

## FIȘA DISCIPLINEI

Anul universitar 2022 - 2023

### 1. Date despre program

1.1. Instituția de învățământ superior	Universitatea Lucian Blaga din Sibiu
1.2. Facultatea	Inginerie
1.3. Departament	Departamentul de Inginerie Industrială și Management
1.4. Domeniul de studiu	Ingineria Mediului
1.5. Ciclul de studii <sup>1</sup>	Licență
1.6. Specializarea	Ingineria si Protectia Mediului in Industrie

### 2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	Chimie 1		Cod	FING.IIM.IPMI.L.FO. 1.2010.E-4.3	
2.2. Titular activități de curs	Sef lucrări dr. ing. Narcisa VRÎNCEANU				
2.3. Titular activități practice	Sef lucrări dr. ing. Narcisa VRÎNCEANU				
2.4. An de studiu <sup>2</sup>	1	2.5. Semestrul <sup>3</sup>	1	2.6. Tipul de evaluare <sup>4</sup>	E
2.7. Regimul disciplinei <sup>5</sup>	O	2.8. Categoria formativă a disciplinei <sup>6</sup>	F		

### 3. Timpul total estimat

<b>3.1. Extinderea disciplinei în planul de învățământ – număr de ore pe săptămână</b>					
3.1.a.Curs	3.1.b. Seminar	3.1.c. Laborator	3.1.d. Proiect	3.1.e Alte	Total
2		1			<b>3</b>
<b>3.2. Extinderea disciplinei în planul de învățământ – Total ore din planul de învățământ</b>					
3.2.a.Curs	3.2.b. Seminar	3.2.c. Laborator	3.2.d. Proiect	3.2.e Alte	Total <sup>7</sup>
28		14			<b>42</b>
<b>Distribuția fondului de timp pentru studiu individual<sup>8</sup></b>					<b>Nr. ore</b>
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					12
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					15
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					15
Tutoriat <sup>9</sup>					14
Examinări <sup>10</sup>					2
<b>3.3. Total ore alocate studiului individual<sup>11</sup> (NOSIsem )</b>					<b>58</b>
<b>3.4. Total ore din Planul de învățământ (NOADsem)</b>					<b>42</b>
<b>3.5. Total ore pe semestru<sup>12</sup> (NOADsem + NOSIsem )</b>					<b>100</b>
<b>3.6. Nr ore / ECTS</b>					<b>25</b>
<b>3.7. Număr de credite</b>					<b>4</b>

#### 4. Precondiții (acolo unde este cazul)

<b>4.1.</b> Discipline necesar a fi promovate anterior (de curriculum) <sup>13</sup>	Cunoștințe de Chimie Anorganică, Chimie Organică, Chimie Analitică, Termodinamică chimică, CINETICĂ Chimică, cunostinte minime de utilizare a computerului;
<b>4.2.</b> Competențe	Efectuarea de calcule chimice, efectuarea și interpretarea unor dozări de diferite specii chimice, realizarea graficelor în Excel sau Origin, competențe lingvistice de bază în limba română/engleză / Competențe IT

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

<b>5.1.</b> De desfășurare a cursului <sup>14</sup>	Participare activă • Discuții privind conținutul suportului de curs, folosind tablă, cretă, videoproiector
<b>5.2.</b> De desfășurare a activităților practice (lab/sem/pr/aplic) <sup>15</sup>	Laborator de chimie pentru activitățile experimentale; Elaborarea și susținerea lucrărilor planificate de laborator • Participare activă prin folosirea suportului pentru lucrări de seminar, probe, simulare lucrări practice, soft-uri de modele matematice, softuri asociate unor dispozitive/aparatul de laborator, calculator

#### 6. Competențe specifice acumulate<sup>16</sup>

		Număr de credite alocate disciplinei <sup>17</sup>	4	Repartizare credite pe competențe <sup>18</sup>
<b>6.1.</b> <b>Competențe profesionale</b>	CP1	Explicarea mecanismelor, proceselor și efectelor de origine antropică sau naturală care determină și influențează poluarea mediului		4
	CP2	Gestionarea și soluționarea problemelor specifice de mediu pentru dezvoltarea durabilă		-
	CP3	Aplicarea principiilor generale de calcul tehnologic		-
	CP4	Elaborarea și exploatarea sistemelor de monitorizare a poluanților		-
	CP5	Controlul calității mediului, evaluarea impactului și a riscului și elaborarea de variante tehnologice cu impact redus asupra mediului în concordanță cu cerințele BAT/BREF și cu legislația în vigoare		-
	CP6	Desfășurarea activităților specifice managementului și marketingului în ingineria și protecția mediului		-
<b>6.2.</b> <b>Competențe transversale</b>	CT1	Identificarea și respectarea normelor de etică și deontologie profesională, asumarea responsabilităților pentru deciziile luate și a riscurilor aferente		-
	CT2	Identificarea rolurilor și responsabilităților într-o echipă pluridisciplinară și aplicarea de tehnici de relaționare și muncă eficientă în cadrul echipei		-
	CT3	Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională asistată (portaluri, Internet, aplicații software de specialitate, baze de date, cursuri on-line etc.) atât în limba română, cât și într-o limbă de circulație internațională		-

