ob
2.8 Categoria formativă	DS		2.9 Codul disciplinei	UPB.11.S.04.Ob.002			

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	Din care: 3.2 curs	2	3.3 laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 laborator	28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					69
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate					
Pregătire seminarii/ laboratoare/proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					
Tutorat					8
Examinări					6
Alte activități (dacă există):					-
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	Parcurgerea și/sau promovarea următoarelor discipline: - Matematica, Fizica
4.2 de rezultate ale învățării	Acumularea următoarelor cunoștințe: - Utilizarea computerului și a calculatorului științific de buzunar; - Cunoașterea pachetului MS Office; - Abilitatea de a lucra individual și în echipă; - Cunoștințe de informare-documentare.



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

5.1 de desfășurare a cursului	Cursul se va desfășura într-o sală dotată cu videoproiector și computer.
5.2 de desfășurare a laboratorului	Studentii trebuie să aibă calculatoare științifice/laptopuri/notebook-uri sau alte mijloace pentru efectuarea de calcule; se vor prezenta în laborator cu halat, vor supraveghea o instalație în funcțiune, vor preda referatul de laborator în săptămâna următoare desfășurării efective a lucrării.

6. Obiectiv general

Cursul își propune să prezinte noțiuni avansate de Termodinamică chimică necesare în instruirea viitorului inginer chimist. Termodinamica chimică constituie o abordare matematică a sistemelor chimice, ca urmare îmbinarea noțiunilor fizico-chimice cu formalismul matematic asociat acestora este esențială. Conform cu manualele universitare moderne, cursul acoperă părți majore în înțelegerea fenomenelor fizico-chimice: Echilibrul în sisteme fizico-chimice, Echilibrul chimic, Termodinamica statistică și Structura moleculară a sistemelor fizico-chimice.

7. Rezultatele învățării

Cunoștințe	<ul style="list-style-type: none"> • Interpretarea proceselor fizico-chimice din punct de vedere termodinamic; • Înțelegerea rolului termodinamicii în monitorizarea proceselor; • Crearea de legături și asocieri între noțiunile învățate, ce ajută la dezvoltarea unei viziuni integrative și interdisciplinare.
Abilități	<ul style="list-style-type: none"> • Înțelegerea principiilor de funcționare a aparaturii din ingineria chimică; • Identificarea, definirea și rezolvarea corectă a problemelor; • Aplicarea de metode de rezolvare numerică, inclusiv cu utilizarea calculatorului; • Capacitatea de planificare a unei cercetări experimentale și interpretarea rezultatelor; • Realizarea conexiunilor cu noțiuni predate la alte materii; • Utilizarea unor aparate de laborator uzuale și prelucrarea datelor achiziționate.
Responsabilitate și autonomie	<ul style="list-style-type: none"> • Dezvoltarea gândirii critice, creatoare, inițiativei în cercetare; • Capacitatea de a comunica noțiunile învățate sau rezultatele unui studiu științific; • Capacitatea de a lucra independent și în echipă; • Respectarea principiilor de etică în învățământul superior; • Informarea și documentarea permanentă în domeniul de activitate.

8. Metode de predare

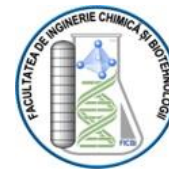
Expunere, prelegere, prezentare la tablă;

Discuții, dezbateri, prezentare și/sau analiză de lucrări, rezolvare de exerciții și probleme;

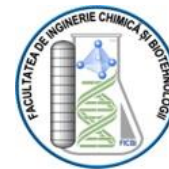
Mijloace moderne de predare: prezentări Power Point, filme, video cursuri, animații.

9. Conținuturi

CURS		
Capitolul	Conținutul	Nr. ore
1	ECHILIBRUL CHIMIC Criteriul de echilibru chimic în sisteme omogene. Constanta K_p . Aplicație la sisteme omogene ideale în fază gazoasă. Echilibrul chimic în fază gazoasă reală. Constanta de echilibru K_f . Echilibrul chimic în soluții. Constanta de echilibru K_a . Valori tabelate	6



