

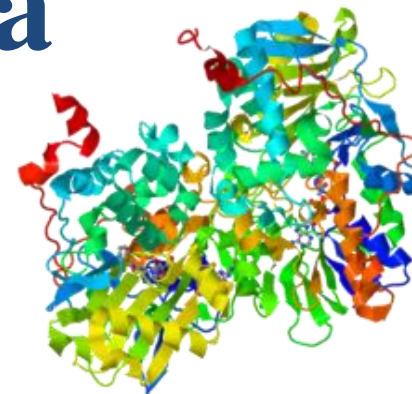


UNIwersytet IM. ADAMA MICKIEWICZA W POZNANIU

WYDZIAŁ CHEMII

LABORATORIUM DYDAKTYCZNE CHEMII ORGANICZNEJ I BIOORGANICZNEJ

Modyfikacja wybranych alkaloidów – analiza QSAR



Grupa badawcza: prof. UAM dr hab. Beata Jasiewicz
Zakład Produktów Bioaktywnych

Coll. Chemicum, Segment G, p. 2.142 e-mail: beatakoz@amu.edu.pl



UNIWERSYTET IM. ADAMA MICKIEWICZA W POZNANIU

WYDZIAŁ CHEMII

LABORATORIUM DYDAKTYCZNE CHEMII ORGANICZNEJ I BIOORGANICZNEJ

Pozostali członkowie grupy:

Dr Arleta Sierakowska

Dr Joanna Kurek

Mgr Karolina Babijczuk

Mgr Milda Szlaużys

Mgr Kamil Ostrowski



Alkaloidy

Zasadowe związki organiczne, głównie pochodzenia roślinnego;

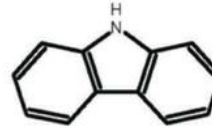
funkcje ochronne roślin;

