

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea de Vest din Timișoara
1.2 Facultatea / Departamentul	Chimie, Biologie, Geografie / Biologie-Chimie
1.3 Catedra	Biologie-Chimie
1.4 Domeniul de studii	Chimie medicală
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studii / Calificarea	Chimie medicală
1.7 Cod Curs/Planul de învățământ	CBGBCC57

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Bio-si Nano-materiale						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. univ. dr. dr.-habil. MIHAI V. PUTZ						
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof. univ. dr. dr.-habil. MIHAI V. PUTZ						
2.4 Anul de studiu	III	2.5 Semestrul	2	2.6 Tipul de evaluare	Ex	2.7 Regimul disciplinei	DS/DO

3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	48	din care: 3.5 curs	24	3.6 seminar/laborator	24
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					12
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate / pe teren					16
Pregătire seminarii / laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat					9
Examinări					10
Alte activități (traduceri, conspecte, conferințe studentesti, prezenta la evenimente științifice UVT, vizite ghidate la institute/laboratoare de cercetare in chimie-fizica structurala, voluntariat in popularizarea stiintei, etc.)					16
3.7 Total ore studiu individual	77				
3.8 Total ore pe semestru	125				
3.9 Numărul de credite	5				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> Structura și proprietățile moleculelor, Matematică, Fizică
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> Cunoștințe de limba Engleză și de informatică

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> Sală curs (optional și On-line sincron)
5.2 de desfășurare a seminarului/laboratorului (fata-in-fata)	<ul style="list-style-type: none"> Sală de seminar, rețea de conexiuni la computere/laptop, acces internet
5.3 Documentarea activităților on-line	<ul style="list-style-type: none"> Este recomandat ca Studenții să aibă un instrument de accesare digitală on-line/web în vederea urmăririi interactive a materialelor digitale pe toată durata activității didactice Accesarea materialelor activităților didactice se va face prin pagina specifică de pe Classroom (cu link conectare on-line de tip meet pentru prezentarea sincronă a materialelor digitale)

6. Obiectivele disciplinei - rezultate așteptate ale învățării la formarea cărora contribuie parcurgerea și promovarea disciplinei

Cunoștințe	<ul style="list-style-type: none"> C1 Cunoașterea și înțelegerea conceptelor, abordărilor, teoriilor, metodelor și modelelor elementare privitoare la compoziții chimice, biochimice și farmaceutice. C2 Explicarea și interpretarea unor noțiuni fundamentale, concepte, teorii, modele și proprietăți.
Abilități	<ul style="list-style-type: none"> A2 Reflecția critică și constructivă pentru rezolvarea de probleme și situații în activitatea de analiză-cercetare și la locul de muncă;
Responsabilitate și autonomie	<ul style="list-style-type: none"> RA3 Capacitatea de a lucra în echipă sau în grup.

7. Conținuturi

7.1 Curs (Tematica poate fi actualizată din partea cadrului didactic, în relație cu studenții curenți, pe parcurs)	Metode de predare	Observații
1. Paradigma cristalină a materiei. De la Atomul cubic la cristalele de proteine.	<ol style="list-style-type: none"> Prezentări orale Prelegere participativă 	Se combină metodele creative de predare interactivă:

