

Departamentul DE CHIMIE FIZICĂ
CONFERENȚIAR UNIVERSITAR, poziția 5

Discipline din planul de învățământ

1. Cinetică chimică (curs și lucrări practice)
2. Fizico-chimia stării solide (curs și lucrări practice)
3. Materiale polimerice micro și nanostructurate. Analiză Termică. (curs și lucrări practice)

Tematică și bibliografie

1. Cinetică chimică

Notiuni introductive. Teoria cinetico-moleculară a gazelor ideale. Semnificația cinetico-moleculară a presiunii și temperaturii. Principiul echipartiției energiei. Teoria Maxwell - funcții de distribuție a vitezelor moleculare. Viteze moleculare medii. Funcții de distribuție a energiei cinetice moleculare. Distribuția Maxwell-Boltzmann. Numarul de ciocniri al moleculelor în unitatea de timp pe unitatea de volum și pe unitatea de suprafață. Corelarea cu presiunea gazului. Fenomene de transport în gaze: curgerea vâscoasă, conductibilitatea termică și difuzia. Teoria generală a fenomenelor de transport. Clasificări ale reactoarelor și reacțiilor chimice. Reacții singulare și rețele de reacții. Definirea și măsurarea vitezei de reacție în sisteme omogene și heterogene. Reacții elementare și rețele de reacții. Ecuații cinetice. Molecularitate și ordin de reacție. Dependența de temperatură a constantei de viteză: activarea termică a moleculelor - teoria Arrhenius, teoria activării prin ciocniri. Teoria modernă a activării tratată prin formalismul funcțiilor de partiție, suprafețe de energie potențială; expresiile: constantei de viteză, factorului preexponențial, factorului steric. Cinetica reacțiilor complexe (opuse, paralele, consecutive). Aproximația de cvasi-staționaritate. Etapă determinantă de viteză, diagrame Tamaru-Boudart. Cinetica reacțiilor chimice în soluție. Corecții termodinamice ale modelului ideal al stării de tranziție. Interacții solut-solvent și solut-solut. Influența solventului asupra unei reacții elementare în soluție. Control cinetic și difuzional. Cinetica reacțiilor catalitice: cataliză omogenă, cataliză enzimatică, cataliză heterogenă. Suprafețe uniforme și neuniforme. Modelul adsorbției ideale: chemosorbție nedisociativă, disociativă, efecte competitive. Aspecte cinetice privind mecanismele fundamentale ale reacțiilor catalitice heterogene.

1. Murgulescu I.G., Segal E., „Introducere în Chimia Fizică”, vol. II.1, „Teoria molecular-cinetică a materiei”, Ed. Academiei Române, 1979
2. Murgulescu I.G., Oncescu T., Segal E., „Introducere în Chimia Fizică”, vol. II.2, „Cinetică Chimică și Cataliză”, Ed. Academiei Române, 1981
4. Poling B. E.; Prausnitz J. M.; O'Connell J. P., “The Properties of Gases and Liquids”; 5th ed. , McGraw-Hill, 2001.
3. Hirschfelder J. O.; Curtiss C. F.; Bird R. B., “Molecular Theory of Gases and Liquids”; John Wiley & Sons, 1954.
5. Laidler K. J., “Chemical Kinetics”; 3rd ed., Prentice Hall, 1987.
6. Boudart M., “Kinetics of Chemical Processes”, Prentice Hall, 1968.
7. Oancea D., “Modelarea cinetică a reacțiilor catalitice”, Ed. All, București, 1998
8. Segal E., Răzuș D. M., Ionescu N., Sălăgeanu I., “Cinetica reacțiilor catalitice eterogene”, vol. I, Ed. Academiei Române, 1992
9. Segal E., Ionescu N., Răzuș D. M., Fătu D., Căldăraru M., “Cinetica reacțiilor catalitice heterogene”, vol. II, Ed. Academiei Române, 1999
10. Fogler H. S., “Elements of Chemical Reaction Engineering”, 4th ed., Prentice Hall, 2006.
11. Boudart M.; Djega-Mariadassou G., “Kinetics of Heterogeneous Catalytic Reactions”, Princeton University Press, 1984.
12. Vannice M. A., “Kinetics of Catalytic Reactions”, Springer, 2005.