Szeroki zakres aktywności biologicznej - składniki leków

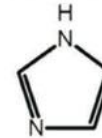
Aporfine



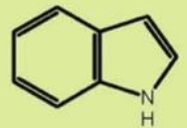
Carbazol



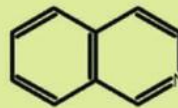
Imidazol



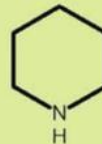
Indol



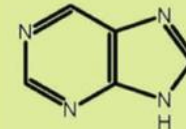
Isoquinoline



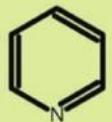
Piperidine



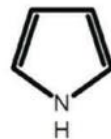
Purine



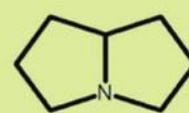
Pyridine



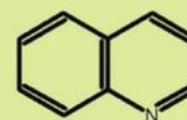
Pyrrole



Pyrrolizidine



Quinoline



Tropane

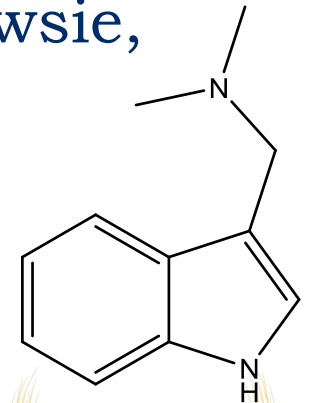




Synteza pochodnych indolowych

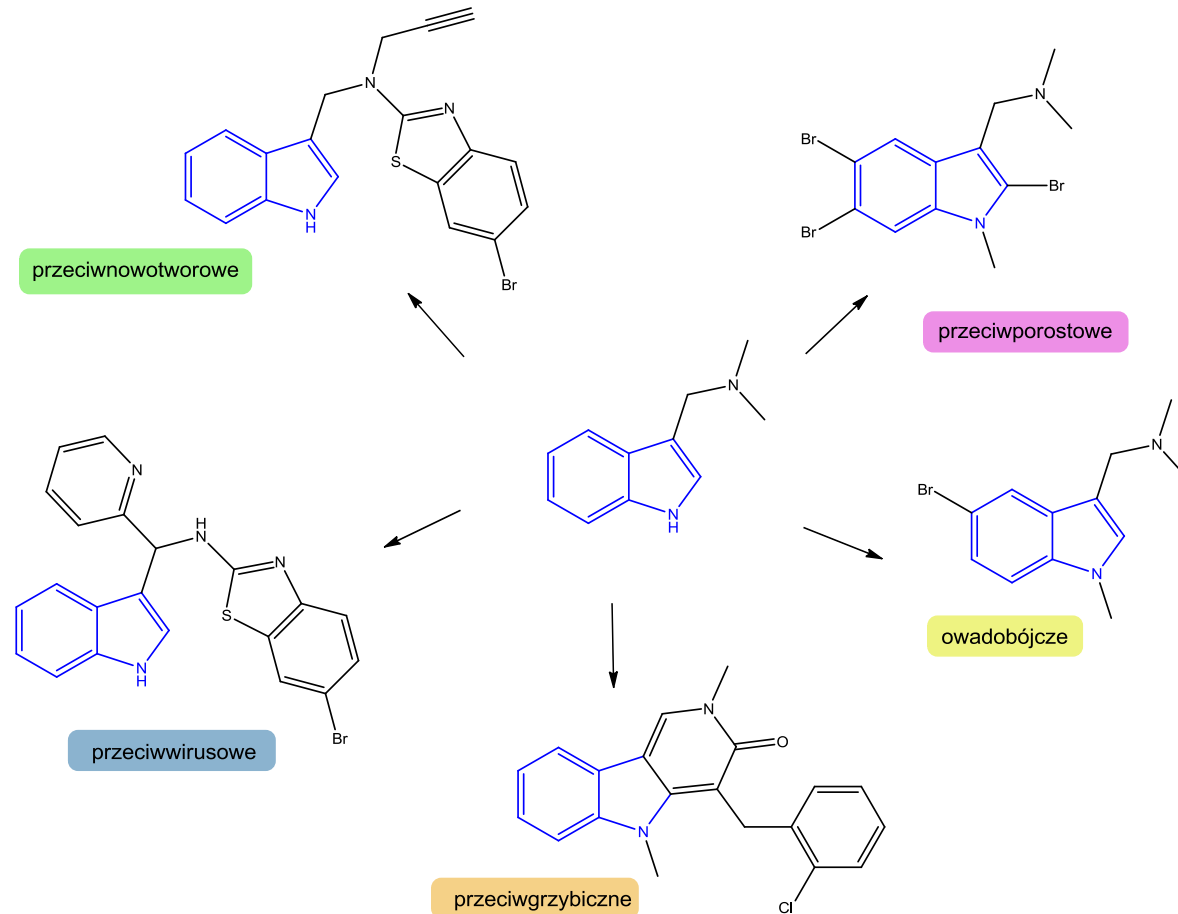
Modyfikacje graminy

- **Gramina:**
- Występuje między innymi w jęczmieniu, owsie, łubinie,
- Używana w syntezach chemicznych jako „rusztowanie”.



