

## INFORMAȚII PERSONALE

**CRÎȘAN ELENA - LUMINIȚA**

📍 Str. Carpați, 34B, Giroc, 307220, Romania

☎ +40-256-491818 📠 +40-766-769607

✉ [lumi\\_crisan@acad-icht.tm.edu.ro](mailto:lumi_crisan@acad-icht.tm.edu.ro)

🔗 [orcid.org/0000-0001-7148-5701](https://orcid.org/0000-0001-7148-5701)

Sexul Feminin | Data nașterii 11/09/1977 | Naționalitatea Română

## EXPERIENȚA PROFESIONALĂ

2016 - prezent

**Cercetător științific grad III**

Institutul de Chimie "Coriolan Drăgulescu" Timișoara

Bulevardul Mihai Viteazu 24, Timișoara 300223, România

<https://acad-icht.tm.edu.ro/wp/>

2020 - 2021

**Profesor în învățământul preuniversitar**

Colegiul Național Bănățean

Bulevardul 16 Decembrie 1989 26, Timișoara 300425, România

<https://colegiulnationalbanatean.ro/>

2011 - 2016

**Cercetător științific**

Institutul de Chimie "Coriolan Drăgulescu" Timișoara

Bulevardul Mihai Viteazu 24, Timișoara 300223, România

<https://acad-icht.tm.edu.ro/wp/>

2004 - 2011

**Asistent de cercetare**

Institutul de Chimie "Coriolan Drăgulescu" Timișoara

Bulevardul Mihai Viteazu 24, Timișoara 300223, România

<https://acad-icht.tm.edu.ro/wp/>

2001 - 2004

**Profesor în învățământul preuniversitar**

Liceul Pedagogic "Carmen Silva", Timișoara

Liceul Teoretic "Jean Louis Calderon", Timișoara

Liceul Tehnologic de Poștă și Telecomunicații, Timișoara

Liceul Teoretic "William Shakespeare", Timișoara

2005 - 2009

**Concediu de maternitate**

## EDUCAȚIE ȘI FORMARE

2022 - 2025

### Diploma de licență în Informatică

Facultatea de Automatică și Calculatoare, Universitatea Politehnica Timișoara, *specializarea Informatică*

- Titlu: Soluție software bazată pe metode de învățare automată: identificarea de utilizări alternative ale medicamentelor

2011

### Diploma de Doctor în Chimie

Institutul de Chimie "Coriolan Drăgulescu" Timișoara, Academia Română, *domeniul Chimie*

- Titlu: Compararea diferitelor metode QSAR pentru același receptor biologic

2000 - 2002

### Diploma de master în Chimie

Universitatea de Vest Timișoara, Facultatea de Chimie-Biologie-Geografie, *specializare Chimia compușilor biologic activi*

- Titlu: Studiul QSAR al unor inhibitori neptidici ai protezei 3C a rinovirusului uman (human rhinovirus 3C proteases)

1996 - 2000

### Diploma de licență în Chimie

Universitatea de Vest Timișoara, Facultatea de Chimie-Biologie-Geografie, *specializarea Chimie*

- Titlu: Combinații complexe ale vanadiului cu bis-metil-piperazină (BMP)

## COMPETENTE PERSONALE

|                              |            |        |                            |              |         |
|------------------------------|------------|--------|----------------------------|--------------|---------|
| Limba(i) maternă(e)          | Română     |        |                            |              |         |
| Alte limbi străine cunoscute | INTELEGERE |        | VORBIRE                    |              | SCRIERE |
|                              | Ascultare  | Citire | Participare la conversație | Discurs oral |         |
| Engleză                      | B2         | B2     | B2                         | B2           | B2      |

### Competențe de comunicare

- Experiență internațională în comunicarea științifică și editorială, inclusiv ca editor invitat în reviste de prestigiu (International Journal of Molecular Sciences, Processes, Symmetry, Molecules).
- Abilități avansate de comunicare scrisă și orală în contexte profesionale și academice, incluzând redactarea și evaluarea articolelor științifice și coordonarea proiectelor de cercetare.
- Experiență în mentorat și ghidare academică, coordonând studenți și doctoranzi în cadrul programelor de mentorat INSPIRE JOB și a comisiilor de îndrumare a doctoranzilor ICCD și UMF „Victor Babeș” Timișoara.
- Implicare în inițiative pentru echitate și reducerea abandonului universitar, precum și în comunicarea științei către publicul larg (Noaptea Cercetătorilor Europeni).
- Expertiză în colaborare interdisciplinară și internațională, participând la proiecte de cercetare, evaluare tehnică și comitete de recenzare.

