

**SPRAWOZDANIE
Z DZIAŁALNOŚCI NAUKOWO-BADAWCZEJ
INSTYTUTU CHEMII ORGANICZNEJ PAN
ZA ROK 2010**

W 2010 r. Sejm uchwalił pakiet 6 Ustaw: o Zasadach Finansowania Nauki, o Narodowym Centrum Badań i Rozwoju, o Narodowym Centrum Nauki, o Polskiej Akademii Nauk, o Instytutach Badawczych i o Przepisach wprowadzających ustawy reformujące system nauki. Ustawy weszły w życie 1 października 2010. Ustawa o Polskiej Akademii Nauk zreorganizowała pion korporacyjny Akademii, niewiele zmieniając w pionie placówek. Zmniejszono liczbę Wydziałów do 5 podporządkowując je Wiceprezesom, zreorganizowano Prezydium Akademii i wprowadzono w Wydziałach Rady Kuratorów odpowiedzialne za placówki. 14 Października 2010 Prof. Michał Kleiber został powtórnie wybranym Prezesem PAN na kadencję 2011 – 2014. Zgromadzenie Ogólne PAN uchwaliło również nowy Statut Akademii, który w końcu grudnia został zaakceptowany przez Prezesa Rady Ministrów. 9 Grudnia Zgromadzenie Ogólne PAN wybrało na funkcję Wiceprezesa PAN prof. Marka Chmielewskiego. Konsekwencją wyboru jest odwołanie prof. Chmielewskiego z funkcji Dyrektora IChO. Pozostałymi Wiceprezesami PAN zostali wybrani prof. Ryszard Górecki, prof. Andrzej Górski i prof. Mirosława Marody. Wraz ze zmianą Władz Akademii zakończyły działanie Rady Naukowe Instytutów i kończą działanie Komitety Naukowe PAN.

Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego ogłosiło wyniki ostatniej oceny parametrycznej placówek naukowych, które wzbudziły wiele dyskusji. Instytut znalazł się w jednorodnej grupie 42 placówek na 11 miejscu uzyskując 1 kategorię. Wyniki parametryzacji spotkały się z powszechną krytyką. Podnoszono fakt, iż kryteria oceny nie uwzględniały, w wystarczającym stopniu, powodów, dla których przed laty zdecydowano o powołaniu placówek PAN, premiując, często przypadkową, współpracę z gospodarką ponad jakość prowadzonych badań naukowych, ukierunkowanych na priorytety badawcze poszczególnych jednostek. Powszechnie wyrażano opinię, iż ewaluacja parametryczna powinna być wsparta oceną niezależnych ekspertów.

W minionym roku warunki prowadzenia badań nie uległy zasadniczej zmianie. Z powodu kryzysu gospodarczego Ministerstwo wycofało się z obietnic podniesienia nakładów budżetowych na naukę. Równocześnie zaczęły napływać środki europejskie, nie omijając Instytutu.

Od początku roku 2010 rozpoczęto realizację projektów finansowanych z funduszy strukturalnych (program POIG). Niewątpliwie najbardziej znaczącym wśród nich jest projekt POIG: „*Cukry jako surowce odnawialne w syntezie produktów o wysokiej wartości dodanej*”, który jest realizowany przez konsorcjum, liderem którego jest Instytut Chemii Organicznej PAN [kierownik projektu: prof. Sławomir Jarosz, całkowita dotacja na 5 lat ok. 25 mln PLN (z czego ok. 15 mln PLN dla trzech zespołów badawczych IChO PAN; dokładniejsze omówienie znajduje się na str. 20)]. W skład konsorcjum wchodzi IChO PAN (lider), Instytut Chemii Fizycznej PAN, Politechnika Warszawska, Uniwersytet Gdański, Uniwersytet Łódzki i Politechnika Śląska.

Następny projekt, którego beneficjentem jest IChO PAN to „*Zastosowanie farmaceutyczne związków dendrymerycznych zawierających aminokwasy*” (kierownik projektu: prof. Zofia Lipkowska)

Kolejne projekty, które IChO PAN realizuje w ramach POIG jako członek konsorcjum, to koordynowane przez Politechnikę Wrocławską: „*Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym*” (kierownik projektu w IChO PAN: prof. Ryszard

Ostaszewski), Instytut Biochemii i Biofizyki PAN: „*Metagenomy jako źródło nowoczesnych narzędzi biotechnologicznych służących do bioremediacji i biotransformacji*” (kierownik projektu w IChO PAN: prof. Witold Danikiewicz), oraz drugi koordynowany przez IBB: „*Zastosowanie pochodnych poliizoprenoidów jako nośników leków i regulatorów metabolizmu*” (Kierownik projektu w IChO PAN: prof. Marek Chmielewski i prof. Witold Danikiewicz).

Kolejnym projektem, jest projekt w ramach inicjatywy „INITECH”: „*Opracowanie syntezy substancji farmaceutycznej ezetymibu – selektywnego inhibitora wchłaniania cholesterolu*” (kierownik projektu: prof. Marek Chmielewski).

W roku 2010 otrzymano dofinansowanie dla kolejnych projektów badawczych:

- Projekt rozwojowy nr 13-0153-10/2010: „*Założenia technologiczne otrzymywania oraz badania przedkliniczne niskocząsteczkowych peptydowych związków dendrymerycznych o własnościach przeciwdrobnoustrojowych do zastosowań u ludzi i zwierząt*”. Kierownik Projektu: prof. Zofia Lipkowska. Projekt realizowany we współpracy z Narodowym Instytutem Zdrowia Publicznego – Państwowym Zakładem Higieny.
- Projekt finansowany w ramach Poddziałania 2.3 Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka POIG.02.03.02-00-043/10: „*Repozytorium cyfrowe Instytutów Naukowych*”, Kierownik Projektu w IChO: dr Piotr Lipkowski. Lider Projektu: Muzeum i Instytut Zoologii PAN.
- Projekt finansowany w ramach Poddziałania 1.3.2 Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka Nr POIG.01.03.02-00-012/09: „*Nowe syntetyczne słodziki i inhibitory słodkiego smaku*”. Kierownik Projektu: prof. Marek Chmielewski.

Prof. Daniel Gryko uzyskał Grant z Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej w ramach projektu **TEAM** finansowanego przez FNP z funduszy europejskich, Działanie 1.2. ‘Wzmocnienie potencjału kadrowego nauki’ Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka. Tytuł: „*Nowe barwniki funkcjonalne do zastosowań w dwufotonowej mikroskopii fluorescencyjnej oraz w blokowaniu optycznym*”. Projekt realizowany we współpracy z: prof. Aleksander Rebane (Montana State University of Texas, USA). Okres realizacji: październik 2010 – kwiecień 2014.

Kontynuowano działalność w programach międzynarodowych:

1. ® – Kontynuowano realizację grantu typu: Marie Curie Research Training Network o kryptonimie „REVCAT”. Grant ten zakłada ścisłą współpracę z zespołami w następujących ośrodkach naukowych: Uniwersytet w Amsterdamie, Uniwersytet w Kolonii, Uniwersytet w Bazylei, Uniwersytet w Grazu, Uniwersytet w Cambridge, Uniwersytet w Mediolanie, Firma DSM (Geelen, Holandia), Instytut Chemii Słowackiej Akademii Nauk w Bratysławie. Grant dotyczy opracowania nowego typu katalizatorów. W maju 2010 roku odbyła się w Warszawie finalna konferencja w ramach tego konsorcjum. W roku 2010 opublikowano jedną pracę.
2. Hierarchically Organized Metal Organic Catalysts for Continuous and Multi-batch Processes (HiCat: prof. K. Grela - 7 PR). Badano syntezę i właściwości kompleksów rutenu zawierających krzemowy tag POSS w kierunku możliwość oddzielenia tak immobilizowanych kompleksów za pomocą nanofiltracji. Kontynuowano prace nad zastosowaniem katalizatorów metatezy w nowych rozpuszczalnikach (jak fluorowane węglowodory aromatyczne - FAH).

W roku 2010 „Sieci Naukowe” nie były finansowane.

W minionym roku Instytut zorganizował trzy międzynarodowe konferencje naukowe:

“(R)Evolution in Catalysis” (IChO PAN Warszawa, organizator: prof. Daniel Gryko),
“Magnetic Resonance in Chemistry, Physics and Biology” (IChO PAN Warszawa, organizator:
dr hab. Jarosław Jaźwiński), oraz „Microsymposium on Asymmetric Synthesis” (IChO PAN
Warszawa, organizator: dr hab. Jacek Młynarski).

Utrzymuje się znaczne zainteresowanie naszymi studiami doktoranckimi, a także stażami, w których uczestniczą głównie studenci z Wydziałów Chemii UW i Chemicznego PW, oraz Akademii Podlaskiej. Ten napływ młodzieży i jej autentyczne zaangażowanie w prace naukowe jest w tych trudnych dla nauki czasach powodem do dumy. Pomimo ograniczonych środków, jesteśmy zdecydowani kontynuować politykę ściągania młodych ludzi do Instytutu.

Na początku października został przeprowadzony konkursowy egzamin na Studia Doktoranckie IChO PAN, na podstawie którego na Studium zakwalifikowano 15 osób (spośród 32 kandydatów). Z tej grupy 3 osoby zostały przyjęte na Studium Doktoranckie do realizacji programu TEAM w Zespole X prof. Daniela Gryko, 6 osób w programie POIG „Cukry jako surowce odnawialne w syntezie produktów o wysokiej wartości dodanej”, 2 osoby w programie POIG: „Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym” oraz jedna osoba jako stypendysta firmy Polpharma S.A. Pozostali zakwalifikowani są stypendystami Instytutu.

W minionym roku prowadzono badania w czterech podstawowych kierunkach:

- I Nowe reakcje, reagenty i metody syntezy organicznej.*
- II Synteza, izolacja i ustalenie struktury produktów naturalnych oraz związków o dużym znaczeniu dla ochrony zdrowia.*
- III Spektroskopia rezonansowa, optyczna i masowa oraz badania strukturalne związków organicznych.*
- IV Współpraca z przemysłem: poszukiwanie nowych metod wytwarzania leków.*

Łącznie prowadzono w Instytucie 98 zadań badawczych (42 statutowych, 56 grantowych) oraz 10 usługowych, w których uczestniczyło 20 zespołów badawczych.

Od początku roku ogłoszono drukiem 86 publikacji, w tym 14 prac monograficznych, oraz 3 o innym charakterze. Dalsze 32 publikacje (w tym 11 monografii) zostały zaakceptowane do druku w roku 2011. Zaprezentowano 146 referatów i komunikatów na zjazdach i konferencjach naukowych. Uzyskano 1 patent oraz zgłoszono 6 wniosków patentowych (4 międzynarodowe, 2 polskie). Tak jak i w latach poprzednich, zdecydowana większość prac została opublikowana w najlepszych czasopismach publikujących prace z chemii organicznej. **Średni IF za rok 2010 wyniósł 3,36 (za rok 2009 - 3,169).**

Na zaproszenie organizatorów pracownicy Instytutu wygłosili 21 wykładów z prac własnych na 17 imprezach międzynarodowych:

1. 6th Flash Conference ERA - Chemistry, Roscoff, Francja
2. 12th Frühjahrssymposium – JungChemikerForum, Getynga, Niemcy
3. 25th Central European NMR Meeting, Valtice, Czechy (2 wykłady)
4. 1st Annual World Congress of Asymmetric Synthesis 2010, Pekin, Chiny

5. IIIrd International Mini-Symposium Advances in Organocatalysis and Related Problems, Łódź (2 wykłady)
6. 6th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, Santa Ana, USA
7. A WorldWide Magnetic Resonance Conference, Joint EUROMAR 2010 and 17th ISMAR Conference, Florence, Włochy
8. 17th International Symposium on Homogeneous Catalysis, Poznań
9. 22nd International Symposium on Chirality, Chirality2010, Sapporo, Japonia.
10. IVth International Conference CBC-2010 "Modern Aspects of Chemistry of Heterocycles", Sankt-Petersburg, Rosja
11. 18th International Conference on Organic Synthesis, Bergen, Norwegia
12. VIth Symposium on Nuclear Magnetic Resonance in Chemistry, Physics and Biological Sciences, Warszawa (3 wykłady)
13. 8th International Congress of Young Chemists "YoungChem2010", Reda, Polska (3 wykłady)
14. ANAL & BIOANAL 2010: International Conference and Exhibition on Analytical and BioAnalytical Techniques: Pharmaceutical R & D Summit, Hyderabad, India
15. International Symposium on Antimicrobial Research, Valladolid, Spain
16. 8th Symposium on Chemical Approach to Chirality 2010, Tokio, Japonia
17. XVIIth INTERNATIONAL WINTER SCHOOL ON COORDINATION CHEMISTRY, Karpacz
18. Pacificem 2010 -International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Honolulu, USA (2 wykłady)

oraz jeden wykład na wewnętrznym seminarium w firmie Firmenich SA, Niemcy.

Na 9 konferencjach krajowych wygłoszono 21 wykładów.

W ciągu roku sprawozdawczego 15 zespołów uzyskało 25 grantów badawczych (w tym 1 projekt rozwojowy, 4 w programie Iuventus Plus, 4 z FNP i 5 z funduszy strukturalnych); kontynuowano realizację 26 dalszych (w tym 6 z FNP, 1 zagraniczny i 1 z funduszy strukturalnych) indywidualnych projektów badawczych; zakończono 5 grantów (w tym 1 zagraniczny – RevCat i 1 z FNP).

