Petru Tîrnovan

europass

Contact

- Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni", Iași, Aleea Grigore Ghica Vodă, nr. 41A, 700487, Iași, România
- tirnovan.petru@icmpp.ro
- tirnovanpetru@yahoo.com
- (+40) [redacted]
- Petru Tîrnovan
- Petru Tîrnovan
- Petru Tîrnovan
- Fotografie

EXPERIENȚA PROFESIONALĂ

Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni", Iași România

Student doctorand

01/11/2019 - În curs

Modelarea și simularea *in silico* a sistemelor moleculare capabile de autoorganizare, cu aplicații în încapsularea și eliberarea substanțelor active farmaceutice.

Investigarea mecanismelor de formare a complexelor de incluziune cu ciclodextrină prin simulări de dinamică moleculară și interpretarea rezultatelor în raport cu datele experimentale.

Analiza literaturii de specialitate pentru formularea ipotezelor de lucru, alegerea metodelor de simulare și interpretarea rezultatelor.

Dezvoltarea de scripturi în Python și Bash pentru automatizarea prelucrării, analizei și vizualizării datelor de simulare. Rularea și monitorizarea calculelor pe infrastructuri de calcul de înaltă performanță (HPC), utilizând Slurm și HTCondor.

Selectarea și optimizarea sistemelor moleculare candidate pe baza rezultatelor simulărilor, în vederea validării experimentale.

Participarea la mobilități și programe de formare naționale și internaționale pentru aprofundarea metodelor de modelare moleculară, a metodelor statistice, a programării orientate pe obiecte și a tehnicilor de învățare automată și inteligență artificială.

Prezentarea rezultatelor la conferințe prin comunicări orale și postere, contribuția la redactarea și publicarea articolelor științifice și integrarea rezultatelor în teza de doctorat.

EDUCAȚIE ȘI FORMARE

01/11/2024 - ÎN CURS Iași, România

Asistent de Cercetare Științifică (ACS) Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni", Iași

Site de internet: https://icmpp.ro/ | **Nivelul CEC:** Nivelul 7 CEC

01/01/2017 - 31/12/2019 Iași, România

Master în Chimie Universitatea "Alexandru Ioan Cuza", Iași

Adresa Bd. Carol I, Nr. 11700506, Iași (România) | **Site de internet:** http://chem.uaic.ro **Domeniul (domeniile) de studiu:** Chimia mediului și siguranță alimentară | **Nivelul CEC:** Nivelul 7 CEC

01/01/2014 - 31/12/2017 Iași, România

Licențiat în Chimie Universitatea "Alexandru Ioan Cuza", Iași

Adresa Bd Carol I, Nr. 11700506, Iași (România) | **Site de internet:** www.chem.uaic.ro **Domeniul (domeniile) de studiu:** Chimie | **Nivelul CEC:** Nivelul 6 CEC

01/01/2010 - 31/12/2014 Gura Humorului, România

Bacalaureat Colegiul "Alexandru cel Bun", Gura-Humorului

Site de internet: https://alexandrucelbun.ro/ | **Nivelul CEC:** Nivelul 4 CEC

COMPETENȚE LINGVISTICE

LIMBĂ(I) MATERNĂ(E): română
ALTĂ LIMBĂ (ALTE LIMBI):
engleză

Comprehensiune orală C2
Citit C2
Scris C1
Producerea de mesaje orale C1
Conversație C1

PUBLICAȚII

2026

Toward Reliable LCST Prediction of PNIPAM: The Influence of Water Model and Multi-Chain Interactions

Bacaita, E. S., Tirnovan, P., Laaksonen, A., Mocci, F. ***Journal of Physical Chemistry B.*** (**FI = 3,2, Q = Q2**) - under review

2026

Extensive TD-DFT investigation of the absorption wavelength in single and multilayer polycyclicaromatic hydrocarbons/graphene quantum carbon dots

Tirnovan, P., Isac, D. L., Man, I. C., Puf, R., Dascalu, A., Coroaba, A., Marangoci, N. L., Cibotariu, N., Ciuhodaru, T., Ania, C. O., Pinteala, T. ***Surfaces and Interfaces***, vol. 98, 110526 (**FI = 6,0, Q = Q1**).