## Competențe organizaționale/manageriale

- 2025 - 2026 **Chimia cu IMPACT in educație pentru un stil de viață sănătos, CHIMPACT**  
Director proiect, buget 250.000,00 RON  
PN-IV-P10-SS-SC-2024-0066, Număr contract: 4SSSC/01.09.2025
- 2022 - 2023 **ICT – Centru interdisciplinar de specializare inteligentă în domeniul chimiei biologice, ROOPENSCREEN**  
Expert tehnic, responsabil cu achiziția echipamentelor pentru dotarea Lab. Librărie Chimică, buget proiect: 42.587.899,61 RON, budget Lab. Librărie Chimică: 6.156.773,46 RON  
Număr Contract 371/20.07.2020 / Cod SMIS: 127952
- 2016 - 2018 **ERANET-RUS PLUS Innovation 2014, Identification of first in class chemical scaffolds against Hepatitis C Virus NS2 cysteine protease, HVCYSPROT**  
Membru în echipa de cercetare, buget proiect: 954.000,00 RON  
ERANET-PNIII-P3-40/19.04.2016
- 2006 - 2009 **Compuși biologic activi, coloranți și compuși cu fosfor studiați prin relații cantitative structură-proprietăți (QSAR/QSPR) și alte metode de chimie computațională**  
Membru în echipa de cercetare, buget proiect: 134.400,00 RON  
Grant CNCIS Cod 71GR/2006

## Competențe dobândite la locul de muncă

- Coordonarea și gestionarea proiectelor științifice: planificarea, monitorizarea progresului și atingerea obiectivelor de cercetare.
- Redactare și evaluare științifică: elaborarea și recenzarea articolelor, contribuția la reviste internaționale.
- Mentorat și ghidare academică: instruirea și coordonarea studenților și doctoranzilor în cercetare și activități practice.
- Organizare de evenimente și conferințe: participare în comitete de organizare și evaluare pentru conferințe internaționale și simpozioane.
- Comunicare profesională și colaborare interdisciplinară: lucru eficient în echipă și în proiecte de cercetare colaborative.
- Managementul activităților de voluntariat educațional: coordonarea programelor de practică pentru elevi și mentorat în cadrul universității.
- Abilități tehnice specifice domeniului chimiei computaționale: utilizarea de software specializat, analiza datelor și modelarea moleculară.

## Competențe informatice

- Chimie computațională și modelare moleculară: Schrödinger, Biovia, Simca, Maestro, etc.
- Analiză de date și machine learning: Python (pandas, numpy, scikit-learn), R, etc.
- Vizualizare moleculară și simulări: PyMOL, Chimera, etc.
- Gestionarea literaturii și resurselor științifice: Mendeley, Zotero; baze de date PubChem, ChEMBL, DrugCentral, DrugBank, etc.
- Suport pentru proiecte și colaborare: MS Office (Word, Excel, PowerPoint), LaTeX, Git/GitHub.

## Alte competențe

- 2025 - prezent **Editor invitat în comitetul editorial al revistei International Journal of Molecular Sciences**  
*Nature-Inspired and Synthetic Compounds: New Frontiers in Bioactivity and Drug Discovery*
- 2025 - prezent **Expert în Comunitatea de Experți pentru echitate și reducerea abandonului**

**universitar**

*Proiectul „Intervenții pentru învățământul terțiar – Măsuri sistemice pentru prevenirea și reducerea abandonului universitar” (PEO 322473)*

- 2025 - prezent **Membru în comisia de îndrumare a doctoranzilor de la Institutul de Chimie "Coriolan Dăgulescu" Timișoara**
- 2024 - 2025 **Editor invitat în comitetul editorial al revistei Processes**  
*Natural and Synthetic Compounds in Human Health and Environmental Sustainability: Challenges, Advances, and Opportunities*
- 2024 - prezent **Tutore în programul de mentorare INSPIRE JOB pentru studenții Universității de Vest din Timișoara**
- 2024 - prezent **Membru în comisia de îndrumare a doctoranzilor de la Universității de Medicină și Farmacie "Victor Babeș" Timișoara**
- 2023 - prezent **Coordonator în programul de practică voluntară pentru elevii din învățământul preuniversitar**
- 2023 - prezent **Membru în comitetul de program al Conferinței Internaționale „New Trends in Chemistry Research”**
- 2023 - prezent **Membru în comisia de evaluare și premiere a rezultatelor științifice din cadrul Conferinței Internaționale „New Trends in Chemistry Research”**
- 2023 - prezent **Tutor în programul de mentorare pentru studenții Universității de Vest Timișoara: Secția Chimie și Chimie Medicală**
- 2022 - 2023 **Editor invitat în comitetul editorial al revistei Processes**  
*Natural Compounds Applications in Drug Discovery and Development*
- 2021 - 2023 **Editor invitat în comitetul editorial al revistei Symmetry**  
*Synthetic and Natural Compounds with Symmetry/Asymmetry in Medicinal and Environmental Chemistry*
- 2022 - 2023 **Expert tehnic în echipa responsabilă cu implementarea proiectului RO-OPENSREEN**
- 2021 - prezent **Membru al consiliului de recenzori pentru revista internațională Molecules**
- 2020 - 2024 **Responsabil de relația dintre ICCD și ROHEALTH: Clusterul pentru Sănătate și Bioeconomie**
- 2018 - prezent **Participant activ în activitățile de comunicare a științei pentru publicul larg în cadrul evenimentului „Noaptea Cercetătorilor Europeni”**
- 2011 - prezent **Coordonator tema de cercetare în cadrul Programului de cercetare nr 1 al ICCD (Cheminformatică și alte metode de chimie computațională)**