<p>2. Introducere în Cristalo-chimie. Spațiul reciproc; rezoluția electro-nucleară a nanoși bio-materialelor.</p>	<p>3. Dezbateră</p>	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Brainstorming sau asaltul de idei:</i> formularea a cât mai multor idei – oricât de fanteziste ar putea părea acestea – ca răspuns la o situație enunțată, după principiul „cantitatea generează calitatea”.
<p>3. Cristalul Cuantic. Legătura covalentă extinsă. Legătura Metalică. De la împachetări cristaline la topologia ADN-ului.</p>	<p>4. Demonstrația logică, matematică, fizică, și computațională</p>	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Bulgărele de zăpadă:</i> reducerea numărului de elemente, aspecte, fațete ale unei probleme pentru focalizarea asupra celor esențiale
<p>4. Metrica Stării Cristaline. De la factorul de Structură la structura bio-nano-materialelor.</p>	<p>5. Exemplificarea</p>	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Carduri de aplicații:</i> După ce studenții au fost introduși într-un principiu, generalizare, teorie sau procedură, studenții primesc cartonașe pe care să noteze cel puțin o posibilă aplicare a ceea ce au învățat în lumea reală.
<p>5. Teorema Bloch și orbitalii cristalini. De la cristalul cuantic la micro-circuite integrate; bio- și nano- compatibilitatea electronică.</p>		<ul style="list-style-type: none"> • <i>Ciorchinele:</i> metodă de brainstorming neliniară care stimulează găsirea conexiunilor dintre idei.
<p>6. Potențiale Cristaline. Modelul electronic al electronilor legați în cristal.</p>		<ul style="list-style-type: none"> • <i>Diagrama os de pește</i> (sau echivalent): problema ce trebuie rezolvată este notată în „capul” peștelui, apoi sunt înșirate cauzele, de-a lungul „oaselor” și împărțite pe categorii. Cauzele suplimentare pot fi adăugate pe noi ramificații.
<p>7. Câmpul cristalin. Originea separării orbitalilor tetralobari. Modelul cuantic al câmpului cristalin.</p>		<ul style="list-style-type: none"> • <i>PBL - Problem Based Learning:</i> tema este prezentată sub forma unei probleme de rezolvat de către studenți care au mijloacele și informațiile necesare la dispoziție. Profesorul acționează ca un ghid și se abține să ofere un răspuns gata fabricat.
<p>8. Grupuri Spațiale și Simetria Cristalină. Difracția cu Raze X. Spectre caracteristice. Legea Bragg. Difractograme și Lauegrame.</p>		<ul style="list-style-type: none"> • <i>Pictionary:</i> Profesorul notează pe bilețele concepte importante, un student va extrage un bilețel și va trebui să reprezinte graphic conceptul, restul grupei având sarcina de a recunoaște despre ce este vorba.
<p>9. Rețeaua Reciprocă. Celula Bravais. Indicii Miller. Legea Zonelor. Factorul de Structură și determinarea structurii cristaline.</p>		
<p>10. Descrierea semiempirică a sistemelor multi-electronice-poli-electronice. Difracția în raze X pe cristale. Difracția în cristalul perfect. Unde staționare. Absorbția Anomală. Efectul Bormann cuantic.</p>		
<p>11. Benzi energetic în Cristale. Modelarea structurală de nano-structuri și nano-materiale.</p>		
<p>12. Sisteme extinse cristaline. Defecte cristaline și propagarea acestora. Cazul PAH-urilor.</p>		
<p>13. Sisteme extinse cristaline. Modelul statistic Ising. Tranzitii de fază. Cazul grafenelor.</p>		

14. Legătura chimică cuantică în bio- și nano-materiale. Cazul mașinilor moleculare.		
Bibliografie (poate fi actualizată din partea cadrului didactic sau a studenților, pe parcurs) <ul style="list-style-type: none"> • Putz M.V. (2016) QUANTUM NANOCHEMISTRY. A Fully Integrated Approach: Vol I. QUANTUM THEORY AND OBSERVABILITY. Apple Academic Press & CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA .pp. 651+index; ISBN: 978-1-771881-33-3; URL: http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=9781771881333 • Putz M.V., Mirică M.C. (Editori) (2016) SUSTAINABLE NANOSYSTEMS DEVELOPMENT, PROPERTIES, AND APPLICATIONS IGI Global, Hershey Pasadena, USA; pp. 794+index; DOI: 10.4018/978-1-5225-0492-4; ISBN13: 9781522504924; ISBN10: 1522504923; EISBN13: 9781522504931; URL: http://www.igi-global.com/book/sustainable-nanosystems-development-properties-applications/147016 • Putz M.V. (Editor), Advances in Quantum Chemical Bonding Structures, Research Signpost, Kerala, India, in press, pag. 400; ISBN: 978-81-7895-306-9, http://www.trnres.com/putz.htm. • Putz M.V., Structura Nanosistemelor Cuantice, pag. 263; ISBN: 973-125-006-9, Editura Universității de Vest, Timișoara 2006. • Boeyens JCA, New Theories for Chemistry, pag. 279, ISBN: 978-0-444-51867-5, Elsevier, 2005, http://www.sciencedirect.com/science/book/9780444518675. • Chiriac V, Putz MV, Chiriac A, Cristalografie, Editura Universității de Vest, Timișoara, pag. 335; ISBN: 973-7608-39-9, 2005. • Birău O, Putz M.V., Conceptul "Standing Waves" în Teoria Dinamică a Difrakției cu Raze X, Mirton, Timișoara, pag. 111; ISBN: 973-585-137-7, 2000. • Putz M.V. Electronic Density from Structure Factor Determination in Small Deformed Crystals, International Journal of Quantum Chemistry, 94(4) (2003) 222-231. • Putz M.V., Lacrămă AM, Cunoașterea Sistemelor Naturale Complexe, Editura Mirton, Timișoara, pag. 170; ISBN: 973-661-541-3, 2005. • Putz M.V., Lazea M., Chiriac A. Introducere în Chimie-Fizică. Structura și Proprietățile Atomilor și Moleculilor, Editura Mirton, Timișoara, pag. 270; ISBN: 978-973-52-0812-7, 2010. • Putz M.V. The Bondons: The Quantum Particles of the Chemical Bond, International Journal of Molecular Sciences, 11(11) (2010) 4227-4256. • Putz M.V. (Editor) Carbon Bonding And Structures: Advances In Physics And Chemistry, Springer Verlag, London, 2011, Pp. 450, ISBN: 978-94-007-1732-9; Carte inclusă în Seria „Carbon Materials: Chemistry And Physics” (Series Editors: Franco Cataldo, Paolo Milani), Series ISSN: 1875-0745. 		
7.2 Seminar / laborator (Tematica poate fi actualizată din partea cadrului didactic, în relație cu studenții curenți, pe parcurs)	Metode de predare	Observații
Natura cuantică a interacțiilor specifice: de la undele de materie la celula cuantică. Viața ca informație sau entropie cuantică. Evoluția ca statistică a selecției naturale.	<ol style="list-style-type: none"> 1) Prezentari orale 2) Experimente de calculator individuale 3) Rezolvări de probleme 4) Eseuri creative, 	Se combină metodele creative de seminarizare interactivă: <ul style="list-style-type: none"> • <i>Discurs improvizat:</i> Studenții scriu cuvinte cheie, iar acestea se pun într-un bol. Un student