2. Fizico-chimia stării solide

Noțiuni introductive. Feromagnetism, antiferomagnetism, ferimagnetism. Modelul Heisenberg. Aplicații ale materialelor magnetice moi și dure. Măsurători în câmp magnetic I: susceptibilitate magnetică: balanță Gouy/Faraday, magnetometru VSM. Materialele supraconductoare: caracteristici, teoria BCS. Magnetometrul SQUID. Măsurători în câmp magnetic II (măsurători electrice) : efect Hall, magnetorezistență. Aplicații practice ale elementelor Hall și ale materialelor magnetorezistive. Măsurători de difracție de raze X: Teoria cinematică a difracției, Informații structurale și texturale. Afinament structural: algoritmul Rietveld pentru date de difracție de raze X pe pulbere. Configurații instrumentale de difracție de raze X (pulbere/monocristal). Tehnici de sinteză a fazelor solide: metode de sinteză în stare solidă; metode de sinteză din soluție; metode speciale; analiza factorilor implicați în fiecare metodă prezentată; alegerea metodei de sinteză pe baza acestora; exemplificări.

1. Munteanu I., “Fizica solidului”, Ed. Universității din București, 2004.
2. Kittel C., “Introduction to Solid State Physics”, 8th ed., John Wiley & Sons, 2005.
3. Vanderah T. A. “Chemistry of Superconductor Materials: Preparation, Chemistry, Characterization and Theory”, Noyes Publications, 1992.
4. Tilley R. J. D., “Crystals and Crystal Structures”, John Wiley & Sons, 2006.
5. Müller U. “Inorganic Structural Chemistry”, 2nd ed., John Wiley & Sons, 2006.
6. Woolfson M. M., “An Introduction to X-ray Crystallography”, 2nd ed., Cambridge University Press, 1997.
7. Pecharsky V. K., Zavalij P. Y., “Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials”, Springer, 2009.
8. Young R. A. (ed), “The Rietveld Method”, Oxford University Press, 1995.

3. Materiale polimerice micro si nanostructurate. Analiză termică.

Noțiuni introductive. Prezentarea metodelor celor mai utilizate. Informații fizico-chimice obținute prin aceste metode (exemple). Reacții heterogene cu participarea fazelor solide. Influența cinetică a proceselor de nucleație și difuzie. Procese heterogene ce au loc în condiții izoterme: deducerea ecuațiilor cinetice, asemănări/deosebiri cu cinetica sistemelor omogene, forma diferențială/integrală a funcției de conversie. Procese heterogene ce au loc în condiții neizoterme: forma ecuației cinetice, problema evaluării integralei de temperatură. Calculul gradului de conversie din date experimentale; clasificarea metodelor de determinare a parametrilor cinetici neizotermi. Metode de determinare a parametrilor cinetici neizotermi din date obținute la o singură viteză de încălzire: metode diferențiale și integrale. Dezavantajele metodelor bazate pe o singură viteză de încălzire. Metode izoconversionale de determinare a valorii energiei de activare: liniare și neliniare. Metode de determinare a expresiei funcției de conversie. Efectul de compensare în cinetica neizotermă. Metoda parametrilor cinetici invariante. Metode speciale.

1. Segal E., Budruga P., Carp O., Doca N., Popescu C., Vlase T., *“Analiză Termică. Fundamente și Aplicații. Analiza cinetică a transformărilor heterogene”*, Ed. Academiei Române, 2013.
2. Haines P. J. (ed), *“Principles of Thermal Analysis and Calorimetry”*, Royal Society of Chemistry, 2002
3. Gabbott P. (ed), *“Principles and Applications of Thermal Analysis”*, Blackwell Publishing, 2008
4. Brown M. E. (ed), *“Handbook of Thermal Analysis and Calorimetry”*, vol.1 – *“Principles and Practice”*, Elsevier 1998
5. Cheng S. Z. D. (ed), *“Handbook of Thermal Analysis and Calorimetry”*, vol.3 – *“Applications to Polymers and Plastics”*, Elsevier 2002
6. Hatakeyama T. , Quinn F.X., *“Thermal Analysis - Fundamentals and Applications to Polymer Science”*, 2nd ed., John Wiley and Sons, 1999
7. Groenewoud W. M., *“Characterisation of Polymers by Thermal Analysis”*, Elsevier, 2001
8. Wunderlich B., *“Thermal Analysis of Polymeric Materials”*, Springer 2005
9. Simon, J. (ed), *“Hot Topics in Thermal Analysis and Calorimetry”*, vol.7 – *“Thermal Decomposition of Solids and Melts”*, Kluwer Academic Publishers, 2007
10. Galwey A. K., Brown M. E., *“Thermal Decomposition of Ionic Solids”*, Elsevier, 1999.

Decan,

Prof. dr. Andrei Valentin MEDVEDOVICI