

GRUPUL DE LUCRU PENTRU CHIMIE TEORETICĂ ȘI COMPUTAȚIONALĂ - GLCTC

Societatea de Chimie din România – SChR

DOMENII DE EXPERTIZĂ

Chimie cuantică (metode ab initio și DFT)

Dinamică moleculară și simulări Monte Carlo

Modelare moleculară și docking

Metode QM/MM

Modelarea materialelor

Chemoinformatică și modelare QSAR

Modelarea mecanismelor de reacție

Inteligență artificială aplicată în chimie

ACTIVITĂȚI ȘI EVENIMENTE

Conferințe și workshopuri

- Organizarea de workshopuri naționale
- Participarea la Conferința Națională de Chimie
- Seminarii periodice
- Școli de vară

Activități de popularizare

- Prezentări educaționale
- Activități de promovare a științei

Interconectarea cu activitățile internaționale de profil prin The Division of Computational and Theoretical Chemistry (DCTC) a European Chemical Society (EuChemS).

PARTENERI ȘI COLABORĂRI

Parteneri Naționali

- Universități și institute de cercetare din România
- Academia Română
- Societatea de Chimie din România

Parteneri Internaționali

- Universități și institute de cercetare internaționale
- Rețele europene de chimie teoretică – în primul rând [The Division of Computational and Theoretical Chemistry \(DCTC\)](#) a European Chemical Society (EuChemS)