

DAN MAFTEI



(n. 1980)

Lect. univ. dr.

e-mail:
dan.maftei@chem.uaic.ro

Chimie fizică și
teoretică

Chimie și biochimie
computațională

Doctorat
Univ. „Alexandru Ioan
Cuza” Iași, 2014

DEA
Métallurgie et
Matériaux, 2003-2004,
Université Paris
Sud XI

Domenii de cercetare/interes

- **Structura electronică a moleculelor:** metode teoretice, algoritmi și implementare;
- **Spectroscopie computațională:** calculul proprietăților optice spectrale ale moleculelor;
- **Dinamică și interacțiuni intermoleculare:** modelarea atomistică a interacțiunilor intermoleculare și a evoluției temporale în sisteme de interes biologic

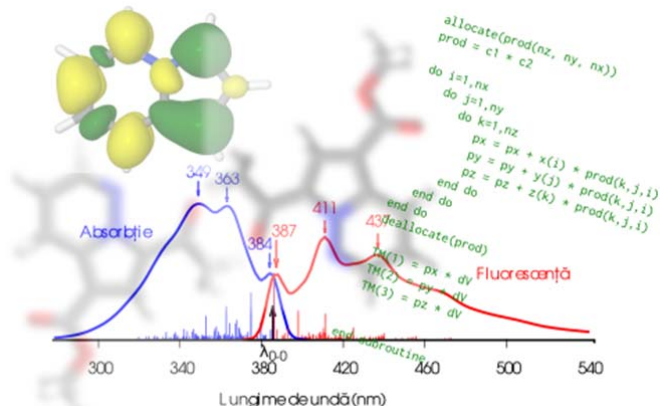
Structura electronică a moleculelor: calculul și interpretarea structurii electronice a sistemelor moleculare; proprietăți moleculare derivate din calculele de structură electronică; utilizarea, implementarea și evaluarea metodelor teoretice de calculare a structurii electronice;

Spectroscopie computațională: modelarea proprietăților optice spectrale ale sistemelor moleculare; interpretarea

spectrelor electronice de absorbție și de fluorescență cu aplicații în proiectarea de compuși cu proprietăți emise;

Dinamică și interacțiuni intermoleculare: modelarea geometriei și a dinamicii moleculelor de interes biologic în soluție; modelarea interacțiunilor receptor-ligand;

Cuvinte cheie: structură electronică, chimie computațională, *ab initio*, teoria funcționalei de densitate electronică, spectre electronice, dinamică moleculară.



Publicații (selectiv)

Moldoveanu, C., Zbancioc, G., Mantu, D., **Maftei, D.** and Mangalagiu, I.I., The Cycloaddition of the Benzimidazolium Ylides with Alkynes: New Mechanistic Insights, *PLoS One*, 11 (5), e0156129, **2016**.

Gosav, S., Paduraru, N., **Maftei, D.**, Birsă, M.L. and Praisler, M., Quantum chemical study of a derivative of 3-substituted dithiocarbamic flavanone, *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.*, in press, **2016**.

Odochian, L., Moldoveanu, C. and **Maftei, D.**, TG-FTIR study on thermal degradation mechanism of PTFE under nitrogen atmosphere and in air. Influence of the grain size, *Thermochem. Acta*, 598, 28–35, **2014**.

Maftei, D., Zbancioc, G., Humelnicu, I., Mangalagiu, I.I., Conformational effects on the lowest excited states of benzoyl-pyrrolopyridazine: Insights from PCM time-dependent DFT. *J. Phys. Chem. A*, 117, 3165–3175, **2013**.

Mantu, D., **Maftei, D.**, Iurea, D., Ursu, C. and Bejan, V., Synthesis, structure, and in vitro anticancer activity of new polycyclic 1,2-diazines, *Med. Chem. Res.*, 23 (6), 2909-2915, **2013**.

Fifere, A., Marangoci, N., Maier, S., Coroaba, A., **Maftei, D.** and Pinteala, M., Theoretical study on β -cyclodextrin inclusion complexes with propiconazole and protonated propiconazole., *Beilstein J. Org. Chem.*, 8, 2191-2201, **2012**.