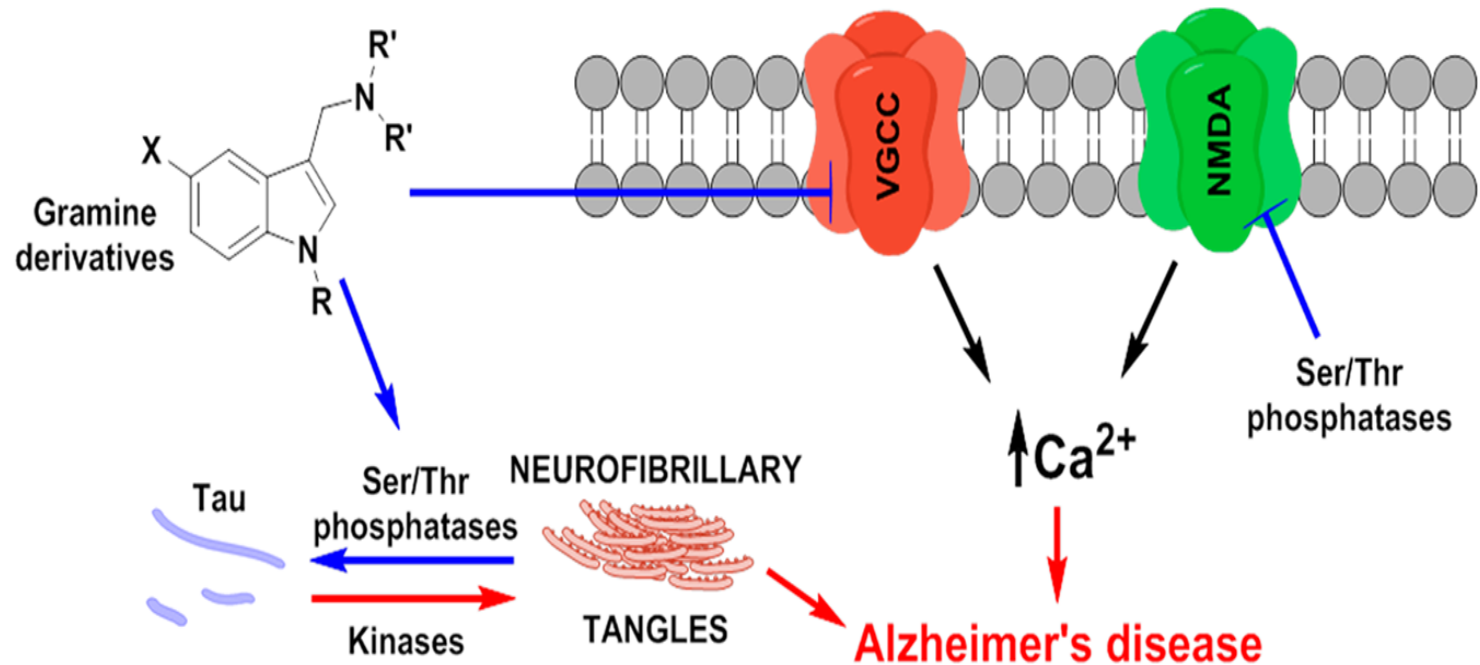


Pochodne graminy aktywne biologicznie





Pochodne graminy jako leki w leczeniu choroby Alzheimera

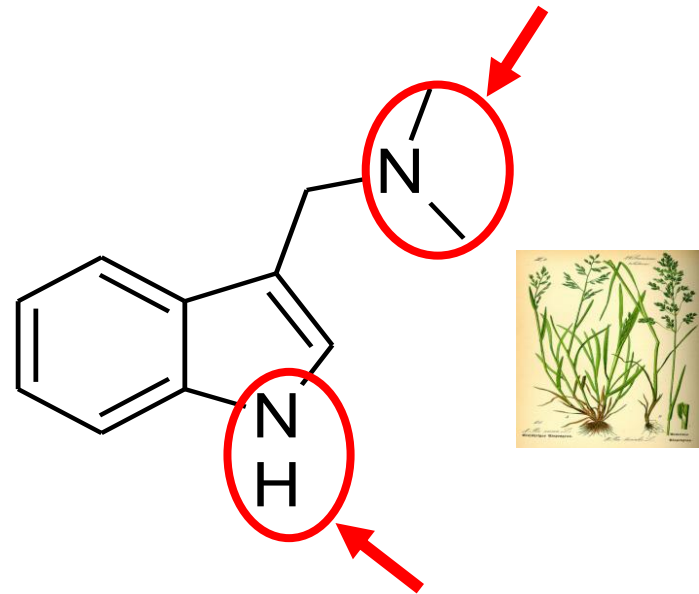


Synteza nowych pochodnych graminy

* **modyfikacja w pozycji N-1 i C-3**

* **właściwości antyoksydacyjne**
oraz **aktywność protekcyjna**
wobec erytrocytów ludzkich
poddanych działaniu stresu
oksydacyjnego;

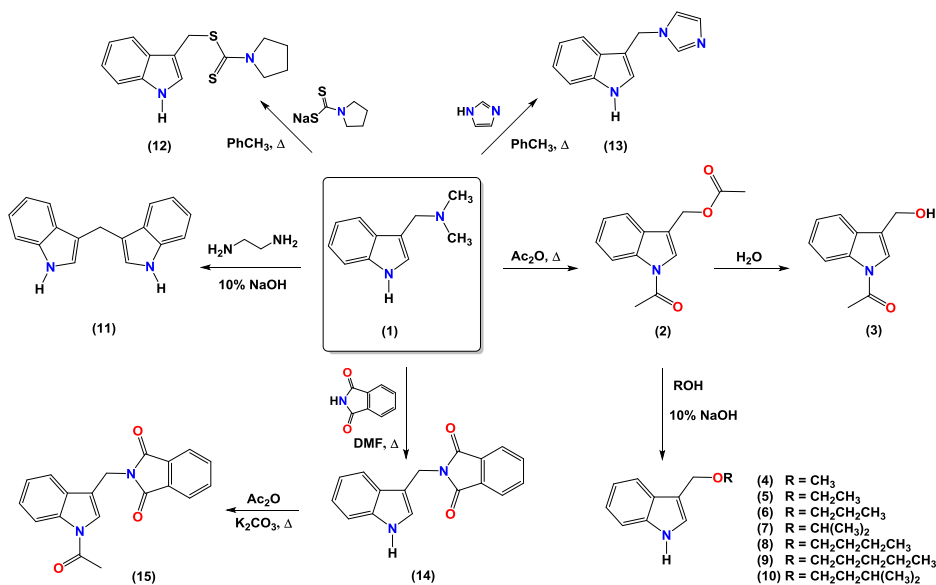
- Wykazują właściwości:
- **przeciwnowotworowe**
 - **przeciwwirusowe**
 - **antybakteryjne**
 - **przeciwporostowe**
 - **przeciwgrzybiczne**



