

Propozycje tematów badawczych/ Proposals of research topics

Dyscyplina: Nauki chemiczne/ Discipline: Chemical sciences

prof. dr hab. Piotr Bałczewski

Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych

Instytut Chemii

p.balczewski@ujd.edu.pl

1. Mechanochemiczna i rozpuszczalnikowa synteza formulacji farmaceutycznych zawierających blokery receptora angiotensyny II oraz naturalne związki chemiczne.

Praca eksperymentalna, której celem byłoby otrzymywanie nowych formulacji farmaceutycznych na drodze syntezy mechanochemicznej oraz rozpuszczalnikowej, wykorzystując przeciwnadciśnieniowe antagonisty receptora angiotensyny II (sartany) i związki chemiczne pochodzenia naturalnego, jako ko-formery.

1. Mechanochemical and solvent synthesis of pharmaceutical formulations containing angiotensin II receptor blockers and natural chemical compounds.

Experimental work aimed at obtaining new pharmaceutical formulations by mechanochemical and solvent synthesis, using antihypertensive angiotensin II receptor antagonists (sartans) and compounds of natural origin as co-formers.

The aim of the work is to: 1) to improve the solubility of hard-to-solubilize antihypertensive drugs on the market to make the drugs more bioavailable to the human body, 2) to enhance the drug's primary action by combining it in a formulation with a matched co-former or other drug.

prof. dr hab. Józef Drabowicz

Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych

Instytut Chemii

j.drabowicz@ujd.edu.pl

jozef.drabowicz@cbmm.lodz.pl

1. Nowe ligandy i katalizatory organiczne oraz chiralne ciecze jonowe oparte na diastereoizomerycznych 1-[α -(N-1-aryloetylo)]benzylo-2-naftolach

Tematyka pracy związana jest z wykorzystaniem jako substratu do syntezy tytułowych ligandów, katalizatorów i cieczy jonowych pochodnych 2-naftolu funkcjonalizowanego w pozycji 1 podstawnikiem (N-1-aryloetylo)benzylowym, a w szczególności diastereoizomerycznie czystego 1-[α -(N-1-feniloetylo)]benzylo-2-naftolu. Badania o charakterze syntetycznym związane będą z syntezą modelowych aminonaftoli i ich dalszą funkcjonalizacją wynikającą z wbudowania do struktury związków wyjściowych podstawników dających szansę wykorzystania finalnych produktów jako chiralnych substancji pomocniczych w syntezie asymetrycznej. Prace syntetyczne uzupełnione

zostaną badaniami strukturalnymi przy wykorzystaniu technik spektroskopowych dostępnych w UJD i instytucjach kooperujących.

1. New organic ligands and catalysts and chiral ionic liquids based on diastereoisomeric 1-[α -(N-1-arylethyl)]benzyl-2-naphthols

The topic of the work is related to the use of 2-naphthol derivatives functionalized in position 1 with an (N-1-arylethyl)]benzyl substituent as a substrate for the synthesis of the title ligands, catalysts and ionic liquids, and in particular diastereoisomerically pure 1-[α -(N-1-phenylethyl)]benzyl-2-naphthol. Synthetic studies will be related to the synthesis of model aminonaphthols and their further functionalization resulting from the incorporation of substituents into the structure of starting compounds, giving the possibility of using the final products as a chiral auxiliary in asymmetric synthesis. Synthetic work will be supplemented by structural studies using spectroscopic techniques available at UJD and cooperating institutions.

prof. dr hab. Wojciech Marczak

Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych

Instytut Chemii

w.marczak@ujd.edu.pl

1. Nowy model lepkości roztworów zasocjowanych.

Lepkość płynu stanowi miarę jego oporu związanego z płynięciem. Na lepkość cieczy wpływają oddziaływania międzycząsteczkowe, zatem badania lepkości dostarczają informacji o tych oddziaływaniach. Ponadto znajomość lepkości cieczy oraz umiejętność jej przewidywania jest istotna dla wielu zastosowań praktycznych.

