

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea de Vest din Timișoara
1.2 Facultatea / Departamentul	Chimie, Biologie, Geografie /Chimie
1.3 Catedra	Chimie
1.4 Domeniul de studii	Chimie Medicala
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studii / Calificarea	Chimie Medicala
1.7 Cod Curs/Planul de învățământ	CBGBCC30

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Structura și proprietățile moleculelor						
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	I	2.5 Semestrul	2	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	4	din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate / pe teren					20
Pregătire seminarii / laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					20
Tutoriat					11
Examinări					3
Alte activități (traduceri, conspecte, conferințe studentesti, prezenta la evenimente științifice UVT, vizite ghidate la institute/laboratoare de cercetare în chimie-fizica structurala, voluntariat în popularizarea științei, etc.)					20
3.7 Total ore studiu individual	94				
3.8 Total ore pe semestru	150				
3.9 Numărul de credite	6				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	• Matematica generală, Fizica generală, Chimie generală
4.2 de competențe	• 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
5.2 de desfășurare a seminarului/laboratorului (fata-in-fata)	<ul style="list-style-type: none"> Sală de seminar, rețea de computere, acces internet
5.3 de desfășurare a activităților on-line	<ul style="list-style-type: none"> Studentii să aibă camera web pornită și să se afle într-un spațiu adecvat studiului pe toată durata activității didactice Accesarea activităților 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 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. 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 (<i>Tematica poate fi actualizată, respectiv completată sau adaptată din partea cadrului didactic, în relație cu studenții curenți, pe parcurs</i>)	Metode de predare	Observații
<p>Introducere în chimia-fizică structurală. Misterul legăturii chimice, al reactivității chimice. De la mecanica cuantică, la fizica cuantică, la chimia cuantică, la biochimia cuantică. Jurnale celebre, consacrate și de specialitate în chimia fizică structurală. Personalități celebre: Einstein, Bohr, de Broglie, Schrödinger, Slater, Coulson, Pauling, Feynman, Kohn, Zewail, Kleinert. Polemica seculară privind răspunsul la întrebarea: „Poate mecanica cuantică să furnizeze o descriere completă a realității fizice?” Chimia-fizică structurală în România: origini, direcții, centre de cercetare actuale.</p> <p>Micro-indeterminismul cuantic. Constante fundamentale ale universului: viteza luminii, constanta lui Boltzmann, constanta lui Planck. Domeniile de manifestare ale materiei: ondulatoriu, statistic, cuantic. Legătura dintre domeniile de manifestare ale materiei: relația lui de Broglie, relațiile lui Heisenberg, distribuții statistice.</p>	Expunerea, conversația, problematizarea, demonstrația, modelarea.	Abordare colocvială frontală; <i>activitățile /temele /metodele pot fi actualizate /adaptate /centrate pe student(i) din partea cadrului</i>