W roku 2010 uzyskano następujące nagrody, wyróżnienia i zaszczyty:

1. Prof. Marek Chmielewski został wybrany wiceprezesem Polskiej Akademii Nauk.
2. Prof. Karol Grela został laureatem Nagrody Prezesa Rady Ministrów za wybitne osiągnięcie naukowe.
3. Prof. Karol Grela został laureatem Nagrody Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego w kategorii badań na rzecz rozwoju nauki.
4. Mgr Anna Szadkowska - Stypendium START dla młodych naukowców - Fundacja na Rzecz Nauki Polskiej
5. Dr Wojciech Chaładaj – Stypendium START dla młodych naukowców - Fundacja na Rzecz Nauki Polskiej
6. Mgr Kajetan Dąbrowa – Laureat 5. edycji Ventures Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej
7. Dr Sebastian Stecko został laureatem Nagrody Stanisława Binieckiego przyznawanej przez Instytut Farmaceutyczny
8. Mgr Cezary Samojłowicz otrzymał grant MNiSW „Juventus plus”
9. Dr Anna Koziół otrzymała grant MNiSW „Juventus plus”
10. Dr Sebastian Stecko otrzymał grant MNiSW „Juventus plus”
11. Dr Michał Michałak otrzymał grant MNiSW „Juventus plus
12. Mgr Cezary Samojłowicz został nagrodzony grantem konferencyjnym przyznany przez Katalońskie Towarzystwo Chemiczne na pokrycie kosztów uczestnictwa letniej szkoły w *ICIQ Summer School* w Tarragonie (Hiszpania).

Informacja o zatrudnieniu i dydaktyce

W dniu 31.12.2010 r. Instytut zatrudniał 191 osób na 186 etatach. Skład personalny przedstawiał się następująco:

- profesorów	-	14
- docentów	-	6
- adiunktów dr hab.	-	2
- asystentów ze stopniem dr	-	27
- asystentów - doktorantów	-	13
- pracowników inż. ze stopniem dr	-	6
- prac. inż.-techn. i obsługa	-	43
- pracowników biblioteki	-	2
- prac. administracji i obsługi	-	21
- doktorantów	-	57

Razem - 191

W roku 2010 Rada Naukowa IChO nadała stopień naukowy doktora habilitowanego nauk chemicznych jednej osobie (dr hab. Agnieszka Szumna), a stopień doktora nauk chemicznych 7 osobom.

W IChO PAN odbywało studia doktoranckie 57 osób. Od 1 listopada 2010 roku 13 nowych doktorantów rozpoczęło studia w Instytucie. Dwie osoby rozpoczęły studia od 1.01.2011.

Nowoprzyjęci doktoranci wzięli udział w cyklu jednogodzinnych wykładów wstępnych, które przygotowali: prof. W. Danikiewicz, prof. J. Frelek, prof. S. Jarosz, prof. M. Jaszuński, prof. Z. Lipkowska, doc. W. Schilf.

W semestrze zimowym 2009/2010 wykłady na Studium Doktoranckim IChO PAN prowadzili: prof. Witold Danikiewicz (*Zaawansowane metody identyfikacji związków organicznych*) i doc. Jarosław Jaźwiński (*Zaawansowane techniki NMR w chemii organicznej*); w semestrze letnim 2010: prof. Mieczysław Mąkosza (*Nowoczesne metody syntezy organicznej I*), prof. Karol Grela (*Nowoczesne metody syntezy organicznej II*) oraz prof. Janusz Jurczak (*Wybrane zagadnienia współczesnej chemii organicznej; seminarium doktoranckie*). W semestrze zimowym 2010/2011 rozpoczęto kolejny cykl wykładowy: prof. Sławomir Jarosz (*Stereochemia organiczna*), oraz prof. Grzegorz Młostoń (U.Ł.; *Mechanizmy reakcji organicznych*).

Tak jak w ubiegłych latach, w semestrze letnim doktoranci odbywali praktykę dydaktyczną, biorąc czynny udział w prowadzeniu ćwiczeń laboratoryjnych z chemii organicznej na Wydziale Chemii UW.

Stały kontakt z wydziałami chemii wyższych uczelni zapewniało kilku pracowników Instytutu. Do nich należą zatrudnieni na częściowych etatach w Instytucie: prof. J. Jurczak – etatowy pracownik Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, dr hab. R. Kawęcki – etatowy pracownik Wydziału Chemii Akademii Podlaskiej, dr hab. Jacek Młynarski – prof. Wydziału Chemii UJ, a także zatrudnieni na pierwszych etatach w Instytucie: prof. K. Grela (Wydział Chemii UW), prof. Daniel Gryko (Wydział Chemiczny PW), oraz prof. B. Korybut-Daszkiewicz i dr hab. Jarosław Jaźwiński (Uniwersytet Kardynała St. Wyszyńskiego), a także prof. M. Mąkosza (Profesor Emeritus).

Warsztaty Chemiczne dla stypendystów Krajowego Funduszu na Rzecz Dzieci.

W dniach 29.11-3.12.2010 w IChO PAN zorganizowano warsztaty chemiczne, w których uczestniczyła grupa 17 stypendystów z klas 1-3 liceum. Organizatorką warsztatów z ramienia IChO PAN była prof. Zofia Lipkowska. Młodzież włączono w codzienną działalność Instytutu, umożliwiając aktywny udział w pracach 12 zespołów badawczych. Zajęcia obejmowały wykłady prezentujące główne kierunki badawcze Instytutu (zaprezentowano 8 wykładów i 4 seminaria), spotkania dyskusyjne z doktorantami i młodą kadrą Instytutu, w tym z byłymi stypendystami Funduszu, będącymi uczestnikami Studium Doktoranckiego IChO. Szczególnym zainteresowaniem cieszyły się dyskusje mające na celu przybliżenie młodzieży specyfiki pracy naukowej oraz samodzielna (pod nadzorem) praca w laboratoriach oraz bibliotece. Pierwszy dzień pobytu w Instytucie poświęcono na zapoznanie z przepisami BHP obowiązującymi w laboratoriach chemicznych, zaznajomienie z głównymi technikami analitycznymi oraz wizyty w laboratoriach analitycznych.

Wykłady promujące tematykę Instytutu wygłosili: Marek Chmielewski, Karol Grela, Daniel Gryko, Sławomir Jarosz, Zofia Lipkowska, Mieczysław Mąkosza, Sławomir Szymański, Jerzy Wicha, Bohdan Korybut-Daszkiewicz Zbigniew Kałuża, Marian Olejnik, Ryszard Ostaszewski.

W minionym roku w Instytucie 6 studentów wyższych uczelni (głównie warszawskich) wykonywało prace magisterskie, a kolejnych 36 ochotniczo uczestniczyło w pracach badawczych.

Działalność dydaktyczna poza IChO:

Prof. W. Danikiewicz, wykład pt. „Zastosowania spektrometrii mas w chemii organicznej i biochemii” dla doktorantów Uniwersytetu im. Mikołaja Kopernika w Toruniu – wykład na terenie Wydziału Chemicznego UMK w Toruniu, semestr letni 2009/2010 oraz semestr zimowy 2010/2011 (2x15 godzin).

Prof. W. Danikiewicz, wykład pt. „Spektrometria magnetycznego rezonansu jądrowego i spektrometria mas” w ramach wykładu monograficznego „Metody spektroskopowe” dla studentów i doktorantów Politechniki Warszawskiej – wykład w ramach Centrum Studiów Zaawansowanych Politechniki Warszawskiej, semestr zimowy 2009/2010 (6 godzin z 10; pozostałe cztery w grudniu 2009), oraz semestr zimowy 2010/2011 (2 godziny z 10; pozostałe 8 godzin w styczniu 2011).

Prof. W. Danikiewicz, wykład z podstaw spektrometrii mas dla studentów Uniwersytetu im. Kardynała Stefana Wyszyńskiego (4 godziny).

Mgr M. Olejnik, zajęcia laboratoryjne dla studentów Uniwersytetu im. Kardynała Stefana Wyszyńskiego (20 godzin).

Prof. B. Korybut-Daszkiewicz, Wydział Matematyczno-Przyrodniczy UKSW, wykłady i ćwiczenia z chemii organicznej oraz opieka nad 1 wykonaną pracą magisterską (180 godzin).

Dr hab. Jacek Młynarski, seminarium magisterskie w Zakładzie Chemii Organicznej Uniwersytetu Jagiellońskiego (45 godzin).

Dr hab. Jacek Młynarski, wykład: „Nowoczesna synteza stereoselektywna” dla studentów Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego (30 godzin).

Dr hab. Jacek Młynarski, wykład: „Chemia organiczna” dla studentów Wydziału Biologii i Geologii Uniwersytetu Jagiellońskiego (45 godzin).

Dr hab. Jacek Młynarski, wykłady do studentów chemii Universite d'Orleans, Institut de Chimique et Analytique (12 godzin; kontrakt *visiting professor*).

Prof. J. Jurczak, ustawowe pensum dydaktyczne, Wydział Chemii UW.

Prof. D.T. Gryko, pracownia syntezy organicznej (75 godzin) oraz wykład monograficzny "Chemia koloru" (15 godzin), Wydział Chemiczny Politechniki Warszawskiej.

Dr hab. R. Kawęcki – Akademia Podlaska w Siedlcach, Instytut Chemii, zajęcia ze studentami w wymiarze 210 godz.

Prof. Z. Urbańczyk-Lipkowska, „Elementy krystalografii geometrycznej i zastosowanie rentgenowskiej analizy strukturalnej w chemii” wykład (Wydział Nauk Ścisłych UKSW, 2 godz.).

Mgr inż. Marcin Górecki, pani Alicja Dziedzic, zajęcia (120 godzin) w zakresie spektroskopii dichroizmu kołowego, ultrafioletu i podczerwieni dla uczniów Technikum Chemicznego Nr 3 im. Prof. dr J. Zawadzkiego przy ulicy Saskiej 78 w Warszawie prowadzone na terenie IChO PAN w Pracowni Spektroskopii Optycznej w ramach praktyk uczniowskich w maju 2010.

Mgr inż. M. Górecki, "*Possibilities of measuring solid state samples.*" - ABL&E-JASCO TRAINING: "*CD and related measuring techniques including ORD*" (Budapeszt, 27-30.X 2010 r.) 4-dniowa seria wykładów szkoleniowych z zasad wykonywania i wykorzystania pomiarów dichroizmu kołowego w ciele stałym w ramach szkolenia zorganizowanego przez firmę JASCO i Uniwersytet Eötvös Lorand w Budapeszcie dla 10-osobowej grupy pracowników polskich jednostek naukowych.

Prof. J. Frelek, "*Circular Dichroism Spectroscopy (CD) – Foundations and Application*" – 2½ godz. wykład szkoleniowy ogłoszony w ramach International Summer School on Molecular Spectroscopy: "*Fascinating Spectra of magic compounds: isolation and structure elucidation of natural products*" (22-29.VIII, 2010, Oppurg, Niemcy). Kurs organizowany przez Uniwersytet w Lipsku (Niemcy).

Dr hab. J. Jaźwiński, wykłady nt. zaawansowanej chemii organicznej na Uniwersytecie Kardynała S. Wyszyńskiego (60 godz.).

Dr hab. J. Jaźwiński, dr M. Bugaj, koordynacja wykładów oraz wykłady nt. metod identyfikacji związków organicznych na Uniwersytecie Kardynała S. Wyszyńskiego (18 godz.).

Prof. R. Ostaszewski, wykłady: Instytut Biotechnologii Wydział Chemiczny PW „Elementy chemii bioorganicznej” 15 godzin, „Biochemia” 60 godz.

Prof. R. Ostaszewski, wykład: „Chemia” 15 godz., „Seminarium Dyplomowe” 30 godz. Wydział Zamiejscowy Nauk o Społeczeństwie, Katedra Inżynierii Środowiska w Stalowej Woli.

Prof. R. Ostaszewski, „Zastosowanie enzymów w syntezie organicznej i biotechnologii”, cykl wykładów (6 godz.) w Katedrze Chemii Organicznej, Bioorganicznej i Biotechnologii, Politechniki Śląskiej.

Prof. R. Ostaszewski, „Chemoenzymatyczna synteza leków dla przemysłu farmaceutycznego” wykład (3 godz.) w Zespole Chemii Bioorganicznej, Instytutu Chemii Organicznej, Biochemii i Biotechnologii Politechniki Wrocławskiej.

Prof. M. Mąkosza, wykłady „Metody syntezy organicznej” dla studentów Wydziału Chemicznego Politechniki Warszawskiej.

Prof. M. Mąkosza, cykl wykładów w Technische Universitaet Berlin.

Prof. M. Mąkosza, cykl wykładów Badische Anilina und Soda Fabrik, Ludwigshafen.

W minionym roku odbyło się 10 seminariów ogólnoinstytutowych. Wśród wykładowców było 9 osób z zagranicy:

1. Prof. Harry Anderson (University of Oxford, Anglia)
2. Prof. Chang-Hee Lee (Kangwon National University, Korea Pd.)
3. Prof. Hanz Langhals (University of Munchen, Niemcy)
4. Prof. Ram Mohan (Illinois Wesleyan University, USA)
5. Prof. Anthony P. Davis (University of Bristol, Anglia)
6. Prof. Herbert Mayr (University of Munchen, Niemcy)
7. Prof. David Crich (Institut de Chimie des Substances Naturelles (ICSN) in Gif sur Yvette, Francja)
8. Prof. Henk Hiemstra (University of Amsterdam, Holandia)
9. Prof. Fran Unger (University of Vienna, Austria)

oraz 1 osoba z Polski – prof. Barbara Nawrot (Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN, Łódź).

W 2010 r. Instytut zorganizował trzy konferencje międzynarodowe:

1. ‘(R)Evolution in Catalysis’ (IChO PAN, Warszawa, 7-10 maja 2010).

