

## FIȘA DISCIPLINEI

### 1. Date despre program

1.1. Instituția de învățământ superior	Universitatea de Vest din Timișoara
1.2. Facultatea	Chimie - Biologie - Geografie / Biologie-Chimie
1.3. Departamentul	SCOALA DOCTORALA DE CHIMIE
1.4. Domeniul de studii	Chimie
1.5. Ciclul de studii	DOCTORAT
1.6. Programul de studii/Calificarea	DOCTOR IN CHIMIE

### 2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	<i>INTRODUCERE IN NANOCHIMIA CUANTICA. Nanosisteme Complexe</i>						
2.2. Titularul activităților de curs	Prof.dr.habil. Mihai Putz						
2.3. Titularul activităților de seminar	Prof.dr.habil. Mihai Putz						
2.4. Anul de studii	1	2.5. Semestrul	1	2.6. Tipul de evaluare	C	2.7. Regimul disciplinei	DOb, DF

### 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
<b>Distribuția fondului de timp*</b>					<b>ore</b>
Studiu după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					21
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate/pe teren					21
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					30
Tutorat					10
Examinări					10
Alte activități ...					10
3.7. Total ore studiu individual	72				
3.8. Total ore pe semestru	150				
3.9. Număr de credite	6				

### 4. Precondiții (acolo unde e cazul)

4.1. de curriculum	• Cursuri fundamentale sau complementare de Stiinte (Matematice/ale Naturii/ale Vietii)
4.2. de competențe	• Engleza, Informatica/competente digitale

### 5. Condiții (acolo unde e cazul)

5.1. de desfășurarea a cursului	Resurse on-line, Laptop, videoprojector, ecran proiecție, tablă
5.2. de desfășurare a seminarului/laboratorului	Programe software cu licența, resurse on-line

## 6. Competențe specifice acumulate

<p>Competențe profesionale</p>	<p>C1. Operarea cu noțiuni de structură și reactivitate a compușilor <i>NANO-chimici, nano-topologici, de tipul GRAFENEI</i></p> <p>C1.1 Recunoașterea și descrierea conceptelor, abordărilor, teoriilor, metodelor și modelelor specifice privitoare la structura și reactivitatea compușilor nano-chimici, cei pe baza de carbon în special.</p> <p>C1.2 Explicarea și interpretarea unor proprietăți, concepte, abordări, teorii, modele și noțiuni avansate de știință referitoare la clusterele chimice, nano-chimie moleculară, precum și interacțiile acestora cu lumina (efecte foto-electrice, etc.)</p> <p>C2 Determinarea compoziției, structurii și proprietăților fizico-chimice ale unor compuși nano-chimici, de tipul rețelelor nano-structurate exotice, de grafen vacant sau în câmp electromagnetic</p> <p>C2.1 Identificarea conceptelor și a metodelor utilizate pentru determinarea compoziției, structurii și a proprietăților fizico-chimice ale compușilor chimici, biochimici și farmaceutici pe baza de GRAFEN și materiale nano-structurate.</p> <p>C2.2 Descrierea și interpretarea metodelor și tehnicilor folosite la determinarea structurii cuantice, electro-nucleare, respective a activității bio-nano-materialelor compozite; prelucrarea și interpretarea rezultatelor</p> <p>C2.3 Utilizarea corectă a metodelor specifice de analiză a structurii cuantice și a proprietăților nano-scopice ale compușilor chimici de sinteză naturală (grafit și grafen cristalin), și de sinteză controlată, precum și a compușilor biochimici și farmaceutici astfel funcționalizați.</p> <p>C2.4 Analiză critică a metodelor aplicate pentru determinarea compoziției, structurii și a proprietăților fizico-chimice metrologice măsurabile (current electric, potențial</p>
--------------------------------	--