<p>Determinarea relației lui Bohr la atomul de hidrogen pe baza relațiilor Heisenberg și de Broglie. Complementaritatea undă-corpusul. Pachetul de unde cuantice. Drumul cuantic. De la probabilitate la amplitudinea de probabilitate.</p>		<p><i>didactic, pe parcurs</i></p>
<p>Ecuția Schrödinger. Rezolvarea integralei de drum pentru un potențial extern generalizat $V(x, t)$. Integrale de tip Poisson. Dezvoltarea fluctuațiilor cuantice în jurul drumului clasic al funcționalei de acțiune. Ecuția Schrödinger temporală. Hamiltonianul. Operatorii de energie cinetică și potențială. Aplicație la cazul relativist al mișcării particulei libere. Ecuția Klein-Gordon. Principiul omogenității transformărilor spațio-temporale clasice și relativiste. Spinul electronic. Postulatele mecanicii cuantice.</p>		
<p>Molecule poliatomice I. Simetria moleculară. De la ecuația de stare la simetria moleculară. Operatorul de simetrie. Elementele de simetrie: punctul, dreapta, planul. Operațiile de simetrie: inversa, rotația, reflexia. Operații compuse de simetrie. Grupuri de simetrie. Clasificarea moleculelor după grupul de simetrie. Cuantificarea grupurilor de simetrie. Tabla de caractere. Reprezentarea matriceală a simetriei.</p>		
<p>Molecule poliatomice II. Orbitali moleculari. Coordonate interne de simetrie. Setul de bază al orbitalilor atomici. Reprezentări ireductibile de simetrie. SALC: adaptarea la simetrie a combinațiilor lineare (a orbitalilor atomici). Vibrații moleculare. Descompunerea spectrală a reprezentării toate de simetrie. Operatorii de proiecție. Vibrații de tip Raman și IR. Reguli de selecție. Analiza moleculară în aproximația Hückel. Ecuția seculară și determinantul secular. Spectrul moleculelor poliatomice.</p>		
<p>Bibliografie Curs (poate fi actualizată din partea cadrului didactic sau a studenților, pe parcurs)</p> <ul style="list-style-type: none"> ➤ Putz M.V.(2016) <i>Quantum Nanochemistry. A Fully Integrated Approach: Vol I-V. Vol I. QUANTUM THEORY AND OBSERVABILITY; Vol II. QUANTUM ATOMS AND PERIODICITY; Vol III. QUANTUM MOLECULES AND REACTIVITY; Vol IV. QUANTUM SOLIDS AND ORDERABILITY; Vol V. QUANTUM STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP (Qu-SAR).</i> Apple Academic Press & CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA; pp. 3086+index; ISBN: 978-1-771881-38-8; ♣URL: http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=9781771881388 ➤ Putz M.V."<i>Quantum Theory: Density, Condensation, and Bonding</i>", Apple Academics & CRC Press, Toronto-New Jersey (2012), 272 pp.; ISBN (Hardcover): 978-1-926895-14-7. ♣URL:http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=56 ➤ Putz M.V. "Structura Nanosistemelor Cuantice", Editura Universității de Vest, Timișoara (2006), pag. 263; ISBN: 973-125-006-9. ➤ Putz M.V. (2014) <i>Quantum and Optical Dynamics of Matter for Nanotechnology</i>, IGI Global, Hershey Pasadena, USA (http://www.igi-global.com/book/quantum-optical-dynamics-matter-nanotechnology/77401). ➤ Cantor C.R, Schimmel P.R. (1980) <i>Biophysical Chemistry. Part II. Techniques for the Study of Biological Structure and Function</i>, W.H. Freeman & Co., New York. ➤ Hornyak G.L., Dutta J., Tibbals H.F., Rao A.K. (2008) <i>Introduction to Nanoscience</i>, CRC Press-taylor & Francis Group, Boca Raton. ➤ Silbey R.J., Alberty R.A., Bawendi MG. (2005) <i>Physical Chemistry</i>, 4th ed., John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ ➤ Voet D., Voet JG. (1995) <i>Biochemistry</i>, 2nd ed., John Wiley & Sons, New York. 		