Konferencja była finalnym spotkaniem dwóch europejskich sieci badawczych typu Marie Curie Research Training Network (MC RTN): ‘Revolutionary Catalysis’ REVCAT (koordynowana przez prof. Joosta Reeka) oraz ‘Dynamic Combinatorial Chemistry’ DCC (koordynowana przez prof. Sijbrena Otto). Sieci te działały w latach 2006-2010. Jednym z celów konferencji było zaprezentowanie najcenniejszych wyników uzyskanych w czasie działania w/w sieci MC RTN. Głównym organizatorem był prof. Daniel Gryko (uczestnik sieci REVCAT), któremu pomagało szereg osób wśród których na szczególne wyróżnienie zasługuje dr Beata Koszarna. W czasie tej trzydniowej konferencji wygłoszono łącznie 12 wykładów i 20 komunikatów ustnych. Wśród zaproszonych gości było wielu znanych europejskich chemików pracujących w obszarze katalizy homo- i heterogenicznej: Karl Anker Jørgensen (Aarhus University), Thomas Ward (University of Basel) i Douglas Philp (University of St. Andrews). Wykłady wygłosiło też wielu profesorów uczestniczących w sieciach MC RTN.: Joost Reek (University of Amsterdam), Jeremy Sanders (University of Cambridge), Helma Wennemers (University of Basel), Umberto Piarulli (University of Como), Sijbren Otto (University of Groningen). W konferencji uczestniczyła większość pracowników naukowych i doktorantów IChO PAN. Wielu z nich wygłosiło ustne komunikaty, co było doskonałą okazją do prezentacji naszego ośrodka na arenie międzynarodowej.

2. III Microsymposium on Asymmetric Synthesis in Warsaw (IChO PAN, 9.09.2010).

Było to już trzecie z cyklu jednodniowych spotkań dotyczących aktualnych wybranych zagadnień współczesnej syntezy asymetrycznej. Na program symposium składały się dwa wykłady plenarne i dwie krótsze prezentacje. Tematyka konferencji dotyczyła wybranych zagadnień współczesnej syntezy asymetrycznej. Prezentowane tematy obejmowały zastosowanie katalizatorów zawierających metale, jak i ‘organokatalizatorów’ w syntezie organicznej. Wykłady na zaproszenie wygłosili chemicy o międzynarodowej reputacji: prof. Kenso Soai (Department of Applied Chemistry, Faculty of Science, Tokyo University of Science), prof. Magnus Rueping (Institute of Organic Chemistry, RWTH-Aachen University),

dr. Tsuneomi Kawasaki (Department of Applied Chemistry, Faculty of Science, Tokyo University of Science) oraz prof. Thomas Nugent (School of Engineering and Science, Jacobs University, Bremen). Konferencja została zorganizowana przez Instytut Chemii Organicznej PAN przy wsparciu firmy Linegal Chemicals.

3. VI Symposium: “Nuclear Magnetic Resonance in Chemistry, Physics and Biological Sciences” (IChO PAN, Warszawa, 22-24 września 2010).

Była to już 6 konferencja tego typu tym razem dedykowana prof. Krystynie Kamińskiej-Treli. Konferencja zgromadziła 88 uczestników (70 z Polski oraz 18 z zagranicy). Wygłoszono 16 wykładów: sześć plenarnych oraz dwa ‘invited’. Wykłady plenarne wygłosili: Helmut Duddeck (Leibniz University Hannover, Germany), Jochen Autschbach (University at Buffalo, State University of New York, USA), Anthony J. Horsewill (University of Nottingham, United Kingdom), Bernhard Brutscher (Institut de Biologie Structurale Jean-Pierre Ebel, Grenoble, France), Peter Tolstoy (Freie Universität Berlin, Germany), Wiktor Koźmiński (Wydział Chemii UW). Wykłady ‘invited’ wygłosili: Jadwiga Frelek (IChO PAN) oraz Franciszek Hennel (Bruker BioSpin MRI, Ettlingen, Germany). Zaprezentowano również siedem 30-minutowych i cztery 15-minutowe komunikaty oraz 49 posterów.

Wzorem lat ubiegłych Instytut Chemii Organicznej PAN zorganizował XIX Zimową Szkołę Nowoczesnej Chemii Organicznej w Szczyrku. Szkoła odbyła się w dniach 28 lutego - 6 marca 2010 r. Uczestniczyło w niej 21 studentów reprezentujących 11 wydziałów chemicznych z całego kraju. Wykłady i panele dyskusyjne prowadziło 6 pracowników Instytutu (M. Chmielewski, W. Danikiewicz, D.T. Gryko, S. Jarosz, J. Jurczak, M. Mąkosza).

WAŻNIEJSZE WYNIKI INSTYTUTU W 2010 ROKU

W badaniach podstawowych

1. Uzyskanie na drodze obliczeń kompletnego profilu energetycznego reakcji akrylonitrylu z izomerycznymi anionami nitrofenidowymi oraz *p*-halonitrofenidowymi. (*Zespół 1*)
2. Opracowanie prostej asymetrycznej metody syntezy wysoce sfunkcjonalizowanych indolizydyn na drodze katalizowanej kwasami Lewisa reakcji silyloksy dienów i cyklicznych nieracemicznych imin. (*Zespół 2*)
3. Opracowanie katalizowanej tryflanami silylowymi reakcji przegrupowania *N*-zabezpieczonych 4-winyloksyazetydyn-2-onów prowadzące do 4-karbonylmetyloazetydyn-2-onów. Zastosowanie otrzymanych produktów w syntezie karbapenemów. (*Zespół 2*)
4. Określenie wpływu struktury terminalnej grupy acetylenowej w cząsteczce na wydajność i stereochemię reakcji chiralnych nitronów z alkinami katalizowanej solami miedzi (I). (*Zespół 2*)
5. Opatentowanie POSS-immobilizowanych ligandów umożliwiających oddzielenie katalizatora po reakcji metatezy za pomocą nanofiltracji. (*Zespół 3*)
6. Selektywna deprotekcja polihydroksylowanego związku o 12-atomach węgla w łańcuchu. (*Zespół 4*)
7. Makrocyclizacja otwartołańcuchowego prekursora na bazie sacharozy templatowana *L*-fenyloalaniną. (*Zespół 4*)
8. Opisanie nowego programu MSITE i jego zastosowanie do badania oddziaływań koaktywator-białko-ligand witaminowy. (*Zespół 5*)
9. Zaproponowanie nowej interpretacji zjawiska tłumionej rotacji kwantowej w spektroskopii NMR, bazującą na stochastycznych zmianach hamiltonianu efektywnego, opisującego oddziaływanie spinów jąder atomów tworzących rotator. Oprócz znanego członu Heisenberga, opisującego fluktuacje rozszczepień tunelowych, w hamiltonianie efektywnym pojawia się fluktuujący człon nowego typu, opisujący efekty chwilowego znoszenia degeneracji Kramersa. (*Zespół 5*)
10. Zrealizowanie asymetrycznej syntezy warfaryny prowadzony w warunkach organokatalizy (*green chemistry*) z wysoką wydajnością i nadmiarem enancjomerycznym 99%. (*Zespół 6*)
11. Zbadanie zestawu tytanowych kompleksów pochodnych (R)-BINOLu jako katalizatorów enancjoselektywnych reakcji Friedla-Craftsa pirolu i jego pochodnych z glioksalanami. Wyselekcjonowanie optymalnej struktury katalizatora i wykazanie, że opracowana metoda daje się przełożyć na dużą skalę laboratoryjną. Zaproponowanie modelu reakcji pozwalającego przewidzieć jej stereochemiczne wyniki. (*Zespół 8*)
12. Opracowanie warunków bezpośredniego arylowania pochodnych pirolu w pozycji 2 bez użycia soli lub kompleksów metali przejściowych. (*Zespół 10*)
13. Wyznaczenie struktury trzeciorzędowej monomeru modyfikowanej biotechnologicznie insuliny ludzkiej A22Gly-B31Arg w środowisku woda/acetonitryl i udowodnienie, że przyjmuje zasadniczo taką samą konformację jak insulina natywna. (*Zespół 11*)
14. Określenie (po raz pierwszy) sposobu wiązania motywu genisteiny z DNA typu hantli jako modelu do badania oddziaływań z inhibitorami topoizomerazy II. (*Zespół 11*)

15. Opracowanie wydajnej syntezy peptydowych dendrymerów 1-szej i 2-giej generacji na nośniku stałym. (*Zespół 12*)
16. Wykazanie, że małowcząsteczkowe dendrymeryczne peptydy agregują w roztworach wodnych dając struktury drugorzędowe typowe dla białek. (*Zespół 12*)
17. Opracowanie pierwszej totalnej syntezy tricyklicznego (5-7-6) diterpenoidu pochodzenia grzybowego, (\pm)-heptemeronu G, oraz nowej, uproszczonej formalnej syntezy diterpenoidu o działaniu antybiotycznym, (\pm)-guanakastepenu A. (*Zespół 13*)
18. Wykazanie nieskuteczności reguły helikalności (opracowanej dla chromoforu chromanowego przez Antus'a i współpracowników) na przykładzie pochodnych *S*-tropoloksu oraz stwierdzenie, że w przypadku tych związków na znak długofalowego pasma CD występującego przy około 275 nm większy wpływ wywiera chiralność centrum stereogenicznego niż helikalność pierścienia chromanowego. (*Zespół 13*)
19. Opracowanie 3-etapowej metody syntezy enancjomerycznie czystego spiro-aminoketonu (który znany był dotychczas jedynie jako racemat) z L-proliny. (*Zespół 14*)
20. Opracowanie selektywnej syntezy pochodnych kobalaminy z wolnymi grupami karboksylowymi w pozycji *-c* lub *-d*. (*Zespół 15*)
21. Otrzymanie hybrydowych połączeń witaminy B₁₂ z PPIX-ą w reakcji katalizowanej CuOAc (CuAAC 'click chemistry') z wysoką wydajnością. (*Zespół 15*)
22. Stwierdzenie metodami eksperymentalnymi i teoretycznymi złożonej równowagi w kompleksowaniu azyrydyn przez sole rodu(II), typu „kompleks – azyrydyna *cis* – azyrydyna *trans*”. (*Zespół 16*)
23. Zastosowanie połączonych metod (NMR w fazie ciekłej i stałej) do badania mostka wodorowego w antypirenie. (*Zespół 16*)
24. Otrzymanie polimerycznych adduktów „ligand wielofunkcyjny/dimeryczna sól rodu(II)” o dobrze zdefiniowanym składzie (addukty polimeryczne 1:1). Metoda może być przydatna w syntezie interesujących układów supramolekularnych. (*Zespół 16*)
25. Opracowanie stereoselektywnej metody syntezy tripeptydów, w której kluczowym etapem jest reakcja Ugi. (*Zespół 20*)
26. Opracowanie nowych, chemoenzymatycznych metod syntezy optycznie czynnych kwasów 3-arylo-penten-4-owych, w których donorem grupy alkoksylowej są ortoestry i węglany. (*Zespół 20*)
27. Opracowanie metody syntezy nowych analogów tripeptydów zawierających grupę akrylamidową i wykazanie ich wysokiej aktywności antynowotworowej. (*Zespół 20*)
28. Wykazanie (analizując związek pomiędzy obliczonymi energiami pobudzeń trypletowych a dokładnością obliczanych stałych sprzężenia spin-spin w NMR dla serii funkcjonałów DFT), który funkcjonał powinien dawać najbardziej wiarygodne wyniki. (*Zespół 22*)
29. Zaobserwowanie zjawiska katalizy jonowymiennej w reakcjach oksydacyjnego podstawienia wodoru w nitroarenach prowadzonych w rozpuszczalnikach niepolarnych. (*Zespół 23*)

W badaniach aplikacyjnych

Stabilna postać farmaceutyczna leku przeciwnowotworowego oraz sposób wytwarzania stabilnej postaci farmaceutycznej leku przeciwnowotworowego, twórcy: S. Janicki, W. Karaś, M. Znitowska, Z Mroczek, A. Tyrała, I. Czarnecka, Uprawnieni: Zakłady Farmaceutyczne Polfa S.A., Instytut Chemii Organicznej PAN, Akademia Medyczna Gdańsk, UP Bułgarii pat nr 65985, data przyznania patentu: 31.08.2010

Patenty zgłoszone:

„Sposób otrzymywania kwasu (S)-7-hydroxy-6-oxo-2,3,4,6-tetrahydroizochinolino-3-karboksyowego oraz jego zastosowanie”, twórcy: L. Kozerski, R. Kawecki, J. Solecka, Narodowy Instytut Zdrowia Publicznego –PZH, Instytut Chemii organicznej PAN, data zgłoszenia, nr zgłoszenia P388577

„Polyhedral Oligomeric Silsesquioxane (POSS)-linked Ligands”, twórcy:H. Abbenhuis, J. Wilting, G. Gerritsen, K. Grela, K. Leszczyńska, J. Czaban, A. Wojtasiewicz, C. Azap, D. Wolf, uprawnieni: hybrid Catalysis BV, Instytut Chemii Organicznej PAN, Evonik Degussa GmbH, nr zgłoszenia 10166004.1, data zgłoszenia 15.06.2010

Zgłoszenie międzynarodowe nr PCT/PL2009/000090, „Dendrimeric compounds comprising amino acids, a hyperbranched core compound, a process for the preparation of dendrimeric compounds comprising amino acids and a hyperbranched core compound, and use thereof”, data zgłoszenia 24-09-2009, Zofia Lipkowska, Piotr Polcyn, Andrzej Lipkowski – kontynuacja procedury PCT.

Zgłoszenie patentowe: Republic of South Africa – 06.07.2010. Z. Pakulski, P. Cmoch, J. Oklešťková, M. Strnad, „Saccharide lupane derivatives, their use and pharmaceutical compositions containing these derivatives”

Nr zgłoszenia P 387177, „Związki enaminokarbonylowe i ich zastosowanie”, data zgłoszenia 02-02-2009, Piotr Krajewski, Agnieszka Woźniak – kontynuacja procedury PCT.

Nr zgłoszenia P 387331, Sposób wytwarzania aldehydowego związku beta-laktamowego, związek pośredni, sposób wytwarzania związku pośredniego oraz zastosowanie związku pośredniego, data zgłoszenia 24-02-2009, Marek Chmielewski, Bartłomiej Furman, Adam Mames, Sebastian Stecko, Irma Panfil – kontynuacja procedury PCT.

