FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituţia de învăţământ 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
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studii / Calificarea	Chimie
1.7 Cod Curs/Planul de învățământ	CBGBCC47

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Chimie cuantică						
2.2 Titularul activităţilor de curs	Prof. univ. dr. dr.-habil. MIHAI V. PUTZ						
2.3 Titularul activităţilor de seminar	Prof. univ. dr. dr.-habil. MIHAI V. PUTZ						
2.4 Anul de studiu	III	2.5 Semestrul	1	2.6 Tipul de evaluare	Ex	2.7 Regimul disciplinei	DF/DO

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	3	din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	1
3.4 Total ore din planul de învăţământ	42	din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	14
Distribuţia fondului de timp:					**ore**
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie şi notiţe					14
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate / pe teren					14
Pregătire seminarii / laboratoare, teme, referate, portofolii şi eseuri					14
Tutoriat					14
Examinări					8
Alte activităţi (traduceri, conspecte, conferinte studentesti, prezenta la evenimente stiintifice UVT, vizite ghidate la institute/laboratoare de cercetare in chimie-fizica structurala, voluntariat in popularizarea stiintei, etc.)					19
3.7 Total ore studiu individual	**83**				
3.8 Total ore pe semestru	**125**				
3.9 Numărul de credite	**5**				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	• Structura și proprietățile moleculelor, Matematică, Fizică
4.2 de competenţe	• Cunoștiințe de limba Engleză și de informatică

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfăşurare a cursului	• Sală curs/On-line- pe Google Meet (in functie de statusul Stare de Alerta/COVID-19 în timp real)
5.2 de desfăşurare a seminarului/laboratorului	• Sală de seminar, retea de computere, acces internet (in functie de statusul Stare de Alerta/COVID-19 în timp real)
5.3 de desfășurare a activităților on-line	• Studenții să aibă camera web pornită și să se afle într-un spațiu adecvat studiului pe toată durata activității didactice • Accesarea activitățilro didactice se va face prin utilizarea unui dispozitiv electronic care să permită participarea activă a studentului în plen și pe grupe, precum și realizarea în timp real a sarcinilor de lucru

6. Obiectivele disciplinei - rezultate aşteptate ale învăţării la formarea cărora contribuie parcurgerea și promovarea disciplinei

Cunoștințe	• **C1** Cunoașterea si înțelegerea conceptelor, abordărilor, teoriilor, metodelor si modelelor elementare privitoare la compușii chimici. • **C2** Explicarea si interpretarea unor noțiuni fundamentale, concepte, teorii, modele si proprietăți.
Abilități	• **A2** Reflecția critică și constructivă pentru rezolvarea de probleme și situații în activitatea de analiză-cercetare și la locul de muncă;
Responsabilitate și autonomie	• **RA3** Capacitatea de a lucra în echipă sau în grup.

7. Conținuturi

7.1 Curs **(Tematica poate fi actualizată din partea cadrului didactic, in relație cu studenții curenți, pe parcurs)**	**Metode de predare**	**Observaţii**
Formalismul cuantic al integralei de drum Feynman: ecuația de propagator, ecuația undelor de Broglie-Schrodinger	• Prezentări orale • Prelegere participativa • Dezbaterea • Demonstrația logică, matematică, fizică, și computationala • Exemplificarea	Se combină metodele creative de predare interactivă: • *Brainstorming sauasaltul de idei*: formularea a cât mai multor idei – oricât de fanteziste ar putea părea acestea – ca răspuns la o situaţie enunţată, după principiul „cantitatea generează calitatea“. • *Bulgărele de zăpadă*: reducerea numărului de elemente, aspecte, faţete ale unei problem pentru focalizarea asupra celor esenţiale • *Carduri de aplicaţii*: 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. • *Ciorchinele*: metodă de brainstorming neliniară care stimulează găsirea conexiunilor dintre idei. • *Diagrama os de pește* (sau echivalent): problema ce trebuie rezolvată este notată în ,,capul" peştelui, apoi sunt înşirate cauzele, de-a lungul ,,oaselor" şi împărţite pe categorii. Cauzele suplimentare pot fi adăugate pe noi ramificaţii. • *PBL - Problem Based Learning*: tema este prezentată sub forma unei probleme de rezolvat de către studenți care au mijloacele şi informaţiile necesare la dispoziţie. Profesorul acţionează ca un ghid şi se abţine să ofere un răspuns gata fabricat. • *Pictionary*: Profesorul notează pe bilețele concept importante, un student va extrage un bilețel și va trebui să reprezinte graphic conceptul, restul grupei avînd sarcina de a recunoaște despre ce este vorba.
Structura materiei cu integrala de drum cuantică: proprietățile generale ale integralei de drum, cazul particulei libere, oscilatorul armonic, regăsirea atomului Bohr, tratarea mișcării în groapa de potențial		
Matricea densității electronice cu integrala de drum: matricile mono-electronice, multi-electronice, și relațiile de reducere; densitatea electrinică canonică, ecuația lui Bloch		
Metode self-consistente in chimia cuantică: abordarea orbitalilor atomici, abordarea Roothaan, aproximații semi-empirice (metodele NDO, NDDO)		
Metode ab-initio in chimia cuantică: metoda Hartree-Fock, energia de corelare, Teorema Orbitalilor Koopman		
Teoria funcționalei densitate: teoremele Hohenberg-Kohn, funcționale populare ale densității electronice (cinetică, de schimb, de corelare, de schimb și corelare)		
Observabilitate in chimia cuantică: integrale de drum periodice, relația de incertitudine Heisenberg extinsă, metoda informației cuantice spectrale (IQ-Spectral)		
Alicații ale chimiei cuantice: strucura atomilor, moleculelor, corpurilor și suprafețelor solide, sisteme nano-cuantice, grafenul, mesosisteme de tip sol-gel pe baza de siliciu, puncte cuantice in sisteme fotovoltaice, etc..		
Bibliografie **(poate fi actualizată din partea cadrului didactic sau a studenților, pe parcurs)**		