2026

Supramolecular insights into the complexation of β-Cyclodextrin for alopecia treatment usingthe mixed cation/anion active principle

Tirnovan, P., Isac, D. L., Marangoci, N. L., Nicolescu, A., Coroaba, A., Cretu, B., Laaksonen, A., Neamtu, A., & Pinteala, T. ***Carbohydrate Polymer Technologies and Applications***, 14, 101155 (**FI = 7.6, Q = Q1**).

2025

Cosolvent effects on the complexation of the antifungal propiconazole nitrate with β-cyclodextrin:A combined molecular dynamics and NMR study

Isac, D. L., **Tirnovan, P.**, Nicolescu, A., Fifere, A., Neamtu, A., & Pinteala, M. ***European Journal of Pharmaceutical Sciences***, 213, 107248, (**FI = 5,1, Q = Q1**).

PROIECTE

01/09/2024 - În curs

„BioMat4CAST - "Petru Poni" Institute of Macromolecular Chemistry Multi-Scale In Silico Laboratory for Complex and Smart Biomaterials" Grant Agreement No 101086667

Membru al echipei de chimie computațională (COP)
a proiectului BioMat4CAST .

01/11/2024 - 30/06/2026

„Intelligent systems for cancer diagnosis and treatment - IntelDots" PNRR-III-C9-2022-I8- 291

Membru în echipa proiectului IntelDots .

europass

CONFERINȚE ȘI SEMINARE

08/09/2026 - 11/09/2026 Bruxelles, Belgia

The 5th European Symposium on Chemical Bonding (CBOND2026)

P. Tirnovan, D.-L. Isac, N.-L. Marangoci, A. Nicolescu, A. Coroaba, A. Neamtu, B. Cretu, A. Laaksonen, T. Pinteala, Inclusion of an Organic Salt Drug Formulation with β-Cyclodextrin for the Treatment of Alopecia. A Theoretical and Experimental Investigation;

(**poster**)

27/07/2026 - 31/07/2026 Sardinia, Italia

NGMM 2026 Next-Generation Modelling Summer School

P. Tirnovan, D.-L. Isac, N.-L. Marangoci, A. Neamtu, A. Laaksonen, M. Pinteala, Mechanistic insights înto the complexation mechanism of an organic salt drug with cyclodextrin;

(**poster**)

27/11/2025 București, România

ICUB-IBAR Joint Workshop; Current Topics in Molecular Biosciences

P. Tirnovan, R. Puf, D. L. Isac, BioMat4CAST Multi-Scale In Silico Laboratory for Complex and Smart Biomaterials;

(**poster**)

19/11/2025 Iași, România

MacroYouth 2025, Open door to the future scientific communications of young researchers, 6th edition

P. Tirnovan, D. L. Isac, M. Silion, A. Coroaba, A. Laaksonen, M. Pinteala, *Unveiling the role or urocanic acid in the formation of skin cancer;*

Premiul III (comunicare orală)

08/05/2025 - 09/05/2025 Iași, România

COST COSY Training School, Exploring Confined Environments with Polymers, Ionic Liquids, and Deep Eutectic Solvents: Predicting Emerging Applications through Modeling and Advanced Experiments

P. Tirnovan, C. M. Carbonaro, L. V. Engelbrecht, A. Laaksonen, T. Rusu, M. Pinteala, F. Mocci, Simulating molecular systems with peculiar fluorescence. A case study of lysine;

Premiul III (poster)