<https://pl.wikipedia.org/wiki/Wiechlinowate>

OPEN **Synthesis, antioxidant and cytoprotective activity evaluation of C-3 substituted indole derivatives**

Beata Jasiewicz^{1,2}, Weronika Kozanecka-Okupnik¹, Michał Przygodzki², Beata Warzajtis², Urszula Rychlewska¹, Tomasz Pospieszny¹ & Lucyna Mrówczyńska^{2,3}

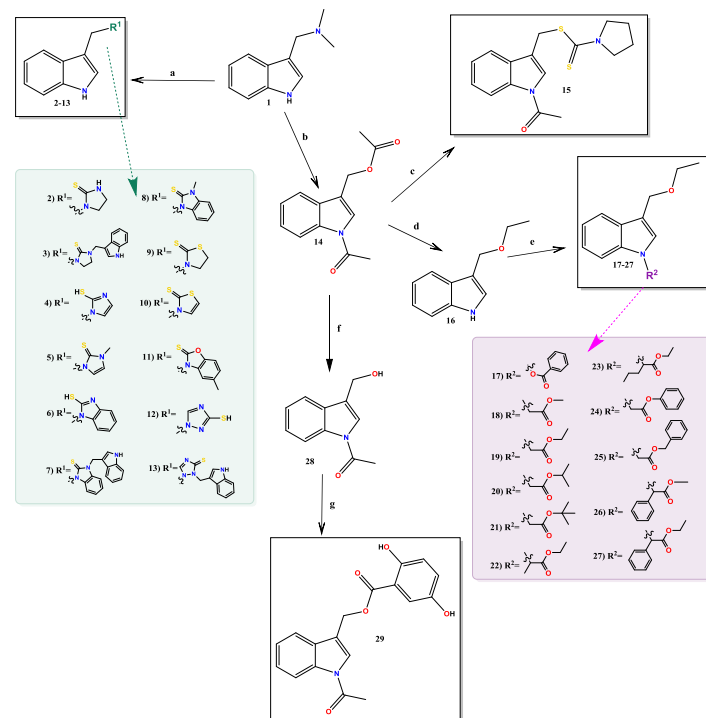


- (4) R = CH₃
 (5) R = CH₂CH₃
 (6) R = CH₂CH₂CH₃
 (7) R = CH(CH₃)₂
 (8) R = CH₂CH₂CH₂CH₃
 (9) R = CH₂CH₂CH₂CH₂CH₃
 (10) R = CH₂CH₂CH(CH₃)₂

Article

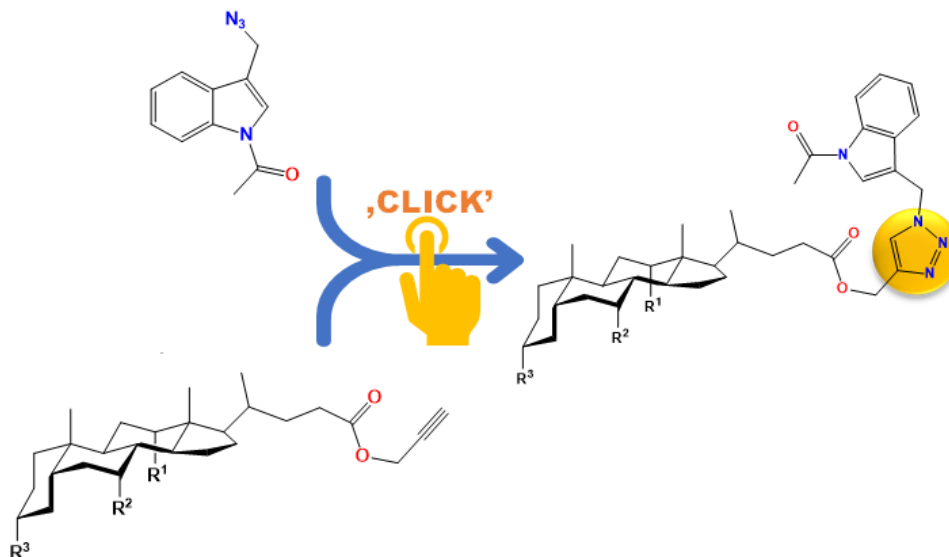
Novel C3-Methylene-Bridged Indole Derivatives with and without Substituents at N1: The Influence of Substituents on Their Hemolytic, Cytoprotective, and Antimicrobial Activity