- 2011 **Editor invitat pentru revista Analele Universității de Vest din Timișoara, Seria de Chimie**
- 2011 **Membru în comitetul de organizare al Simpozionului Internațional „Tinerii și cercetarea multidisciplinară”**
- 2009 - prezent **Membru în Societatea Română de Chimie**

## INFORMATII SUPLIMENTARE

### Sinteza performanțelor academice

- Indice Hirsch: 15 (Web of Science), 16 (Google Scholar);
- 55 de lucrări științifice (Web of Science): 40 de lucrări ca autor principal și 15 ca și co-autor;
- 98 de lucrări prezentate la conferințe;
- carte publicată ca autor principal;
- 3 capitole de carte publicate în edituri consacrate din străinătate (Wiley, Springer și Elsevier);
- 2 cărți în calitate de editor invitat;
- editor invitat al consiliilor editoriale ale revistelor internaționale *Symmetry*, *Processes* și *International Journal of Molecular Sciences*;
- membru selectat reviewer în consiliul științific al revistei internaționale *Molecules*;
- peste 120 recenzii pentru articole științifice în jurnale de specialitate cotate ISI Thompson.

### Obiectiv profesional

- Dezvoltarea și aplicarea cercetării științifice de frontieră prin metode moderne de inteligență artificială (machine learning și deep learning) pentru descoperirea și prioritizarea medicamentelor și compușilor naturali cu activitate biologică relevantă, contribuind la identificarea de terapii alternative și impact în sănătatea publică.
- Integrarea principiilor chimiei verzi și strategiilor de sustenabilitate în proiectarea și optimizarea compușilor și proceselor chimice, promovând practici responsabile și soluții ecologice.
- Consolidarea legăturii dintre știință și comunitate, prin promovarea aplicării rezultatelor cercetării în beneficiul societății și facilitarea accesului publicului la cunoaștere științifică.
- Inspirarea generațiilor tinere prin inițiative educaționale și mentorat, dezvoltând gândirea critică, rigoarea științifică și spiritul inovator, conectând excelența cercetării cu oportunități concrete de dezvoltare academică și profesională.

### Referințe

- ResearcherID: <https://www.webofscience.com/wos/author/record/P-1208-2014>
- Google Scholar: <https://scholar.google.com/citations?user=znhILlwAAAAJ&hl=ro>
- ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7148-5701>

### LISTA CELOR MAI REPREZENTATIVE LUCĂRI ȘTIINȚIFICE

- Chirila, CB.; **Crisan, L.** Harnessing machine learning models to repurpose drugs targeting HIV-1 integrase, protease, and reverse transcriptase. *Sci. Rep.*, 2026. <https://doi.org/10.1038/s41598-026-48926-0>
- Plesu, N.; **Crisan, L.**; Maranescu, B.; Popa, A.; Visa, A. Exploring Corrosion Protection with Greener Synthesized Metal Phosphonates. *Sustain. Chem. Pharm.* 2025, 44, 101970. <https://doi.org/10.1016/j.scp.2025.101970>
- **Crisan, L.**; Pacureanu, L.; Avram, S.; Bora, A.; Avram, S.; Kurunczi, L. PLS and Shape-Based Similarity Analysis of Maleimides - GSK-3 Inhibitors. *J. Enzym. Inhib. Med. Chem.* 2014, 29(4), 599–610. <https://doi.org/10.3109/14756366.2013.833196>
- Kurunczi, L.; Seclaman, E.; Oprea, T.I.; **Crisan, L.**; Simon, Z. MTD-PLS: A PLS Variant of the Minimal Topologic Difference Method. III. Mapping Interactions Between Estradiol Derivatives and the Alpha Estrogenic Receptor. *J. Chem. Inf. Model.* 2005, 45(5), 1275–1281. <https://doi.org/10.1021/ci050077c>

