

## Departamentul DE CHIMIE ANALITICĂ ȘI CHIMIE FIZICĂ

### TEMATICĂ ȘI BIBLIOGRAFIE

#### CONFERENȚIAR UNIVERSITAR, poziția 16 în statul de funcții al Departamentului de Chimie Analitică și Chimie Fizică

#### Discipline din planul de învățământ

1. Structură moleculară (curs și lucrări practice)
2. Biochimie cuantică (curs și lucrări practice)
3. Relații structură moleculară - proprietăți farmaceutice (curs)
4. Proprietăți moleculare ale medicamentelor și modalități de determinare (curs)
5. Cinetică chimică (lucrări practice)
6. Practică pedagogică 1 (practică cu studenți, nivel I (inițial) de certificare pentru profesia didactică)
7. Practică pedagogică 2 (practică cu studenți, nivel I (inițial) de certificare pentru profesia didactică)

#### Tematică

1. Modelarea cuantică a moleculei biatomice: aplicarea metodei variaționale în tratarea cuantică a moleculei ionice de hidrogen ( $H_2^+$ );
2. Spectre electronice ale moleculelor biatomice: Principiul Franck-Condon; Complement spectral de rotație: determinarea pozițiilor liniilor spectrale care fac parte din ramurile R, P și Q și reprezentarea diagramei Fortrat.
3. Spectre electronice de emisie ale moleculelor poliatomice: demonstrare, discuții practice asupra relației Stern-Volmer.
4. Teoria Hartree-Fock: Teoria câmpului self-consistent (SCF); ecuațiile Hartree-Fock-Roothaan; Corelarea electronică - concept, importantă.
5. Metode post-Hartree-Fock: Interacție configurațională (CI); Metode multiconfiguraționale (MCSCF); Teoria perturbărilor Moller Plesset (MP); Clustere cuplate (CC).

6. Metoda DFT (Density Functional Theory): Principii, teoremele Hohenberg-Kohn, formalismul Kohn-Sham; interacții de schimb și de corelare, aproximatii;
7. Importanța regulilor empirice de identificare a unui potențial medicament: exemplificare comparativă pentru regula Kell
8. Variante cromatografice de măsurare a lipofilității medicamentelor. Predicția lipofilității medicamentelor prin metode bazate pe substructuri și, respectiv, pe proprietăți moleculare.

### Bibliografie

1. Murgulescu, I.G., Sahini, V. Em., *Introducere in chimia fizica*, Editura Academiei Republicii Socialiste Romania., Bucuresti, vol.I.1 (*Atomi, Molecule. Legatura chimica*), I.2. (*Structura si proprietatile moleculelor*), 1978.
2. P.W. Atkins, *Tratat de Chimie Fizica*, Ed Tehnica, 1996, Bucuresti.
3. J.H. Jensen, *Molecular Modeling Basics*, CRC Press. 2010.
4. C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry*. John Wiley & Sons. 2002.
5. E Lewars, *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*, Kluwer Academic Publishers, 2004.
6. W. Koch, M.C. Holthausen, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, 2nd edition, Wiley-VCH Verlag GmbH, 2001.
7. E. Kerns, D. Li, *Drug-like Properties: Concepts, Structure Design and Methods: from ADME to Toxicity Optimization*, Elsevier, 2008.
8. David C. Young, *Computational Drug Design: A Guide for Computational and Medicinal Chemists*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2009.

***Se poate folosi orice altă sursă bibliografică reprezentativă pentru tematica cerută.***

## TOPICS and BIBLIOGRAPHY

**Associate Professor, position 16 from Department of Analytical Chemistry and Physical Chemistry**

### Academic disciplines in the curricula:

1. Molecular structure (course and laboratory)
2. Quantum biochemistry (course and laboratory)
3. Molecular structure – pharmaceutical properties relationships (course)
4. Molecular properties of drugs and their investigation methods (course)
5. Chemical kinetics (laboratory)
6. Teaching practice 1 (practice)
7. Teaching practice 2 (practice)

### Topics:

1. Quantum modeling of the diatomic molecule: quantum treatment of the ionic hydrogen molecule ( $H_2^+$ ) by the variational method;
2. Electronic spectra of diatomic molecules: Franck-Condon principle; Rotational structure in the electronic spectra of diatomic molecules: determination of the positions for R, P and Q lines and their representation in the Fortrat diagram.
3. Electronic emission spectra of polyatomic molecules: demonstration and discussions on the Stern-Volmer relationship.
4. Hartree-Fock Theory: Self-Consistent Field theory (SCF); Hartree-Fock-Roothaan's equations; Electron correlation – concept and importance.
5. Post-Hartree-Fock methods: Configuration Interaction (CI); Multi-Configurational Self-Consistent Field method (MCSCF); Moller Plesset perturbation theory (MP); Coupled clusters (CC).
6. Density Functional Theory: Principles, Hohenberg-Kohn theorems, Kohn-Sham; formalism; exchange and correlation interactions, approximations.
7. The importance of empirical rules to identify a potential drug structure: comparative example for Kells's rule.
8. Chromatographic approaches of drug lipophilicity measurement. Prediction of drug lipophilicity by methods based on substructures and molecular properties.

### References:

1. Murgulescu, I.G., Sahini, V. Em., *Introducere in chimia fizica*, Editura Academiei Republicii Socialiste Romania., Bucuresti, vol.I.1 (*Atomi, Molecule. Legatutra chimica*) and I.2. (*Structura si proprietatile moleculelor*), 1978.
2. P.W. Atkins, *Tratat de Chimie Fizica*, Ed Tehnica, 1996, Bucuresti.
3. J.H. Jensen, *Molecular Modeling Basics*, CRC Press. 2010.
4. C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry*. John Wiley & Sons. 2002.
5. E Lewars, *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*, Kluwer Academic Publishers, 2004.
6. W. Koch, M.C. Holthausen, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, 2nd edition, Wiley-VCH Verlag GmbH, 2001.
7. E. Kerns, D. Li, *Drug-like Properties: Concepts, Structure Design and Methods: from ADME to Toxicity Optimization*, Elsevier, 2008.
8. David C. Young, *Computational Drug Design: A Guide for Computational and Medicinal Chemists*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2009.

***Other bibliographical sources related to the above topics can also be used.***