



Prof. Dr. Vasile CHIȘ

Universitatea Babeș-Bolyai

Facultatea de Fizică

Departamentul de Fizică Biomoleculară

Domenii de cercetare

Activitatea de cercetare în grupul meu este direcționată spre investigarea structurii geometrice și electronice a moleculelor și complexilor moleculari cu aplicații biomedicale sau de interes în nanotehnologie. În acest sens, sunt avute în vedere următoarele direcții de cercetare:

- Dezvoltarea și validarea metodelor de spectroscopie computațională
- Spațiul conformațional al substanțelor active farmaceutice și interacțiunile ligand-receptor
- Polimorfismul compușilor farmaceutici și discriminarea spectroscopică între medicamentele "brand" și cele generice
- Interacțiuni intermoleculare slabe: rolul dispersiei în sistemele slab legate
- Adsorbția moleculelor pe suprafețe
- Fotofizica sistemelor biomoleculare
- Discriminarea enantiomerică și cuantificarea compușilor chirali prin metode experimentale (Raman și SERS) și computaționale (DFT)
- Structura moleculară și electronică a radiofarmaceuticelor folosite în medicina nucleară (imagistică PET și SPECT).

Pentru aceste investigații folosim metode computaționale moderne, bazate pe teoria DFT, precum și metode experimentale, precum: Raman, UV-Vis, RMN și Fluorescență.

www.phys.ubbcluj.ro/~vasile.chis

www.phys.ubbcluj.ro/raman



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI

TRADIȚIE ȘI EXCELENȚĂ



FACULTATEA DE FIZICĂ

ȘCOALA DOCTORALĂ FIZICĂ

Str. M. Kogălniceanu nr. 1

Cluj-Napoca, RO-400084

Tel.: 0264-405300 / Fax: 0264-591906



Prof.dr. Vasile CHIȘ

Babeș-Bolyai University

Faculty of Physics

Department of Biomolecular Physics

Research interest

The research activity in my group is focused on the geometric and electronic structure and properties of molecules and complex molecular systems with biomedical applications or with relevance in nanotechnology. Thus, the following research directions are considered:

- Development and validation of computational spectroscopy approaches
- Conformational landscapes of the active pharmaceutical ingredients and ligand-receptor interactions
- Polymorphism in pharmaceutical compounds and spectroscopical discrimination between the brand and generic drugs
- Weak intermolecular interactions: role of dispersion in weakly bound systems
- Adsorption of molecules on surfaces
- Photophysics of biomolecular compounds
- Enantiomeric discrimination and quantification of the chiral compounds by combined experimental (Raman and SERS) and computational (DFT) techniques
- Molecular and electronic structure of radiopharmaceuticals used in nuclear medicine (PET and SPECT imaging).

We use state of the art quantum chemistry methods based on DFT, as well as experimental methods like: Raman, UV-Vis, NMR and Fluorescence.

www.phys.ubbcluj.ro/~vasile.chis

www.phys.ubbcluj.ro/raman