7.2 Seminar / laborator <i>(Tematica poate fi actualizată, respectiv completată sau adaptată din partea cadrului didactic, în relație cu studenții curenți, pe parcurs)</i>	Metode de predare	Observații
<p>Molecula biatomică. Aproximația adiabatică Born-Oppenheimer. Sistemul de coordonate al laboratorului. Teorema virialului moleculară. Combinația lineară a orbitalilor atomici (LCAO). Soluția în cadrul teoriei legăturii de valență. Soluția în cadrul teoriei orbitalilor moleculari. Integralele de tip Coulombian, de schimb, de acoperire. Orbitali de legătură, de antilegătură și de ne-legătură. Hibridizarea orbitalilor. Stări singlet și triplet moleculare. Spectrul energetic. Componenta electronică. Componenta mișcării de translație. Componenta mișcării de vibrație. Oscilatorul armonic. Polinoamele Hermite. Componenta mișcării de rotație. Potențialul de tip Morse. Metoda perturbațiilor. Corecțiile de tip anarmonic. Termeni electronici. Reguli de selecție. Spectre ale moleculelor biatomice. Inteligența chimică structurală: de la orbitali la qbits, de la reacțiile chimice la algoritmi cuantici, de la legătura chimică la teleportare, de la noi materiale inovatoare la computerul cuantic moletronic!</p>	învățare prin descoperire dirijată, modelare	Abordare colocvială individuală <i>activitățile /temele /metodele pot fi actualizate /adaptate /centrate pe student(i) din partea cadrului didactic, pe parcurs</i>
<p>Structura și proprietățile moleculei biatomice. Hamiltonianul și funcția de undă a moleculei biatomice. Aplicație la molecula K_2, la sistemul He_2^+, și la molecula HF. Aplicarea metodei variaționale pentru determinarea energiilor moleculei ionice H_2^+ și He_2^+. Calculul probabilităților moleculare. Funcții de undă-spin moleculare. Scheme și configurații orbital moleculare. Aplicație la moleculele B_2, Li_2, N_2, N_2^+, N_2^-, NO, NO^+, OH, OH^+, OH^-.</p>		
<p>Bibliografie Seminar/Laborator (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, 3-Volume Set: Volume 1: Structural Nanochemistry. Volume 2: Topological Nanochemistry. Volume 3: Sustainable Nanochemistry.</i> 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.(2016) <i>Quantum Nanochemistry. A Fully Integrated Approach: Vol V. Quantum Structure-Activity Relationship (Qu-SAR)</i>, Apple Academic Press & CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA; pp. 622+index; ISBN: 978-1-771881-37-1; ♣URL: http://www.appleacademicpress.com/title.php?id=9781771881371 ➤ Putz M.V. (2008) (Editor) "ADVANCES IN QUANTUM CHEMICAL BONDING STRUCTURES", Transworld Research Network, Kerala, India (2008), 419 pp.; ISBN (Hardcover): 978-81-7895-306-9. ➤ Putz M.V. (2010) (Editor) "Quantum Frontiers of Atoms and Molecules", NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA; ISBN: 978-1-61668-158-6. ➤ Putz M.V., Mirică M.C. (2017) (Editori) <i>Sustainable Nanosystems Development, Properties, and Applications</i>, 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., Lacrămă A.M., <i>Introducing Spectral Structure Activity Relationship (S-SAR) Analysis. Application to Ecotoxicology</i>, Int. J. Mol. Sci. 2007, 8, 363-391. http://www.mdpi.org/ijms/papers/i8050363.pdf. ➤ Balaban AT (ed.), <i>Chemical Applications of Graph Theory</i>, Academic Press, London, 1976. ➤ Daolio S. (1980) <i>Introduzione alla moderna Spettrometria di Masa. Applicazioni in Chimica, Agraria,</i> 		

Ambiente, Biomedica e Geologia, Societa Chimica Italiana – Gruppo di Spetrometria di Masa, Consiglio Nazionale delle Ricerche, Area di Ricerca di Padova.

- Hornyak G.L., Moore J.J., Tibbals H.F., Dutta J. (2009) *Fundamentals of Nanotechnology*, CRC Press-taylor & Francis Group, Boca Raton.
- Miller J.N., Miler J.C. (2000) *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry*, 4th ed., Prentice Hall, Harlow, England (UK)
- Russo N., Salahub D.R., Eds. (2000) *Metal-Ligand Interactions in Chemistry, Physics, and Biology*, NATO Science Series C: Mathematical and Physical Sciences, vol. 546, Kluwer Academic, Dordrecht.
- Russo N., Salahub D.R., Witko M. Eds. (2003) *Metal-Ligand Interactions*, NATO Series II: Mathematics, Physics and Chemistry – vol. 1166, Kluwer Academic, Dordrecht (NL).
- Ugi I, Bauer J, Brandt J, Friedrich J, Gasteiger J, Jochum C, Schubert W, New Applications of Computers in Chemistry, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 1979, 18, 111-123.

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

In cadrul cursului se obtin informatii teoretice, iar in cadrul seminariilor se formeaza deprinderi de utilizare a diferite metode fizico-chimice si computaționale pentru determinarea structurii moleculare, macro- si bio-moleculare, a interacției chimico-biologice, pentru interpretarea și controlul funcției biologice și (eco) toxicologice.

9. Evaluare (poate fi actualizată din partea cadrului didactic în relație și acord cu studenții, pe parcurs)

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, autoevaluare	Realizare și prezentare eseu științific, pe parcurs	25%
9.5 Seminar / laborator	Evaluarea periodică, teme și realizare eseu științific, autoevaluare		25%
9.6 Examen	Test (eventual Grila) cu întrebări și probleme din temele predate, discutate, studiate; autoevaluare	Evaluare sintetică/scris	50%
9.7 Standard minim de performanță: Obținerea notei minime de 5 la punctele 9.4-9.6			

Data completării
03.02.2025

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

Data avizării în departament
05.02.2025

Director de departament
Conf.univ.dr. Vlad CHIRIAC