- **Putz M.V.** (2016) ***QUANTUM NANOCHEMISTRY. A Fully Integrated Approach: Voll. 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 A.M.,Putz M.V. (2012)** Spectral inverse quantum (Spectral-IQ) method for modeling mesoporous systems. application on silica films by FTIR. *Int. J. Mol. Sci.* 13(12):15925-15941 (DOI:10.3390/ijms131215925).
- **Putz M.V.** (2008) Density functionals of chemical bonding. *Int. J. Mol. Sci.* 9(6): 1050-1095 **Putz M.V.**(2009) Path integrals for electronic densities, reactivity indices, and localization functions in quantum systems. *Int. J. Mol. Sci.* 10(11):4816-4940 (DOI: 10.3390/ijms10114816).
- **Putz M.V.** (2010) On Heisenberg uncertainty relationship, its extension, and the quantum issue of wave-particle dualit. *Int. J. Mol. Sci.* 11(10):4124-4139 (DOI: 10.3390/ijms11104124)
- **Putz M.V.** (2013) Koopmans' analysis of chemical hardness with spectral like resolution. *The Scientific World Journal*, 2013:348415/14 pages (DOI: 10.1155/2013/348415).
- **Putz M.V.**; Chiriac A. (2008) Quantum perspectives on the nature of the chemical bond. In:Putz M.V. (Ed.), *Advances in Quantum Chemical Bonding Structures*,Transworld Research Network, Kerala, pp. 1–43.
- Lowe J.P, Peterson K.A. (2006) QUANTUM CHEMISTRY (3rd. Edition). Elsevier-Academic Press, Amsterdam.

7.2 Seminar / laborator (Tematica poate fi actualizată din partea cadrului didactic, in relație cu studenții curenți, pe parcurs)	**Metode de predare**	**Observaţii**
Natura cuantică (post)moderna a legaturii chimice	• Prezentari orale • Experimente de calculator idividuale • Rezolvari de probleme • Eseuri creative, formative	Se combină metodele creative de seminarizare interactivă: • *Discurs improvizat*: Studenții scriu cuvinte cheie, iar acestea se pun într-un bol. Un student (auto)desemnat va extrage un bilețel și va trebui să își construiască un monolog pe care să îl expună în 30 de secunde. • *Discuţia de tip panel* (sau echivalent): utilizarea unui grup mic (de şase persoane) de personae competente şi/sau reprezentative care formează panelul. Aceste personae analizează şi dezbat o problemă, în timp ce profesorul intervine prin mesaje scrise. • *Eseul de 5 minute* (la inceput și finalul orei). La finalul orei scrie un lucru pe care l-au învăţat din cursul respective şi să formulize o întrebare pe care o mai au în legătura cu acesta (acestea vor fi ulterior dezbatute, folosite la selecția
Teoria legăturii de valență: aproximația adiabatică, teorema virialului		
Teoria orbitalilor moleculari: necesitatea particulei cuantice a legăturii chimice		
Ce este câmpul (cuantic) chimic.		
Prezicerea existenței bondonului – particula cuantică a legăturii chimice în câmpul cuanto-chimic al sistemelor legate		
Legătura chimică cuantică cu teoria bondonului: consistența cu ecuația Schrodinger și Dirac pentru fermioni		
Condensatul cuantic al legăturii chimice		
Aproximația densității locale: ecuația Bogoliubov-Landau-Thomas-Fermi		
Condensarea bondonică în teoria Heitler-London a legăturii chimice. Generalizarea bondonică a orbitalilor moleculari. Aplicații pe sisteme grafenice și topologice extinse		

		studenților pentru cercetare științifică, cooptare in grupuri de cercetare, etc.) • *Mini-prezentări*: 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.