	pentru funcții standard. Calculul compoziției de echilibru în fază gazoasă la temperatură și presiune constante. Calculul compoziției de echilibru în fază gazoasă la temperatură și volum constante. Calculul compoziției de echilibru în fază gazoasă în condiții adiabate. Reacții chimice simultane. Calculul compoziției de echilibru în soluții. Echilibrul chimic în sisteme eterogene. Reacție chimică implicând o fază mixtă și faze condensate pure. Influența diferiților factori (parametri) asupra echilibrului chimic.	
2	STRUCTURA MOLECULARĂ Aproximația Born-Oppenheimer. Teoria legăturilor de valență. Teoria orbitalilor moleculari. Simetria moleculară. Orbitali moleculari pentru sisteme poliatomice. Metode SCF-MO semiempirice și ab-initio.	2
3	SPECTROSCOPIA DE ROTAȚIE ȘI VIBRAȚIE Spectre de rotație pură. Vibrațiile moleculelor diatomice. Vibrațiile moleculelor poliatomice. Spectroscopia de absorbție în infraroșu. Spectroscopia Raman.	2
4	SPECTROSCOPIE ELECTRONICĂ Tranziții electronice. Laseri. Spectroscopie fotoelectronică. Nanofotonică. Biofotonică.	2
5	SPECTROSCOPIE DE REZONANȚĂ MAGNETICĂ Efectul câmpurilor magnetice asupra electronilor și nucleelor. Rezonanța magnetică nucleară. Tehnici RMN în puls. Rezonanța electronică de spin.	2
6	TERMODINAMICA STATISTICĂ A SISTEMELOR DE PARTICULE INDEPENDENTE Modele statistice. Legile de distribuție Boltzmann-Planck, Bose-Einstein și Fermi-Dirac. Funcția de partiție moleculară. Semnificația statistică a entropiei. Legătura între funcțiile termodinamice și funcția de partiție moleculară.	1
7	TERMODINAMICA STATISTICĂ CLASICĂ A SISTEMELOR DE PARTICULE DEPENDENTE Spațiul de stare (de fază). Funcția de distribuție. Media statistică. Condiții de normare. Ansamblul statistic canonic (Gibbs). Calculul statistic al funcțiilor termodinamice.	1
8	ELEMENTE DE TERMODINAMICĂ STATISTICĂ CUANTICĂ Ansamblu statistic cuantic canonic. Probabilitatea stărilor cuantice. Calculul statistic-cuantic al funcțiilor termodinamic	1
9	EVALUAREA FUNCȚIEI DE PARTIȚIE MOLECULARE Grade de libertate moleculare. Factorizarea funcției de partiție moleculare. Funcția de partiție de translație. Funcția de partiție nucleară (a spinului nuclear). Funcția de partiție electronică. Funcția de partiție de rotație (moleculă rigidă). Funcția de partiție de vibrație (oscilatorul armonic)	2
10	APLICAȚIILE TERMODINAMICII STATISTICE LA GAZUL IDEAL Teoria cinetică-moleculară a gazului ideal. Legea de distribuție a vitezelor Maxwell – Boltzmann. Viteze medii. Legea de distribuție a energiilor. Drum liber mediu. Ciocniri intermoleculare. Calculul statistic al funcțiilor termodinamice la gazul ideal. Contribuția translației. Contribuția rotației. Contribuția vibrației. Entropia gazului ideal. Capacitatea calorică a gazului ideal. Funcția entalpie liberă la gaze ideale. Calculul statistic al constantei de echilibru la reacții ale gazelor ideale	4
11	GAZUL REAL. FORȚE INTERMOLECULARE Forțe intermoleculare. Integrala de configurație. Presiunea gazului real. Ecuația van der Waals.	1
12	STAREA LICHIDA Proprietăți de echilibru ale lichidelor. Modelul cinetic al lichidului. Modele cristaline (celulare) ale lichidelor. Modelul soluțiilor strict regulate. Funcția radială de	2



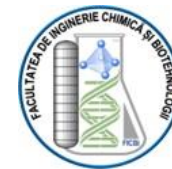
	distribuție. Metode de simulare moleculară: metode Monte Carlo (MC) și Dinamică Moleculară (MD).	
13	STAREA SOLIDĂ Legatura cristalină. Cristale ionice. Calculul energiei de rețea. Proprietăți termice ale solidelor (cristalelor). Modelul Einstein. Modelul Debye. Solidul real. Nanomateriale și nanofabricația.	2
	Total:	28

Bibliografie:

1. Crisciu Adrian, Chimie Fizica II, suport de curs electronic, <https://curs.upb.ro/2021/mod/resource/view.php?id=244935>
2. **D. Geană**, *Termodinamică Chimică. Teoria echilibrului de faze și chimic*, Ed. Politehnica Press, București, 2008.
3. **V. Feroiu, D. Geană**, *Proprietăți fizico-chimice ale fluidelor pure. Exemple de calcul.*, Litografia Universității „Politehnica“ București, 2000.
4. **D. Geană, V. Feroiu**, *Proprietăți fizico-chimice ale amestecurilor de fluide. Exemple de calcul.*, Litografia Universității „Politehnica“ București, 2000.
5. **V. Feroiu**, *Chimie coloidală. Aplicații în procesarea alimentelor.*, Editura Printech, București, 2009.
6. **D. Geană, V. Feroiu**, *Ecuatii de stare. Aplicații la echilibre de faze*, Ed. Tehnică, București, 2000.
7. **P.W. Atkins, J. de Paula**, *Chimie Fizică, ed.7 (traducere A. Meghea)*, Editura Agir, București, 2003.

