

**FIȘA DISCIPLINEI****1. Date despre program**

1.1 Instituția de învățământ superior	UNIVERSITATEA “ALEXANDRU IOAN CUZA” DIN IAȘI
1.2 Facultatea	CHIMIE
1.3 Departamentul	ȘCOALA DOCTORALĂ DE CHIMIE
1.4 Domeniul de studii	CHIMIE
1.5 Ciclul de studii	DOCTORAT
1.6 Programul de studii / Calificarea	PROGRAM DE STUDII UNIVERSITARE AVANSATE–ȘCOALA DOCTORALĂ DE CHIMIE / DOCTOR ÎN CHIMIE

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	TEHNICI EXPERIMENTALE, PRELUCRAREA ȘI INTERPRETAREA REZULTATELOR CERCETĂRII – MODULUL I						
2.2 Titularul activităților de curs	[NUME, TITLU ACADEMIC]						
2.3 Titularul activităților de seminar	[NUME, TITLU ACADEMIC] (dacă este cazul)						
2.4 An de studiu	I	2.5 Semestru	1	2.6 Tip de evaluare	*C	2.7 Regimul disciplinei	**OP

*[E – examen / C – colocviu] **[OB – obligatoriu / OP – opțional]

3. Timpul total estimat (ore pe semestru și activități didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	2.25	din care: 3.2. curs	1.25	3.3. seminar	1
3.4 Total ore din planul de învățământ	31.5	din care: 3.5. curs	17.5	3.6. seminar	14
Distribuția fondului de timp					ore
Studiu după manual, suport de curs, bibliografie și altele					10
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					15
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					10
Tutoriat					4.5
Examinări					4
Alte activități					-

3.7 Total ore studiu individual	43.5
3.8 Total ore pe semestru	75
3.9 Număr de credite	3

4. Precondiții (dacă este cazul)

4.1 De curriculum	Absolvirea studiilor universitare de masterat sau echivalent. Înscrierea în ciclul de studii universitare de doctorat în domeniul Chimie, conform regulamentelor Școlii Doctorale.
4.2 De competențe	Competențe de bază de utilizare a limbajului științific specific domeniului Chimie, capacitatea de analiză și interpretare a informațiilor din literatura de specialitate, abilități de documentare și sinteză a datelor științifice, precum și competențe de utilizare a PC-ului și a aplicațiilor de procesare, analiză și prezentare a datelor (cel puțin din pachetul Microsoft Office).

5. Condiții (dacă este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	Săli adecvate desfășurării activităților didactice doctorale, dotate cu echipamente multimedia (videoproector, PC), cu acces la internet și la infrastructura IT instituțională necesară prelucrării și vizualizării datelor experimentale. Respectarea regulamentelor instituționale privind organizarea studiilor universitare de doctorat.
-------------------------------	---

5.2 De desfășurare a laboratorului	Săli adecvate activităților aplicative, cu acces la calculatoare și aplicații software utilizate în prelucrarea, analiza și reprezentarea datelor experimentale. Respectarea regulamentelor instituționale privind organizarea studiilor universitare de doctorat.
---	---

6. Competențe specifice acumulate

Competențe profesionale	- Capacitatea de evaluare critic-constructivă a proiectelor și rezultatelor cercetării științifice, prin raportare sistematică la stadiul actual al cunoașterii teoretice și metodologice din domeniul de specialitate; - Capacitatea de selecție, adaptare și aplicare a principiilor, teoriilor și metodelor avansate de cercetare, inclusiv prin utilizarea abordărilor interdisciplinare, pentru rezolvarea unor probleme științifice noi și complexe; - Capacitatea de explicare, analiză și interpretare avansată a datelor și rezultatelor experimentale, din perspective multiple, în vederea fundamentării concluziilor științifice; - Cunoașterea sistematică și aprofundată a conceptelor și metodelor de cercetare, precum și capacitatea de comunicare și dialog științific cu specialiști din domenii conexe.
Competențe transversale	- Capacitatea de dezvoltare a creativității și a inițiativei în conceperea și derularea proiectelor de cercetare; - Capacitatea de asumare a responsabilității și de organizare a activităților de cercetare, individual și în cadrul unor echipe sau structuri profesionale; - Capacitatea de inițiere, planificare și dezvoltare inovatoare a unor proiecte teoretice și aplicative, în contexte academice și de cercetare avansată.

7. Obiectivele disciplinei (din grila competențelor specifice acumulate)

7.1. Obiectivul general	Formarea capacității doctoranzilor de a identifica, aplica și interpreta metode avansate de prelucrare matematică și statistică a datelor experimentale obținute în cercetarea științifică, precum și de a utiliza instrumente software specializate pentru analiza, vizualizarea și diseminarea riguroasă a rezultatelor cercetării.
7.2. Obiectivele specifice	La finalizarea disciplinei, doctorandul va fi capabil: - să identifice principalele tehnici experimentale generatoare de baze de date complexe și de mari dimensiuni; - să aplice metode adecvate pentru obținerea și analiza corelațiilor dintre datele experimentale; - să utilizeze instrumente software dedicate procesării și gestionării bazelor de date experimentale; - să aplice metode și tehnici de vizualizare și reprezentare grafică a datelor experimentale, în funcție de obiectivele cercetării; - să respecte cerințele privind proprietatea intelectuală și utilizarea responsabilă a programelor specializate în activitatea de cercetare doctorală.