- Avram, S.I.; Pacureanu, L.M.; Bora, A.; **Crisan, L.**; Avram, S.; Kurunczi, L. ColBioS-FlavRC: A Collection of Bioselective Flavonoids and Related Compounds Filtered from High-Throughput Screening Outcomes. *J. Chem. Inf. Model.* 2014, 54(8), 2360–2370. <https://doi.org/10.1021/ci5002668>
- Caraba, I.V.; **Crisan, L.**; Caraba, M.N. A Comprehensive Environmental and Molecular Strategy for the Evaluation of Fluroxypyr and Nature-Derived Compounds. *Int. J. Mol. Sci.* 2025. <https://doi.org/>
- Pacureanu, L.; Bora, A.; **Crisan, L.** New Insights on the Activity and Selectivity of MAO-B Inhibitors through In Silico Methods. *Int. J. Mol. Sci.* 2023, 24(11), 9583. <https://doi.org/10.3390/ijms24119583>
- Oniga, S.D.; Pacureanu, L.; Stoica, C.I.; Palage, M.D.; Craciun, A.; Rusu, L.R.; **Crisan, E.L.**; Araniciu, C. COX Inhibition Profile and Molecular Docking Studies of Some 2-(Trimethoxyphenyl)-Thiazoles. *Molecules* 2017, 22(9), 1507. <https://doi.org/10.3390/molecules22091507>
- Visa, A.; Plesu, N.; Maranescu, B.; Ilia, G.; Borota, A.; **Crisan, L.** Combined Experimental and Theoretical Insights into the Corrosion Inhibition Activity on Carbon Steel Iron of Phosphonic Acids. *Molecules* 2021, 26(1), 135. <https://doi.org/10.3390/molecules26010135>
- **Crisan, L.**; Funar-Timofei, S.; Borota, A. Homology Modeling and Molecular Docking Approaches for the Proposal of Novel Insecticides against the African Malaria Mosquito (*Anopheles gambiae*). *Molecules* 2022, 27(12), 3846. <https://doi.org/10.3390/molecules27123846>
- Murariu, A.C.; Macarie, L.; **Crisan, L.**; Plesu, N. Experimental Investigations of AlMg3 Components with Polyurethane and Graphene Oxide Nanosheets Composite Coatings, after Accelerated UV-Aging. *Molecules* 2022, 27(1), 84. <https://doi.org/10.3390/molecules27010084>
- Visa, A.; Maranescu, B.; Lupa, L.; **Crisan, L.**; Borota, A. New Efficient Adsorbent Materials for the Removal of Cd(II) from Aqueous Solutions. *Nanomaterials* 2020, 10(5), 899. <https://doi.org/10.3390/nano10050899>
- Funar-Timofei, S.; Borota, A.; **Crisan, L.** Combined Molecular Docking and QSAR Study of Fused Heterocyclic Herbicide Inhibitors of D1 Protein in Photosystem II of Plants. *Mol. Divers.* 2017, 21(2), 437–454. <https://doi.org/10.1007/s11030-017-9735-x>
- **Crisan, L.**; Avram, S.; Pacureanu, L. Pharmacophore-Based Screening and Drug Repurposing Exemplified on Glycogen Synthase Kinase-3 Inhibitors. *Mol. Divers.* 2017, 21(2), 385–405. <https://doi.org/10.1007/s11030-016-9724-5>
- **Crisan, L.**; Istrate, D.; Bora, A.; Pacureanu, L. Virtual Screening and Drug Repurposing Experiments to Identify Potential Novel Selective MAO-B Inhibitors for Parkinson's Disease Treatment. *Mol. Divers.* 2021, 25(3), 1775–1794. <https://doi.org/10.1007/s11030-020-10155-6>
- Caraba, M.N.; Caraba, I.V.; Pet, E.; Pet, I.; **Crisan, L.**; Sinitean, A.; Hutanu, D. Soil Enzymatic Response to Nicosulfuron: A Preliminary Study in a Chernozem Typical to the Banat Plain, Western Romania. *Agriculture* 2024, 14(8), 1380. <https://doi.org/10.3390/agriculture14081380>
- **Crisan, L.**; Bora, A. Small Molecules of Natural Origin as Potential Anti-HIV Agents: A Computational Approach. *Life* 2021, 11(7), 722. <https://doi.org/10.3390/life11070722>
- Avram, S.I.; **Crisan, L.**; Pacureanu, L.M.; Bora, A.; Seclaman, E.; Balint, M.; Kurunczi, L.G. Challenges in Docking 2'-Hydroxy and 2',4'-Dihydroxychalcones into the Binding Site of ALR2. *Med. Chem. Res.* 2013, 22(8), 3589 – 3605. <https://doi.org/10.1007/s00044-012-0367-5>
- **Crisan, L.**; Borota, A.; Suzuki, T.; Funar-Timofei, S. An Approach to Identify New Insecticides Against Myzus Persicae. In Silico Study Based on Linear and Non-Linear Regression Techniques. *Mol. Inf.* 2019, 38(8–9), 1800119. <https://doi.org/10.1002/minf.201800119>
- **Crisan, L.**; Borota, A.; Bora, A.; Suzuki, T.; Funar-Timofei, S. Application of Molecular Docking, Homology Modeling, and Chemometric Approaches to Neonicotinoid Toxicity against Aphis craccivora. *Mol. Inf.* 2022, 41(3), 2100058. <https://doi.org/10.1002/minf.202100058>
- **Crisan, L.**; Avram, S.; Kurunczi, L.; Pacureanu, L. Partial Least Squares Discriminant Analysis and 3D Similarity Perspective Applied to Analyze Comprehensively the Selectivity of Glycogen Synthase Kinase 3 Inhibitors. *Mol. Inf.* 2020, 39(6), e1900142. <https://doi.org/10.1002/minf.201900142>
- Croitor, L.; Petric, M.; **Crisan, L.**; Bourosh, P.N.; Vlase, G.; Vlase, T.; Crisan, M. Effect of Substituents on the Crystal Structure and Thermal Stability of N-Phosphorylated Iminophosphoranes. *J. Therm. Anal. Calorim.* 2022, 147(9), 5423–5435. <https://doi.org/10.1007/s10973-022-11201-1>
- Avram, S.I.; **Crisan, L.**; Bora, A.; Pacureanu, L.M.; Avram, S.; Kurunczi, L. Retrospective Group Fusion Similarity Search Based on eROCE Evaluation Metric. *Bioorg. Med. Chem.* 2013, 21(5), 1268–1278. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2012>

