

Kratek opis usposabljanja mladega raziskovalca (*Short description of the Young Researcher's training*)

1. Raziskovalna organizacija (*Research organisation*):

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology

2. Ime, priimek in elektronski naslov mentorja (*Mentor's name, surname and email*):

Jakob Kljun, jakob.kljun@fkkt.uni-lj.si

3. Šifra in naziv raziskovalnega področja (*Research field*):

1.04.03 Anorganska kemija

1.04.03 Inorganic Chemistry

4. Kratek opis usposabljanja mladega raziskovalca (*Short description of the Young Researcher's training*):

Navedite tudi morebitne druge zahteve, vezane na usposabljanje mladega raziskovalca (npr. znanje tujih jezikov, izkušnje z laboratorijskim delom, potrebne licence za usposabljanje...).

slo:

Mladi raziskovalec/raziskovalka se bo ukvarjal/a s sintezo in karakterizacijo *N*-heterocikličnih spojin z žveplovimi funkcionalnimi skupinami, ki jih lahko pripravimo iz tiosemikarbazidnih osnovnih gradnikov. Zanimale nas bodo spojine s sposobnostjo kelatne vezave kovinskih zvrsti za načrtovanje zaviralcev klinično relevantnih metaloproteinov ter načrtovanje biološko aktivnih kovinskih učinkovin. Kandidat/ka bo tako a) preučeval/a vezavo novih spojin na modelne kovinske spojine, ki simulirajo aktivna mesta klinično relevantnih metaloenzimov (npr. cinkovih encimov karbonske anhidraze in metalo- β -laktamaze) in b) jih uporabljal/a pri načrtovanju novih kovinskih učinkovin z elementi platinske skupine in nekaterih drugih žlahtnih kovin (prednostno Ru, Pt, Au, Ag).

Cilj raziskave je na podlagi rezultatov predkliničnih raziskav poiskati primerno spojino vodnico bodisi za morebitne klinične preiskave, ali za nadaljnjo strukturno optimizacijo.

Ob delu bo kandidat/ka osvojil/a napredne metode kemijske sinteze in karakterizacije spojin kot so jedrska magnetna resonanca in rentgenska difrakcija na monokristalu. Ob tem se bomo posebej osredotočili na razvoj sinteznih postopkov z upoštevanjem principov zelene kemije. Z različnimi metodami bo kandidat/ka nato preučil/a stabilnost in reaktivnost novih spojin ter jih v sodelovanju z domačimi in tujimi eksperti ovrednotil/a kot zdravilne učinkovine s potencialno aplikacijo v medicini ali veterini tako s presejalnimi testi na izbranih molekularnih tarčah kot na mikroorganizmih.

Raziskovalno delo bo vpeto v okvir raziskovalnega programa P1-0175 (Napredna anorganska

kemija).

Kandidati/kandidatke morajo imeti magisterij s področja kemije, biokemije, farmacije ali primerljivih ved s praktičnimi izkušnjami iz kemijskega ali biokemijskega eksperimentalnega dela. Znanje angleškega jezika na visoki ravni je zaželeno. Doktorand/ka se bo vpisal/a na doktorski študijski program Kemijske znanosti na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani.

eng:

The PhD candidate will synthesize and characterize novel N-heterocyclic compounds containing sulfur functional groups starting from thiosemicarbazide building blocks. We will be interested in compounds with metal chelating properties in order to design and develop inhibitors of clinically relevant metalloproteins as well as biologically active metal complexes. The researcher will thus study a) the metal binding properties of novel compounds utilizing small-molecule models of metalloprotein binding sites such as clinically relevant zinc enzymes carbonic anhydrase or metallo- β -lactamase and b) utilize these ligands to design novel metallodrugs containing precious metals (primarily Ru, Pt, Au, Ag).

The goal of the research project is to select a suitable lead compound for clinical tests or a second round of structural optimization based on the results of the performed preclinical evaluations.

The candidate will thus gain skills in advanced methods of chemical synthesis and characterization techniques, with most focus on nuclear magnetic resonance and single-crystal X-ray diffraction. Moreover, we will put considerable effort in the development of synthetic procedures following the principles of green chemistry. We will study the stability and reactivity of novel compounds and evaluate their medicinal and veterinary application potential in collaboration with domestic and international research partners by performing screening and mode-of-action studies on potential molecular targets and microorganisms.

The research work will be integrated in the research activity of the research program P1-0175 – Advanced Inorganic Chemistry.

The candidates must have MSc in the fields of Chemistry, Biochemistry, Pharmacy, or related fields with practical experience with research work in the fields of chemistry or biochemistry. Advanced English level is preferred. The PhD candidate will enrol in the doctoral study programme Chemical Sciences at the Faculty of Chemistry and Chemical Technology of the University of Ljubljana.