

# Programa

| Curs (unități de conținut)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | Nr. ore |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|
| <b>Structura și proprietățile moleculelor</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |         |
| 1. Formarea moleculelor, principii generale ale mecanicii cuantice, legături chimice standard. Diagrame LCAO-MO pentru molecule simple, principiul izolobalității.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 1       |
| 2. Reactivitate chimică, orbitali moleculari de frontieră (HOMO-LUMO), regula lui Kenichi Fukui.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 1       |
| 3. Termocromism; tipuri de tranziții electronice; schimbarea formei moleculelor prin excitare electronică.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | 1       |
| 4. Proprietăți electrice ale moleculelor: refracția moleculară, polaritatea moleculelor, moment de dipol electric, polarizarea moleculelor.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 1       |
| 5. Proprietăți magnetice ale moleculelor: susceptibilitate magnetică, diamagnetism, paramagnetism, feromagnetism; forte inter- și intramoleculare - clatrați.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 1       |
| <b>Termodinamică chimică</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |         |
| 6. Noțiuni și mărimi fundamentale; transformări fizice și chimice; regula lui Trouton; energiile Helmholtz – Gibbs; potențial chimic.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 1       |
| 7. Proprietățile amestecurilor simple: mărimi molare parțiale.<br>Proprietăți coligative ale soluțiilor: creșterea temperaturii de fierbere a amestecurilor, scăderea temperaturii de congelare a amestecurilor, legea Van't Hoff.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 1       |
| <b>Electrochimia</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |         |
| 8. Transportul în soluții de electroliți, legea Debye-Huckel, celule electrochimice.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 1       |
| 9. Reacții și semireacții la electrozi; potențial standard; senzori electrochimici pentru siguranța și controlul calității produselor cosmetice.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 1       |
| <b>Cinetică chimică</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |         |
| 10. Viteză și ordin de reacție, constanta specifică de reacție; reacții de ordin 0, 1, 2 și 3; legi de viteză integrate; cinetica formală a reacțiilor complexe (reacții reversibile, reacții paralele și successive).                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | 1       |
| 11. Aproximația staționarității, ecuația Michaelis-Menten; Influența diferiților factori asupra cineticii reacțiilor chimice: temperatură, solvent, coeficient de activitate, constantă dielectrică.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 1       |
| 12. Cataliză, reacții oscilante bazate pe autocataliză (mecanismul Lotka-Voltera, reacții oscilante în sistemele biologice). Fotochimia: legile fotochimiei, randament cuantic; exemple de reacții fotochimice.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 1       |
| <b>Proiectul medicamentului</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |         |
| 13. Metode de cercetare și obținere a noilor medicamente; tehnici QSAR; afinitatea ligandului față de receptor, ecuații Hansch, modelul biliniar Kubinyi pentru producerea activității biologice                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 1       |
| 14. Modularea structurii chimice pentru depășirea barierelor psihologice; relația structură – gust, relația structură – iritabilitate. Modularea proprietăților fizico – chimice ale substanțelor medicamentoase pentru depășirea barierelor farmaceutice; optimizarea biodisponibilității medicamentelor, prelungirea duratei de acțiune a substanțelor chimice.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 1       |
| <b>BIBLIOGRAFIE</b><br>1. A. Martin, <i>Physical Pharmacy: Physical Chemical Principles in the Pharmaceutical Sciences</i> , Philadelphia: Lea & Febiger, 4th ed., 1993.<br>2. P. Atkins, J. de Paula, <i>Atkins' physical chemistry</i> , W. H. Freeman and Company, New York, 2006.<br>3. A. Chiriac, D. Ciubotariu, Z. Simon, <i>Relații cantitative Structură chimică – Activitate biologică (QSAR)</i> , Ed. Mirton, Timișoara, 1996.<br>4. Emilia Amzoiu și Costinel Lepădatu, <i>Modelare Chimică și Proiectarea Medicamentului</i> , Ed. Sitech, Craiova, 2005.<br>5. William B. Tucker, <i>Chemistry - Energy, Matter and Change</i> , Taylor & Francis Ltd, CRC Press, 2024.<br>6. R. Amjesh, <i>Principes fondamentaux du QSAR</i> , Ed. Notre Savoir, 2021.<br>7. A. Hofmann, <i>Physical Chemistry Essentials</i> , Springer Nature Switzerland AG, 2018.<br>8. R. Chang, <i>Physical Chemistry for the Chemical and Biological Sciences</i> , University Science Books, 2000.<br>9. D.R. Rusu, M. Gorgan, I.O. Marian, <i>Chimie fizică generală</i> , UMF Cluj-Napoca, 2021.<br>10. C.E. Dinu-Pîrvu, <i>Metode de investigare în chimia fizică a medicamentului</i> , Ed. Printech, București, 2013. |         |
| <b>Lucrări practice (subiecte/teme)</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |         |
| 1. Noțiuni introductive                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | 1       |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |   |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---|
| 2. Formarea compușilor chimici. Legături chimice.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 1 |
| 3. Modelarea sistemelor moleculare. Studiul orbitalilor moleculari și estimarea proprietăților moleculare cu ajutorul calculatorului.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 1 |
| 4. Utilizarea parachorului la elucidarea structurii moleculare.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 1 |
| 5. Determinarea căldurii de dizolvare a unei substanțe                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 1 |
| 6. Partiția unui solvat între doi solvenți nemiscibili.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 1 |
| 7. Determinarea punctului critic de solubilitate pentru un sistem ternar.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 1 |
| 8. Variația conductivității soluțiilor de electrolit tare cu concentrația.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 1 |
| 9. Determinarea conductometrică a gradului de disociere și a constantei de disociere ale unui electrolit slab.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 1 |
| 10. Descompunerea apei oxigenate.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 1 |
| 11. Determinarea energiei de activare la hidroliza acidă a unui ester.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 1 |
| 12. Studiul QSAR al coeficienților de partiție.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 1 |
| 13. Recuperări                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 1 |
| 14. Colocviu                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | 1 |
| <b>BIBLIOGRAFIE</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |   |
| 1. Amzoiu Emilia – (2010) “ <i>Lucrări practice de Chimie – Fizică pentru farmaciști</i> ”, Editura Medicală Universitară, Craiova, 174 pag., ISBN 978-973-106-151-16.<br>2. Pacurariu, C., Davidescu, C.-M., Poraicu, M., Reisz, E., <i>Cinetica chimica si chimie coloidala-Lucrari practice</i> , Litografia Univ. Politehnica Timisoara, 2002.<br>3. Găinar I., Bala D., <i>Chemical Termodinamics theory and applications</i> , Ed. Univ. București, 2005.<br>4. HyperChem Professional Release 8. <a href="http://www.hyper.com">www.hyper.com</a><br>5. Kunal Roy, <i>Advances in QSAR Modeling: Applications in Pharmaceutical, Chemistry and Physics</i> , Springer Nature Switzerland AG, 2017. |   |