**WYKAZ REALIZOWANYCH INDYWIDUALNYCH
PROJEKTÓW BADAWCZYCH**

Rodzaj projektu, Tytuł projektu	Kierownik projektu	Okres realizacji
1	2	3
a) Krajowe:		
1/ finansowane ze środków MNiSW		
1. Wykorzystanie makrocyclicznych kompleksów metali do konstrukcji urządzeń molekularnych (<i>własny</i>)	prof. B. Korybut-Daszkiewicz	2007-2010
2. Nowa metoda syntezy azyrydyn wykorzystujących wewnątrzcząsteczkowe podstawienie w karboanionach zawierających w pozycji beta-ugrupowanie N-chloro-aminowe (<i>promotorski przedłużony do 2010</i>)	prof. M. Mąkosza	2007-2009
3. Synteza i wykorzystanie cyklicznych enaminonów w stereoselektywnej syntezie alkaloidów azabicyklicznych i benzochinolizydyn (<i>własny</i>)	dr hab. B. Furman	2008-2011
4. Polihydroksylowe związki o długich łańcuchach i ich karbocykliczne analogi: synteza i właściwości (<i>własny</i>)	prof. S. Jarosz	2008-2011
5. Nowe makrocycliczne receptory anionów – poszukiwania możliwości ich wykorzystania w chemii i biologii (<i>własny</i>)	prof. J. Jurczak	2008-2011
6. Ustalanie korelacji pomiędzy strukturą i właściwościami chiralnoptycznymi w antybiotykach beta-laktamowych i ich analogach (<i>własny</i>)	prof. J. Frelek	2008-2011
7. Asymetryczna reakcja aldolowa w roztworach wodnych. Zastosowanie unikalnych donorów: hydroksy- i dihydroksyacetony w syntezie (<i>własny</i>)	dr hab. J. Młynarski	2008-2011
8. Badania metodą NMR chemii, właściwości fizykochemicznych i kompleksów molekularnych z oligomerami DNA wybranych inhibitorów topoizomerazy I i II (<i>własny</i>)	dr W. Bocian	2009-2012

9. Badanie reakcji karboanionów ze związkami karbonylowymi i akceptorami Michaela w fazie gazowej (<i>promotorski</i>)	prof. W. Danikiewicz	2009-2010
10. Synteza i badanie własności peptydowych dendrymerów oddziałujących z biomembranami (<i>własny</i>)	prof. Z. Lipkowska	2009-2012
11. Synteza i zastosowanie katalizatorów o opóźnionej inicjacji w reakcjach metatezy (<i>własny</i>)	prof. K. Grela	2009-2012
12. Karbenowe kompleksy rutenu zawierające zmodyfikowane ligandy anionowe, jako katalizatory reakcji metatezy (<i>promotorski</i>)	prof. K. Grela	2009-2011
13. Reakcja Kinugasy – nowa, asymetryczna metoda syntezy karbapenamów, karbacefamów, klawamów i oksacefamów (<i>własny</i>)	prof. M. Chmielewski	2009-2012
14. Badania strukturalne analogów antybiotyków beta-laktamowych metodą dichroizmu kołowego (<i>promotorski</i>)	prof. J. Frelek	2009-2011
15. Synteza totalna trójcyklicznych diterpenoidów wytwarzanych przez mikroorganizmy, guanakastepenu A i heptameronu G (<i>własny</i>)	prof. J. Wicha	2009-2011
16. Asymetryczna synteza alkaloidów <i>Erythrina</i> (<i>własny</i>)	dr hab. Z. Kałuża	2009-2012
17. Synteza ciekłych porfiryn i koroli o wysokim współczynniku absorpcji dwufotonowej (<i>własny</i>)	prof. D.T. Gryko	2009-2012
18. Badania porównawcze technik jonizacji stosowanych w spektrometrii mas w analizie kompleksów metali przejściowych i ligandów organicznych (<i>własny</i>)	prof. W. Danikiewicz	2009-2012
19. Pochodne 10-hydroksybenzo[h]chinoliny – synteza i wewnątrzcząsteczkowy transfer protonu w stanie wzbudzonym (<i>promotorski</i>)	prof. D.T. Gryko	2009-2011
20. Zastosowanie hydroksy- i dihydroksyacetonu w asymetrycznej syntezie związków polihydroksylowych (<i>promotorski</i>)	dr hab. J. Młynarski	2009-2011

21. Stereoselektywna synteza 4-arylo- β -laktamów o potencjalnych właściwościach farmakologicznych (<i>promotorski</i>)	prof. M. Chmielewski	2009-2011
22. Metody chemii kwantowej w badaniach stałych sprzężenia kwadrupolowego lekkich jąder (<i>własny</i>)	prof. M. Jaszuski	2010-2011
23. Nowe metody syntezy policyklicznych pochodnych indolu (<i>własny</i>)	rof.. K. Wojciechowski	2010-2013
24. Synteza polihydroksylowanych pochodnych aminocyklopentanu, analogów związków o interesujących właściwościach biologicznych (<i>promotorski</i>)	prof. S. Jarosz	2010-2012
25. Wykorzystanie 4-winyloksyazetydynonu w asymetrycznej syntezie monocyklicznych β -laktamów, cefamów i oksacefamów (<i>promotorski</i>) zakończony	prof. M. Chmielewski	2010-2011
26. Stereoselektywna, katalizowana proliną, synteza związków polihydroksylowych o długich łańcuchach oraz dużych pierścieniach karbocyklicznych (<i>promotorski</i>)	prof. S. Jarosz	2010-2012
27. Synteza C_2 -symetrycznych diamin i ich zastosowanie w asymetrycznej katalizie (<i>promotorski</i>)	dr hab. Z. Kałuża	2010-2012
28. Organokatalityczne C-H hydroksylowanie – kataliza enaminowa i dienaminowa (<i>własny</i>)	dr hab. Dorota Gryko	2010-2013
29. Wpływ kompleksowania dimerycznych soli rodu(II) na przesunięcie chemiczne NMR i sprzężenie spin-spin w związkach organicznych – porównanie wyników eksperymentalnych i teoretycznych (<i>własny</i>)	dr hab. J. Jaźwiński	2010-2013
30. Karboksylany dimolibdenu, jako chromofory pomocnicze w badaniach strukturalnych transparentnych związków organicznych (<i>własny</i>)	prof. J. Frelek	2010-2013
31. Kwantowo-mechaniczna teoria spinowej relaksacji jądrowej rotatorów molekularnych (<i>własny</i>)	prof. S. Szymański	2010-2013

32. Chiralne kapsuły molekularne, jako środowisko reakcji chemicznych i kontrolowanych procesów dynamicznych (<i>własny</i>)	dr hab. Agnieszka Szumna	2010-2013
33. Wykorzystanie reakcji metatezy chlorowcopodstawionych alkenów, dienów i alkeninów do otrzymywania złożonych związków chemicznych (Iuventus Plus)	mgr C. Samojłowicz	2010-2011
34. Procesy tandemowe oparte na reakcjach przegrupowania Overmana/cyklizacji. Zastosowanie w syntezie azotowych związków heterocyklicznych (Iuventus Plus)	dr S. Stecko	2010-2011
35. Wykorzystanie kompleksów miedzi z N-heterocyklicznymi karbenami jako katalizatorów 1,3-dipolarnej cykloaddycji nitronów z acetylenami. Przemiany otrzymanych adduktów (Iuventus Plus)	dr M. Michalak	2010-2011
36. Katalizowana tryflanami silylowymi reakcja przegrupowania 5-winyloksy-piperydyn-2-onów i 6-winyloksy-pirolidyn-2-onów jako stereoselektywna metoda alkaloidów azabicyklicznych (Iuventus Plus)	dr A. Koziół	2010-2011
37. Założenia technologiczne otrzymywania oraz badania przedkliniczne niskocząsteczkowych peptydowych związków dendrymerycznych o właściwościach przeciwdrobnoustrojowych do zastosowań u ludzi i zwierząt (projekt rozwojowy)	prof. Zofia Lipkowska	2010-2013
2/ finansowane ze środków FNP		
38. Poszukiwanie nowych, przyjaznych środowisku warunków prowadzenia reakcji metatezy – nowe katalizatory, aktywacja, immobilizacja, nowe rozpuszczalniki (program MISTRZ)	prof. K. Grela	2007-2010
39. Nowatorskie zastosowanie aromatycznych faz fluorowanych w reakcjach katalizowanych kompleksami metali przejściowych i ligandów NHC (program VENTURES)	mgr C. Samojłowicz	2008-2011
40. Nowe enancjoselektywne katalizatory reakcji metatezy olefin (program VENTURES)	mgr R. Gawin	2009-2011

41. Metateza trudnych partnerów i organokatalityczne transformacje jej produktów, jako źródła cennych bloków budulcowych w syntezie istotnych chiralnych związków biologicznie czynnych (program VENTURES)	T. Wdowik	2009-2011
42. Blokery optyczne oparte na porfirynach i korolach o rozbudowanym chromoforze (program VENTURES)	mgr A. Nowak-Król	2009-2012
43. Rozpoznanie chiralne anionów karboksylanowych o szczególnym znaczeniu biologicznym (program VENTURES)	mgr F. Ulatowski	2009-2012
44. Fotochemiczna kontrola kompleksowania anionów przez syntetyczne receptory (program VENTURES)	mgr K. Dąbrowa	2010-2012
45. Program Start	mgr A. Szadkowska	2010
46. Program Start	dr W. Chaładaj	2010
47. Novel approach towards NO-free activators of sGC enzyme for medical treatment of heart diseases (TEAM)	dr hab. Dorota Gryko	2009-2013
48. Novel chromophores for two-photon excitation fluorescence microscopy and optical limiting (TEAM)	prof. D.T. Gryko	2010-2014
b) finansowane z innych źródeł		
49. ® – Evolutionary Catalysis (REVCAT) (6 PR)	prof. D. Gryko	2006-2010
50. HiCat – Hierarchically Organized Metal Organic Catalysts for Continuous and Multi-batch Processes (7 PR)	prof. K. Grela	2008-2011
51. Zastosowanie farmaceutycznych związków dendrymerycznych zawierających aminokwasy (POIG.01.03.02-00-030/08)	prof. Z. Lipkowska	2009-2013
52. Cukry, jako surowce odnawialne w syntezie produktów o wysokiej wartości dodanej (POIG.01.01.02-14-102/09)	prof. S. Jarosz	2010-2014
53. Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym (POIG.01.03.01-00-158/09)	prof. R. Ostaszewski	2010-2014

54. Metagenomy, jako źródło nowoczesnych narzędzi biotechnologicznych służących do bioremediacji i biotransformacji (POIG.01.01.02-14-054/09)	prof. W. Danikiewicz	2010-2014
55. Zastosowanie pochodnych poliizoprenoidów, jako nośników leków i regulatorów metabolizmu (POIG.01.03.01-14-036/09)	prof. W. Danikiewicz, prof. M. Chmielewski	2010-2013
56. Opracowanie syntezy substancji farmaceutycznej ezetymibu – selektywnego inhibitora wchłaniania cholesterolu (INITECH)	prof. M. Chmielewski	2010-2012

Projekt TEAM Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej

Tytuł: *‘Nowe aktywatory cyklicznej guanylowej jako potencjalne leki w chorobie wieńcowej’*.
Kierownik projektu: dr hab. Dorota Gryko, prof. nadzw. Okres realizacji projektu: wrzesień 2009 – sierpień 2013.

Projekt został rozpoczęty w drugiej połowie 2009 we współpracy z University of Texas (Health Science Center University of Texas, Medical School, Houston) dotyczy badań nad syntezą układów syntezą związków biologicznie czynnych a konkretnie układów porfirytowych oraz modyfikacji witaminy B12.

W projekcie jest zaangażowanych 2 stażystów po doktoracie, 3 doktorantów i 2 studentów.

Projekt TEAM Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej

Tytuł: *‘Nowe barwniki funkcjonalne do zastosowań w dwufotonowej mikroskopii fluorescencyjnej oraz w blokowaniu optycznym’*. Kierownik projektu: prof. Daniel Gryko, okres realizacji: październik 2010 – kwiecień 2014.

Projekt badawczy realizowany w ramach Programu TEAM finansowanego przez Fundację na Rzecz Nauki Polskiej z funduszy europejskich, działanie 1.2. ‘Wzmocnienie potencjału kadrowego nauki’ Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka we współpracy z Prof. Aleksandrem Rebane, Montana State University of Teras (Bozeman, USA).

Ten multidyscyplinarny projekt dotyczy badań nad syntezą układów porfirytowych, barwników funkcjonalnych, oraz właściwości spektroskopowych tych związków zsyntetyzowanych w grupie badawczej prof. D. Gryko.

Do udziału w projekcie zaangażowano: 2 stażystów po doktoracie, 3 doktorantów i 2 studentów.

Projekty finansowane z Funduszy Strukturalnych, realizowane w IChO PAN

1. Projekt POIG.01.01.02-14-102/09 „*Cukry jako surowce odnawialne w syntezie produktów o wysokiej wartości dodanej*” współfinansowany z Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka 2007-2013 osi priorytetowej 1: Badania i rozwój nowoczesnych technologii, działania 1.1: Wsparcie badań naukowych dla budowy gospodarki opartej na wiedzy, poddziałania 1.1.2: Strategiczne programy badań naukowych i prac rozwojowych.

Okres realizacji: 01.01.2010 – 31.12.2014

Koordynator projektu: Instytut Chemii Organicznej, Polskiej Akademii Nauk

Kierownik projektu: prof. Sławomir Jarosz

Projekt wykonywany jest przez osiem zespołów (trzy z IChO PAN oraz po jednym: z ICHF PAN, Politechniki Warszawskiej, Uniwersytetu Gdańskiego, Uniwersytetu Łódzkiego, oraz Politechniki Śląskiej), które realizują 18 zadań badawczych. W IChO PAN projekt jest realizowany przez zespoły na czele których stoją:

Prof. Sławomir Jarosz	(2 zadania)
Prof. Marek Chmielewski	(3 zadania)
Prof. Janusz Jurczak	(2 zadania)

Całkowita wartość projektu: **25 503 764 PLN**

Kwota dofinansowania dla IChO PAN: 15 291 888 PLN

2. Projekt POIG.01.03.01-00-158/09 „*Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym*” współfinansowany z Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka 2007-2013 osi priorytetowej 1: Badania i rozwój nowoczesnych technologii, działania 1.3: Wsparcie projektów B+R na rzecz przedsiębiorców realizowanych przez jednostki naukowe, poddziałania:1.3.1: Projekty rozwojowe.