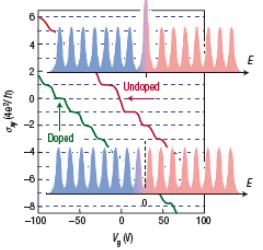
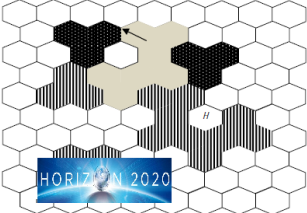
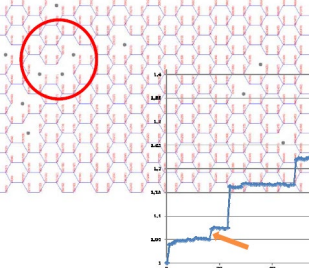
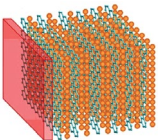
	<p>electric, rezistențaelectrica) ale unor compuși nano-chimici de interes bio-medical (implanturi, cipuri de carbon, nano-circuite integrate cu carbonulinlocuindsiliciul , etc.)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• C2.5 Realizareaunorrapoarteștiințificeavansatecu privire la determinareastructurii nano-chimicecuanticesistabilireaproprietățilorfizico-chimicemasurabile, observabile, proiectate/prestabiliteale compușilorchimici, biochimicisifarmaceuticibazatipeheterojonctiuni cu grafit, cu grafensi carbon în suprafețe plane extinse (<i>nano-landia</i>).</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>• CT 2. Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională continuă pentru îndeplinirea planului personal de dezvoltare a carierei.</li> <li>• CT 3. Manifestarea unei atitudini responsabile fata de domeniul științific si de cercetare ales, valorificarea potențialului propriu pe plan profesional, respectarea regulilor de munca riguroasa si eficienta pentru executarea unor sarcini profesionale complexe.</li> </ul>

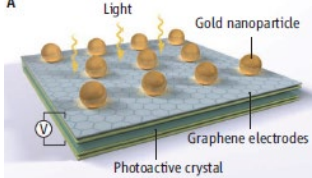
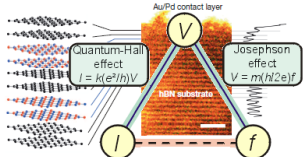
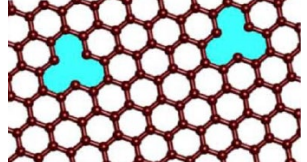
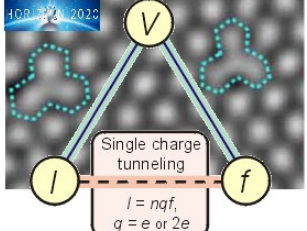
## 7. Obiectivele disciplinei

7.1. Obiectivul general al disciplinei	<p>Așa cum afirmă “Lema Noii Tehnologii” (enunțată de Herbert Kroemer, Premiul Nobel în fizică în 2000 pentru munca de pionierat în domeniul Tehnologiei Informației și a Comunicării) se pare că: “Principalele aplicații ale oricărei tehnologii suficient de noi și inovatoare au fost întotdeauna – și continuă să fie – aplicațiile create de acea tehnologie”. Și totuși ... posibilă actuală cercetare, inovare și tehnologie <i>disruptivă</i> poate apărea datorită descoperii recente a <b>Grafenului</b>, ca o nouă stare a materiei (și, în consecință, răsplătită prin acordarea premiului Nobel în Fizică lui Andre Geimșilui Konstantin Novoselov de la Universitatea Manchester). Acest lucru se datorează faptului că Grafenul a fost – și încă este – o stea în ascensiune în orizontul științei materialelor; cu o natură strict bi-dimensională (2D), acest material prezintă o proprietăți cristaline și electronice ridicate, având o rezistență de 200 de ori mai mare față de cea a oțelului, în timp ce conduce eficient <i>electricitatea</i> și căldura; mai mult decât atât, datorită spectrului electronic deosebit pe care îl posedă, grafenul și-a făcut apariția în noua paradigmă a fizicii materiei condensate „relativiste”, în care fenomenele fizice cuantice relativiste sunt combinate în mod unic cu noile căi de acces în fizica low-dimensională prin dimensiunea sa subțire formată dintr-un singur atom (de Carbon). În consecință,</p>
--	---