Karolina Babijczuk¹^b, Natalia Berdzik¹, Damian Nowak²^b, Beata Warzajtis³^b, Urszula Rychlewska³, Justyna Starzyk⁴, Lucyna Mrówczyńska⁵^b and Beata Jasiewicz^{1,4}^b



Synthesis and Hemolytic Activity of Bile Acid-Indole Bioconjugates Linked by Triazole

Natalia Berdzik, Hanna Koenig, Lucyna Mrówczyńska, Damian Nowak, Beata Jasiewicz,*
and Tomasz Pospieszny*

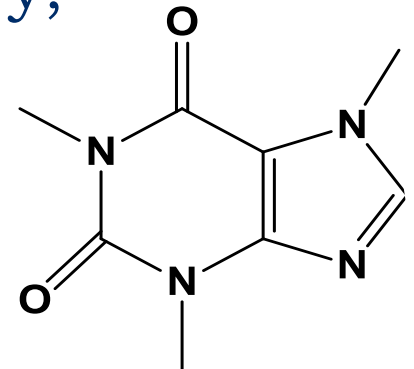




Synteza pochodnych purynowych

Modyfikacje kofeiny

- **Kofeina:**
- Obecna między innymi w ziarnach kawy, herbacie, nasionach guarany

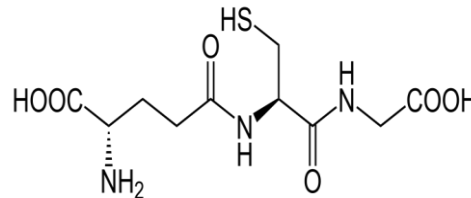
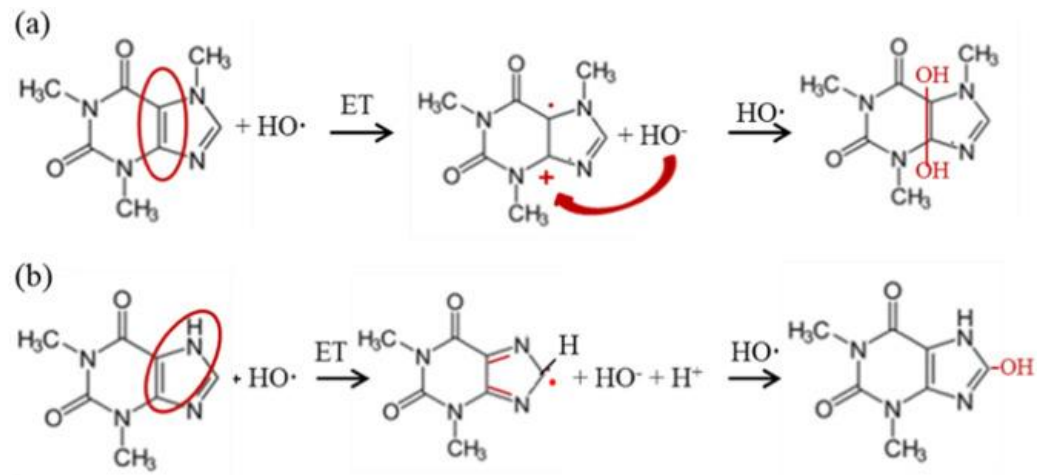


Kofeina jako naturalny antyoksydant

→ zapobiega apoptozie limfocytów indukowanej promieniowaniem jonizującym;

→ neutralizuje rodnik hydroksylowy, tlen singletowy oraz rodniki nadtlenkowe – odpowiedzialny za peroksydację wielonienasyconych kwasów tłuszczowych;

→ wydajność antyoksydacyjna jest porównywalna do glutationu.



