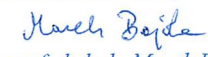


Formularz zgłoszenia tematu badawczego do interdyscyplinarnego programu kształcenia	
Dyscyplina <i>Proszę zaznaczyć</i>	☐ nauki medyczne ☒ <u>nauki farmaceutyczne</u> ☐ nauki o zdrowiu
Zgłaszający – osoba zainteresowana objęciem funkcji promotora	
Tytuł/stopień Imię i nazwisko	Prof. dr hab. Marek Bajda
Kategoria <i>proszę zaznaczyć odpowiednią kategorię wg Regulaminu SDNMinOZ</i>	<u>X osoba zatrudniona w UJ CM posiadająca stopień naukowy doktora habilitowanego lub tytuł profesora oraz złożyła oświadczenie o przynależności w wymiarze co najmniej 75% do dyscypliny, w której zgłaszany jest temat badawczy</u> ☐ osoba zatrudniona w Polsce w uczelni lub innym podmiocie wymienionym w art. 7 ust. 1 ustawy – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, posiadająca tytuł profesora lub stopień doktora habilitowanego oraz złożyła oświadczenie o przynależności w wymiarze co najmniej 25% do dyscypliny, w której zgłaszany jest temat badawczy, oraz przedstawiła zgodę osoby spełniającej warunki określone w pkt 1 na podjęcie się funkcji promotora, po uzyskaniu pozytywnej opinii rady szkoły ☐ osoba będąca pracownikiem zagranicznej uczelni lub instytucji naukowej, jeżeli rada właściwej dyscypliny uzna, że osoba ta posiada znaczące osiągnięcia w zakresie zagadnień naukowych, których dotyczy temat badawczy.
Data uzyskania a) stopnia naukowego doktora	8.11.2010
b) stopnia naukowego doktora habilitowanego	27.11.2017
c) tytułu profesora	4.07.2022
Miejsce zatrudnienia:	Uniwersytet Jagielloński Collegium Medicum Wydział Farmaceutyczny Katedra Chemii Farmaceutycznej Zakład Fizykochemicznej Analizy Leku
Adres e-mailowy:	marek.bajda@uj.edu.pl
Telefon kontaktowy:	+48 12 620-54-52 / +48 661-852-843
Dorobek naukowy: lista max 5 publikacji z ostatnich 3 lat kalendarzowych	- Kukułowicz J., Siwek A., Wolak M., Bröer A., Yadav A., Bröer S., Bajda M., Insight into the structure of the neutral amino acid transporter B⁰AT2 enabled the discovery of tiagabine as an inhibitor, <i>ACS Chem. Neurosci.</i> 2025, 16: 262-274 - Łątka K., Kicking S., Rzepka Z., Zaręba P., Latacz G., Siwek A., Wolak M., Stary D., Marcinkowska M., Wellendorph P., Wrześniok D., Bajda M., Rational search for betaine/GABA transporter 1 inhibitors – in vitro evaluation of selected hit compound, <i>ACS Chem. Neurosci.</i> 2024, 15: 4046–4054

	3. Stary D., Bajda M., Structural studies of the taurine transporter: A potential biological target from the GABA transporter subfamily in cancer therapy, <i>Int. J. Mol. Sci.</i> 2024, 25, 7339 4. Kukułowicz J., Pietrzak-Lichwa K., Klimończyk K., Idlin N., Bajda M., The SLC6A15-SLC6A20 neutral amino acid transporter subfamily: functions, diseases, and their therapeutic relevance, <i>Pharm. Rev.</i> 2024, 76(1), 142-193 5. Zaręba P., Łątka K., Mazur G., Gryzłó B., Pasieka A., Godyń J., Panek D., Skrzypczak-Wiercioch A., Höfner G.C., Latacz G., Maj M., Espargaró A., Sabaté R., Józwiak K., Wanner K.T., Sałat K., Malawska B., Kulig K., Bajda M., Discovery of novel multifunctional ligands targeting GABA transporters, butyrylcholinesterase, β-secretase, and amyloid β aggregation as potential treatment of Alzheimer's disease, <i>Eur. J. Med. Chem.</i> 2023, 261: 115832
Sumaryczny Impact Factor	391,73
Indeks cytowań Web of Science Core Collection	2692
Indeks Hirscha	29
Liczba wypromowanych doktorów:	2 (promotor) + 1 (promotor pomocniczy)
Liczba wypromowanych magistrów:	21
Liczba aktualnych doktorantów w Szkole Doktorskiej Nauk Medycznych i Nauk o Zdrowiu	2
Proponowany temat badawczy	Poszukiwanie nowych inhibitorów transportera B ⁰ AT2
Uzasadnienie zgodności tematu z dyscypliną (max 100 słów)	Proponowany temat dotyczy projektowania i syntezy inhibitorów transportera B ⁰ AT2 (SLC6A15), który jest odpowiedzialny za transport aminokwasów obojętnych. Jego obecność stwierdzono w błonie komórkowej neuronów, dzięki czemu zaopatrzuje je w prolinę, leucynę, walinę, izoleucynę i metioninę. Nieprawidłowe funkcjonowanie transportera B ⁰ AT2 może być przyczyną zaburzeń depresyjnych. Z kolei knockout genu slc6a15 u myszy zmniejsza poziom lęku w warunkach stresowych. W związku z powyższym postuluje się, że hamowanie transportera B ⁰ AT2 może mieć korzystny efekt terapeutyczny. Badania nad inhibitorami tego transportera są zatem istotne dla rozwoju nowych leków, a tematyka projektu w pełni wpisują się w zakres dyscypliny „Nauki farmaceutyczne”.
Krótki opis metod badawczych (max 250 słów)	Celem niniejszego projektu jest poszukiwanie inhibitorów transportera B ⁰ AT2. Nasze wstępne badania wykazały, że tiagabina (lek przeciwdrgawkowy) posiada zdolność hamowania wspomnianego transportera (Kukułowicz, ACS Chem Neurosci 2024). Dodatkowo dane literaturowe wskazują, że tiagabina posiada pewną aktywność przeciwdepresyjną i przeciwłękową, w tym także u myszy z knockoutem dla transportera GAT1, który jest głównym celem tego leku. Takie wyniki pozwalają sugerować, że aktywność przeciwłękowa i przeciwdepresyjna tiagabiny może być związana z hamowaniem transportera B ⁰ AT2. Aby móc udowodnić tę hipotezę konieczne jest znalezienie odpowiednich inhibitorów B ⁰ AT2.

