

Universitatea de Vest din Timișoara

Facultatea de Chimie, Biologie, Geografie

Laboratorul de Cercetare în Chimie-Fizică Structurală și Computațională pentru Nanoștiințe și QSAR (CF-SC-NQ)

2002-2014
12 ani de Excelență în Cercetare
în Chimie-Fizică Structurală, Computațională, Nanoștiințe și QSAR
<< Only healthy ideas can fly all over the world! >>

Direcții de cercetare

Chimie Cuantică și Conceptuală:

- Studiul corelației dintre principiile fundamentale ale mecanicii cuantice și natura cuantică-corporculară a legăturii chimice;
- Studiul reactivității chimice și a indicilor cuantici aferenți, electronegativitatea, tăria chimică, acțiunea chimică, către unificarea analitico-conceptuală a principiilor lor de reactivitate
- Studiul funcțiilor Markoviene de localizare electronică în relație cu legătura chimică în sistemele poliatomice complexe;
- Caracterizarea legăturii chimice prin teoria funcționalei densitate, cu extensia la condensarea Bose-Einstein aplicată bondonilor;
- Studiul delocalizării cuantice a legăturii chimice în modele covalente non-orbitale (bondonic chemistry);
- Aromaticitatea cuantică

Ecotoxicologie Computațională și QSAR:

- Structura cuantică și in silico a moleculelor cu potențial eco- /farmaco- toxicologic și anti-inflamator;
- Analiza QSAR și Spectral-SAR a sistemelor și bateriilor ecotoxicologice;
- Modelarea logistică a reacțiilor enzimă-substrat

Nanosisteme:

- Caracterizarea sistemelor chimice extinse și a tranzițiilor lor de fază cu ajutorul bondonului -quasi-particula cuantică a legăturii chimice;
- Modelarea isomeriilor grafenice prin metode topo-reactivo-bondonice cu defecte topologice (de tip Stone-Wales)

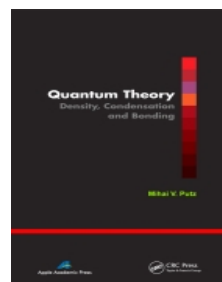
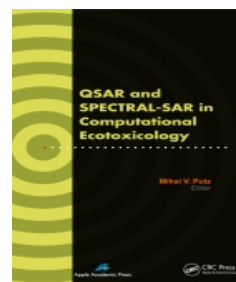
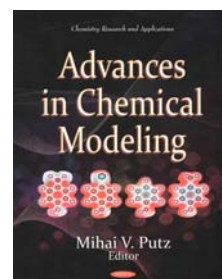
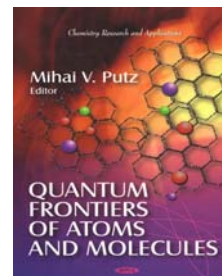
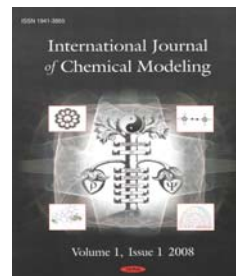
Manifestări științifice co-organizate

- **MATH/CHEM/COMP**, Inter-University Centre, Dubrovnik, Croatia, edițiile XXIII (2008) –XXVI (2011) (<http://mcc.irb.hr>)
- **Chemical Modelling** (Symposium no. 2) în cadrul ICCMSE, 02-07 October 2011, Halkidiki, Greece (http://www.iccmse.org/Sessions_Minisymposia.htm)

Recunoaștere Științifică Internațională

(Jurnale și Cărți):

- *Physical Review E*
- *Journal of Physical Chemistry A*
- *Int. Journal of Quantum Chemistry*
- *Journal of Computational Chemistry*
- *Theoretical Chemistry Accounts*
- *Int. Journal of Molecular Sciences*
- *J. Theor. Comp. Chemistry*
- *MATCH Comm. Math. Comput. Chem.*
- *J. of Molecular Structure: THEOCHEM*
- *Journal of Mathematical Chemistry*
- *Molecules*
- *Chemistry Central Journal*
- *Chemical Physics Letters*
- *Structure and Bonding*
- *The Scientific World Journal*
- *Current Organic Chemistry*



Director Științific: Conf. dr. dr. habil. Mihai V. PUTZ
Str. J. H. Pestalozzi, nr. 16, 300115, Timișoara
Tel: 0256-592638, Fax: 0256-592620

Em: mv_putz@yahoo.com, URL: www.mvputz.iqstorm.ro

2002-2014
12 ani de Excelență în Cercetare
în Chimie-Fizică Structurală, Computațională, Nanoștiințe și QSAR
<< Only healthy ideas can fly all over the world! >>

Proiecte internaționale:

- **STOCHASTIC ANALYSIS OF THE OPEN SYSTEMS WITH THE FOKKER-PLANCK EQUATION BY PATH INTEGRALS**; grant DAAD 322 A/04/17690, Institute of Theoretical Physics, Free University of Berlin (2004);
- **BOSE-EINSTEIN CONDENSATION IN RANDOM POTENTIALS**; Center for International Cooperation (CIC), Institute of Theoretical Physics, Free University of Berlin (2010);
- **DENSITY FUNCTIONAL THEORY OF BOSE-EINSTEIN CONDENSATION FOR THE QUASIHOMOGENEOUS SYSTEMS**; grant DAAD 322A/11/05356, Institute of Theoretical Physics, Free University of Berlin (2011).

