

## SIMON, ZENO VIRGIL GHEORGHE

chimist



(n. 23 aprilie 1935, Timișoara). **Studii** liceale (1952) la Timișoara, universitare (Facultatea de Chimie, Secția Chimie-Fizică) la București (1957); doctorat în 1965 cu teza *Contribuții la teoria coeficientului preexponențial al reacțiilor monomoleculare*, sub conducerea regretatului Acad. I. G. Murgulescu. Căsătorit (1965) cu Stela Maria Simon n. Botiș; 1 fiu, 2 nepoți. În 1970 și-a continuat specializarea în domeniul biologiei moleculare la „Max Planck” Institut für Virusforschung din Tübingen. **Activitate:** între 1957 și 1965 în cadrul Secției Cinetică Chimică a Centrului de Chimie Fizică din București; din 1966 cercetător la Centrul de Chimie al Bazei Academiei Române din Timișoara; între 1966 și 1970 a fost conferențiar, iar din 1970 profesor la Facultatea de Fizică a Universității din Timișoara; conferențiar (1977), profesor (din 1980) de biofizică la Institutul de Medicină din Timișoara. **Cercetare:** Și-a axat activitatea științifică îndeosebi pe trei mari direcții de studii: chimie cuantică, aplicații ale

chimiei fizice în modelarea reglajului celular și teoria interacțiilor receptor biologic/moleculă efectator. În domeniul chimiei cuantice, a abordat teoria reacțiilor monomoleculare, în cadrul căreia a adus contribuții în calculul teoretic al coeficientului preexponențial și al energiei de activare al reacțiilor monomoleculare termice; elaborarea unei scheme de calcul pentru viteza tranzițiilor neradiative fără schimbare de spin; teoria proceselor elementare monomoleculare termice și fotochimice, în cadrul căreia a stabilit o metodă de construire a diagramelor de corelație a stărilor electronice din molecule poliatomică în raport cu o coordonată de reacție. A abordat, totodată, și aplicarea metodei orbitalelor moleculare la probleme de chimie organică: *I. G. Murgulescu și Z. Simon: Kinetische Untersuchung der thermischen cis-trans Isomerisierung einiger disubstituierten Athylenderivate, Ztschr. Physik Chemie (Leipzig)* (1962), 221, 29. O atenție aparte a acordat-o studiului unor modele pentru procese ale reglajului celular, problemă centrală a biofizicii și cineticii biochimice, ca și elaborării unor modele pentru ciclul mitotic celular, bazate pe atingerea unei concentrații prag. Modelele constau în transcrierea în limbajul cineticii chimice a unor procese de sinteză și reglaj din celule și studiul matematic al acestora pentru simularea unor procese de reglaj. Ele se înscriu în lucrările de pionierat pe această linie: *Z. Simon: Multi steady state model for cell differentiation, J. Theoret. Biol.* (1965), 8, 258. Studiul teoriei interacțiilor receptor/efector l-a condus la elaborarea unei metode originale pentru tratarea efectelor de potrivire sterică în cadrul relațiilor QSAR (relații structură-activitate; metoda MTD), apoi la o tratare generalizată a problemei interacțiilor specifice în biologie pe baza echilibrului chimice și a forțelor intermoleculare. Metoda MTD este printre primele care au permis o tratare generalizată într-o singură serie QSAR a unor molecule cu structură spațială diferită (izomeri optici, etc). Unele elemente din MTD (suprapunerea moleculelor, crearea unei rețele de noduri) au fost preluate de metodele 3D-QSAR moderne (CoMFA). Rezultatele cercetărilor s-au concretizat în cca 340 de lucrări și studii; 660 nonautocitari. Exemple semnificative: *Z. Simon și Z. Szabadai: Minimal steric difference parameter and the importance of steric fit for structure-biological activity correlations. Studiu Biophysica (Berlin)* (1973), 39, 123; *A.T. Balaban, A. Chiriac, I. Moțoc și Z. Simon: Steric Fit in Quantitative Structure-Activity Relations, Lect Notes in Chem.* (15), Springer, Heidelberg (1980); *L. Kurunczi, Z. Simon și colab.: MTD-PLS, A PLS variant of the MTD – method. Mapping ligand-receptor interactions. Acetic acid esters hydrolysis, J. Chem. Comput. Sci.* (2002), 42, 841; *Z. Simon: Quantum Biochemistry and Specific Interactions, ABACUS Press, Timbridge-Wells,* (1976). **Afilieri:** Membru corespondent al Academiei de Științe Medicale din România (din 1994), membru al Societății de Biologie Celulară, al Societății de Chimie din România, al Grupului European de Studii în Proliferarea Celulară, al Societății Internaționale „QSAR & Modeling”, al Societății Americane de Chimie, membru al Societății Maghiare de Chimie; distins cu Premiul „Gh. Spacu” al Academiei Române și cu Premiul Ministerului Învățământului. **Bibl.:** *Who's Who în România*, București, 2002