

FIȘA DISCIPLINEI

Denumirea universității: Universitatea AȘM Facultatea: Științe exacte			Denumirea cursului: Modelarea proceselor chimice în sisteme acvatice Codul cursului în planul de studii: F.01.O.001				
Nivelul calificării ISCED: 7 Domeniul de formare profesională: 44 Științe Exacte Specialitatea: Chimie			Catedra responsabilă de curs: Fizică și Chimie Titular/Responsabil de curs: Povar Igor, dr. hab.				
Total ore			Număr de ore pe tipuri de activități			Forma de evaluare	Număr de credite
Total	Contact direct	Studiu individual	Curs	Seminar	Laborator		
150	40	110	30	10	0	E	5

Descrierea succintă a corelării cursului cu programul de studii

Modelarea proceselor chimice în sisteme acvatice este un curs de pregătire pentru masteranzii chimiști și ecologi, care vor folosi cunoștințele obținute în perioada pregătirii universitare pentru realizarea unor activități de bună calitate în domeniul descrierii unor procese chimice, cât și la analiza perturbărilor aduse mediului de factorii naturali și antropici.

Din punct de vedere practic, cursul este direcționat spre utilizarea pe larg a calculelor computerizate de pronosticare a condițiilor de desfășurare a proceselor chimice în sisteme acvatice. Relațiile matematice obținute de autorul cursului într-un șir de lucrări, expuse în bibliografia de mai jos, inclusiv și în două monografii recente, vor fi utilizate pentru determinarea stabilității sistemelor omogene și eterogene multicomponente și pronosticului stării în prezent și pe viitor a poluanților în ecosistemele contaminate.

Competențe dezvoltate în cadrul cursului:

Competențe transversale:

- aprofundarea, analiza și sinteza cunoștințelor din domeniul chimiei;
- analiza critică a literaturii științifice;
- aplicarea cunoștințelor teoretice din domeniul chimiei în rezolvarea sarcinilor științifice practice;
- definirea unui subiect de cercetare din domeniul chimiei materialelor noi și elaborarea unui plan de realizare a obiectivelor propuse;
- argumentarea scopurilor, obiectivelor și rezultatelor cercetărilor proprii;
- planificarea consecutivității cercetărilor teoretice și practice proprii în dependență de obiectivele propuse;
- rezolvarea problemelor de cercetare prin identificarea și folosirea tehnologiilor informaționale;
- organizarea și realizarea activității în grup în scopul derulării activității științifice de cercetare a proprietăților fizico-chimice a compușilor chimici;
- aplicarea strategiilor de muncă eficientă și responsabilă, de punctualitate, seriozitate și răspundere personală.

Competențe specifice:

- aplicarea conceptelor, teoriilor, principiilor, metodelor și modelelor contemporane ale chimiei;
- operarea cu noțiunile de structură și proprietăți ale compușilor chimici;
- evidențierea posibilităților de sinteză a compușilor chimici de interes, reieșind din cunoștințele privind corelația structură-proprietăți chimice;
- identificarea avantajelor și dezavantajelor metodelor aplicate pentru sinteza, determinarea compoziției, structurii și a proprietăților fizico-chimice ale compușilor chimici;
- modernizarea și optimizarea procedeelelor și tehnicilor existente pentru sinteza și analiza substanțelor în funcție de sarcinile propuse;
- analiza datelor experimentale obținute prin prisma teoriilor moderne cunoscute;
- obținerea rezultatelor scontate în contextul utilizării raționale și optime a reagenților chimici și utilajului specific;
- inițierea și dezvoltarea unor proiecte inovative în domeniul profesional cu importanță teoretică-fundamentală și aplicativă;
- identificare posibilităților de utilizare a metodelor specifice chimiei și nespecifice, din alte domenii științifice în realizarea proiectelor de cercetare.

Finalități de studii ale cursului:

La nivel de aplicare studenții vor:

- calcula cu ajutorul unor programe de calcul computerizat diagrame de repartiție a speciilor solubile și insolubile

într-un sistem eterogen „faza solidă – soluție apoasă saturată” și „lichid polar – lichid nepolar”;

- exprima gradul de precipitare al compușilor puțin solubili în funcție de un șir de variabile de concentrație în sistemele multicomponente;
- compune sisteme de ecuații ale bilanțului de masă și legii acțiunii maselor în sisteme omogene și eterogene;
- aplica analiza termodinamică a proprietăților de tamponare în ecosisteme bifazice;
- caracteriza procesele de dizolvare-precipitare cu participarea concomitentă a unui șir de specii chimice solubile cu ajutorul ecuației generalizate;
- determina aria stabilității termodinamice a fazelor solide într-un sistem bifazic;
- aplica un șir larg de metode grafice de prezentare a echilibrilor chimice complexe în sisteme multicomponente;
- estima condițiile optime de derulare a proceselor chimice în sisteme acvatice.