	<p>în timp ce grafenul nu mai necesită dovezi ulterioare în ceea ce privește importanța lui în termeni de fizică fundamentală, „este probabil singurul sistem în care ideile din domeniul teoriei cuantice pot conduce la inovații patentabile” – așa cum spune Frank Wilczek (laureat al Premiului Nobel în fizică în 2004 pentru descoperirea limitelor liber asimptotice în teoria interacțiunii puternice). Astfel, <i>la orizont, devin posibile aplicații cu impact inovativ/disruptive care utilizează grafenul, în mod particular devine posibilă crearea materialelor inteligente cu funcțiuni nano-ecologice, cum ar fi cazul utilizării acestuia în sisteme fotovoltaice prin senzitivare, având ca scop amplificarea conversiei energiei luminii solare în energie electrică verde, pe baza proprietăților sale și a structurii subțiri compusă dintr-un singur atom de carbon.</i></p>
7.2. Obiectivele specifice	<p>În consecință, <b>principalele obiective</b> ale acestui curs sunt legate de inițierea în: <i>a)-modelarea, b)-controlarea și c)-îmbunătățirea (peste performanțele actuale) a cifrelor de merit ale sistemelor nano-structurate, de tipul celor fotovoltaice de conversie a energiei cu mecanismul punctelor cuantice activate pe nano-compusi grafenici grafene A) funcționalizate și B) defective, utilizate fie ca și i) electrod transparent sau ca și ii) mediu activ în senzitivarea hetero-structurilor 2D utilizate pentru chipuri nano-electronice sau micro-bai-electrochimice, respectiv celulele solare, și, în consecință, d)-comunicarea și e)-patentarea unor astfel de sisteme complexe realizat prin combinarea tuturor celor menționate mai sus.</i></p> <p>Aceste obiective conceptuale, care oricând pot fi transpuse în aplicații nano-tehnologice, cu finanțarea corespunzătoare, sunt în acord total cu nevoile curente de competitivitate ale nanoștiinței și tehnologiilor pentru a contribui la exigențele economice și sociale ale secolului XXI, și anume: existența materialelor ecologice (non-toxice, în acest caz având la bază carbonul), cu mecanisme inteligente (aici, asociate punctelor cuantice), cu valoare ridicată de energie regenerabilă (aici, dublând, cel puțin, performanțele energiei fotovoltaice disponibile la ora actuală), într-un spațiu cât mai mic posibil (aici, asigurat de efectul cuantic la nano-scală asupra grafenului) și cu costuri minime (disponibil pe măsură ce grafenul intră din ce în ce mai mult în circuitul de producție european).</p>

**8. Conținuturi (pot fi adaptate pe profilul cursanților doctoranzi, în dialog și comunicare cu aceștia)**

8.1. Curs	Conceptualizare (Grafica)	Observații
<p><b>Modelarea conceptuală.</b>Principiile grafenului funcționalizat și defectiv și predicția energiei materialelor de heterojoncțiune prin intermediul cuasi-particulelor cuantice coerente – puncte cuantice duble ca senzitivitori ai sistemelor fotovoltaice.</p>		<p>Se va produce un template de RAPORT DE CERCETARE/ESEU/ARTICOL SIMULAT specific pentru domeniile de interes ale doctoranzilor</p>
<p><i>Studiul trecerii de la Bondon Chemic la Bondot Condensat (prin legarea puntelor cuantice duble) pe Grafen</i></p>		
<p><i>Construirea Grafenului Funcționalizat ca și Electrode Fotovoltaic Sensitivizat Coerent/Mediu activ cu Puncte Cuantice Duble (Bondots)</i></p>		
<p><i>Studiul Dinamicii Vacanțelor Structurale pe Grafenele Defective cu Mecanisme de tip Bondotic</i></p>		
<p><i>Construirea Grafenului Defectiv ca Electrode Fotovoltaic Sensitivizat Coerent/Mediu activ cu Bondots</i></p>		
<p><b>Dezvoltare experimentală.</b>Design-ul experimental și măsurarea curenților de merit fotovoltaice (intensitatea curentului, voltamograme și frecvențele ieșirilor) sunt realizate pentru grafenul funcționalizat și defectiv prin combinații de heterojoncțiune, fie ca electrod, fie ca mediu insensitivare materialelor celulelor solare, cu</p>		<p>Discuții libere, Formatoare, Inspirationale, Cu minim de parat matematic, Fixarea reperelor științifice fundamentale și avansate,</p>