8. Conținut

8.1	Curs	Metode de predare*	Observații (ore și referințe bibliografice)
1.	Tehnici experimentale generatoare de baze de date complexe sau de mari dimensiuni	Prelegere interactivă, explicație, conversație, analiză demonstrativă, problematizare	(4,5 ore, [1-4])
2.	Metode avansate de prelucrare matematică a datelor experimentale brute	Prelegere interactivă, explicație, conversație, analiză demonstrativă, problematizare	(4 ore, [1-4])
3.	Corelarea datelor experimentale utilizând metode statistice și algoritmi matematici	Prelegere interactivă, explicație, conversație, analiză demonstrativă, problematizare	(4,5 ore, [1-4])
4.	Instrumente software pentru facilitarea procesării datelor experimentale	Prelegere interactivă, explicație, conversație, analiză demonstrativă, problematizare	(4,5 ore, [5-7])

*În cazuri de forță majoră, activitățile didactice se pot desfășura prin platforme online, în conformitate cu legislația în vigoare.

Bibliografie

1. Li, X.; Dorman, F. L.; Helm, P. A.; et al. Nontargeted screening using gas chromatography atmospheric pressure ionization mass spectrometry: recent trends and emerging potential. *Molecules*, 26, 6911, **2021**. <https://doi.org/10.3390/molecules26226911>
2. Szabo, F. E. (Ed.) *The Linear Algebra Survival Guide*. Academic Press, Elsevier, **2015**.
3. Pluskal, T.; Castillo, S.; Villar-Briones, A.; Oresic, M. MZmine 2: modular framework for processing, visualizing, and analyzing mass spectrometry-based molecular profile data. *BMC Bioinformatics*, 11, 395, **2010**. <https://doi.org/10.1186/1471-2105-11-395>
4. Jolliffe, I. T.; Cadima, J. Principal component analysis: A review and recent developments. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 374, 20150202, **2016**. <https://doi.org/10.1098/rsta.2015.0202>
5. Norris, G.; Duvall, R.; Brown, S.; Bai, S. EPA Positive Matrix Factorization (PMF) 5.0: Fundamentals and User Guide. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, Washington, DC, **2014**.
6. Wiley. KnowItAll® Software – Spectral Interpretation Tool. Disponibil online la: <https://sciencesolutions.wiley.com/whitepapers-case-studies/>, (accesat în scop educațional).
7. WaveMetrics. Tools for Igor Pro® Users. Disponibil online la: <https://www.wavemetrics.com/users/tools>, (accesat în scop educațional).

8.2	Seminar	Metode de predare*	Observații (ore și referințe bibliografice)
1.	Prelucrarea datelor complexe obținute prin tehnici ale spectrometriei de masă cuplată cu tehnici cromatografice	Conversație, explicație, analiză aplicativă, problematizare	(2 ore, [1-4])
2.	Prelucrarea datelor experimentale brute: medierea datelor, normalizarea datelor, procesarea spectrelor IR, procesarea spectrelor de masă	Conversație, explicație, analiză aplicativă, problematizare	(2 ore, [1-4])
3.	Matricea de corelație, analiza de component principal și factorizarea matricială pozitivă în prelucrarea datelor	Conversație, explicație, analiză aplicativă, problematizare	(2 ore, [1-4])
4.	Programe software implicate în optimizarea procesării datelor: KnowItAll, Igor Pro, Origin, SigmaPlot	Conversație, explicație, analiză aplicativă, problematizare	(2 ore, [4-7])
5.	Utilizarea de programe specializate în analiza datelor KnowItAll, MZmine	Conversație, explicație, analiză aplicativă, problematizare	(2 ore, [4-7])
6.	Posibilități de reprezentare grafică a datelor experimentale utilizând Origin, ChemDraw, CorelDraw	Conversație, explicație, analiză aplicativă, problematizare	(2 ore, [4-7])
7.	Modalități de asigurare a cerințelor privind proprietatea intelectuală în cazul utilizării de programe specializate	Conversație, explicație, analiză aplicativă, problematizare	(2 ore, [4-7])

*În cazuri de forță majoră, activitățile didactice se pot desfășura prin platforme online, în conformitate cu legislația în vigoare.