La nivel de integrare studenții vor:

- analiza distribuția speciilor chimice în sisteme eterogene în funcție de compoziția lor chimică și temperatura mediului ambiant;
- modela cu ajutorul metodelor termodinamice, computerizate și de reprezentare grafică un șir de procese ecologice în ecosisteme;
- elaborează programe de calcul ale echilibrilor chimice complexe în sisteme acvatice;
- deduce relațiile de reciprocitate între gradul de precipitare, solubilitate și concentrațiile reziduale ale componentelor fazelor solide;
- soluționează diverse probleme practice, aplicând principiile fizico-chimice de bază;
- elaborează și utilizează programe computerizate de calcul în scopul optimizării proceselor complexe;
- realizează cercetări științifice în domeniul modelării proceselor chimice complexe în sisteme acvatice.

Condiții pre-rechizit: Pentru studierea cursului *Modelarea proceselor chimice în sisteme acvatice* este necesară parcurgerea disciplinelor: „Chimia ecologică”, „Chimia fizică”, „Chimia anorganică” și „Chimia analitică”.

Teme de bază: Introducere. Obiectul cursului. Considerații generale. Chimia apelor naturale. Elemente de hidrochimie și hidrobiologie. Macro- și microcomponentele apelor naturale. Eutrofizarea antropogenă a bazinelor acvatice. Tipuri de liganzi și forme de existență a ionilor metalelor tranzitoriale în apele naturale. Rolul depunerilor de fund în formarea calității mediului acvatic. Calculul termodinamic al echilibrilor chimice în sistemele eterogene „Fază solidă – soluție saturată” de orice grad de complexitate, în condițiile derulării unor reacții secundare de hidroliză, protonare, complexare etc. Modele matematice și tehnici de calcul ale echilibrilor chimice complexe în sisteme omogene și eterogene. Dependența gradului de precipitare a compușilor puțin solubili de parametrii termodinamici fundamentali ai sistemelor eterogene multicomponente. Metode de calcul al constantelor de echilibru, gradul de formare a complecșilor polinucleari. Metode de calcul al coeficientului de stabilitate. Utilizarea calculelor termodinamice ale echilibrilor chimice complexe pentru estimarea unor procese chimice în sisteme acvatice.

Strategii de predare-învățare:

Învățare centrată pe student: prelegeri interactive, lucrări individuale, proiecte, consultații.

Strategii de evaluare: teste de evaluare, prezentări, rapoarte, dezbateri, elaborarea portofoliilor, teze/proiecte etc. Nota finală se constituie din rezultatul evaluării finale (40%), curente (40 %) și calității lucrului individual al studentului pe parcursul semestrului (20%).

Bibliografie:

1. Komari N.P. Chemical metrology. Homogeneous ionic equilibrium. Kharkov: Vishaya Shkola, 1983, 208 p.
2. Komari N.P. Chemical metrology. Heterogeneous ionic equilibrium. Kharkov: Vishaya Shkola, 1984, 208 p.
3. Povar I., Spînu O. Termodinamica echilibrilor chimice complexe în sisteme eterogene multicomponente. Inst. De Chimie al Acad. De Științe din Moldova. – Chișinău : S. N., 2014 (Tipografia AȘM). – 460 p.
4. Povar I., Lupascu T., Leah T., Andries S., Filipciuc V. Natural and antropogenic influences on the quality of soils and water resources (Природные и антропогенные факторы воздействия на качество почв и водных ресурсов Республики Молдова). Ин-т Химии Акад. Наук Молдовы, Ин-т Почвоведения, Агрехимии и Защиты Почвы „Николае Димо”. – Кишинэу : Б. И., 2014 (Tipografia AȘM). – 268 p
5. I. Povar. Determination of the stability of slightly soluble complexonate from pH metric data. Can. J. Chem., 2001, 79, 1166-1172.

Data

Semnătura