Okres realizacji: 01.01.2010 – 31.12.2014

Koordynator projektu: Politechnika Wroclawska

Kierownik projektu w IChO PAN: prof. Ryszard Ostaszewski (2 zadania)

Całkowita wartość projektu: **13 631 854 PLN**

Kwota dofinansowania dla IChO PAN: 1 841 500 PLN

3. Projekt POIG.01.01.02-14-054/09 „*Metagenomy jako źródło nowoczesnych narzędzi biotechnologicznych służących do bioremediacji i biotransformacji*” współfinansowany z Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka 2007-2013 osi priorytetowej 1: Badania i rozwój nowoczesnych technologii, działania 1.1: Wsparcie badań naukowych dla budowy gospodarki opartej na wiedzy, poddziałania 1.1.2: Strategiczne programy badań naukowych i prac rozwojowych.

Okres realizacji: 01.04.2009 – 31.12.2014

Koordynator projektu: Instytut Biochemii i Biofizyki PAN

Kierownik projektu w IChO PAN: prof. Witold Danikiewicz

Całkowita wartość projektu: **15 225 200,27 PLN**

Kwota dofinansowania dla IChO PAN: 927 280,28 PLN

4. Projekt POIG.01.03.01-14-036/09 „*Zastosowanie pochodnych poliizoprenoidów jako nośników leków i regulatorów metabolizmu*” współfinansowany z Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka 2007-2013 osi priorytetowej 1: Badania i rozwój nowoczesnych technologii, działania 1.3: Wsparcie projektów B+R na rzecz przedsiębiorców realizowanych przez jednostki naukowe, poddziałania 1.3.1: Projekty rozwojowe.

Okres realizacji: 04.01.2010 – 31.12.2013

Koordynator: Instytut Biochemii i Biofizyki PAN

Kierownik projektu w IChO PAN: prof. Witold Danikiewicz (1 zadanie)

prof. Marek Chmielewski (1 zadanie)

Całkowita wartość projektu: **5 000 000 PLN**

Kwota dofinansowania dla IChO PAN: 1 200 000 PLN

5. Projekt „*Opracowanie syntezy substancji farmaceutycznej ezetymibu – selektywnego inhibitora wchłaniania cholesterolu*” współfinansowany w ramach przedsięwzięcia „INITECH”

Okres realizacji: 01.01.2010 – 31.12.2012

Beneficjent: Instytut Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk

Kierownik projektu: prof. Marek Chmielewski

Całkowita wartość projektu: **1 666 492 PLN**

Kwota dofinansowania dla IChO PAN: 1 666 492 PLN

6. Projekt POIG.01.03.02-00-030/08 „*Zastosowanie farmaceutyczne związków dendrymerycznych zawierających aminokwasy*” współfinansowany z Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka 2007-2013 osi priorytetowej 1: Badania i rozwój nowoczesnych technologii, działania 1.3: Wsparcie projektów B+R na rzecz przedsiębiorców realizowanych przez jednostki naukowe, poddziałania 1.3.2:

Wsparcie ochrony własności przemysłowej tworzonej w jednostkach naukowych w wyniku prac B +R.

Okres realizacji: 01.09.2008 – 30.08.2013

Beneficjent: Instytut Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk

Kierownik projektu: prof. Zofia Lipkowska

Całkowita wartość projektu: **200 000 PLN**

Kwota dofinansowani dla IChO PAN: 200 000 PLN.

Ponadto w roku 2010 uzyskano dofinansowanie następujących projektów

1. Projekt rozwojowy nr NR13-0153-10/2010: tytuł Projektu: *„Założenia technologiczne otrzymywania oraz badania przedkliniczne niskocząsteczkowych peptydowych związków dendrymerycznych o własnościach przeciwdrobnoustrojowych do zastosowań u ludzi i zwierząt”*. Projekt realizowany we współpracy z Narodowym Instytutem Zdrowia Publicznego –Państwowym Zakładem Higieny.
Kierownik Projektu: prof. Zofia Lipkowska
2. Projekt finansowany w ramach Poddziałania 2.3 Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka Nr POIG.02.03.02-00-043/10: Tytuł Projektu w IChO PAN: *„Repozytorium cyfrowe Instytutów Naukowych”*. Lider Projektu: Muzeum i Instytut Zoologii PAN.
Kierownik Projektu w IChO PAN: dr Piotr Lipkowski
3. Projekt finansowany w ramach Poddziałania 1.3.2 Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka Nr POIG.01.03.02-00-012/09: Tytuł Projektu *„Nowe syntetyczne słodziki i inhibitory słodkiego smaku”*
Kierownik Projektu: prof. Marek Chmielewski

ROCZNA INFORMACJA O WSPÓLPRACY NAUKOWEJ Z ZAGRANICĄ W 2010 r.

1. Informacja o zakresie bezpośredniej współpracy Instytutu z zagranicznymi partnerami oraz o uzyskanych wynikach naukowych.

1.1. Wykaz instytutów, z którymi placówka współpracuje bez umów.

- a. Prof. M. Jaszuski, współpraca z Wydziałem Chemii Uniwersytetu w Oslo (Norwegia).
- b. Prof. M. Jaszuski, współpraca z Wydziałem Chemii Uniwersytet w Tromsø (Norwegia).
- c. Prof. Z. Lipkowska kontynuowała współpracę w dziedzinie badania struktury i zastosowania chemii związków inkluzyjnych z prof. Koichi Tanaka (Kansai University, Japonia). Kontynuowano badania metodami spektroskopowymi i rentgenograficznymi przemian fazowych nowych materiałów wykazujących w fazie stałej własności termo- i fotochromowe. W szczególności, udało się potwierdzić eksperymentalnie, że mechanizm powstawania wolnych rodników w kryształach pochodnych 1,3-dioxo-2-indenylidenu jest wspomagany przez migrację protonu z tworzenie formy enolowej. Wyniki prac opublikowano.
- d. Prof. K. Grela – współpraca z CNRS Rennes (Francja). Mgr Cezary Samojłowicz spędził 2 tygodnie w Rennes gdzie pracował pod opieką dr Marca Mauduita. Wykazano możliwość dodatkowej aktywacji katalizatora w rozpuszczalnikach FAH przez mikrofałe.
- e. Prof. K. Grela – współpraca z Imperial College w Londynie. Mgr Justyna Czaban odbyła staż (dwa tygodnie) w zespole prof. A. Livingstona specjalisty w dziedzinie nanofiltracji. Sprawdzała możliwości oczyszczania katalizatorów zawierających krzemowy tag POSS w warunkach nanofiltracji.

1.2 Informacja o współpracy realizowanej na podstawie centralnie rozdzielanych limitów wymiany bezdewizowej (CNRS, Royal Society, DFG, NAS itp.) oraz jej wynikach.

Węgry

porozumienie PAN – WAN

Polsko-Węgierski projekt badawczy "Eksperymentalne i teoretyczne badania związków biologicznie aktywnych i ich kompleksów z metalami przejściowymi przy pomocy ECD, VCD, FTIP i NMR" na lata 2008 – 2010. Prof. Jadwiga Frelek – prof. M. Hollossi

Współpraca była skoncentrowana na badaniach właściwości chiralnoptycznych kompleksów rodowych z naturalnymi aminokwasami. Wyizolowane z wykorzystaniem HPLC kompleksy były charakteryzowane przy pomocy pomiarów dichroizmu kołowego w cieple stałym, w KBr bądź bez nośnika, oraz widm niskotemperaturowych w zakresie od 25°C do -190°C. Ponadto bardzo zaawansowane zostały badania nad wykorzystaniem VCD do badań strukturalnych analogów antybiotyków β -laktamowych. Wyniki tych badań są bardzo interesujące i zostaną w najbliższym czasie przygotowane do opublikowania.

Hiszpania

porozumienie PAN – Instituto de Quimica Organica General, Consejos Superior Investigaciones Cientificas (C.S.I.C.)

Polsko-Hiszpański projekt badawczy, 'Syntezy karbocyklicznych i karbobicyklicznych mimetyków cukrów; inhibitory glikozydaz' na lata 2009-2010. Prof. Sławomir Jarosz – prof. Cristobal Lopez

Projekt jest kontynuacją wieloletniej współpracy naukowej pomiędzy prof. Jaroszem i prof. Lopezem, która do tej pory zaowocowała już 10 wspólnymi publikacjami. W r. 2010 każdy z zespołów realizował swoje zadania badawcze w macierzystych jednostkach. Prof. Lopez złożył wizytę w IChO PAN, podczas której dyskutowano istotne problemy dotyczące wykonanych kluczowych eksperymentów nad wykorzystaniem cukrów w syntezie związków aktywnych biologicznie.

Niemcy

porozumienie PAN – DFG

Polsko-Niemiecki projekt badawczy, *‘Nowe chiralne katalizatory – kwasy Lewisa - pochodne węglowodanów. Synteza i zastosowanie w syntezie asymetrycznej w roztworach wodnych’* na lata 2008-2010. Dr hab. Jacek Młynarski – prof. Mike Boysen (Universität Hannover, Institut für Organische Chemie)

Tematyka: realizacja syntezy chiralnego katalizatora o strukturze glucoBox-u. Wprowadzenie modyfikacji strukturalnych szkieletu bis-oksazolidynowego ligandu i testy katalizatora ligand-Zn(II) reakcji aldolowej Mukaiyamy. W roku 2010 nie finansowano wymiany naukowej w ramach tego projektu.

Korea Płd.

Projekt badawczy PAN-KSF *‘Synteza i właściwości fotofizyczne makrocycli porfirynoidowych o rozszerzonym chromoforze’*. Prof. Daniel Gryko – prof. Chang-Hee Lee

Kontynuowano współpracę z Prof. Chang-Hee Lee z Korei Południowej w ramach wspólnego projektu. Prof. Daniel Gryko odbył wizytę w Kangwon National University w lutym 2010 r. a prof. Chang-Hee Lee był w Warszawie w sierpniu 2010 r. Współpraca doprowadziła do powstania jednej wspólnej publikacji w 2010 r.

Porozumienie IChO PAN - Uniwersytet Palackeho (Ołomulec) - firma BioApex (Ołomulec), na lata 2009-2010. Dr hab. Zbigniew Pakulski – prof. Miroslav Strnad. Projekt pt.: *‘Saccharide lupane derivatives, their use and pharmaceutical compositions containing these derivatives’* dotyczy izolacji i syntezy związków o aktywności przeciwnowotworowej.

Projekt IAESTE

W czasie wakacji (lipiec, sierpień 2010) w ramach programu w Instytucie odbywał praktykę student Politechniki w Kijowie, Volodymyr Nasgoriansky. Pracował w Zespole IV (prof. Sławomira Jarosza) nad syntezą analogów sacharozy.

1.3 Zewnętrzne zagraniczne granty i zlecenia finansujące współpracę naukową (omówione w części szczegółowej sprawozdania).

- *Granty europejskie*
 - REVCAT – (6 PR) kierownik prof. Daniel Gryko
 - HiCat – (7 PR) Kierownik prof. Karol Grela
- Kontynuowano współpracę z Institutes for Pharmaceutical Discovery, L.L.C., ("IPD", USA). W ramach współpracy były prowadzone badania nad syntezą nowych antagonistów receptorów CRTH2 (prof. R. Ostaszewski).

Zlecenia firm zagranicznych objęte klauzulą poufności. Liczba zleceń – 1.

2. Ocena merytoryczna

Podobnie jak w ubiegłych latach, współpracę naukową z zagranicą w roku 2010 należy ocenić pozytywnie. Odbywała się ona w ramach oficjalnych umów i wielu nieformalnych kontaktów. Znaczne ograniczenie finansowania współpracy zagranicznej przez Kancelarię PAN zmniejszyło zainteresowanie formalnymi umowami.

Instytut Chemii Organicznej cieszy się ugruntowaną opinią liczącego się europejskiego ośrodka naukowego w obszarze chemii organicznej. Nasza współpraca z zagranicą staje się współpracą równorzędnych partnerów.

Kontynuowano działalność w programie Marie Curie Research Training Network o kryptonimie „REVCAT”, oraz projekcie ‘HiCat’ w ramach 7 Programu Ramowego.

3. Wnioski

Warunki, w których odbywa się współpraca międzynarodowa nie zmieniły się w ostatnich latach. Środki przeznaczone na współpracę zostały włączone do strumienia finansującego badania statutowe i granty indywidualne. Pomoc finansowa Kancelarii PAN kierowana jest na współpracę objętą dwustronnymi umowami i rekompensuje tylko część kosztów; finansowane są przejazdy tylko młodych pracowników i tylko niewielkimi kwotami ryczałtowymi.

Niezrozumiała wydaje się niechęć kierownictwa Ministerstwa do dofinansowania międzynarodowych imprez naukowych organizowanych w kraju. Obecnie tylko wyjątkowo skromne tzw. środki DOT mogą być kierowane na dofinansowanie naukowych imprez. Ze środków DOT nie można finansować krajowych uczestników. Są oni gorzej traktowani od uczestników zagranicznych, którym obowiązujące umowy (przynajmniej w części) umożliwiają finansowanie. Byłoby wskazane, aby krajowi uczestnicy, szczególnie studenci i doktoranci, mogli uzyskać granty konferencyjne.

Tę trudną sytuację zdecydowanie poprawiła aktywność zespołów Instytutu w pozyskiwaniu środków z Funduszy Strukturalnych, MNiSzW, a także z Unii Europejskiej. Dzięki zwiększonej liczbie grantów i programom Unijnym, liczna grupa doktorantów i młodszych pracowników mogła uczestniczyć w ważnych imprezach międzynarodowych i stażach naukowych.