## CAPTITOLE DE CARTE

- **Crisan, L.**; Bora, A.; Open-source modelling tools for chemical toxicity and ecotoxicity; in: *Cheminformatic Modeling and Data Gap Filling for a Green and Sustainable Environment*. Kunal Roy, Arkaprava Banerjee (eds.), Chapter 23, 2026, Elsevier, ISBN: 9780443364747
- **Crisan, L.**; Borota, A.; Bora, A.; Funar-Timofei, S.; Ilia G. Chemometric modeling of algal and daphnia toxicity; in: *Chemometrics and Cheminformatics in Aquatic Toxicology*. Roy K. (ed.), Chapter 13, 2021, Wiley, ISBN: 978-1-119-68159-5

## CĂRȚI CA AUTOR ȘI/SAU EDITOR

- Bora, A.; **Crisan, L.**; Borota, A.; Funar-Timofei, S.; Ilia, G. Ecotoxicological QSAR Modeling of Organophosphorus and Neonicotinoid Pesticides. in: Ecotoxicological QSARs. Methods in Pharmacology and Toxicology. Chapter 21, 2020, 513–544., Roy K. (ed.), Humana, Springer protocols, New York, NY., ISBN 978-1-0716-0149-5

- **Crisan, L.**; Kurunczi, L. Relații Cantitative Structură-Activitate (QSAR), METODE SI APLICAȚII, Seria de Monografii de Chimie, Volumul 78, 1-71, 2016 - Editura Universitatii de Vest, Timișoara
- Bora A.; **Crisan L.** (Eds.) Natural Compounds Applications in Drug Discovery and Development; Editura; MDPI, 204 pag, 2024, ISBN 978-3-7258-2280-5
- Chiriac, A.; Simon, Z.; Ostafe, V.; Farbas, V.; **Crisan, L.** (Eds) Annals of West University of Timișoara, Seria Chemistry, Editura Universității de Vest Timișoara vol 20(3),1-68, 2011;
- **Crisan L.** et al., Broșură de activități experimentale STEAM, Editura Presa Universitară Clujeană, 64 pag., 2026, ISBN: 978-606-37-2962-1, <https://editura.ubbcluj.ro/index.php/puc/catalog/book/4090>