Proiecte naționale:

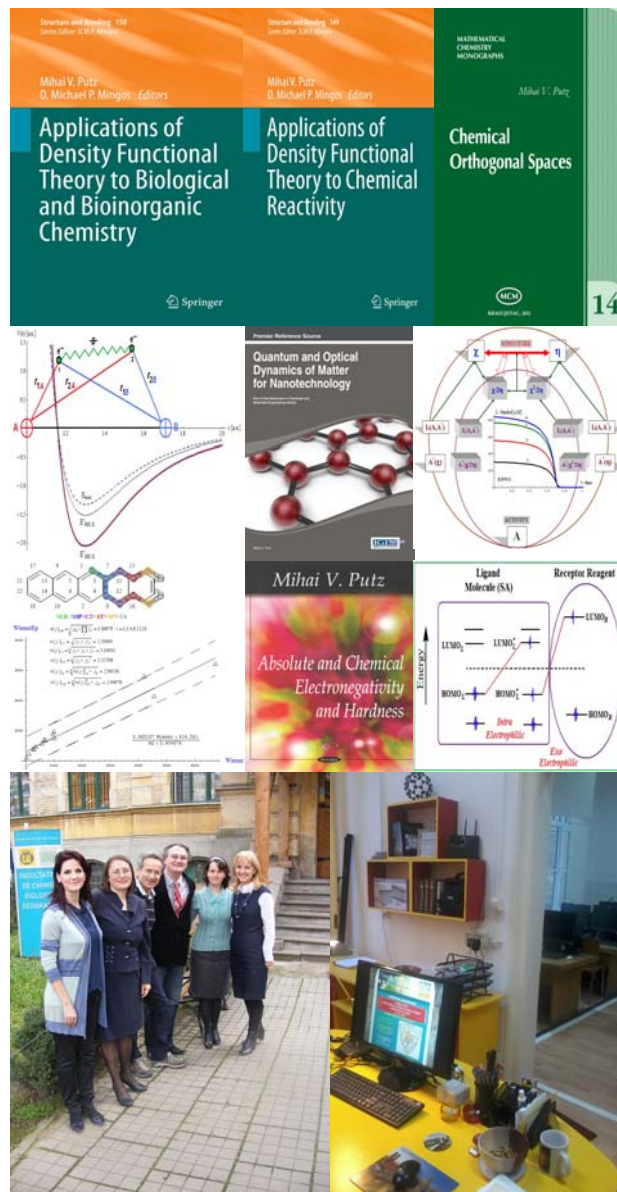
- **UNIFICAREA CUANTICĂ A LEGĂTURII CHIMICE PRIN FUNCȚIONALĂ DENSITATE A ELECTRONEGATIVITĂȚII ȘI FUNCȚIA DE LOCALIZARE ELECTRONICĂ CU APLICAȚII LA REACTIVITATEA NANOSISTEMELOR NATURALE COMPLEXE**; grant CNCSIS: AT54/2006-2007
- **CUANTIFICAREA LEGĂTURII CHIMICE ÎN SPAȚII ORTOGONALE DE REACTIVITATE. APLICAȚII LA MOLECULE DE INTERES BIO-, ECO-, ȘI FARMACO-LOGIC**; grant CNCS-UEFISCDI: TE16/2010-2013 (<http://mvputz.iqstorm.ro/g1.php>).

Doctorate Tutorate:

- susținute la Universitatea de Vest din Timișoara, 2007, 2009, 2010, 2011;
- susținute la Universitatea de Medicină și Farmacie "Victor Babeș" din Timișoara, 2010, 2012.

Doctorate Coordonate:

- susținere la Universitatea de Vest din Timișoara (2013)



Recunoaștere Științifică Națională

Mihai V. PUTZ, lider laborator cercetare:

- Cercetătorul Eminent al Timișoarei (2008)
 - Cercetătorul Anului (2010)
 - Cercetătorul Anului (2011) la UVT.
 - Abilitare Conducere de Doctorat (2013)
- Laboratorul de cercetare CF-SC-NQ:**
- Acreditare la Nivelul Senatului UVT (2013)

Director Științific: Conf. dr. dr. habil. Mihai V. PUTZ
 Str. J. H. Pestalozzi, nr. 16, 300115, Timișoara
 Tel: 0256-592638, Fax: 0256-592620

Em: mv_putz@yahoo.com, URL: www.mvputz.iqstorm.ro