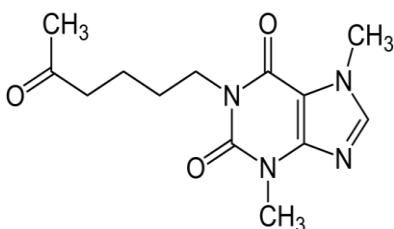
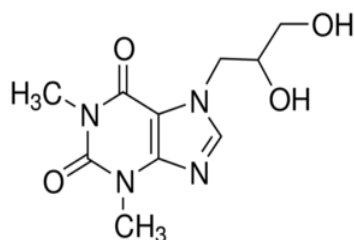


Caffeine and caffeine-containing pharmaceuticals as promising inhibitors for 3-chymotrypsin-like protease of SARS-CoV-2

Amin O. Elzupir

College of Science, Deanship of Scientific Research, Imam Mohammad Ibn Saud Islamic University (IMSIU), Riyadh, Kingdom of Saudi Arabia

Communicated by Ramaswamy H. Sarma



Pharmaceutical name	Binding percentage ^a	Score \pm SD ^b (kcal/mol)	RMSD	Hydrogen bond	Vander Val (distance)
Remdesivir	11	-6.7 \pm 0.00	29.278–32.562	–	Cys ¹⁴⁵ (4 side contacts, distance range 3.572–3.852 Å). Glu ¹⁶⁶ (6 side contacts, distance range: 3.518–3.991 Å).
Linagliptin	56	-8.6 \pm 0.55	0.000–0.000	–	His ⁴¹ (3.453 Å/3.498 Å/3.834 Å). Glu ¹⁶⁶ (3.562 Å/3.902 Å/3.987 Å).
Istradefylline	22	-6.1 \pm 0.07	29.039–32.061	Cys ¹⁴⁵	Cys ¹⁴⁵ (3.867 Å) Cys ^{145*} (3.720 Å/3.936 Å) His ^{41*} (3.753 Å)
Dyphylline	89	-6.0 \pm 0.34	2.009–4.637	Cys ¹⁴⁵ Glu ¹⁶⁶	His ⁴¹ (3.619 Å/3.673 Å/3.713 Å). Cys ¹⁴⁵ (6 side contacts, distance range: 3.091–4.027 Å) Glu ¹⁶⁶ (3.015 Å).
Caffeine	67	-5.6 \pm 0.30	0.000–0.000	Glu ¹⁶⁶ Cys ^{145*}	His ⁴¹ (3.720 Å/3.807 Å). Cys ¹⁴⁵ (3.629 Å/3.694 Å). Glu ¹⁶⁶ (3.504 Å/ 3.912 Å/2.988 Å).
Bromotheophylline	44	-5.6 \pm 0.26	0.000–0.000	Glu ¹⁶⁶	His ⁴¹ (5 side contacts, distance range 2.733 Å to 3.565 Å). Cys ¹⁴⁵ (3.708 Å/3.817 Å) Glu ¹⁶⁶ (3.385 Å/3.417/ 3.612 Å).
Pentoxifylline	67	-5.4 \pm 0.19	2.485–4.751	Cys ¹⁴⁵	His ⁴¹ (5 side contacts, distance range 3.585–3.906 Å). Glu ¹⁶⁶ (7 side contacts, distance range: 3.211–3.767 Å).
Theophylline	67	-4.9 \pm 0.17	1.526–3.155	Glu ¹⁶⁶	His ⁴¹ (3.583 Å/3.668 Å/3.717 Å/3.764 Å). Cys ¹⁴⁵ (3.566 Å/3.733 Å/ 3.746 Å). Glu ¹⁶⁶ (3.003 Å/3.951 Å).