<p>Forțe intermoleculare. Constante dielectrice. Momentul de dipol. Legătura de hidrogen. Mobilitatea protonică și conceptul de feliitate protonică.</p>	<p>formative</p>	<p>(auto)desemnat va extrage un bilețel și va trebui să își construiască un monolog pe care să îl expună în 30 de secunde.</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Discuția de tip panel</i> (sau echivalent): utilizarea unui grup mic (de șase persoane) de personae competente și/sau reprezentative care formează panelul. Aceste personae analizează și dezbat o problemă, în timp ce profesorul intervine prin mesaje scrise. • <i>Eseul de 5 minute</i> (la început și finalul orei). La finalul orei studentul scrie un lucru pe care l-a învățat din cursul respective și formulează o întrebare pe care o găsește în legătura cu acesta (acest tip de întrebări vor fi ulterior dezbătute, folosite la selecția studenților pentru cercetare științifică, cooptare în grupuri de cercetare, etc.) • <i>Mini-prezentări</i>: studentul se folosește de mijloacele audio-vizuale pentru a prezenta un subiect pe care l-a studiat în prealabil sau chiar l-a învățat. Ceilalți colegi trebuie să întrețină discuția punând întrebări și adăugând informații suplimentare.
<p>Membrane celulare. Membrane cristaline și hexatice. Membrane fluidice: modelul Canham-Helfrich. Parametrizarea Monge. Aproximația Armonică. Termeni anarmonici și renormalizarea cuantică. Fluctuații cuantice.</p>		
<p>Termodinamică și statistică cuantică. De la conservarea energiei la mutații, spontaneitate, probabilitate de reactivitate chimică și activitate biologică. Haos și procese sinergetice în biomolecule.</p>		
<p>Modelul cuantic al codului genetic. Modelul cuantic al evoluției celulare.</p>		
<p>Elemente de topologia ADN-ului. Modelarea structurii covalente a proteinelor prin teoria nodurilor (knot theory).</p>		
<p>Teoria catastrofelor. Sistemele micro-biologice ca sisteme dinamice.</p>		
<p>Atractori și competiția Hamiltonianului dinamic. Modelarea morfogenezei celulare. Cinetica formelor în embriologie.</p>		
<p>Controlul cuantic al transcripțiilor și clonărilor. Modelare statistică în genetică. Teoria Priggogine a sistemelor la nonechilibru.</p>		
<p>Biocompatibilitate, stabilitate și tranziții de tip „helix-coil”. Configurația statistică a lanțurilor polimerice.</p>		
<p>Reglarea activității biologice. Reacții alosterice. Activatori și inhibitori. Modelarea cineticilor biochimice prin tunelarea cuantică a grupărilor protonice.</p>		
<p>Bibliografie(poate fi actualizată din partea cadrului didactic sau a studenților, pe parcurs)</p> <ul style="list-style-type: none"> • Putz M.V. (2020) (Editor) <i>New Frontiers in Nanochemistry: Concepts, Theories, and Trends</i>, 3- 		

Volume Set: Volume 1: Structural Nanochemistry. Volume 2: Topological Nanochemistry. Volume 3: Sustainable Nanochemistry. Apple Academic Press & CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA. pp. 1479+index; ISBN: 978-1-771887-80-9; URL:

