

Rezumat executiv al activităților realizate în perioada de implementare

Denumire proiect: *Design adaptiv si asamblare de nanoplatforme bazate pe polimeri pentru livrarea inteligentă de gene si medicamente (ADAPT4dlvrY)*

Perioada de implementare a proiectului a fost caracterizată prin desfășurarea a cinci activități principale, menite să atingă obiectivul central, și anume dezvoltarea unui design inteligent al PBN-urilor utilizând varietatea structurală și protocolul multi-stage pentru design-ul acestor nanoplatforme. În cadrul proiectului, au fost elaborate și validate modele avansate de design, bazate pe algoritmi de inteligență artificială și simulări moleculare, utilizând echipamente de calcul de înaltă performanță.

Toate activitățile din perioada de implementare au fost realizate cu succes, demonstrând avansarea semnificativă a proiectului. În Activitatea 1.1, au fost construite cu precizie structuri pdb și psf pentru polimeri sintetici și naturali. În Activitatea 1.2, am dezvoltat un proces de proiectare a polimerilor utilizând machine learning, accelerând identificarea componentelor optime pentru nanoplatforme performante. Activitatea 1.3 a vizat proiectarea arhitecturilor variate de nanocomposite, în diferite forme, dimensiuni și materiale, obținând structuri personalizate și eficiente. În Activitatea 1.4, metoda de auto-asamblare a nanoplatformelor bazată pe simulări de dinamica moleculară a fost validată, demonstrând controlul asupra dimensiunii și caracteristicilor nanoparticulelor. În final, Activitatea 1.5 a explorat interacțiile dintre derivați de lignină și modele membranare, utilizând simulări și calcule de chimie cuantica, dinamica moleculară energie liberă, evidențiind influența dimensiunii moleculare și a concentrației asupra comportamentului de inserție și agregare, de importanta în industria cosmetică.

Rezultatele obținute au fost diseminate activ, fiind publicate în patru articole în reviste indexate ISI, reflectând valoarea științifică a cercetărilor. De asemenea, rezultatele au fost prezentate în 30 de conferințe și workshop-uri internaționale, asigurând vizibilitatea globală a grupului de cercetare și a instituției. *Diseminarea* s-a realizat și prin actualizarea constantă a paginii web a proiectului (<https://www.itim-cj.ro/PNCIDI/adapt4dlvry/>), facilitând transparența și informarea publicului larg. Activitățile tehnice au inclus calcule intensive pe unitățile de procesare grafică pentru dinamica moleculară, precum și analiza interacțiunilor moleculelor, ceea ce a permis obținerea unor rezultate relevante pentru dezvoltarea de nanoplatforme eficiente pentru livrare de medicamente și gene.

Raportul de etapă sintetizează principalele concluzii, evidențiind progresul semnificativ în domeniu vectorilor de livrare și diseminării rezultatelor. *Indicatorii de rezultat* au fost atinși integral, fiind realizate toate fișierele de structură pentru polimeri și nanocompozite, precum și rapoarte științifice și website-ul proiectului. Participarea la peste 30 de conferințe și workshop-uri, atât naționale, cât și internaționale, a consolidat poziția de lider a grupului în domeniu și a contribuit la consolidarea rețelelor de colaborare. În concluzie, activitățile desfășurate au asigurat atingerea obiectivelor proiectului, promovând inovarea în domeniul nanomaterialelor pentru medicină personalizată, și au generat rezultate științifice de impact, vizibile la nivel internațional, care vor susține dezvoltarea ulterioară a tehnologiilor în domeniu.

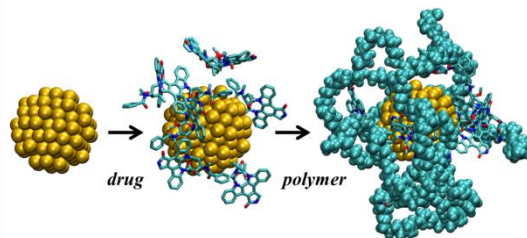


Figura 1. Nanoplatforme bazate pe polimeri pentru livrarea inteligentă de gene si medicamente