

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2025

Cifra proiectului 25.80012.5007.28TC

Denumirea Proiectului Sinteza dirijată și studiul activității biologice a unor compuși terpenici cu unități structurale heterociclice

Rezumat în limba română pentru anul 2025

Scopul principal al proiectului pentru perioada anului 2025 s-a axat pe elaborarea unor metode eficiente de sinteză a hibrizilor moleculari care conțin fragment tetranorlabdanic, tiosemicarbazidic și 1,3,4-oxadiazolic, pe confirmarea structurilor acestora și pe cercetarea activității lor antioxidante. În acest sens, au fost utilizate, ca materie primă, produsele de transformare ale diterpenoidei labdanice naturale (-)-sclareol, izolat din materie primă locală și regenerabilă.

Prima etapa a fost axată pe valorificarea deșeurilor provenite de la producerea uleiului volatil de Salvie tămâioasă (*Salvia sclarea* L.) cu obținerea diterpenoidei labdanice naturale (-)-sclareol.

Ulterior, a fost realizată sinteza a 5 compuși noi cu schelet combinat tetranorlabdanic, tiosemicarbazidic și 1,3,4-oxadiazoli, pornind de la sclareol. Structurile compușilor sintetizați au fost confirmate prin metode spectroscopice: IR, ^1H -RMN, ^{13}C -RMN, ^{15}N -RMN și aplicații bidimensionale (COSY, HMQC, HMBC).

A fost cercetată activitatea antioxidantă prin metoda radicalică DPPH pentru 7 compuși, dintre care 4 cu schelet hibrid tetranorlabdanic, tiosemicarbazidic și 1,3,4-oxadiazolic. Unul dintre compușii analizați a manifestat o capacitate antioxidantă superioară, comparabilă și chiar mai ridicată decât cea a acidului ascorbic ($\text{IC}_{50} = 0.2439$, $\text{IC}_{100} = 0.4877$).

Rezultatele obținute subliniază importanța arhitecturii structurale a noilor compuși sintetizați, ale cărei particularități electronice și sterice influențează direct capacitatea acestora de a interacționa cu radicalul DPPH și, implicit, de a manifesta activitate antioxidantă. În continuare, se propune investigarea detaliată a relației dintre structura compușilor și activitatea lor antioxidantă, pentru a identifica fragmentele structurale care conferă moleculei eficiență biologică—un demers esențial pentru dezvoltarea noilor candidați terapeutici în industria farmaceutică.

Conducătorul de proiect

LUNGU Lidia



(numele, prenumele, semnătura)

Data: 28.11.2025

LȘ



For the year 2025

The main objective of the project for 2025 focused on developing efficient synthetic methods for molecular hybrids containing tetranorlabdane, thiosemicarbazide, and 1,3,4-oxadiazole fragments, confirming their structures, and investigating their antioxidant activity. In this context, the transformation products of the natural labdane-type diterpenoid (-)-sclareol, isolated from local and renewable raw materials, were used as starting materials.

The first stage focused on the valorization of waste resulting from the production of the essential oil of clary sage (*Salvia sclarea* L.), leading to the isolation of the natural labdane diterpenoid (-)-sclareol.

Subsequently, the synthesis of five new compounds bearing a combined tetranorlabdane, thiosemicarbazide and 1,3,4-oxadiazole scaffold was carried out starting from sclareol. The structures of the synthesised compounds were confirmed using spectroscopic methods, including IR, ^1H NMR, ^{13}C NMR, ^{15}N NMR, and two-dimensional NMR techniques (COSY, HMQC, HMBC).

The antioxidant activity of seven compounds was evaluated using the DPPH radical method, four of which possessed the hybrid tetranorlabdane, thiosemicarbazide and 1,3,4-oxadiazole framework. One of the analysed compounds exhibited superior antioxidant capacity, comparable to or even exceeding that of ascorbic acid ($\text{IC}_{50} = 0.2439$, $\text{IC}_{100} = 0.4877$).

The obtained results highlight the importance of the structural architecture of the newly synthesized compounds, whose electronic and steric features directly influence their ability to interact with the DPPH radical and, consequently, their antioxidant activity. Further studies are proposed to investigate in detail the relationship between molecular structure and antioxidant activity, in order to identify the structural fragments that confer biological efficiency - an essential step for the development of new therapeutic candidates in the pharmaceutical industry.

Conducătorul de proiect

LUNGU Lidia



(numele, prenumele, semnătura)

Data: 28.11.2025

LȘ

