



ACADEMIA ROMANA
INSTITUTUL DE CHIMIE MACROMOLECULARA „PETRU PONI”
Aleea Grigore Ghica Voda, nr. 41A, 700487 IASI, ROMANIA
Tel. +40.332.880.220; E-Mail: pponi@icmpp.ro

TEMATICĂ și BIBLIOGRAFIE

pentru concursul de **Asistent cercetare științifică - ACS** (membru-doctorand) în cadrul proiectului de tip ERA Chair: „**BIOMAT4CAST - Petru Poni Institute of Macromolecular Chemistry Multi Scale in Silico Laboratory for Complex and Smart Biomaterial**”, acronim: **BioMat4CAST**

Tematică:

- Bazele chimiei cuantice și ale chimiei computaționale.
- Metode de calcul al structurii electronice (Hartree–Fock, DFT – noțiuni generale).
- Dinamica moleculară – principii și aplicații.
- Utilizarea programelor de modelare moleculară și interpretarea rezultatelor.
- Aplicații ale chimiei computaționale în studiul biomoleculelor, materialelor și proceselor chimice.

Bibliografie selectivă:

- [BioMat4CAST Project Website](#) inclusiv publicațiile științifice și materialele educaționale disponibile pe site-ul web al proiectului.

Optional:

1. **Leach, A. R.** *Molecular Modelling: Principles and Applications*, 2nd Edition. Pearson Education, 2001.
2. **Jensen, F.** *Introduction to Computational Chemistry*, 3rd Edition. John Wiley & Sons, 2017.
3. **Cramer, C. J.** *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, 2nd Edition. John Wiley & Sons, 2004.