Bibliografie
(poate fi actualizată din partea cadrului didactic sau a studenților, pe parcurs)

- **Putz M.V.** (2020) (Editor) *New Frontiers in Nanochemistry: Concepts, Theories, and Trends, 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.** (2015) *QUANTUM NANOCHEMISTRY. A Fully Integrated Approach: Vol III. QUANTUM MOLECULES AND REACTIVITY* Apple Academic Press & CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA pp. 579+index; ISBN: 978-1-771881-35-7; URL: http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=9781771881357
- **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
- **Putz M.V.** (2012) *Quantum Theory: Density, Condensation, and Bonding*, Apple Academics, Toronto, Canada.
- **Putz M.V.(2012)**Density functional theory of Bose-Einstein condensation: road to chemical bonding quantum condensate. *Structure and Bonding* 149: 1-50 (DOI: 10.1007/978-3-642-32753-7_1)
- **Putz M.V.** (2011) Conceptual density functional theory: from inhomogeneous electronic gas to Bose-Einstein condensate, In: Putz M.V. (Ed.), *Chemical Information and Computational Challenges in 21st Century. A Celebration of 2011 International Year of Chemistry*, NOVA Science Publishers, Inc., New York, Ch. 1, pp. 1-60.
- **Putz M.V.** (2011) Conceptual density functional theory: from inhomogeneous electronic gas to Bose-Einstein condensates. In: *Chemical Information and Computational Challenges in 21st Century,* Putz M.V. (Ed.), NOVA Science Publishers, Inc., New York, Chapter 1, pp.1-60.
- **Putz M.V.** (2011) Hidden side of chemical bond: the bosonic condensate. In *Advances in Chemistry Research. Volume 10*, Taylor J.C. (Ed.),NOVA Science Publishers, Inc., New York, Chapter 8, pp. 261-298.
- **Putz M.V.** (2011) Fulfilling the Dirac's promises on quantum chemical bond, In: *Quantum Frontiers of Atoms and Molecules*, Putz M.V. (Ed.), NOVA Science Inc., New York, Chapter 1, pp.1-20.
- **Putz M.V.** (2010) The bondons: the quantum particles of the chemical bond. *Int. J. Mol. Sci.* 11(11):4227-4256.
- **Putz M.V.** (2010) Beyond quantum nonlocality: chemical bonding field.*Int. J. Environ. Sci.* 1: 25-31.
- **Putz M.V.** (2007) Can quantum-mechanical description of chemical bond be considered complete? In: Kaisas M.P. (Ed.), *Quantum Chemistry Research Trends*, Nova Science Publishers Inc., New York, Expert Commentary.

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

- Intelegerea corespunzătoare principiilor mecanicii cuantice care stă la baza explicării structurii atomului si moleculei.
- Capacitatea de a modela formarea legăturilor chimice între atomi, folosind diferitele teorii (Teoria legăturii de valență, Teoria orbitalilor moleculari, etc.)
- Abilitati de comunicare orala si scrisa
- Abilitati de interpretare a rezultatelor obţinute şi de corelare cu datele de literatură.
- Capacitatea de adaptare la situatii noi.
- Capacitatea de a utilizare a metodelor specfice de investigare.
- Capacitatea de a transpune in practica cunostintele dobandite
- Abilităţi de dezvoltare a unui studiu/comentariu/caracterizare la nivel interdisciplinar
- Capacitatea de evaluare şi autoevaluare critica
- Preocuparea pentru obţinerea calităţii 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	Eseu (scris) și raspuns (oral) la examen	Examen scris si oral	25%
	Activitate și testare pe parcursul semestrului	Evaluare scrisă și orală	25%
9.5 Seminar / laborator	Activitate și testare pe parcursul semestrului	Evaluare scrisă și orală	25%
	Realizare eseuri pe baza materialelor bibliografice oferite de profesor sau căutate la indicațiile sale în bazele de date științifice internaționale	Evaluare scrisă	25%
9.6 Standard minim de performanţă			
• Obtinerea notei 5 la fiecare din activitatile anterior mentionate.			

Elaborat
Prof. Dr. Dr.-Habil. Mihai V. PUTZ

Semnătura titularului de curs
Prof. Dr. Dr.-Habil. Mihai V. PUTZ

Semnătura titularului de seminar
Prof. Dr. Dr.-Habil. Mihai V. PUTZ

Data completării
12.09.2023

Data avizării în catedră/departament
13.09.2023

Semnătura şefului catedrei/departamentului
Lector Dr. Adrian SINITEAN