CZEŚĆ SZCZEGÓŁOWA SPRAWOZDANIA

Temat I: Nowe reakcje, reagenty i metody syntezy organicznej

Zespół II – prof. Marek Chmielewski

Badania statutowe

Badania są prowadzone w dwóch grupach badawczych kierowanych przez prof. Marka Chmielewskiego oraz dr hab. Bartłomieja Furmana, prof. nadz.

Prof. Chmielewski: W wyniku prowadzonych prac wykazano, że *N*-zabezpieczone 4-winyloksy-azetydyn-2-ony ulegają przegrupowaniu z utworzeniem 4-karbonylometylo-azetydyn-2-onów w obecności tryfluanu trimetylosililowego. Stwierdzono, że proces przegrupowania przebiega z wysoką wydajnością, a w przypadku związków nieracemicznych z podstawnikiem przy centrum C-3 azetydynonu, również z wysoką stereoselektywnością. Zaproponowano mechanizm przegrupowania, a otrzymane produkty zastosowano w syntezie karbapenamów.

Prof. Furman: Zoptymalizowano syntezy enancjomerycznie wzbogaconych propargilosilanów. Zastosowano otrzymane nukleofile w wewnątrzcząsteczkowej reakcji Prinsa.

Grant N N204 156036 – kierownik prof. Marek Chmielewski

Kontynuowano badania nad katalizowaną solami miedzi (I) reakcją terminalnych acetylenów z chiralnymi cyklicznymi nitronami prowadzącą do β -laktamów. Stwierdzono, że cykliczne pięcioczłonowe nitrony otrzymane z kwasu winowego lub jabłkowego w reakcji z prostymi acetylenami tworzą oczekiwane karbapenamy z wysoką stereoselektywnością. Zaproponowano stereochemiczny przebieg badanego procesu, określono wpływ jaki na wydajność chemiczną i indukcję asymetryczną w badanej reakcji wywiera struktura użytego terminalnego acetyleny.

Grant N N204 192738 (promotorski) – kierownik prof. Marek Chmielewski

Celem zrealizowanego projektu było opracowanie asymetrycznej metody syntezy 4-podstawionych azetydynonów, cefamów i oksacefamów. Kluczowym etapem syntezy była wewnątrz- lub międzycząsteczkowa wymiana nukleofilowa na atomie węgla C-4 w 4-formyloksy-azetydynonach. Reakcje wymiany w zależności od zastosowanego katalizatora (promotora) przebiegały przez płaski kation *N*-acyloiminiowy lub neutralny 1,4-dehydro-azetydynon. Powiodło się zastosowanie opracowanego układu promującego opartego na czterochlorku cyny i pochodnej binaftolu w procesie addycji alkoholi allilowych i tiofenoli do 4-winyloksy-azetydynonu. Stwierdzono, że zastosowany kwas Lewisa (Binol/SnCl₄) jest efektywny również w przypadku enancjoselektywnej destrukcji racemicznych oksacefamów, 3,4-benzocefamów, 4-aryloksy- i 4-tiofenylazetydynonów. Wykazano, że 4-formyloksy-azetydynon w obecności katalitycznej ilości chinidyny ulegał nukleofilowemu podstawieniu tiofenolami z utworzeniem oczekiwanych, enancjomerycznie wzbogaconych 4-tiofenoazetydynonów. Proces ten przebiegał z umiarkowaną enancjoselektywnością i bardzo dobrymi wydajnościami. Zaproponowano mechanizm opracowanego procesu. Zastąpienie tiofenoli alifatycznymi tiolami lub alkoholami prowadziło również do oczekiwanych azetydynonów, jednak wydajności chemiczne procesu i nadmiary enancjomeryczne były niższe.

Konfigurację absolutną na centrum C-6 w otrzymanych cefamach lub centrum C-4 w 4-podstawionych azetydynonach określono wykorzystując spektroskopię dichroizmu kołowego (CD). Poprawność przypisania konfiguracji absolutnej potwierdziły symulowane widma CD przy wykorzystaniu danych z obliczeń w oparciu o TDDFT.

Wstępne badania biologiczne wobec DD-peptydazy 64-575 pokazały, że otrzymane oksacefamy o konfiguracji (*S*) na węglu C-4 posiadają umiarkowaną aktywność antybiotyczną. (doktorantka: Anna Kozioł).

Grant N N204 124137 (promotorski) – kierownik prof. Marek Chmielewski

Zbadane zostały reakcje 4-acyloksyazetydyn-2-onów z nukleofilowymi arenami w wariacie między- i wewnątrzcząsteczkowym. Stwierdzono, że jedynie wariant wewnątrzcząsteczkowy reakcji ma potencjalną wartość preparatywną – w przypadku reakcji międzycząsteczkowych zaobserwowano reakcję następczą prowadzącą do otwarcia pierścienia β -laktamu. Z tego powodu pożądane monocykliczne 4-aryloazetydynony otrzymano na drodze pośredniej, w wyniku wewnątrzcząsteczkowego alkilowania arenu i następczego usunięcia odpowiedniego łącznika łączącego β -laktam z resztą aromatyczną. Najlepszym łącznikiem był tiometylen. Po usunięciu siarki przy pomocy niklu Raneya otrzymano 4-aryloazetydynony. Zbadano również reakcje jonów *N*-acyloiminiowych z wybranymi heteroarenami. Otrzymane 4-furyloazetydynony, w wyniku reakcji aza-Achmatowicza przekształcono w bicykliczne pochodne z dobrymi wydajnościami (do 65%). Przeprowadzono również reakcje diastereo selektywnie z zastosowaniem azetydynonu „Kaneka”. W wyniku reakcji tego związku z 1,4-dimetoksybenzenem otrzymano produkt alkilowania o konfiguracji *trans* z wydajnością 33%. Próby syntezy enancjoselektywnej zakończyły się niepowodzeniem. (doktorant: Bartosz Zambroń).

Grant N N204 2380 34 – kierownik prof. Bartłomiej Furman

Kontynuowano badania nad zastosowaniem 2,3-dihydropirydonów jako bloków budulcowych w syntezie wielopierścieniowych związków heterocyklicznych. Stwierdzono, że w obecności *tert*-BuLi jako związku litującego, cykliczne enaminy zawierające w łańcuchu bocznym grupę 2-bromopirydynową ulegają cyklizacji z utworzeniem indolizydyochinolin o zdefiniowanej konfiguracji względnej. Rozpoczęto badania nad katalizowaną kompleksami palladu wewnątrzcząsteczkową addycją halogenków arylowych do cyklicznych enaminonów.

Grant POIG 01.01.02-14-102/09 ‘CUKRY’ – kierownik prof. Marek Chmielewski

W projekcie realizowano trzy zadania (oznaczone w projekcie nr 3,4,5):

Zadanie 3. (kierownik zadania: dr hab. B. Furman): Opracowano metodę syntezy polihydroksyloowych imin z odpowiednich nitronów. Jako chiralny materiał wyjściowy w syntezie zastosowano tanie i handlowo dostępne cukry proste. Nowootrymane cykliczne iminy w katalizowanej kwasami Lewisa reakcji z bogatymi w elektrony dienami tworzą wysoce sfunkcjonalizowane azabicykloalkany o strukturze indolizydy. Badana tandemowa reakcja Mannicha-Michaela przebiega z dobrą wydajnością chemiczną i wysoką diastereo selektywnością. Rozpoczęto wstępne prace nad dalszą funkcjonalizacją otrzymanych bicyklicznych enaminonów.

Zadanie 4. Wychodząc z handlowo dostępnych cukrów prostych przeprowadzono syntezę odpowiednich polibenzyloksyloowych nitronów. Tak otrzymane nitrony w katalizowanej jodkiem miedzi (I) reakcji z dietoksypropylenem tworzą oczekiwane addukty z wysoką stereoselektywnością.

Zadanie 5. Opracowano i zoptymalizowano syntezę wodoronadtlenków glikozyloowych. Jako materiał wyjściowy w syntezie stosowano 3,4,6-tri-O-benzylo-2-deoksy-D-glukozę lub D-galaktozę, a także odpowiednie glikozydy *t*-butylowe. Najwyższą wydajność chemiczną i stereoselekcję w syntezie cukrowych wodoronadtlenków odnotowano stosując jako utleniacz zakwaszony (H_2SO_4 ilość katalityczna) 2M roztwór H_2O_2 w eterze etylowym. Otrzymano i charakteryzowano (NMR, X-ray) nową grupę połączeń nadtlenkowych - nadtlenki bisglikozyłowe. Stwierdzono, że nadtlenek bisglikozyłowy (o strukturze α,α -anomeru)

powstaje wyniku addycji wodoronadtlenku cukrowego do anomerycznego kationu oksykarbeniowego. Opracowano sposób zabezpieczania reszty wodoronadtlenkowej działaniem 2-metoksypropenu.

Grant POIG.01.03.02-14-036/09 – kierownik prof. Marek Chmielewski

Z dostarczonych przez Instytut Biochemii i Biofizyki PAN poliprenoli otrzymywano terminalne sole trimetyloamoniowe. Osoba realizująca zadanie: dr Marek Masnyk.

Grant "Initech" Umowa nr ZPB/51/64927/IT2/10 – kierownik prof. Marek Chmielewski

Opracowano stereoselektywną metodę syntezy azetydynonu będącego materiałem wyjściowym w syntezie substancji farmaceutycznej o nazwie handlowej Ezetymib. Jako metodę syntezy pierścienia β -laktamowego zaproponowano katalizowaną solami miedzi (I) reakcję nitronów diarylowych z enancjomerycznie czystym acetylenem otrzymanym z acetonidu aldehydu L-glicerynowego. Prowadzone w ramach grantu prace, poza syntezą kluczowego azetydynonu, obejmowały optymalizację syntezy substratów i sprawdzenie alternatywnych ścieżek syntetycznych.

Drugim zadaniem realizowanym w ramach projektu „Initech” w roku 2010 były badania nad 1,3-dipolarną cykloaddycją nienasyconych laktonów i diarylonitronów. Stwierdzono, że w reakcji katalitycznej można otrzymać izoksazolidynę o pożądanej konfiguracji z wysoką diastereoselekcją.

Zespół III – prof. Karol Grela

badania statutowe

Kontynuowano prace nad syntezą nowych katalizatorów do metatezy oraz poszukiwania nowych zastosowań tej metodologii, w tym w szczególności w reakcjach tandemowych (np. metateza – cyklizacja prowadząca do otrzymania pirolu). Prowadzono prace nad otrzymaniem katalizatorów, których reaktywność może być łatwo kontrolowana. Ważnym wątkiem były prace nad bardziej ekonomicznym ich użyciem, np. w obecności mikrofal (zielona chemia).

Grant NN204 1554 36 (promotorski) – kierownik prof. Karol Grela

Dokonano syntezy i scharakteryzowano za pomocą technik NMR, MS i X-ray kilku nowych analogów kompleksu otrzymanego wcześniej (*Angew. Chem. Int. Ed.* 2007, 46, 7206-7209). Otrzymano również analogi zawierające zmodyfikowane ligandy anionowe: ligand jodkowy i trifluorooctanowy. Otrzymane kompleksy charakteryzują się odmienną reaktywnością w stosunku do klasycznych kompleksów zawierających ligandy chlorkowe. Zastosowanie ligandu jodkowego, pozwoliło w znaczący sposób ograniczyć międzycząsteczkową wymianę ligandów anionowych między kompleksami rutenu. (doktorant: Rafał Gawin)

Program FNP VENTURES – kierownik mgr Cezary Samojułowicz

„Nowatorskie zastosowanie aromatycznych faz fluorowanych w reakcjach katalizowanych kompleksami metali przejściowych i ligandów NHC”. Wykonano pomiary X-Ray handlowych katalizatorów z heksafluorobenzenem inkorporowanym w sieć krystaliczną. Wykonano pomiary ^{31}P NMR w celu wyjaśnienia doskonałej aktywacji katalizatorów Ru posiadających ligand fosforowy w swojej budowie. Ponadto wykonano obliczenia DFT mocy i charakteru wiązania FAH do katalizatorów rutenowych.

Program FNP VENTURES – kierownik mgr Rafał Gawin

„Nowe enancjoselektywne katalizatory reakcji metatezy olefin”. Dokonano syntezy benzyliidenowych ligandów „karboksylanowych” w formie enancjomerycznie czystej, a

następnie odpowiednich kompleksów rutenu. Otrzymano szereg substratów modelowych do enancjoselektywnych reakcji metatezy. Prowadzone są badania nad modyfikacją ligandów anionowych w otrzymanych kompleksach oraz próby ich zastosowania w reakcjach enancjoselektywnej metatezy (desymetryzacja trienów).

Program FNP VENTURES – kierownik Tomasz Wdowik

„Metateza trudnych partnerów i organokatalityczne transformacje jej produktów jako źródła cennych bloków budulcowych w syntezie istotnych chiralnych związków biologicznie czynnych”. Opracowano skuteczną metodę syntezy sfunkcjonalizowanych β,γ -nienasyconych nitroolefin na drodze metatezy 3-nitropropenu z terminalnymi olefinami. Przeprowadzono (nieudane) próby izomeryzacji β,γ -nienasyconych nitroolefin do α,β -nienasyconych nitroolefin. Wykazano możliwość funkcjonalizacji otrzymanych β,γ -nienasyconych nitroolefin z użyciem związków organicznych jako katalizatorów.

CP-FP 214095-2 HiCat – kierownik prof. Karol Grela

Hierarchically Organized Metal Organic Catalysts for Continuous and Multi-batch Processes. Dokonano syntezy i charakteryzacji serii kompleksów rutenu zawierających krzemowy tag POSS i określono aktywność tych kompleksów w modelowych reakcjach RCM.