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

<b>7.1.</b> Obiectivul general	Îmbogățirea cunoștințelor în ceea ce privește descrierea conceptelor specifice disciplinei Chimie, a metodelor de sinteză a nanostructurilor ecocompatibile, modelelor de caracterizare structurală, morfologică și texturală, precum și stabilirea proprietăților acestora, dezvoltarea de abilități de conectare logică interdisciplinară (cu chimia hidrocarburilor, toxicologia, știința mediului) și comunicare a cunoștințelor acumulate. Formarea de atitudini de responsabilitate și respect față de colegi/grup de lucru, cu respectarea normelor de securitate și sănătate în muncă și protecție a mediului.
--------------------------------	--



<p><b>7.2. Obiectivele specifice</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Cunoasterea principiilor teoretice ale chimiei hidrocarburilor și ale metodelor experimentale folosite în laborator; Dobandirea de abilitati de comunicare orală și scrisă.</li> </ul> <p>La finalizarea cu succes a acestei discipline, studenții vor fi capabili să:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Descrie principiile și condițiile specifice sintezelor, precum și metodele de caracterizare a nanostructurilor eco-compatibile, precum și a modului de valorificare/purificare a produșilor și/sau deșeurilor.</li> <li>• Utilizeze noțiunile introduse la curs în context mai larg în ceea ce privește pregătirea generală în calitate de chimist cu potențială angajare în laboratoare de analize medicale/laboratoare.</li> <li>• Analizeze critic calitatea datelor obținute despre caracteristicile nanostructurilor, efectuarea de comparații și optimizări.</li> <li>• Efectueze determinări experimentale, să sistematizeze și să interpreteze rezultatele experimentale.</li> <li>• Comunice eficient noțiuni legate de specificul disciplinei, transfere cunoștințele acumulate prin comunicare orală sau scrisă.</li> <li>• Se integreze într-un grup de lucru în care se efectuează activități ce implică sinteză/prelucrare/caracterizare de nanostructurilor eco-compatibile.</li> <li>• Acționeze responsabil și autonom pentru sarcini specifice legate de folosirea și analiza nanostructurilor eco-compatibile.</li> </ul>
--	---

## 8. Conținuturi

8.1. Curs <sup>19</sup>		Metode de predare <sup>20</sup>	Nr. ore
Curs 1	Optimizarea geometriei moleculei de etanol: crearea moleculei, vizualizarea moleculei, conformație moleculară, setarea parametrilor geometriei, extensia și modificarea geometriei, opțiuni de calcul, rularea calculului, rezultatele calculului ADF - Structura și reactivitate	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentări grafice) co-asistate de sisteme de proiectare a imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	2
Curs 2	ADF - Spectroscopie vibrațională Energii de excitație ale etenei	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentări grafice) co-asistate de sisteme de proiectare a imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	2
Curs 3	ADF - Proprietăți optice, excitații electronice Frecvențe vibraționale ale etanolului	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentări grafice) co-asistate de sisteme de proiectare a	2



		imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	
Curs 4	ADF – spectroscopie RMN Construirea unei structuri moleculare	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentari grafice) co-asistate de sisteme de proiectare a imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	2
Curs 5	ADF - Structura electronica, model hamiltonian Reactii de izomerizare ale HCN	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentari grafice) co-asistate de sisteme de proiectare a imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	2
Curs 6	ADF - Transport electronic	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentari grafice) co-asistate de sisteme de proiectare a imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	2
Curs 7	ADF - Analiza	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentari grafice) co-asistate de sisteme de proiectare a imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	2
Curs 8	BAND Structura si reactivitate. Cristale si suprafete	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentari grafice) co-asistate de sisteme de proiectare a imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	2