LABORATOR

Nr. crt.	Conținutul	Nr. ore
1	Instructaj privind protecția muncii. Prezentarea aparaturii utilizate în laboratorul de termodinamică. Achiziția datelor experimentale și prelucrarea acestora prin metode analitice și grafice. Cifre semnificative și erori de măsurare. Raportarea și interpretarea rezultatelor experimentale. Întocmirea referatelor de laborator.	2
2	Diagrama lichid-vapori ($T-X, Y$) a unui amestec binar. Echilibre între faze în sisteme multicomponente: legea lui Raoult, legea lui Henry.	4
3	Ebulioscopie. Echilibre între faze în sisteme multicomponente: legea lui Raoult.	4
4	Crioscopie. Echilibre între faze în sisteme multicomponente: ecuația Schröder-van Laar.	4
5	Sistem ternar. Curba de echilibru lichid-lichid. Echilibre între faze în sisteme multicomponente: diagrame de faze (LV, SL, LL)	4
6	Verificarea legii de distribuție a lui Nernst. Echilibre între faze în sisteme multicomponente: fugacitate și activitate termodinamică, funcții de exces, presiune osmotică, diagrame de faze (LV, SL, LL)	4
7	Constanta de echilibru a reacției de descompunere a unui complex. Echilibrul chimic: constante de echilibru, compoziția de echilibru	4
8	Determinarea diametrului molecular mediu. Termodinamică statistică: funcții de partiție moleculare (translație, rotație, vibrație). Aplicațiile teoriei cinetico-moleculare la gazul ideal: Legea de distribuție a vitezelor Maxwell – Boltzmann, viteze medii, drum liber mediu, ciocniri intermoleculare. Calculul statistic al funcțiilor termodinamice la gazul ideal: Entropia gazului ideal, capacitatea calorică a gazului ideal, entalpie liberă la gaze ideale, calculul statistic al constantei de echilibru la reacții ale gazelor ideale	2
	Total:	28



Bibliografie:

1. Crișciu Adrian, Sima Sergiu, material electronic laborator Chimie Fizică I, <https://curs.upb.ro/2021/mod/page/view.php?id=48975>
2. S. Sima, A.V. Crișciu, A. Cotârță, O. Istrate, M. Mihaly, L. Pilan, C. Secuianu, E.M. Ungureanu, A.C. Manea, V. Feroiu, Lucrări practice de laborator pentru chimie fizică, Ed. Politehnica Press, București, 2016.
3. D. Geană, Termodinamică Chimică. Teoria echilibrului de faze și chimic, Ed. Politehnica Press, București, 2008.
4. V. Feroiu, D. Geană, Proprietăți fizico-chimice ale fluidelor pure. Exemple de calcul., Litografia Universității „Politehnica“ București, 2000.
5. D. Geană, V. Feroiu, Proprietăți fizico-chimice ale amestecurilor de fluide. Exemple de calcul., Litografia Universității „Politehnica“ București, 2000.
6. V. Feroiu, Chimie coloidală. Aplicații în procesarea alimentelor., Editura Printech, București, 2009.
7. D. Geană, V. Feroiu, Ecuații de stare. Aplicații la echilibrul de faze, Ed. Tehnică, București, 2000.
8. P.W. Atkins, J. de Paula, Chimie Fizică, ed.7 (traducere A. Meghea), Editura Agir, București, 2003.
9. P.W. Atkins, C.A. Trapp, Exerciții și probleme rezolvate de Chimie Fizică, Editura Tehnică, București, 1997.
10. O. Landauer, D. Geană, O. Iulian, Probleme de chimie fizică, Editura Didactică, București, 1982.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	<ul style="list-style-type: none">• completitudinea și corectitudinea cunoștințelor;• capacitatea de a opera cu cunoștințele asimilate, coerența logică• capacitatea de analiză, de interpretare• gradul de asimilare a limbajului de specialitate și capacitatea de comunicare.	Examen scris	50%
10.5 Laborator	<ul style="list-style-type: none">• capacitatea de aplicare în practică a cunoștințelor învățate;• capacitatea de analiză, de interpretare• gradul de asimilare a limbajului de specialitate și capacitatea de comunicare.	Referate de laborator	30%
		Lucrari scrise, teste	20%
10.6 Condiții de promovare			
Obținerea a minimum 50% din punctajul final.			

Data completării
15.06.2025

Titular de curs

Titular de aplicații

Conf. Dr. Maria MIHALY

Ș.l. Dr. Ing. Sergiu SIMA

Data avizării în
departament
23.06.2025

Director de departament
Conf.dr.ing. Daniela ISTRATI

Data aprobării în
Consiliul Facultății
04.07.2025

Decan
Prof. dr. Cristina ORBECI