## LUCRĂRI ȘTIINȚIFICE RELEVANTE (2020-2025)

1. Plesu, N.; **Crisan, L.**; Maranescu, B.; Popa, A.; Visa, A. Exploring Corrosion Protection with Greener Synthesized Metal Phosphonates. Sustain. Chem. Pharm., 2025, 44, 101970.
2. **Crisan, L.**; Istrate, D. In Silico Approach for Fighting Human Immunodeficiency Virus: A Drug Repurposing Strategy. Chem. Pap., 2025, 79, 417–435.
3. Chirila, C.-B.; Gradinaru, L.; **Crisan, L.**\* A Hybrid Machine Learning Pipeline for Reliable Prediction of Potential HIV-1 Inhibitors. Processes, 2025, 13, 3327.
4. Caraba, I.V.; **Crisan, L.\***; Caraba, M.N. A Comprehensive Environmental and Molecular Strategy for the Evaluation of Fluroxypyr and Nature-Derived Compounds. Int. J. Mol. Sci., 2025, 26, 8209.
5. Istrate, D.; **Crisan, L.\*** Dipeptidyl Peptidase 4 Inhibitors in Type 2 Diabetes Mellitus Management: Pharmacophore Virtual Screening, Molecular Docking, Pharmacokinetic Evaluations, and Conceptual DFT Analysis. Processes, 2023, 11, 3100.
6. Pacureanu, L.; Bora, A.; **Crisan, L.\*** New Insights on the Activity and Selectivity of MAO-B Inhibitors through In Silico Methods. Int. J. Mol. Sci., 2023, 24, 9583.
7. **Crisan, L.**; Borota, A.; Bora, A.; Suzuki, T.; Funar-Timofei, S. Application of Molecular Docking, Homology Modeling, and Chemometric Approaches to Neonicotinoid Toxicity against Aphis Craccivora. Mol. Inform., 2022, 41.
8. Murariu, A.C.; Macarie, L.; **Crisan, L.\***; Pleșu, N. Experimental Investigations of AlMg3 Components with Polyurethane and Graphene Oxide Nanosheets Composite Coatings, after Accelerated UV-Aging. Molecules, 2021, 27, 84.
9. **Crisan, L.**; Istrate, D.; Bora, A.; Pacureanu, L. Virtual Screening and Drug Repurposing Experiments to Identify Potential Novel Selective MAO-B Inhibitors for Parkinson's Disease Treatment. Mol. Divers., 2021, 25, 1775–1794.
10. **Crisan, L.**; Avram, S.; Kurunczi, L.; Pacureanu, L. Partial Least Squares Discriminant Analysis and 3D Similarity Perspective Applied to Analyze Comprehensively the Selectivity of Glycogen Synthase Kinase 3 Inhibitors. Mol. Inform., 2020, 39.

## DESCRIEREA NARATIVĂ - REALIZĂRI IMPORTANTE ÎN DOMENIUL VIZAT

(1) **metode moderne de inteligență artificială aplicate în proiectarea de medicamente** - o realizare academică majoră a perioadei recente constă în dezvoltarea și aplicarea unor metode moderne de inteligență artificială, bazate pe machine learning (ML) și deep learning (DL), pentru repoziționarea medicamentelor și, totodată, pentru descoperirea și prioritizarea compușilor naturali cu potențial terapeutic anti-HIV. În cadrul acestei activități, am conceput și implementat un cadru computațional, care integrează zece modele predictive: două modele DL (Convolutional Neural Network și Multi-Layer Perceptron) și opt modele ML (AdaBoost Classifier, Decision Tree Classifier, Gaussian Naive Bayes, Gaussian Process Classifier, K-Nearest Neighbors, Quadratic Discriminant Analysis, Random Forest Classifier și Support Vector Classifier). Prin acest cadru, am analizat baze de date extinse precum ChEMBL, DrugCentral, COCONUT, etc., antrenând peste 9.000 de modele de învățare automată pentru a evalua activitatea inhibitorie asupra celor trei enzime esențiale HIV-1 (integrează, protează și transcriptază inversă). Fluxul de lucru a fost structurat în două direcții complementare: (i) identificarea compușilor naturali cu potențial anti-HIV și (ii) repoziționarea de medicamente existente pentru aceleași ținte virale. Pentru ambele abordări au fost utilizate multiple tipuri de descriptori moleculari (amprente moleculare și descriptori fizico-chimici), analize tridimensionale ale similarității structurale bazate pe modele farmacofor și suprapunerea formelor moleculare, profilare ADMET completă, studii de andocare moleculară, evaluări energetice MM-GBSA și calcule DFT. Aceste proceduri au condus la dezvoltarea unui sistem orientat pe obiecte, scalabil și flexibil,

capabil să prioritizeze compușii cu activitate biologică relevantă. Metodele dezvoltate permit identificarea rapidă a compușilor naturali, o resursă promițătoare de tratamente alternative datorită diversității structurale, activității multi-țintă și potențialului redus de generare a rezistenței virale, precum și repoziționarea medicamentelor existente pentru aceleași ținte virale. Aceste abordări complementare permit explorarea simultană a resurselor naturale și a medicamentelor deja aprobate, sporind eficiența și siguranța strategiilor terapeutice împotriva HIV-1. În contextul combaterii virusului, descoperirea acestor compuși poate contribui la dezvoltarea unor terapii mai eficiente, sigure și complementare față de medicamentele existente, oferind oportunități pentru tratamente inovative și multi-țintă. Această realizare evidențiază importanța strategică a metodelor AI în cercetarea farmacologică, demonstrând modul în care aplicațiile computaționale avansate pot transforma descoperirea de medicamente și sprijini inovația în sănătatea publică. Totodată, subliniază contribuția personală semnificativă la dezvoltarea și implementarea tehnologiilor computaționale moderne în chimia medicinală, consolidând impactul internațional al cercetării și creând un cadru inovativ pentru integrarea AI în identificarea de tratamente alternative