Grant NN204 1576 36 – kierownik prof. Karol Grela

Dokonano syntezy i charakteryzacji kompleksów zawierających chelatowanie $\text{SO}_2 \cdots \text{Ru}$, określono aktywność tych kompleksów w modelowych reakcjach RCM. Opublikowano dwie prace (*Organometallics* oraz *Chem. Eur. J.*).

Zespół VI – dr hab. Jacek Młynarski, prof. nadzw.

Badania statutowe

Realizowany projekt obejmuje kolejne próby aplikacji opracowanych wcześniej katalizatorów (kompleksy metali i organokataliza) w syntezie wybranych, prostych produktów naturalnych. Najciekawszym wynikiem uzyskanym w roku 2010 jest asymetryczna synteza warfaryny z zastosowaniem handlowej (*S,S*)-difenylotetylenodiaminy w wodzie. Bardzo wydajna synteza prowadzi do otrzymania optycznie czystej cząsteczki warfaryny w warunkach organokatalizy, bez udziału jonów metalu, co ma istotne znaczenie przy syntezie substancji farmaceutycznej. Synteza prowadzona jest bez zastosowania rozpuszczalników organicznych, a oczyszczanie produktu nie wymaga zastosowania chromatografii na żelu krzemionkowym.

W kolejnym projekcie badawczym: „Nowe reakcje z wykorzystaniem akwakompleksów Fe(II) - redukcja grupy karbonylowej oraz reakcja tworzenia wiązań węgiel-węgiel”, rozpoczęliśmy poszukiwania katalizatorów zawierających jony żelaza dla asymetrycznej redukcji prochiralnych ketonów w roztworach wodnych. Zastosowane kompleksy żelaza z ligandami zawierającymi elementy strukturalne porfiryn prowadzą do otrzymania oczekiwanych alkoholi, jednak nie udało nam się dotychczas zaobserwować indukcji asymetrycznej

Grant N N204 0931 35 – kierownik prof. Jacek Młynarski

Celem tego zadania badawczego jest zaprojektowanie i synteza efektywnych katalizatorów bezpośredniej asymetrycznej reakcji aldolowej hydroksy- i dihydroksyacetonu (również w roztworach wodnych). W reakcjach testowano bis(amidy) otrzymane z (*S,S*)-1,2-difenylotetyloaminy oraz aminokwasów: proliny, waliny oraz seryny. W roku 2010 skoncentrowaliśmy się na poszukiwaniach selektywnych organokatalizatorów reakcji hydroksyacetonu. Równolegle badano reakcje ketonów bez grup zabezpieczających (OH-DHA) oraz związków z zabezpieczeniami izopropylidenowymi, silylowymi i benzyłowymi (prot-DHA). Zastosowania

zaprojektowanych katalizatorów zawierających elementy strukturalne siloksyseryny pozwala na otrzymanie aldoli z hydroksyacetonu z wysokimi wydajnościami i nadmiarami enancjomerycznymi. Możliwe jest zastosowanie wodnego środowiska reakcji. Najwyższe nadmiary enancjomeryczne produktów zaobserwowano dla aldehydów alifatycznych (95-99% ee), co ma znaczenie dla potencjalnego zastosowania tej metody w syntezie produktów naturalnych.

Grant N N204 1240 37 (promotorski) – kierownik prof. Jacek Młynarski

Zaplanowano realizację praktycznych syntez z zastosowaniem hydroksy- i dihydroksyacetonu w celu uzyskania naturalnych układów polihydroksylowych: pentoz i heksoz. Zastosowanie zaprojektowanych przez nas organokatalizatorów w reakcji aldolowej hydroksyacetonu i aldehydu glicerynowego prowadzi do otrzymania produktów o strukturze heksoz z wysoką stereoselektywnością. Ważnym zagadnieniem jest również przeprowadzenie części syntez w roztworach wodnych bez konieczności stosowania zabezpieczeń grup hydroksylowych (projektowanie katalizatorów naśladujących mechanizm działania aldolaz). (doktorantka: Joanna Paradowska).

Zespół VII – dr hab. Zbigniew Wróbel, prof. nadzw.

Badania statutowe

W ramach finansowania statutowego kontynuowano badania reakcji amin aromatycznych z nitroarenami prowadzące do N-arylo-2-nitrozoanilin. Rozpoczęto działania mające na celu próbę wyjaśnienia mechanizmu reakcji, w tym stechiometrii. Kontynuowano badania przekształceń N-arylo-2-nitrozoanilin w policykliczne heterocykle azotowe jak fenazyny i benzimidazole.

Grant NN 204 19 30 38 - kierownik prof. K. Wojciechowski

W ramach grantu rozpoczęto badania nad funkcjonalizacją metodą VNS (cyjanometylowanie) odpowiednio zabezpieczonego indolu. Dobór grupy zabezpieczającej indolowy atom azotu okazał się najistotniejszym problemem na tym etapie badań. Równolegle prowadzono badania nad przekształcaniem produktów reakcji Vilsmeijera cyjano- i sulfonylometylowanych nitroarenów z N,N-dialkiloamidami w pochodne indolu oraz pirolo[3,2-b]chinoliny będące azaodpowiednikami indoli.

Zespół VIII – prof. Janusz Jurczak

badania statutowe

Z powodzeniem kontynuowano prace nad zastosowaniem kompleksów metali przejściowych w asymetrycznej katalizie. W szczególności zbadano skuteczność katalizatorów tytanowo-binolowych w reakcji Friedla-Craftsa pirolu, co otwiera ciekawe perspektywy w syntezie produktów naturalnych oraz optycznie czynnych receptorów molekularnych. Rozwinięto wysokociśnieniową metodologię syntezy polimerów o bardzo wysokich masach cząsteczkowych techniką ATRP, co pozwoliło skutecznie zastosować to podejście do otrzymywania hybrydowych połączeń niorganiczno-polimerowych. Ugruntowano metodykę mikrokalorymetrycznego wyznaczania właściwości kompleksów receptorów makrocyklicznych i łańcuchowych z anionami i rozpoczęto jej stosowania do badań praktycznych z wykorzystaniem różnorodnych ligandów (gospodarzy) i gości (aniony, kationy, cząsteczki obojętne).

Grant N N204 187 839 – kierownik dr hab. Agnieszka Szumna

Rozpoczęto prace w nowym grantie poświęconym chiralnym kapsułom molekularnym jako środowisku reakcji chemicznych

Grant N N204 0927 35 – kierownik prof. Janusz Jurczak

Kontynuowano badania nad nowymi makrocyklicznymi i łańcuchowymi receptorami anionów; przeprowadzono syntezę nowych struktur receptorów, ich badania strukturalne oraz ich zdolności kompleksotwórczych w odniesieniu do anionów.

Grant POIG 01.01.02-14-102/09 'CUKRY' – kierownik prof. Janusz Jurczak

W projekcie realizowano dwa zadania (oznaczone nr 6,7):

Zaawansowano badania prowadzone w ramach projektu „Cukry jako nowe surowce odnawialne” a dotyczące wykorzystania aminodeoksymonosacharydów oraz cyklodekstryn do syntezy ligandów, a następnie ich kompleksów z metalami przejściowymi jako potencjalnych katalizatorów w syntezie asymetrycznej.

Zespół X – prof. Daniel Gryko

Badania statutowe

Rozpoczęto prace nad otrzymaniem kompleksów lantanowców o wysokim przekroju czynnym na absorpcję dwufotonową. Przebadano kilka typów ligandów, w tym pochodne pirymidyny i 1,3,5-triazyny, z podstawnikami donującymi elektrony. Otrzymano kilka typów sprzężonych układów poliheterocyklicznych z grupami mogącymi kompleksować kationy terbu i europu.

Kontynuowano prace nad otrzymaniem układów dwuchromoforych składających się z korolu i dodatkowego chromoforu. Otrzymano szereg związków, w których korol połączony jest z imidami aromatycznymi i kumarynami. Badano układy, w których korol spełnia rolę donora elektronów i akceptora energii.

Zsyntetyzowano szereg *mezo*-podstawionych porfiryn typu A_3B oraz *trans*- A_2B_2 zawierających podstawniki o niskim potencjale utleniania. Porfiryny te przekształcono w kompleksy niklowe, a następnie poddano utlenianiu. Badania wykazały, że sole żelaza są najbardziej efektywnym utleniaczem. Otrzymano szereg sprzężonych porfiryn.

Grant 3 T09A 124 29 – kierownik prof. Daniel Gryko

Badano reakcję aldehydów fenylopropargilowych z dipirometanami prowadzącą do *trans*- A_2B_2 -porfiryn o rozszerzonym chromoforze. Opracowano warunki takiej syntezy dla różnych typów aldehydów i dipirometanów.

Grant europejski MRTN-CT-2006-035866 (REVCAT) – kierownik prof. Daniel Gryko

Opracowano trzy metody bezpośredniego arylowania piroli w pozycji 2 bez użycia soli metali przejściowych. Przebadano szereg warunków zmieniając katalizator, rozpuszczalnik, zasadę, oraz dodatki. W zoptymalizowanych warunkach, przeprowadzono reakcje z szeregiem jodków arylowych i kilkoma pochodnymi piroli, otrzymując produkty z wydajnościami rzędu 35-85%.

Grant N N204 1242 37 (promotorski) – kierownik prof. Daniel Gryko

Kontynuowano prace nad syntezą pochodnych benzochinolini zawierających grupę hydroksylową, w których obserwuje się wewnątrzcząsteczkowy transfer protonu w stanie wzbudzonym. Otrzymano kilkanaście pochodnych głównie poprzez hydroksylowanie benzochinolin w warunkach Sanford. Przebadano właściwości spektroskopowe i fotofizyczne tych związków. (doktorantka: Joanna Piechowska)

Grant TEAM Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej – kierownik prof. Daniel Gryko

Zsyntetyzowano szereg układów aza-heterocyklicznych, o silnej fluorescencji, które w zamierzeniu powinny być platformami do konstrukcji do obrazowania optycznego. Szczególny nacisk położono na pochodne kumaryn i azacyjanin. Przebadano ich właściwości spektroskopowe i fotofizyczne.

Zespół XIV – dr hab. Zbigniew Kałuża, prof. nadzw.

badania statutowe

Oksazolidynon Seebacha poddano sekwencji reakcji: deprotonowaniu, alkilowaniu bromkiem *o*-bromo-benzylu i cyklizacji Parhama, otrzymując w rezultacie optycznie czysty spiroaminoketon z wydajnością 62%. Stwierdzono, że redukcja grupy ketonowej daje wyłącznie *trans*- β -aminoalkohol, jeśli atom azotu w drugorzędowej aminie nie jest zabezpieczony, alternatywnie redukcja N-acylowanych ketonów daje związki o konfiguracji *cis*. W analogiczny sposób poprzez odpowiednie oksymy *spiro*-aminoketonów otrzymano *cis* i *trans* β -diaminy. Kompleksy miedzi(II) z otrzymanymi związkami, zastosowano jako katalizatory asymetrycznego acylowania *mezo*-dioli, uzyskując nadmiary enancjomeryczne do 84%.

Grant N N204 123437 – kierownik prof. Zbigniew Kałuża

Kluczowym związkiem w zaplanowanej syntezie alkaloidów z rodzaju *Erythrina*, jest piroloizochinolina zawierająca terminalny (Z)-jodek winylowy. Związek ten otrzymano w kilkunastu etapowej syntezie z kwasu L-winowego. Następnie zoptymalizowano i uproszczono jego syntezę. Obecnie trwają prace zmierzające do uzyskania finalnych produktów na drodze wewnątrzcząsteczkowej reakcji Hecka lub addycji lito-pochodnej do elektrofilowego wiązania podwójnego. Podjęte zostały również prace nad otrzymaniem kluczowego związku o przeciwnej konfiguracji z kwasu L-jabłkowego.

Grant N N204 271538 (promotorski) – kierownik prof. Zbigniew Kałuża

Zgodnie ze znaną procedurą, N,O-zabezpieczoną prolinę postaci acetalu piwailowego poddano oksydatywnemu podstawieniu atomu wodoru w nitrobenzeniu. Otrzymaną 2-(*p*-nitrofenylo) pochodną proliny poddano kolejno redukcji grupy nitrowej, reduktywnemu aminowaniu różnymi aldehydami, a następnie zgodnie z opracowaną w zespole procedurą, przekształcono w nowe C₂-symetryczne diaminy, zawierające 4-(N,N-dialkiloamino)-fenylowy podstawnik przy czwartorzędowym atomie węgla. Uzyskane związki są obecnie testowane jako ligandy w asymetrycznej katalizie. (doktorant: Rafał Ćwiek)

Zespół XV – dr hab. Dorota Gryko, prof. nadzw.

Badania statutowe

Kontynuowano prace nad utlenianiem α,β -nienasyconych związków karbonylowych w pozycji γ . W reakcji heks-2-en-alu z nitrozobenzenu otrzymano γ -nitron oraz odpowiedni β -amino-acetal.

Grant N N204 187139 – kierownik prof. Dorota Gryko

Przeprowadzono bezpośrednie utlenienie wiązania C-H w pozycji γ w α,β -nienasyconych aldehydach. Reakcja 2-heksenu z BPO w obecności katalizatora MacMillana doprowadziła do powstania pożądanego produktu z wydajnością 25% (kataliza dienaminowa). Powyższe wyniki oraz zidentyfikowanie produktów ubocznych pozwalają mieć nadzieję, że możliwe będzie zagłębienie się w zagadnienia mechanistyczne. Ponadto wykazano, że otrzymane przez

nas związki mogą posłużyć do syntezy wielu bloków budulcowych typu: dioli, aminoalkoholi, hydroksykwasów czy hydroksyolefin.