<p>efectul punctelor cuantice duble (bondotice), descriere prin triunghiul metrologic cuantic al efectului cuantic Hall, tunelarea electronică, respectiv efecte Josephson.</p>		<p>Problematizare, metoda soluțiilor multiple, verificarea încrucișată a rezultatelor - concluziilor</p>
<p><i>Prepararea Grafenului Funcționalizat (Bi-strat) cu Puncte Cuantice Duble în Materialele Fotovoltaice Asociate</i></p>		
<p><i>Măsurarea Triunghiului (Fotovoltaic) Cuantic pentru Randamentul Cifrelor de Merit pentru Grafenul Funcționalizat cu Puncte Cuantice Duble Coerente</i></p>		
<p><i>Pregătirea Grafenului Defectiv (Bi-strat) cu Puncte Cuantice Duble în Nano-Materialele (Fotovoltaice) Asociate</i></p>		
<p><i>Măsurarea Triunghiului Fotovoltaic Cuantic pentru Randamentul Cifrelor de Merit pentru Grafenul Defectiv cu Puncte Cuantice Duble Coerente</i></p>		<p><i>Simulare work-shop cu doctoranzi cursanti</i></p>

**Bibliografie Selectivă**

1. Putz M.V., Mirica M.C., Editors (2015) *Sustainable Nanosystems Development, Properties, and Applications*, IGI Global, Hershey Pasadena, USA.
2. Ferrari A.C., et al. (2015) Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems. *Nanoscale* 7 (11):4587-5062.
3. Geim A.K., and Novoselov K.S. (2007) The rise of graphene. *Nature Materials* 6:183-191.
4. Geim A.K., Grigorieva I.V. (2013) Van der Waals heterostructures. *Nature* 499:419-425.
5. Grätzel, M. (2001) Photoelectrochemical cell. *Nature* 414: 338-344.
6. Günes S., Neugebauer H., Sariciftci N.S. (2007) Conjugated polymer based organic solar cells. *Chem. Rev.* 107:1324-1338.

8.2. Seminar/laborator	Metode de desfășurare a activității de seminarizare	Observații
<p><i>Exemplu de CAZ: Organizarea Studiului Conceptual-Computațional asupra Punctelor Cuantice Duble Coerente (Bondots) pe Grafen</i></p>		<p>Managementul cercetării asigură desfășurarea optimă a activităților și sub-activităților propuse (cercetare fundamentală,</p>

<p><i>Planificarea Realizării Grafenului Funcționalizat ca Senzitivitor Fotovoltaic cu Puncte Cuantice Duple Coerente</i></p>	<p>SIMULAREA UNEI ACTIVITATI DE PROIECTARE A UNEI CERCETARI IN NANO-CHIMIA STRUCTURALA /CUANTICA:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Definierea fără ambiguități a tematicii cercetării și a modului de lucru;</li> <li>➤ Selectarea și distribuirea sarcinilor de lucru membrilor echipei proiectului;</li> <li>➤ Etc. (a se vedea și la Observatii)</li> </ul>	<p>dezvoltare experimentală) prin implementarea funcțională în toate etapele de cercetare-dezvoltare, de la concept la prototip: organizare, predicție, coordonare, implicare-motivare și control-evaluare-adaptare ale acțiunilor necesare pentru evitarea riscului potențial.</p> <p><i>În următoarele activități specifice de cercetare vor fi elaborate Rapoarte ale echipelor formate în cadrul doctoranzii și articole științifice în revistele de cercetare din CBG/UVT/Scoala Doctorala.</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Identificarea unor: <ul style="list-style-type: none"> <li>○ oportunități de utilizare a rezultatelor obținute;</li> <li>○ domenii conexe de investigare care rezultă din activitățile desfășurate;</li> <li>○ idei de noi proiecte;</li> <li>○ potențialii parteneri/colaboratori;</li> <li>○ programe adecvate pentru asigurarea finanțării.</li> </ul> </li> </ul>
<p><i>Coordonarea Observării Grafenului Funcționalizat în Heterojoncțiuni-Nanomateriale cu Puncte Cuantice Duple Coerente</i></p>		
<p><i>Evaluarea Investițiilor Fotovoltaice asupra Grafenului Funcționalizat în Heterojoncțiuni-Nanomateriale cu Puncte Cuantice Duple Coerente</i></p>		
<p><i>Organizarea Studiului Conceptual-Computațional asupra Dinamicii Vacanțelor Structurale ale Punctelor Cuantice Duple Coerente (Bondots) pe Grafen</i></p>		
<p><i>Planificarea Realizării Grafenului Defectiv ca Senzitivitor Fotovoltaic cu Puncte Cuantice Duple Coerente</i></p>		
<p><i>Coordonarea Manipulării Grafenului Defectiv în Heterojoncțiuni-Nanomateriale cu Puncte Cuantice Duple Coerente</i></p>		
<p><i>Evaluarea Investițiilor Fotovoltaice asupra Grafenului Defectiv în Heterojoncțiuni-Nanomateriale cu Puncte Cuantice Duple Coerente</i></p>		
<p><i>Analiza de risc pentru activitățile și sub-activitățile proiectului de cercetare nano-chimic: Tipurile de risc: tehnic (T), resurse sociale/umane (S sau U), economic (E), politic (P); etc.</i></p>		
<p>Cercetarea post-cercetare: este NANO-chimia ultima frontiera a interacțiilor atomo-moleculare, respectiv a funcționalizării electronice non-distructive, sustenabile și eficiente în econo-ecolo-mediul observat?</p>		