Planowana praca polegać będzie na przetestowaniu nowego modelu matematycznego lepkości dynamicznej dwuskładnikowych cieczy newtonowskich. Nowością jest rozpatrywanie dynamiki ruchu nie tylko pojedynczych molekuł, ale agregatów molekularnych w cieczy. Pod tym względem nowy model różni się istotnie od konwencjonalnych. Dotychczas powszechnie modelowano lepkość stosując metody udziałów grupowych. Wiązano zatem lepkość z budową pojedynczej cząsteczki, a nie agregatu molekularnego.

Zadaniem doktoranta będzie dopasowanie równania modelu do ok. 300 zbiorów danych empirycznych, który zgromadzi przeglądając literaturę przedmiotu. Równolegle doktorant będzie obliczał geometrię agregatów molekularnych oraz ich energie stabilizacji metodami chemii kwantowej. Następnie doktorant podejmie próbę skorelowania parametrów modelu z teoretycznymi charakterystykami agregatów molekularnych.

Planowane badania mają dać odpowiedzi na następujące pytania:

- Do mieszanin jakich klas związków chemicznych model się nadaje?
- Czy wartości dwóch parametrów modelu mogą zostać oszacowane z energii stabilizacji i geometrii homo- i heteroasocjatyw składników mieszaniny, obliczonych metodami chemii kwantowej?
- Jeśli odpowiedź na drugie pytanie jest przecząca, czyli model jest tylko równaniem korelacyjnym, to czy ma on przewagę nad modelami stosowanymi powszechnie?

Dokładnie przetestowany model może stać się atrakcyjną alternatywą dla dotychczasowych tym bardziej, że prosta matematyczna postać równań modelu jest zaletą, którą docenią praktycy.

1. **A new model for the viscosity of the associated solutions.**

The viscosity of a fluid is a measure of its “thickness”. In the viscosity of liquids, the molecular interactions manifest themselves. Thus, studies of viscosity provide information about such interactions. Moreover, knowledge of the viscosity of liquids and methods of their prediction is essential in engineering applications.

This project aims to test a new mathematical model for the dynamic viscosity of associated binary liquid mixtures. The model assumes that molecular aggregates rather than individual molecules should be considered in the Newtonian liquid. In this respect, the new approach significantly differs from the conventional models. Commonly, the researchers modelled viscosity using group contribution methods, thus related the viscosity with the structure of a single molecule rather than molecular aggregates.

A student’s task will be to fit the model equation to ca. 300 sets of empirical viscosity data, which they gather from the literature. Concurrently, the student will calculate the geometry and stabilization energy of the molecular aggregates using quantum chemical methods. Next, the student will search for correlations between the model parameters and the theoretical characteristics of the molecular aggregates.

The planned studies are to give answers to the following questions:

- To the mixtures of what classes of compounds is the model applicable?
- Can the values of the two model parameters be assessed from the stabilization energies and/or geometry parameters of the self- and cross-associates of the mixture components calculated by quantum chemical methods?
- If the answer to the second question is negative, i.e. the model is just a correlation equation, is it better than those commonly used?

The validated model will be a potential alternative to the conventional ones. The simple model equations are an advantage that will be appreciated by practitioners.

prof. dr hab. Volodymyr Pavlyuk
Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych
Instytut Chemii
v.pavlyuk@ujd.edu.pl

1. **Synteza, analiza fazowa, badania strukturalne oraz własności elektrochemiczne stopów układów {Y, Tb}–{Co, Ni}–{Li, Na}–{Al, Sn}.**

Rozwój sytuacji na rynku energetycznych surowców naturalnych (tj. ropa naftowa, gaz ziemny i in.) oraz prognozy dotyczące potrzeb energetycznych stwarzają konieczność poszukiwania nowych, alternatywnych źródeł energii, w tym baterii, których skład będzie przyjazny dla środowiska naturalnego. Bardzo perspektywicznym obecnie rozwiązaniem jest magazynowanie energii za pomocą ogniw złożonych z układów (stopy, kompozyty, inne). Takie magazynowanie energii ma największą perspektywę wśród wielu proponowanych dotychczas sposobów.