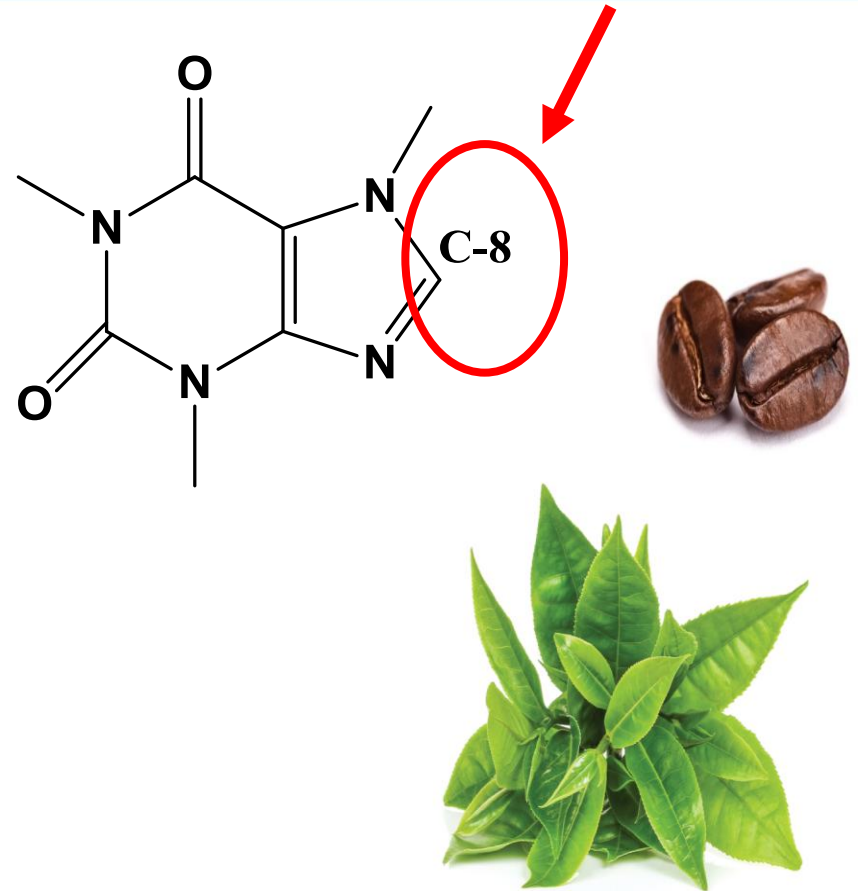
Pochodne kofeiny

** modyfikacja w pozycji C-8*

** właściwości antyoksydacyjne oraz aktywność protekcyjną wobec erytrocytów ludzkich poddanych działaniu stresu oksydacyjnego;*

• wykazują także właściwości przeciwnowotworowe;

- antybakteryjne*
- antygrzybiczne.*





Nasze publikacje

scientific reports

OPEN

New C8-substituted caffeine derivatives as promising antioxidants and cytoprotective agents in human erythrocytes

Arleta Sierakowska¹, Beata Jasiewicz^{1,2}, Łukasz Piosik^{2,3} & Lucyna Mrówczyńska^{2,5}

Check for updates

FREE RADICAL RESEARCH
2018, VOL. 52, NO. 6, 724–736
<https://doi.org/10.1080/10715762.2018.1467561>

ORIGINAL ARTICLE

Antioxidant and cytotoxic activity of new di- and polyamine caffeine analogues

Beata Jasiewicz^a, Arleta Sierakowska^a, Wojciech Jankowski^a, Marcin Hoffmann^a, Weronika Piorońska^b, Agnieszka Górnicka^b, Anna Bielawska^c, Krzysztof Bielawski^d and Lucyna Mrówczyńska^b

^aFaculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, Poznań, Poland; ^bDepartment of Cell Biology, Faculty of Biology, Adam Mickiewicz University, Poznań, Poland; ^cDepartment of Biotechnology, Medical University of Białystok, Białystok, Poland; ^dDepartment of Synthesis and Technology of Drugs, Medical University of Białystok, Białystok, Poland



Taylor & Francis
Taylor & Francis Group

Check for updates



Antioxidant properties of thio-caffeine derivatives: Identification of the newly synthesized 8-[(pyrrolidin-1-ylcarbonothioyl)sulfanyl] caffeine as antioxidant and highly potent cytoprotective agent

Beata Jasiewicz^{a,*}, Arleta Sierakowska^a, Natalia Wandyszewska^b, Beata Warżajtis^a, Urszula Rychlewska^a, Rafał Wawrzyniak^a, Lucyna Mrówczyńska^{b,*}

^aFaculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University, Umultowska 89b, 61-614 Poznań, Poland
^bDepartment of Cell Biology, Faculty of Biology, Adam Mickiewicz University, Umultowska 89, 61-614 Poznań, Poland





ZAPRASZAMY
do kontaktu