### **Bibliografie Selectiva**

1. Putz M.V. (2010) The bondons: the quantum particles of the chemical bond. *Int. J. Mol. Sci.* 11(11):4227-4256.
2. Putz M.V., Ori O. (2012) Bondonic characterization of extended nanosystems: application to graphene's nanoribbons. *Chem. Phys. Lett.* 548:95-100.
3. Putz M.V., Ori O. (2014). Bondonic effects in group-iv honeycomb nanoribbons with Stone-Wales topological defects. *Molecules* 19:4157-4188.
4. Putz M.V., Ori O. (2015a) Predicting bondons by Goldstone mechanism with chemical topological indices. *Int. J. Quantum Chem.* 115(3):137-143.
5. Putz M.V., Ori O. (2015b) Bondonic chemistry: physical origins and entanglement prospects. In: Putz MV, Ori O (eds.) *Exotic Properties of Carbon Nanomatter*, Advances in Physics and Chemistry Series Vol. 8, Springer Verlag, Dordrecht, Chapter 10, pp 229-260.
6. Ori O., Cataldo F., Putz M.V. (2011) Topological anisotropy of Stone-Wales waves in graphenic fragments. *Int. J. Mol. Sci.* 12(11):7934-7949.

### **9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatorilor reprezentativi din domeniul aferent programului**

- Activitățile de seminar de tipul „învață prin descoperire” vor stimula intelectul și gândirea critică.
- Activitățile practice vor pune bazele unei experiențe minimale necesare integrării pe piața fondurilor nerambursabile.
- Experiență în alegerea variantei oportune pentru valorificarea rezultatelor.

### **10. Evaluare**

Tip de activitate	10.1. Criterii de evaluare	10.2. Metode de evaluare	10.3. Pondere din nota finală
10.4. Curs	Activitatea la curs	oral	50%
10.5. Seminar/laborator	Aplicații / referate	scris	50%
<b>10.6. Standard minim de performanță</b>			
<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>prezența minimă</b> la cursuri sau seminarii este de <b>50%</b>. Nerespectarea acestei cerințe impune recontractarea disciplinei/disciplinelor în cauză. În situațiile motivate conform legii, recontractarea este gratuită; procentul de prezenta, alături de prezenta activa, are o pondere în nota finală pentru activitățile de Curs și Seminar, de comun acord agreeată cu studenții cursanți prezenți – în prima jumătate a desfășurării/predării disciplinei.</li> <li>• complementar, în situația în care se considera necesar, cadrul didactic poate suplimenta, cu acordul studenților cursanți, examinarea prin itemi administrați oral sau scris, după caz.</li> </ul>			

Data completării  
18.09.2023

Semnătura titularului de curs  
Prof.dr. dr.-habil. Mihai Putz

Semnătura titularului de seminar  
Prof.dr. dr.-habil. Mihai Putz

Avizat 19.09.2023  
Director Scoala Doctorală de Chimie  
Prof.dr. dr.-habil. Mihai Putz