Badania diagramów fazowych oraz struktury związków międzymetalicznych są podstawą do poszukiwania nowych materiałów o unikatowych własnościach fizyko-chemicznych. Stopy ziem rzadkich bardzo perspektywiczne pod kątem wykorzystania ich jako materiałów elektrodowych w ogniwach wodorkowych, a stopy litu oraz sodu – w ogniwach litowo- i sodowo-jonowych.

1. **Synthesis, phase analysis, structural studies and electrochemical properties of alloys of {Y, Tb}-{Co, Ni}-{Li, Na}-{Al, Sn} systems.**

The development of the situation on the market of natural energy resources (i.e., crude oil, natural gas, etc.) and forecasts of energy needs create the need to search for new, alternative energy sources, including batteries whose composition will be environmentally friendly. A promising solution at the moment is energy storage using cells composed of systems (alloys, composites, etc.). Such energy storage has the greatest prospect among the many proposed methods.

Studies of phase diagrams and the structure of intermetallic compounds are the basis for the search for new materials with unique physical and chemical properties. Rare earth alloys are very promising for electrode materials in hydride cells, and lithium and sodium alloys in lithium- and sodium-ion cells.

dr. hab. Barbara Morzyk-Ociepa, prof. UJD
Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych
Instytut Chemii

b.morzyk@ujd.edu.pl

1. **Synteza i charakterystyka nowych kompleksów metali o potencjalnym zastosowaniu w medycynie**

Słowa kluczowe: Kompleksy metali, synteza, charakterystyka, diagnostyka medyczna, terapia, biokompatybilność, ligand

Cel projektu: Celem projektu jest synteza i szczegółowa charakterystyka nowych kompleksów metali, takich jak miedź, cynk, żelazo, platyna, pallad i mangan, pod kątem ich potencjalnego zastosowania w diagnostyce oraz terapii różnych schorzeń. Badania będą skupiać się na opracowaniu związków pełniących rolę środków diagnostycznych lub terapeutycznych, z wykorzystaniem ligandów pochodzenia biologicznego, co zapewni biokompatybilność i pożądane właściwości biologiczne.

Problem badawczy: Jak struktura i skład nowych kompleksów metali wpływają na ich właściwości diagnostyczne i terapeutyczne, w tym aktywność przeciwdrobnoustrojową, antyoksydacyjną, cytotoksyczność oraz aktywność przeciwnowotworową?

Metody badawcze:

- Synteza kompleksów: Otrzymanie kompleksów metali z ligandami pochodzenia biologicznego, z uwzględnieniem różnych podstawników w cząsteczce liganda, aby zbadać ich wpływ na właściwości kompleksów.
- Charakterystyka fizykochemiczna: Zastosowanie technik takich jak spektroskopia UV-Vis, FTIR, FT-Raman, NMR oraz analiza termiczna w celu określenia struktury i stabilności kompleksów. Pomiary widm oscylacyjnych i NMR będą wykonywane we współpracy z Politechniką Wrocławską.

- Obliczenia teoretyczne: Wykorzystanie metody teorii funkcjonału gęstości (DFT) w ramach grantu obliczeniowego udostępnionego przez Wrocławskie Centrum Sieciowo-Superkomputerowe, aby potwierdzić strukturę i stabilność kompleksów oraz wspomóc interpretację wyników eksperymentalnych.
- Badania biologiczne:
 - a) Aktywność przeciwdrobnoustrojowa i antyoksydacyjna (DPPH): Ocena skuteczności kompleksów w tych aspektach.
 - b) Aktywność cytotoksyczna i przeciwnowotworowa: Badania prowadzone we współpracy z Instytutem Immunologii i Terapii Doświadczalnej im. Ludwika Hirszfelda Polskiej Akademii Nauk we Wrocławiu, specjalizującym się w analizach cytotoksyczności i przeciwnowotworowej aktywności związków chemicznych.
- Analiza strukturalna: Badania prowadzone we współpracy z Uniwersytetem w Lipsku w celu przeprowadzenia zaawansowanych badań krystalograficznych, umożliwiających dokładne określenie struktury kompleksów.

