

IONEL HUMELNICU



Domenii de cercetare/interes

- Studiul structurii și reactivității sistemelor moleculare
- Studiul interacțiunilor intermoleculare și al influenței solventului asupra proprietăților structurale, spectroscopice și de reactivitate ale sistemelor moleculare
- Studiul conformațional și al proprietăților sistemelor moleculare cu activitate biologică utilizând metodele chimiei teoretice
- Determinarea suprafețelor de energie potențială, dinamica și mecanismul reacțiilor chimice

Conf. univ. dr.

e-mail: ionel@uaic.ro

Chimie fizică și teoretică

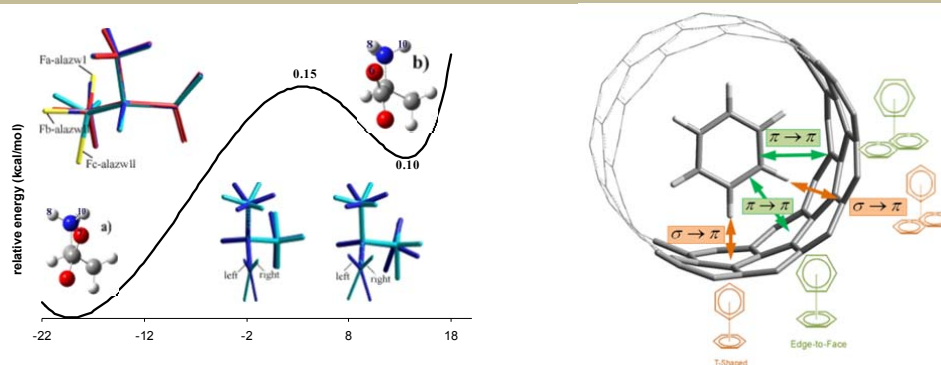
Chimie computațională

Investigarea structurii spațiale și determinarea descriptorilor ce caracterizează reactivitatea sistemelor chimice. Studiul interacțiunilor intra- și intermoleculare precum și determinarea influenței naturii solventului asupra structurii spațiale, proprietăților electronice, spectroscopice și asupra capacității de reacție a sistemelor moleculare. Caracterizarea spectroscopică și studiul tranzițiilor între nivelele energie ce caracterizează sistemele investigate în stare fundamentală și excitată. Modelare moleculară

Studiul structurii conformaționale și al distribuției spațiale a densității electronice în sisteme moleculare cu proprietăți, sau de interes, în domeniul biologic. Corelația parametrilor structurali și de reactivitate cu proprietățile biologice ale sistemelor moleculare studiate. Studiul dinamicii de reacție utilizând metodele de calcul ale chimiei computaționale. Determinarea mecanismelor de reacție pe baza suprafețelor de energie potențială ce caracterizează sistemul reactant. Abordarea teoretică a sistemelor complexe ce conțin metale tranzitionale.

Doctorat
Universitatea
„Alexandru Ioan Cuza”
din Iași, 2000

Bursă Post doc
Universitatea
Westfälische Wilhelms
din Münster, Germania,
2001-2002



Publicații (selectiv)

Humelnicu, I., Würthwein, E-U., Haufe, G., The Conformers of 3-Fluoroalanine. A Theoretical Study Influence of a Fluorine Substituent on the Physicochemical Properties and Chemical Reactivity of Fluorinated Amino Acids. Part 1, *Organic & Biomolecular Chemistry*, 10 (10), 2084-2093, **2012**.

Oprea, C., Panait, P., Cimpoeșu, F., **Humelnicu, I.**, Ferbințeanu, M., Gîrțu, M., Broken symmetry DFT calculations of exchange coupling constants for manganese-porphyrin quasi-one-dimensional molecular magnets, *Theoretical Chemistry Accounts: Theory, Computation, and Modeling* (Theoretica Chimica Acta), *Theor Chem Acc* 131 (7) 1249-1261, **2012**.

Odochian, L., Dîrțu, D., Pui, A., Dumitraș, M., **Humelnicu, I.**, Tănase, C., Hîncu, L., Brevet de invenție nr. 122359/30.04.2009, Procedeu și instalație de obținere a hidrazinei, Patent Number(s): RO122359-B1.

Humelnicu, I., „Elemente de chimie teoretică”, Editura Tehnopress, Iași, 180 pagini, **2003**, ISBN: 973-8377-23-4

Ghirvu, C., **Humelnicu, I.**, „Introducere în Chimia cuantică – Principii și metode generale”, Editura Matrix Rom, București, **2011**, 731 pagini, ISBN: 978-973-755-740-7.