03/02/2025 Forschungszentrum Jülich, Germania

RACB: Recent Advances in Computational Biophysics: Methods and Applications

P. Tirnovan, D. L. Isac, M. Silion, A. Coroaba, T. Rusu, M. Pinteala, F. Mocci, A. Laaksonen, Urocanic Acid and its Role in skin Cancer Under UV-irradiation. A Combined Experimental and Theoretical Study;

(**poster**)

11/09/2024 - 13/09/2024 Iasi, Romania

PolyChar'30: PolyChar World Forum on Advanced Materials 30th Edition

P. Tirnovan, D. L. Isac, , M. Silion, A. Coroaba, T. Rusu, M. Pinteala, A. Laaksonen, Study of Radical Species Formation from Urocanic Acid under UV Irradiation: an Experimental and Theoretical Analysis of its Role in Skin Cancer;

(**comunicare orală**)

11/10/2021 Iasi, Romania

5DnanoP Workshop 2021

P. Tirnovan, F. Mocci, T. Vasiliu, L. Cianga, I. Cianga, M. Pinteala, A. Laaksonen, In silico studies of a novel amphiphilic graft conjugated polymer for biomedical applications;

(**comunicare orală**)

HOBBY-URI ȘI TEME DE INTERES

Astrofotografie/Fotografie

Astrofotografie - fotografierea obiectelor de cer profund cu telescop și sistem de ghidaj, precum și a unor fenomene naturale, precum aurora boreală și fulgerele. Portofoliu pe Flickr .

Observații astronomice - observarea galaxiilor, roiurilor stelare, nebuloaselor, cometelor și planetelor cu un binoclu 20x80. Am observat aproximativ 95% dintre obiectele din catalogul Messier.

ALTE ABILITĂȚI

Instruire/predare

Modul psihopedagic, nivelul I și II (2017-2018).

COMPETENȚE

Competențe de comunicare și interpersonale

Colaborare în echipe de cercetare interdisciplinare, de la interpretarea rezultatelor computaționale și experimentale până la redactarea articolelor științifice în coautorat.

Prezentarea clară și concisă a metodelor și rezultatelor cercetării prin comunicări orale și postere la conferințe naționale și internaționale.

Capacitate de adaptare la echipe și medii de lucru noi, dezvoltată prin colaborarea cu cercetători din alte instituții și prin participarea la mobilități și programe de formare.

Competențe obținute la locul de muncă

Limbaje de programare utilizate: Python, Shell (bash), Julia, C++, Tcl;

Utilizarea sistemelor de operare Windows Vista, 7, 8, 11, Linux (Ubuntu)

Modelare moleculara *in silico* utilizând metode multiscală ce cuprind:

Dinamică moleculară: AMBER, GROMACS, Avogadro, Yasara;

Calcul și definire parametri: AmberTools, CGenFF, ffTk;

Docking molecular: Autodock Suite;

Umbrella sampling: GROMACS;

Mecanică cuantică: GAUSSIAN, GaussView, ORCA, HyperChem, PySCF;

Metode hibride: ONIOM (mechanic + electrostatic embedding);

Efectuarea de simulări pe calculatorul cuantic: qiskit;

Calcule de înaltă performanță (HPC): Slurm, HTCondor;

Utilizarea altor softuri utilitare pentru conversie, vizualizare, filtrare și analiză: VMD, ChemDraw, ChemSketch, Open Babel, RDKit, cheminfo, OriginLab;

Prezentarea datelor științifice în mod succint în conferințe și prelegeri (Microsoft PowerPoint, Libreoffice Impress);

Design grafic pentru prezentări și articole științifice (Inkscape, GIMP, html, css, matplotlib, gnuplot, xmgrace);

Redactarea și elaborarea de draft-uri de articol și publicarea în reviste științifice de specialitate (Microsoft Word, LibreOffice Writter);

Gestionarea erorilor de calcul survenite în anumite sisteme simulate și flexibilitate în funcție de condiții.

Data : 02.11.2026

Petru Tîrnovan

