

Universitatea POLITEHNICA din București, Facultatea de Chimie Aplicată și Știința Materialelor
Departamentul de Chimie Anorganică, Chimie Fizică și Electrochimie
ȘCOALA DOCTORALĂ CHIMIE APLICATĂ ȘI ȘTIINȚA MATERIALELOR

*EVALUARE DE PROPRIETĂȚI DIN CALCULE DE MECANICĂ CUANTICĂ PENTRU
COMPUȘI AZULENICI*

Conducător Științific:
Prof. Dr. Ing. Eleonora-Mihaela UNGUREANU

Doctorand:
Ing. Alina-Alexandra VASILE (CORBEI)

Partea de CERCETARE BIBLIOGRAFICĂ (capitolele 1 - 3) prezintă câteva domenii de aplicare a instrumentelor chemoinformaticice, noțiuni de andocare moleculară folosite în proiectarea rațională a medicamentelor, precum și prezentarea unor descriptori moleculari pentru evaluarea de proprietăți din calcule de mecanică cuantică și a simulării de andocare moleculară pentru 3 compuși organici terapeutici consacrați.

Partea de CONTRIBUȚII ORIGINALE (capitolele 4 - 7) conține caracterizări *in silico* pentru evaluarea de proprietăți prin calcule de mecanică cuantică și realizarea de simulări de andocare moleculară pentru derivați azulenici: 5 compuși 1,3,4-tiadiazolici, 3 derivați de (Z)-5-(azulen-1-ilmetilen)-2-tioxotiazolidin-4-one, 6 azulene substituie cu tiofen-vinil-piridină sau furan-vinil-piridină. Compușii evaluați au perspective ulterioare de utilizare pentru crearea de noi instrumente analitice bazate pe electrozi modificați sau pentru utilizări în terapie.