	Poszukiwanie nowych inhibitorów będzie wykorzystywać techniki modelowania molekularnego: wirtualny screening oraz projektowanie <i>de novo</i>. W projektowaniu zostaną wykorzystane opracowane wcześniej modele homologiczne transportera B⁰AT2 oraz białek pokrewnych. Optymalizacja struktury nowych inhibitorów będzie obejmowała modyfikacje strukturalne prowadzące do nasilenia oddziaływań z wybranym transporterem, przy jednoczesnym osłabieniu wiązania w pozostałych. Do oceny wiązania będą wykorzystywane dokowanie i symulacje dynamiki molekularnej wykonywane przy pomocy pakietów do modelowania, m.in. Schrodinger Suite. Dla zaprojektowanych pochodnych zostanie przeprowadzona analiza dostępności. Związki dostępne komercyjnie zostaną zakupione, a w pozostałych przypadkach zostanie zaplanowana i przeprowadzona synteza. Stosowane będą klasyczne metody syntezy jak i nowoczesne z zastosowaniem reakcji w środowisku mikrofal. W ramach danej klasy związków zostanie przygotowany schemat syntezy pochodnych różniących się m.in. geometrią, rodzajem podstawników i grup funkcyjnych. Wykorzystana zostanie standardowa aparatura niezbędna do syntezy i oczyszczania związków, a struktura produktów zostanie potwierdzona metodami spektroskopowymi. Otrzymane związki zostaną przekazane do badań biologicznych na liniach komórkowych z ekspresją transportera B⁰AT2 (% hamowania, IC₅₀, K_d, kinetyka inhibicji), a dla najaktywniejszych pochodnych zostaną wykonane poszerzone badania.
Przewidywane miejsce realizacji projektu:	Zakład Fizykochemicznej Analizy Leku UJ CM
Opis zadań dla doktoranta	1. Analiza danych literaturowych związanych z tematyką prowadzonych badań. 2. Rewalidacja modeli homologicznych transportera B⁰AT2 oraz pokrewnych białek w różnych stanach konformacyjnych. 3. Projektowanie nowych związków bioaktywnych metodami opartymi na strukturze ligandów i strukturze celu molekularnego (ligand-based design, structure-based design). 4. Wykonanie wirtualnego screeningu baz związków dostępnych komercyjnie w celu wyłonienia potencjalnych inhibitorów transportera B⁰AT2. 5. Optymalizacja struktury znalezionych hitów. 6. Ocena właściwości fizykochemicznych i farmakokinetycznych metodami <i>in silico</i>. 7. Udział w syntezie zaprojektowanych inhibitorów (projektowanie ścieżek syntezy, synteza związków, analiza danych spektralnych). 8. Analiza wyników badań biologicznych. 9. Udział w dyskusjach naukowych, związanych z realizowanym projektem. 10. Całościowa analiza uzyskanych wyników oraz opracowanie materiałów do publikacji i zgłoszeń konferencyjnych.
Oczekiwania wobec doktoranta: specyficzne umiejętności i doświadczenie (<i>opis oczekiwań nie może wskazywać na osobę konkretnego kandydata</i>).	1. Zainteresowanie prowadzeniem badań naukowych. 2. Ukończenie studiów na kierunku: farmacja, drug discovery and development, chemia lub chemia medyczna. 3. Znajomość zagadnień związanych z budową białek, projektowaniem nowych leków oraz analizą oddziaływań ligand – białko. 4. Umiejętność obsługi komputera (znajomość systemów Windows, Linux).