Curs 9	Prorietati optice. Excitatii electronice	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentari grafice) co-asistate de sisteme de proiectare a imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	2
Curs 10	Structura electronica, Model Hamiltonian	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentari grafice) co-asistate de sisteme de proiectare a imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	2
Curs 11	Transport electronic Transport electronic intr-un nanotub de carbon	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentari grafice) co-asistate de sisteme de proiectare a imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	2
Curs 12	Analiza descompunerii periodice a energiei PEDAN PEDA-NOCV - decomposing the orbital relaxation term PEDA-NOCV for Spin Unrestricted Calculations Calculul structurii benzii Descompunerera periodica a energiei Tetrahydrofuran/Si(001)	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentari grafice) co-asistate de sisteme de proiectare a imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	2
Curs 13	Identificarea starii de tranzitie si caracterizarea catalizatorului Ziegler Natta Diamond Lattice Optimization and Phonons Reactie automata pentru hidrohalogenare Cristale si suprafete	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentari grafice) co-asistate de sisteme de proiectare a imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	2
Curs 14	Dinamica moleculara si Monte Carlo Resonanta Raman Proprietati optice, Excitatii electronice Spectrul UV/Vis spectrum al Ir(ppy)3 Transport Electronic	prelegerea clasică (prezentare sintetică, explicațiile, demonstrarea prin scheme, reprezentari grafice) co-asistate de	2



		sisteme de proiectare a imaginilor / problematizarea, învățarea prin descoperire, experiment și studiul de caz.	
		<b>Total ore curs:</b>	<b>28</b>

Activități practice 8.2.b. Laborator <sup>21</sup>	Metode de predare	Nr. ore
Act.1 ReaxFF Structura si reactivitate	Simularea protocolului experimental/Achizitionare date/ Interpretarea rezultatelor din punct de vedere al semnificației cât și din punct de vedere al încadrării lor în principiile teoretice	2
Act.2 ReaxFF Dinamica moleculara si Monte Carlo	Simularea protocolului experimental/Achizitionare date/ Interpretarea rezultatelor din punct de vedere al semnificației cât și din punct de vedere al încadrării lor în principiile teoretice	2
Act.3 ReaxFF Parametrizare	Simularea protocolului experimental/Achizitionare date/ Interpretarea rezultatelor din punct de vedere al semnificației cât și din punct de vedere al încadrării lor în principiile teoretice	2
Act.4 MLPotential Structura si reactivitatea MLPotential ANI-1ccx	Simularea protocolului experimental/Achizitionare date/ Interpretarea rezultatelor din punct de vedere al semnificației cât și din punct de vedere al încadrării lor în principiile teoretice	2
Act.5 QM/MM Hybrid: Inorganic linker in organic framework Microcinetica MKMCXX: Calculul oxidarii CO	Simularea protocolului experimental/Achizitionare date/ Interpretarea rezultatelor din punct de vedere al semnificației cât și din punct de vedere al încadrării lor în principiile teoretice	2
Act.6 Quantum ESPRESSO Crystale si suprafete Optimizarea geometriei si a matricii Magnetism, structura benzii	Simularea protocolului experimental/Achizitionare date/ Interpretarea rezultatelor din punct de vedere al semnificației cât și din punct de vedere al încadrării lor în principiile teoretice	2
Act.7 Test final de laborator COSMO-RS with multi-species components Using the UNIFAC program Python scripting with COSMO-RS using the PLAMS library	Simularea protocolului experimental/Achizitionare date/ Interpretarea rezultatelor din punct de vedere al semnificației cât și din punct de vedere al încadrării lor în principiile teoretice	2

## 8.2. Activități practice

## 9. Bibliografie

9.1. Referințe bibliografice recomandate	<a href="https://www.scm.com/doc/Tutorials/IndexByEngine.html#adf">https://www.scm.com/doc/Tutorials/IndexByEngine.html#adf</a>
	<a href="https://www.scm.com/wp-content/uploads/pdfs/2010/ADFGUI_tutorial.pdf">https://www.scm.com/wp-content/uploads/pdfs/2010/ADFGUI_tutorial.pdf</a> ADF Tutorial 1: fully integrated GUI, get started with easy set up and analysis of DFT calculations – YouTube
	Building Polymers from monomers, doing a conformational search and average IR spectrum - YouTube
9.2. Referințe bibliografice suplimentare	

## 10. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatorilor reprezentativi din domeniul aferent programului<sup>22</sup>

Se realizează prin discuții periodice în cadru formal și informal cu reprezentanții unor companii de profil. În vederea schițării conținuturilor, alegerii metodelor de predare/învățare titularii disciplinei vor organiza discuții periodice cu specialiști în domeniul Chimie, cu reprezentanți ai companiilor cu specific, precum și cu alte cadre didactice din domeniu, titulare în alte instituții de învățământ superior.