Primele rezultate ale acestei cercetări au fost publicate, în anul 2025, jurnalul *Processes* (FI = 2.8), iar o altă lucrare acceptată (10.04.2026) în *Scientific Reports* (FI = 3.9) (Nature Portofolio, Springer Nature), cotelat Q1 în Web of Science (WOS), evidențiind relevanța științifică, originalitatea și impactul internațional al studiului, axat pe aplicarea metodelor moderne de machine learning și deep learning pentru descoperirea și prioritizarea compușilor cu activitate biologică relevantă.

**(2) metode computaționale cu aplicabilitate în chimia verde și agricultura sustenabilă** – o altă realizare academică semnificativă constă în dezvoltarea protocoalelor și aplicarea metodelor computaționale avansate pentru proiectarea și caracterizarea *in silico* a compușilor funcționali cu aplicații în chimia verde și agricultura durabilă, cu accent pe inhibarea coroziunii și identificarea de erbicide și insecticide sigure pentru mediu și sănătatea umană. În contextul chimiei verzi, inhibarea coroziunii reprezintă o strategie esențială pentru prelungirea duratei de viață a materialelor metalice și reducerea necesității de înlocuire, având un impact direct asupra consumului de resurse și generării de deșeuri. În acest cadru, compușii organici care conțin grupări funcționale polare, centrate pe atomi precum azot, oxigen, sulf sau fosfor, combinate cu grupări nepolare, s-au dovedit deosebit de eficienți în protecția metalelor, prin capacitatea lor de a forma legături stabile cu suprafețele metalice. Metodele computaționale avansate utilizate au generat rezultate predictive, demonstrând capacitatea modelării teoretice de a descrie și anticipa cu acuratețe mecanismele de inhibare a coroziunii. Prin aplicarea calculelor de chimie cuantică bazate pe teoria funcțională a densității (DFT), împreună cu analiza descriptorilor electronici globali și locali de reactivitate (energie HOMO-LUMO, duritate chimică, electronegativitate, potențial electrostatic molecular), au fost stabilite corelații solide între structura electronică a compușilor și eficiența lor inhibitoare. Simulările de interacție moleculă-suprafață metalică au evidențiat rolul determinant al atomilor hetero și al grupărilor polare în procesele de adsorbție chimică și fizică, responsabile de formarea straturilor protectoare stabile și compacte. Concordanța excelentă dintre rezultatele computaționale și datele electrochimice experimentale confirmă valoarea predictivă a acestor abordări și relevă potențialul lor strategic în proiectarea rațională a inhibitorilor de coroziune sustenabili, cu impact direct asupra durabilității materialelor metalice. Calculele quantochimice (DFT) au fost realizate de asemenea în vederea caracterizării și prioritizării de erbicide și insecticide naturale sigure, printr-o abordare integrată care cuprinde diverse metode computaționale, printre care analiza tridimensională a conformațiilor moleculare și a complementarității acestora, studiile de andocare moleculară și evaluarea completă ADMETox. Prin utilizarea tehnicilor tridimensionale de evaluare a complementarității moleculare, coroborate cu scorurile Tanimoto Combo, Shape și Color, au fost selectați compuși naturali structural similari cu erbicidul de referință fluroxypyr. Pentru acești compuși au fost evaluate riscurile toxicologice și endocrine prin studii de andocare moleculară pe proteina transtiretină umană. Candidații cu afinități reduse pentru transtiretina umană și profil ADMETox favorabil au fost identificați ca prioritari pentru teste experimentale ulterioare. Această strategie permite reducerea utilizării erbicidelor și insecticidelor chimice convenționale, persistente și potențial toxice, promovând o agricultură mai durabilă și mai sigură pentru oameni și organismele non-țintă, inclusiv albinele, esențiale pentru polenizare și biodiversitate. Întreaga activitate subliniază importanța metodelor computaționale avansate în chimia verde și protecția mediului, oferind un cadru rațional pentru optimizarea moleculelor cu eficiență biologică și risc redus, prin integrarea simulărilor cuantice, andocării moleculare, profilării ADMET și evaluărilor structurale tridimensionale. Această abordare inovativă permite accelerarea cercetării pentru soluții chimice alternative, sustenabile și sigure, contribuind atât la protecția mediului, cât și la dezvoltarea unor tehnologii agricole responsabile și aliniate la principiile dezvoltării durabile și

conceptului One Health.