	5. Znajomość podstawowych narzędzi do modelowania cząsteczkowego (PyMOL, GOLD, Autodock, SchrodingerSuite, serwisy internetowe: SwissModel, SwissADME). 6. Znajomość podstawowych metod syntezy związków chemicznych. 7. Umiejętność analizy danych spektralnych (NMR, LC-MS). 8. Teoretyczna znajomość metod badania aktywności transporterów błonowych. 9. Umiejętność krytycznej analizy danych literaturowych.
Czasowa dyspozycyjność doktoranta (liczba godzin/tydz.) w zakresie koniecznym do realizacji projektu	dyspozycyjność czasowa: 30-40 h/tydzień standardowe godziny pracy
Czy projekt badawczy wymaga samodzielnego wykonywania czynności medycznych na pacjentach przez doktoranta?*	<u>NIE</u> TAK poniżej należy krótko uzasadnić dlaczego i jakiego rodzaju prawo wykonywania zawodu jest wymagane
30.04.2025 Data	Katedra Chemii Farmaceutycznej UJ CM Zakład Fizykochemicznej Analizy Leku  prof. dr. hab. Marek Bajda.. Podpis zgłaszającego

*jeżeli temat badawczy wymaga wykonywania samodzielnych czynności medycznych przez doktoranta, to zgodnie z warunkami rekrutacji (Załącznik nr 1 i 2 do uchwały nr a nr 14/II/2024 Senatu Uniwersytetu Jagiellońskiego z dnia 28 lutego 2024 roku) kandydat musi posiadać prawo wykonywania zawodu, co należy uzasadnić i wskazać jego rodzaj (prawo wykonywania zawodu lekarza/pielęgniarki/fizjoterapeuty, etc). Prawo wykonywania zawodu lekarza lub lekarza dentysty na czas odbywania stażu podyplomowego w rekrutacji do SDN MiNoZ będzie traktowane równoważnie z prawem wykonywania zawodu lekarza lub lekarza dentysty na terenie Rzeczypospolitej Polskiej.

Zgłaszany temat badawczy nie może powielać się tematycznie ani koncepcyjnie z pracą przygotowywaną przez aktualnego doktoranta Szkoły Doktorskiej pod opieką osoby zgłaszającej temat badawczy.

Wypełniony formularz należy wydrukować, podpisać w odpowiednich miejscach, zeskanować wraz z podpisanymi oświadczeniami do jednego pliku i przesłać drogą elektroniczną do dnia 30 kwietnia 2025 roku na adres:

w dyscyplinie nauki medyczne: rekrutacja.nmedyczne@cm-uj.krakow.pl

w dyscyplinie nauki farmaceutyczne: rekrutacja.nfarmaceutyczne@cm-uj.krakow.pl

w dyscyplinie nauki o zdrowiu: rekrutacja.nozdrowiu@cm-uj.krakow.pl

w treści e-maila należy przesłać **nazwę zgłaszanego tematu badawczego**.

Oświadczenie osoby zgłaszającej temat badawczy

Oświadczam, że realizacja tematu badawczego pt.

Poszukiwanie nowych inhibitorów transportera B⁰AT2

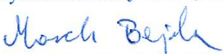
przez doktoranta

Szkoły Doktorskiej Nauk Medycznych i Nauk o Zdrowiu

~~wiąże się~~/ **nie wiąże się** z działalnością objętą ochroną – należy przez to rozumieć określoną /niepotrzebne skreślić/

w art. 21 ustawy z dnia 13 maja 2016 r. o przeciwdziałaniu zagrożeniom przestępczością na tle seksualnym i ochronie małoletnich (Dz.U. z 2023 r. poz. 1304 ze zm.) działalność związaną z wychowaniem, edukacją, wypoczynkiem, leczeniem, świadczeniem porad psychologicznych, rozwojem duchowym, uprawianiem sportu lub realizacją innych zainteresowań przez małoletnich, lub opieką nad nimi.

Katedra Chemii Farmaceutycznej UJ CM
Zakład Fizykochemicznej Analizy Leku


prof. dr hab. Marek Bajda

.....
/podpis osoby zgłaszającej temat badawczy/

Oświadczenie osoby zgłaszającej temat badawczy

Potwierdzam, że znane mi są zasady rekrutacji do Szkoły Doktorskiej Nauk Medycznych i Nauk o Zdrowiu na Uniwersytecie Jagiellońskim w roku akademickim 2025/2026 określone w uchwale nr 15/II/2025 Senatu Uniwersytetu Jagiellońskiego z dnia 26 lutego 2025 roku.

W szczególności przyjmuję do wiadomości, że:

W sytuacji zakwalifikowania się do szkoły dwóch lub więcej kandydatów wskazujących w rekrutacji ten sam wybrany temat badawczy, temat badawczy zostaje przyznany kandydatowi z największą liczbą punktów. Kolejnym kandydatom oferowane są do wyboru inne pozostałe tematy badawcze, nieobsadzone przez zrekrutowanych kandydatów.

Katedra Chemii Farmaceutycznej UJ CM
Zakład Fizykochemicznej Analizy Leku

Marek Bajda
prof. dr hab. Marek Bajda

30.04.2025 r.

/data/

/podpis osoby zgłaszającej temat badawczy/