Znaczenie projektu: Realizacja projektu przyczyni się do poszerzenia wiedzy na temat nowych kompleksów metali oraz ich właściwości strukturalnych i biologicznych. Uzyskane wyniki mogą stanowić podstawę do dalszych badań nad nowymi materiałami diagnostycznymi i terapeutycznymi, otwierając nowe perspektywy w medycynie, zwłaszcza w diagnostyce obrazowej, terapii przeciwnowotworowej oraz w leczeniu infekcji i stresu oksydacyjnego.

Planowane publikacje i patenty: W wyniku realizacji projektu planowane jest opublikowanie wyników w renomowanych czasopismach naukowych oraz zgłoszenie patentów dotyczących nowych kompleksów metali i ich zastosowań w medycynie.

Projekt będzie realizowany we współpracy z wymienionymi instytucjami i specjalistami, co zapewni dostęp do specjalistycznej aparatury oraz doświadczenia niezbędnego do osiągnięcia założonych celów badawczych.

1. Synthesis and characterization of new metal complexes with potential medical applications

Keywords: Metal complexes, synthesis, characterization, medical diagnostics, therapy, biocompatibility, ligand

Project objective: The aim of this project is to synthesize and thoroughly characterize new metal complexes of copper, zinc, iron, platinum, palladium, and manganese, assessing their potential applications in the diagnosis and treatment of various diseases. The research will focus on developing compounds that serve as diagnostic or therapeutic agents, utilizing biologically derived ligands to ensure biocompatibility and desired biological properties.

Research question: How do the structure and composition of new metal complexes influence their diagnostic and therapeutic properties, including antimicrobial activity, antioxidant capacity, cytotoxicity, and anticancer efficacy?

Research methods:

- **Complex synthesis:** Preparation of metal complexes with biologically derived ligands, incorporating various substituents in the ligand molecules to study their impact on the properties of the complexes.
- **Physicochemical characterization:** Employment of techniques such as UV-Vis spectroscopy, FTIR, FT-Raman, NMR, and thermal analysis to determine the structure and stability of the complexes. Spectroscopic measurements will be conducted in collaboration with Wrocław University of Science and Technology.
- **Theoretical calculations:** Application of Density Functional Theory (DFT) methods, utilizing computational resources provided by the Wrocław Centre for Networking and Supercomputing, to confirm the structure and stability of the complexes and to assist in interpreting experimental results.
- **Biological studies:**
 - a) **Antimicrobial and antioxidant activity (DPPH):** Evaluation of the effectiveness of the complexes in these areas.
 - b) **Cytotoxic and anticancer activity:** Studies will be conducted in collaboration with the Ludwik Hirszfeld Institute of Immunology and Experimental Therapy of the Polish Academy of Sciences in Wrocław, which specializes in analyzing the cytotoxicity and anticancer properties of chemical compounds.
- **Structural analysis:** Advanced crystallographic studies will be performed in collaboration with the University of Leipzig to accurately determine the structures of the complexes.

Project significance: Implementing this project will enhance our understanding of new metal complexes and their structural and biological properties. The findings may lay the groundwork for developing new diagnostic and therapeutic materials, offering novel approaches in medicine, particularly in imaging diagnostics, cancer therapy, and the treatment of infections and oxidative stress.

Planned publications and patents: The project aims to publish results in reputable scientific journals and file patents for new metal complexes and their medical applications.

This project will be conducted in collaboration with the aforementioned institutions and specialists, ensuring access to specialized equipment and expertise essential for achieving the research objectives.