Bibliografie

1. Szabo, F. E. (Ed.) *The Linear Algebra Survival Guide*. Academic Press, Elsevier, **2015**.
2. Pluskal, T.; Castillo, S.; Villar-Briones, A.; Oresic, M. MZmine 2: Modular framework for processing, visualizing, and analyzing mass spectrometry-based molecular profile data. *BMC Bioinformatics*, 11, 395, **2010**.
3. Jolliffe, I. T.; Cadima, J. Principal component analysis: A review and recent developments. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 374, 20150202, **2016**.
4. Norris, G.; Duvall, R.; Brown, S.; Bai, S. EPA Positive Matrix Factorization (PMF) 5.0: Fundamentals and User Guide. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, Washington, DC, **2014**.
5. WaveMetrics. Introduction to Igor Pro. Disponibil online la: <https://www.wavemetrics.net/doc/igorman/l-01%20Intro.pdf>, (accesat în scop educațional).
6. WaveMetrics. Tools for Igor Pro® Users. Disponibil online la: <https://www.wavemetrics.com/users/tools>, (accesat în scop educațional).

7. OriginLab Corporation. Origin User Guide. Disponibil online la: <https://www.originlab.com/doc/User-Guide>, (accesat în scop educațional).

9. Rezultatele învățării

Cunoaștere și înțelegere	- să explice principiile fundamentale ale tehnicilor experimentale utilizate în cercetarea chimică, cu accent pe generarea datelor experimentale; - să descrie tipurile de date experimentale obținute prin diferite tehnici analitice și experimentale și caracteristicile acestora; - să înțeleagă rolul metodelor matematice și statistice de bază în prelucrarea și interpretarea datelor experimentale; - să recunoască importanța prelucrării riguroase a datelor experimentale pentru validitatea și reproductibilitatea rezultatelor cercetării.
Aplicare și analiză	- să aplice procedee adecvate pentru organizarea, prelucrarea și filtrarea datelor experimentale brute; - să utilizeze metode statistice și instrumente matematice pentru analiza și corelarea datelor experimentale; - să aplice aplicații software specializate pentru procesarea, vizualizarea și interpretarea seturilor de date experimentale; - să analizeze datele experimentale obținute în raport cu obiectivele cercetării și cu tehnicile experimentale utilizate.
Evaluare critică și responsabilitate	- să evalueze calitatea și consistența datelor experimentale obținute prin diferite tehnici experimentale; - să aprecieze impactul metodelor de prelucrare a datelor asupra interpretării și concluziilor științifice; - să manifeste responsabilitate în gestionarea, utilizarea și raportarea datelor experimentale în cadrul cercetării doctorale; - să argumenteze necesitatea respectării bunelor practici în prelucrarea și interpretarea datelor experimentale.
Comunicare academică	- să comunice coerent și argumentat, oral și în scris, rezultatele obținute în urma prelucrării și interpretării datelor experimentale; - să utilizeze limbajul științific specific domeniului Chimie în prezentarea datelor și a rezultatelor cercetării; - să participe activ la discuții academice privind interpretarea și reprezentarea datelor experimentale; - să prezinte sintetic și structurat seturi de date și rezultate experimentale în contexte academice și științifice.

10. Coroborarea conținutului disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității, asociațiilor profesionale și angajatorilor reprezentativi din domeniul aferent programului

Conținutul disciplinei *Tehnici experimentale, prelucrarea și interpretarea rezultatelor cercetării – Modulul I* este corelat cu cerințele mediului academic și ale cercetării științifice, prin dezvoltarea competențelor necesare selecției și utilizării metodelor și instrumentelor de prelucrare a datelor experimentale.

După parcurgerea și promovarea disciplinei, doctorandul va dobândi capacitatea de a selecta și utiliza metode și instrumente adecvate de prelucrare și interpretare a datelor, precum și de a respecta principiile eticii și integrității în cercetare, în procesul de utilizare a acestora pentru redactarea și diseminarea manuscriselor științifice.

11. Evaluare

Tip activitate	11.1 Criterii de evaluare	11.2 Metode de evaluare	11.3 Pondere în nota finală (%)
11.4 Curs	Corectitudinea și coerența răspunsurilor, ca dovadă a înțelegerii și aplicării corecte a problematicei tratate la curs.	Colocviu – prezentare orală privind principalele tehnici experimentale generatoare de baze de date complexe sau de mari dimensiuni.	70
11.5 Seminar	Corectitudinea răspunsurilor și capacitatea de aplicare a	Prezentare – expunere privind utilizarea instrumentelor de	30

	instrumentelor de procesare a datelor în cercetare.	procesare a datelor experimentale în cercetare.	
11.6 Standard minim de performanță			
Pentru promovarea disciplinei, doctorandul trebuie să demonstreze: - capacitatea de identificare a principalelor metode și instrumente de prelucrare și analiză a datelor complexe sau de mari dimensiuni; - capacitatea de alegere și utilizare a unui instrument software adecvat pentru procesarea datelor experimentale specifice domeniului de cercetare doctorală.			

Data completării
26.09.2024

Titular de curs

Titular de seminar

Data avizării

Director Școala Doctorală de Chimie
Prof. univ. dr. habil. Cecilia ARSENE