Primele rezultate ale acestor cercetări au fost publicate, în anul 2025, în jurnale de prestigiu cotate Q1 în Web of Science (WOS): *Sustainable Chemistry and Pharmacy* (Elsevier, FI=5.8) și *International Journal of Molecular Sciences* (MDPI, FI=4.9), evidențiind relevanța științifică și impactul tematicii în domeniul chimiei verzi și al sustenabilității.

(3) **coordonare și îndrumare academică** - o altă realizare semnificativă a perioadei recente o constituie inițierea, coordonarea și implementarea unor programe educaționale și de mentorat, cu impact relevant atât asupra comunității academice, cât și asupra mediului educațional preuniversitar. Aceste activități evidențiază exercitarea unui rol de coordonare și îndrumare academică constant, competențe consolidate în organizarea proiectelor educaționale, precum și o implicare susținută în formarea și ghidarea tinerilor cercetători. În prezent, sunt implicată activ în activitățile de coordonarea programelor de practică voluntară destinate elevilor, precum și a programelor de mentorat pentru studenți ai Universității de Vest din Timișoara, oferind îndrumare în desfășurarea proiectelor de cercetare, dezvoltarea competențelor academice și orientarea parcursului profesional. În cadrul acestor programe, am asigurat monitorizarea sistematică a progresului participanților, evaluarea rezultatelor și transferul structurat de cunoștințe, contribuind la dezvoltarea gândirii critice, a rigorii științifice și a interesului pentru activitatea de cercetare. De asemenea, sunt membru în comisiile de îndrumare ale doctoranzilor din cadrul Universității de Medicină și Farmacie „Victor Babeș” din Timișoara și ale Institutului de Chimie „Coriolan Drăgulescu” din Timișoara, având un rol activ în orientarea tematică a cercetărilor, evaluarea progresului științific și consolidarea competențelor de cercetare avansată ale acestora. În paralel, sunt membru în comitetul de organizare al Conferinței Internaționale „*New Trends in Chemistry Research*”, activități prin care am dobândit abilități solide de gestionare a provocărilor organizatorice și o înțelegere aprofundată a diversității culturale, esențiale pentru colaborarea eficientă într-un mediu internațional. De asemenea, particip la reprezentarea Institutului de Chimie „Coriolan Drăgulescu” în cadrul evenimentului „Noaptea Cercetătorilor Europeni”, o inițiativă anuală cu vizibilitate ridicată, dedicată promovării cercetării științifice prin activități interactive și demonstrații experimentale adresate publicului larg.

O componentă centrală a activităților de educație științifică și mentorat o constituie inițierea și coordonarea proiectului CHIMPACT - „*CHimia cu IMPACT în educație pentru un stil de viață sănătos*” care integrează activități educaționale inovative destinate elevilor și cadrelor didactice, cu scopul de a facilita transferul cunoștințelor științifice către comunitatea preuniversitară. În calitate de director al proiectului, asigur planificarea strategică, managementul activităților, coordonarea echipei de cercetători și cadre didactice, dezvoltarea platformei educaționale online, precum și organizarea atelierelor și concursurilor tematice. Totodată, am fost implicată direct în desfășurarea activităților educaționale, susținând prezentări și workshop-uri pe teme de chimie computațională și aplicațiile acestora în domeniul sănătății și al vieții cotidiene. Prin ansamblul acestor activități se evidențiază capacitatea mea de a transfera cunoștințe științifice către societate, de a contribui la formarea competențelor tinerilor și de a integra cercetarea în educație, demonstrând abilități consolidate de coordonare, leadership academic și promovare a inovării educaționale. Consider că dezvoltarea sustenabilă a societății se bazează pe investiția strategică în educație și cercetare, iar obiectivul meu profesional este consolidarea și extinderea legăturilor dintre aceste domenii, prin crearea de oportunități reale de formare, mentorat și dezvoltare profesională și științifică pentru tinerele generații.

În calitate de coordonator și autor, am inițiat elaborarea unei broșuri metodologice cu activități experimentale pentru elevi, structurată pe principii științifice riguroase și menită să dezvolte gândirea critică și competențele experimentale. Broșura, identificată prin ISBN 978-606-37-2962-1, va fi tipărită, în acest an, și va fi distribuită în unități de învățământ. De asemenea va fi depusă la Biblioteca Națională, Biblioteci județene și Biblioteca Centrală Universitară, reprezentând o resursă educațională de referință pentru stimularea interesului pentru chimie și știință în rândul tinerelor generații.

Data  
23.04.2026

Dr. CRIȘAN Elena-Luminița

Semnătura,