## 11. Evaluare

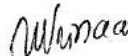

Tip activitate	11.1 Criterii de evaluare	11.2 Metode de evaluare		11.3 Pondere din nota finală	Obs. <sup>23</sup>
11.4a Examen / Colocviu	<ul style="list-style-type: none"> <li>Cunoștințe teoretice și practice însușite (cantitatea, corectitudinea, acuratețea)</li> </ul>	Teste pe parcurs <sup>24</sup> :	10 %	60 % (minim 5)	CPE
		Teme de casă:	10 %		
		Alte activități <sup>25</sup> :	10 %		
		Evaluare finală:	30 % (min. 5)		
11.4c Laborator	<ul style="list-style-type: none"> <li>Cunoașterea aparaturii, a modului de utilizare a instrumentelor specifice; evaluarea unor instrumente sau realizări, prelucrarea și interpretarea unor rezultate</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Chestionar scris</li> <li>Răspuns oral</li> <li>Caiet de laborator, lucrări experimentale, referate etc.</li> <li>Demonstrație practică</li> </ul>		40 % (minim 5)	CPE
11.5 Standard minim de performanță <sup>26</sup> : Nota minimă 5					

*Fișa disciplinei cuprinde componente adaptate persoanelor cu CES (persoane cu dizabilități și persoane cu potențial înalt), în funcție de tipul și gradul acestora, la nivelul tuturor elementelor curriculare (competențe, obiective, conținuturi, metode de predare, evaluare alternativă), pentru a asigura șanse echitabile în pregătirea academică a tuturor studenților, acordând atenție sporită nevoilor individuale de învățare.*



Data completării: |0|8| / |0|9| / |2|0|2|2|

Data avizării în Departament: |1|4| / |0|9| / |2|0|2|2|

	<b>Grad didactic, titlul, prenume, numele</b>	<b>Semnătura</b>
<b>Titular disciplină</b>	Sef lucrari dr. Ing. Narcisa VRINCEANU	
<b>Responsabil program de studii</b>	Conf.univ.dr.ing. Cristian DEAC	
<b>Director Departament</b>	Prof.univ.dr. Dănuț DUMITRAȘCU	

- 
- <sup>1</sup> Licență / Master  
<sup>2</sup> 1-4 pentru licență, 1-2 pentru master  
<sup>3</sup> 1-8 pentru licență, 1-3 pentru master  
<sup>4</sup> Examen, colocviu sau VP A/R – din planul de învățământ  
<sup>5</sup> Regim disciplină: O=Disciplină obligatorie; A=Disciplină opțională; U=Facultativă  
<sup>6</sup> Categoria formativă: S=Specialitate; F=Fundamentală; C=Complementară; I=Asistată integral; P=Asistată parțial; N=Neasistată  
<sup>7</sup> Este egal cu 14 săptămâni x numărul de ore de la punctul 3.1 (similar pentru 3.2.a.b.c.)  
<sup>8</sup> Liniile de mai jos se referă la studiul individual; totalul se completează la punctul 3.37.  
<sup>9</sup> Între 7 și 14 ore  
<sup>10</sup> Între 2 și 6 ore  
<sup>11</sup> Suma valorilor de pe liniile anterioare, care se referă la studiul individual.  
<sup>12</sup> Suma (3.5.) dintre numărul de ore de activitate didactică directă (NOAD) și numărul de ore de studiu individual (NOSI) trebuie să fie egală cu numărul de credite alocate disciplinei (punctul 3.7) x nr. ore pe credit (3.6.)  
<sup>13</sup> Se menționează disciplinele obligatorii a fi promovate anterior sau echivalente  
<sup>14</sup> Tablă, videoproiector, flipchart, materiale didactice specifice, platforme on-line etc.  
<sup>15</sup> Tehnică de calcul, pachete software, standuri experimentale, platforme on-line etc.  
<sup>16</sup> Competențele din Grilele aferente descrierii programului de studii, adaptate la specificul disciplinei  
<sup>17</sup> Din planul de învățământ  
<sup>18</sup> Creditele alocate disciplinei se distribuie pe competențe profesionale și transversale în funcție de specificul disciplinei  
<sup>19</sup> Titluri de capitole și paragrafe  
<sup>20</sup> Expunere, prelegere, prezentare la tablă a problematicii studiate, utilizare videoproiector, discuții cu studenții (pentru fiecare capitol, dacă este cazul)  
<sup>21</sup> Demonstrație practică, exercițiu, experiment  
<sup>22</sup> Legătura cu alte discipline, utilitatea disciplinei pe piața muncii  
<sup>23</sup> CPE – condiționează participarea la examen; nCPE – nu condiționează participarea la examen; CEF - condiționează evaluarea finală; N/A – nu se aplică  
<sup>24</sup> Se va preciza numărul de teste și săptămânile în care vor fi susținute.  
<sup>25</sup> Cercuri științifice, concursuri profesionale etc.  
<sup>26</sup> Se particularizează la specificul disciplinei standardul minim de performanță din grila de competențe a programului de studii, dacă este cazul.