<http://www.appleacademicpress.com/new-frontiers-in-nanochemistry-concepts-theories-and-trends-3-volume-set-volume-1-structural-nanochemistrybrvolume-2-topological-nanochemistrybrvolume-3-sustainable-nanochemistry/9781771887809>

- **Putz M.V., ORI O.** (Editori) (2015) *EXOTIC PROPERTIES OF CARBON NANOMATTER: ADVANCES IN PHYSICS AND CHEMISTRY* Springer Verlag, Dordrecht, NL, pp. 398; ISBN: 978-94-017-9566-1; Book included as Vol.8 in the SERIES „CARBON MATERIALS: CHEMISTRY AND PHYSICS” (Series Editors: Franco Cataldo, Paolo Milani), Series ISSN: 1875-0745; URL: <http://www.springer.com/chemistry/theoretical+and+computational+chemistry/book/978-94-017-9566-1>
- Maitland GC, Rigby M, Smith EB, Wakeham WA, Intermolecular Forces-Their Origin and Determination, Clarendon Press, Oxford, 1987.
- Cantor CR, Schimmel PR, Biophysical Chemistry. I. The Conformation of Biological Macromolecules, W.H. Freeman and Co., San Francisco, 1980.
- Patel A (2001), Quantum Algorithms and the Genetic Code, IISc-CTS-2/00, arXiv: quant-ph/0002037, 2001, pp. 1-11.
- Cantor CR, Schimmel PR, Biophysical Chemistry. III. The Behavior of Biological Macromolecules, W.H. Freeman and Co., San Francisco, 1980.
- Wu FY, Knot Theory and Statistical Mechanics, Rev. Mod. Phys. 1992, Vol. 64, No. 4, pp. 1099-1131.
- Wu FY, The Potts Model, Rev. Mod. Phys. 1982, Vol. 54, No. 1, pp. 235-268.
- Voet D, Voet JG, Biochemistry, John Wiley & Sons, New York, 1995.
- Cramer RD III, Patterson DE, Bunce JD, Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA). 1. Effect of Shape on Binding of Steroids to Carrier Proteins, J. Am. Chem. Soc. 1988, Vol. 110, No. 18, pp. 5959-5967.
- Thom R, Structural Stability and Morphogenesis – An Outline of a General Theory of Models, W.A. Benjamin Inc., Reading, Mass., 1975.
- Copeland RA, Enzymes-A Practical Introduction to Structure, Mechanism, and Data Analysis (second edition), Wiley-VCH, New York, 2000.

8. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

- Analiza moleculară, urmată de proiectarea asistată de calculator, permite interpretarea generală a unui sistem molecular ca o colecție de nuclee și de electorni în interacție fizică, dublată de o colecție de de atomi în interacție chimică prin intermediul stărilor orbitale de frontieră. De aici importanța considerării stereo-structurilor bazate pe proprietățile electronice de frontieră în atomi și molecule.
- Conținutul tematic al disciplinei urmărește să asigure instrumentele matematice, fizice, chimice și computaționale necesare abordării interdisciplinare a structurii moleculare (reale sau virtual-proiectate) într-un ansamblu de metaboliți sau serii omoloage cu acțiune biologică, ecotoxicologică, sau farmacoforă.
- Abilitati de comunicare orala si scrisa
- Abilitati de interpretare a rezultatelor obținute și de corelare cu datele de literatură.

- Capacitatea de adaptare la situatii noi.
- Capacitatea de a utilizare a metodelor specifice de investigare.
- Capacitatea de a transpune in practica cunostintele dobandite
- Abilități de dezvoltare a unui studiu/comentariu/caracterizare la nivel interdisciplinar
- Capacitatea de evaluare și autoevaluare critica
- Preocuparea pentru obținerea calității si autoperfectionare
- Respectarea proprietatii intelectuale.

9. Evaluare

Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare	9.2 Metode de evaluare	9.3 Pondere din nota finală
9.4 Curs	Coroborarea conținutului științific al cursului cu o temă științifică de actualitate	Realizare și prezentare eseu științific	25%
9.5 Seminar / laborator	Evaluarea periodică, teme și realizare eseu științific		25%
9.6 Examen	Test (eventual Grila) cu întrebări și probleme din temele predate, discutate, și studiate	Evaluare sintetică/scris	50%
9.7 Standard minim de performanță: Obținerea notei minime de 5 la punctele 9.4-9.6			

Data completării
27.02.2023

Titular de disciplină
Prof. univ. dr. dr.-habil. Mihai V. Putz

Data avizării în departament
27.02.2023

Director de departament
Lect.univ.dr. Adrian Sinitean