Grant TEAM Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej – kierownik prof. Dorota Gryko

Prowadzone są badania nad selektywną funkcjonalizacją witaminy B₁₂. Zoptymalizowano parametry reakcji otwierania pierścienia laktonu aminami prowadzącą do mono- i diamidów tak aby powstawały one selektywnie. Opracowana przez nas metoda pozwala na otrzymywanie hydrofobowych pochodnych witaminy B₁₂ z wysokimi wydajnościami, w tym na selektywną syntezę *c* i *d* kwasów, pochodnych kobalaminy. Innym kierunkiem badań jest synteza hybrydy molekularnej złożonej z PPIX i B₁₂. W pierwszej kolejności opracowano efektywne metody syntezy łączników z grupami terminalnymi: -CO₂H, -NH₂, -N₃, -CCH. Następnie zostały one wykorzystane do syntezy odpowiednich pochodnych witaminy B₁₂ i PPIX. Otrzymane związki stanowiły substraty do badań modelowej reakcji CuAAC dające pożądane hybrydy molekularne. Efektywnych aktywatorów enzymu sGC poszukiwano również w grupie związków tetrapirrolowych, w szczególności zajmowano się syntezą pochodnych PPIX i porfiryn podstawionych w pozycji *mezo*.

Zespół XXI – dr Piotr Wierzchowski

badania statutowe

W 2010 zbadano kinetykę rozkładu wodoronadtlenku cykloheksylu w środowisku alkalicznym w roztworach wodnych i woda/metanol. Zmierzono stałe szybkości reakcji i energie aktywacji. Równolegle prowadzono badania optymalizacji drogi reakcji metodą DFT; znaleziono struktury stanów przejściowych dla dwóch konkurencyjnych reakcji prowadzących do cykloheksanonu i wody lub cykloheksanolu i tlenu. Uzyskane podobieństwa pozwoliły na przedstawienie hipotezy mechanizmu reakcji.

Przeprowadzono pomiary kinetyki utleniania cykloheksanu wobec oktanianów kobaltu i żelaza oraz ich kompleksów z bis(2-pirydyloimino)izindoliną. Znaleziono zależności kinetyczne pozwoliły na stwierdzenie, że efekt katalityczny dotyczy tylko etapu zdegenerowanych rozgałęzień łańcucha autoutleniania.

Prace na zamówienie

W 2010 roku w Zespole realizowano pracę badawczą na zamówienie japońskiego koncernu UBE z Ube City. Badania miały na celu zbadanie wybranych katalizatorów porfiryńowych zawierających kobalt lub żelazo w układzie zaproponowanym przez Lyons'a to znaczy bez zewnętrznego źródła elektronów w cyklu katalitycznym. Przeprowadzone pomiary pozwoliły precyzyjnie oznaczyć efekt poprawy selektywności przy optymalnej szybkości podawania tlenu i temperaturze reakcji.

Zespół XXIII – prof. Krzysztof Wojciechowski

badania statutowe

Kontynuowano badania nad reakcjami nukleofilowego podstawienia wodoru w nitrozwiązkach aromatycznych. Rozpoczęto badania nad katalizą jonowymienną w reakcjach oksydacyjnego podstawienia wodoru w nitroarenach prowadzoną w rozpuszczalnikach niepolarnych.

Zakończono badania reakcji aza-analogów γ -halokarboanionów wytwarzanych z N-acylowych i N-sulfonylowych pochodnych β -chloroetyloaminy. Stwierdzono, że w reakcjach tych karbo-

anionów z aldehydami i akceptorami Michaela powstają pochodne oksazolidyny i piroolidyny z dobrymi wydajnościami.

Zakończono badania reakcji cykloaddycji chromenów z wybranymi dienofilami.

Grant N N 204 19 30 38 – kierownik prof. Krzysztof Wojciechowski

W ramach prac prowadzonych w granicie opracowano metodę syntezy pirolo[3,2-b]chinolin z pochodnych nitrobenzenu (Publikacja: SYNLETT) Stwierdzono, że w reakcjach 3-nitroanilin z keto-kwasami i ich pochodnymi w środowisku zasadowym powstają pochodne kwasów indolo-karboksylowych.

Grant N204 160 32/4230 – kierownik prof. Mieczysław Mąkosza

Grant promotorski został przekwalifikowany na własny bez dodatkowych kosztów. Grant zakończono.

Temat II: Synteza, izolacja i ustalenie struktury produktów naturalnych oraz związków o dużym znaczeniu dla ochrony zdrowia.

Zespół IV – prof. Sławomir Jarosz

badania statutowe

Kontynuowano badania nad analogami sacharozy posiadającymi inne niż tlen heteroatomy. Prace koncentrowały się nad syntezą modyfikowanych pochodnych (tzw. homologowanych dioli), które będą użyte w syntezie prekursorów receptorów zwierających inne niż tlen heteroatomy.

Zakończono prace (rozpoczęte w 2007 roku) prace nad dość niezwykłą cyklizacją prowadzącą do tetrahydrofuranu w warunkach reakcji inwersji konfiguracji na centrum karbinolowym wyższych cukrowych alkoholi allilowych. Publikacja na ten temat została wysłana do *J. Org. Chem.*

Prowadzono badania nad optymalizacją syntezy rodanków glikozylowych. Stwierdzono możliwość sterowania (w ograniczonym zakresie) budową stereochemiczną syntezowanych pochodnych. Kontynuowano prace nad syntezą saponin - pochodnych lupeolu, betuliny i kwasu betulinowego. Stwierdzono, że w reakcjach glikozydowania lupanów z wykorzystaniem donorów zawierających grupę acetylową przebiega wyłącznie reakcja migracji acetylu do akceptora, natomiast reakcja glikozydowania nie zachodzi. Opracowano wydajną metodę rozdziału ekstraktu metanolowego z kory brzozy na składniki. Kontynuowano współpracę z dr. Romanem Luboradzkim (IChF PAN). W jej ramach przeprowadzono syntezę kilku nowych pochodnych glukofuranozy jako potencjalnych środków żelujących.

Grant POIG 01.01.02-14-102/09 'CUKRY' – kierownik prof. Sławomir Jarosz

W projekcie realizowano dwa zadania (oznaczone w projekcie nr 1 i 2):

Zadanie 1: *Zastosowanie cukrów prostych w syntezie karbocyklicznych mimetyków oraz badanie ich aktywności antyglikozydazowej*

Głównym zadaniem przewidzianym na pierwsze półrocze 2010 była synteza związków będących prekursorami allilocynowych pochodnych cukrów prostych.

Wychodząc z cukrów prostych poprzez standardowe przemiany opracowane już w naszym laboratorium otrzymaliśmy tri-*O*-benzyloglikozyd, który następnie przekształcono w alkohol

allilowy. Wymagało to reakcji ze stabilizowanym odczynnikiem Wittiga ($\text{Ph}_3\text{P}=\text{CHCO}_2\text{Me}$) i następczej redukcji grupy estrowej do alkoholu.

Głównym zadaniem przewidzianym na drugie półrocze 2010 była synteza I-rzędowych związków allilocynowych. To zadanie zostało z powodzeniem zrealizowane dla **D**-glukozy.

Ponadto dokonaliśmy stereoselektywnej transformacji tej pochodnej do odpowiedniego dienoaldehydu (to zadanie było planowane na pierwsze półrocze 2011 r.). Ponieważ tego typu dienoaldehydy są nietrwałe wykorzystaliśmy ten związek w syntezie modelowego związku bicyklicznego – pochodnej perhydro-indanu. Było to zrealizowane na drodze reakcji typu Wittiga z ylidem wywodzącym się z chloroacetonu.

Zadanie 2: Makrokliczne receptory na bazie sacharozy: synteza i właściwości kompleksujące

Substratem w proponowanych przez nas syntezach makrocyclicznych receptorów sacharozowych jest hekso-*O*-benzylosacharoza. Jego prekursorem natomiast jest ditrytylosacharoza. Opracowane uprzednio w naszym zespole metody pozwalały na otrzymanie w jednej ‘szarzy’ ok. 2-3 gramów tego związku. Obecnie otrzymaliśmy prekursor tej użytecznej pochodnej w ilości ok. 50 g. Zrealizowano też syntezę hekso-*O*-benzylosacharozy w skali 5 gramów. Ten związek użyto do otrzymania homologowanego diolu, w którym pozycje terminalne sacharozy C6- oraz C6’ przedłużono o jednostkę $-\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{OH}$.

Ponadto zrealizowano syntezę makrocyclicznego receptora na bazie hekso-*O*-benzylosacharozy na drodze tzw. ‘click chemistry route’. Opracowano metodykę powiększenia skali syntezy hekso-*O*-benzylosacharozy do 20 g. Na bazie tej pochodnej otrzymano zarówno ‘homologowany diol’ jak i pochodne. Ponadto zrealizowano syntezę fosforowych analogów sacharozy poprzez wstawienie w pozycje terminalne grup fosfonowych i/lub fosfonowych.

Grant N N204 0926 35 – kierownik prof. Sławomir Jarosz

Projekt dotyczy stereokontrolowanej syntezy łańcuchowych pochodnych cukrów wyższych (posiadających więcej niż 10 atomów węgla w łańcuchu), które po odpowiedniej funkcjonalizacji obu pozycji terminalnych można będzie przekształcić w pochodne karbocycliczne. Zsyntetyzowano (wychodząc z ‘diacetonogalaktozy’) cukier wyższy zawierający 12-atomów węgla i zrealizowano selektywną hydrolizę terminalnej grupy blokującej. Tak otrzymany diol został przekształcony w aldehyd ($\text{C}_{10}-\text{CHO}$), który okazał się wyjątkowo niereaktywny. Ulegał on jedynie reakcji ze stabilizowanymi fosfonianami cukrowymi dając z umiarkowanymi wydajnościami odpowiednie addukty.

Grant N N204 175938 (promotorski) – kierownik prof. Sławomir Jarosz

Opracowano nową metodę syntezy prekursorów karbocyclicznych mimetyków cukrowych o ściśle zdefiniowanej konfiguracji, które można będzie w dogodny sposób w związki polihydroksylowych. Opracowano również metodologię syntezy innych analogów, związków heterocyclicznych o dwóch i/lub trzech pierścieniach. (doktorantka: Marta Magdycz)

Grant N N204 178438 (promotorski) – kierownik prof. Sławomir Jarosz

Wychodząc z pochodnych **D**-galaktozy oraz **D**-allozy opracowano dogodną metodę syntezy cukru wyższego o 12 atomach węgla w łańcuchu. Możliwa była selektywna hydroliza terminalnej grupy blokującej, co doprowadziło do odpowiedniego diolu przekształconego następnie w aldehyd. Podczas reakcji tego aldehydu z fosfonianem cukrowym w warunkach PTC zaobserwowano nieoczekiwaną hydrolizę grupy benzylovej w warunkach zasadowych. (doktorant: Maciej Cieplak)

Zespół XX – prof. Ryszard Ostaszewski

Badania statutowe

We współpracy z prof. Kłonkowskim kontynuowano badania nad syntezą nowego typu anionowych receptorów molekularnych zawierających fragmenty tiomocznikowe oraz piren. Uzyskane wyniki zostały opublikowane (Tetrahedron).

Wykonano badania nad zastosowaniem reakcji Ugi do syntezy anionowych receptorów molekularnych. Uzyskane wyniki zostały przedstawione jako poster na konferencji naukowej.

Wykonano badania nad przebiegiem reakcji kondensacji kwasu cyjanooctowego z wybranymi aldehydami alifatycznymi i aromatycznymi. Stwierdzono, że reakcja ma charakter wieloetapowy i na jej przebieg bardzo silnie wpływają zanieczyszczenia substratów. Uzyskano szereg bardzo cennych półproduktów do syntezy leków (pregabaliny).

W ramach Grantu *MNiSzW N405 3202 33 (Uniwersytet Medyczny Warszawa – wykonawca prof. R. Ostaszewski)* pt.: „*Synteza i badanie przeciwnowotworowego działania inhibitorów układu tioredoksyna – reduktaza tioredoksyny*” kontynuowano badania nad opracowaniem nowych inhibitorów układu tioredoksyny – reduktaza tioredoksyny. Wykonano syntezę szeregu związków modelowych, które następnie zostały poddane badaniom biologicznym. Projekt został zakończony.

Grant POIG 01.03.01-00-158/09 ‘BIOTRANSFORMACJE’ – kierownik prof. Ryszard Ostaszewski

Zadanie 1: *Chemoenzymatyczna synteza wybranych leków generycznych*

Wykonano badania nad opracowaniem chemoenzymatycznej metody syntezy kwasu 3-fenylo-4-pentenowego. Opracowano metodę syntezy kwasu 3-(4-fluoro-fenylo)-4-pentenowego oraz kwasu 3-(4-metoksy-fenylo)-4-pentenowego, którą wykorzystano do syntezy większych partii tych związków. Kontynuowano badania nad opracowaniem metody kinetycznego rozdziału enzymatycznego uzyskanych racemicznych kwasów. Stwierdzono, że enzymy są dogodnymi biokatalizatorami tych reakcji. Rozpoczęto badania nad zastosowaniem jako donorów grup alkoksylowych acetalu, ortoestrów i węglanów. Enzymatyczna estryfikacja kwasu 3-fenylo-4-pentenowego z użyciem 1,1-dietoksyetanu dała odpowiednie estry z bardzo wysokimi enancjoselektywnościami przekraczającymi wartość 100 dla lipaz z *Rhizopus arrhizus*, z *Aspergillus oryzae*, z *Candida lipolytica*, z *Pseudomonas fluorescens*, z *Rhizomucor miehei*, z *Pseudomonas sp.*, z *Porcine pancreas*. Wyniki badań są kompletowane w celu przygotowania odpowiednich zgłoszeń patentowych.

Rozpoczęto badania literaturowe, których celem jest zebranie danych dotyczących opracowanych syntez kwasów 3-arylo-3-hydroksy-propionowych i ich estrów. Rozpoczęto badania nad opracowaniem chemicznej efektywnej metody syntezy tej klasy związków.

Zadanie 2: *Chemoenzymatyczna synteza nowych związków o działaniu antynowotworowym*

Wykonano badania nad opracowaniem metody syntezy PX-12; (2-[(1-metylopropylo)ditio]-1H-imidazolu), który jest inhibitorem układu Trx związku. Acylowanie grupy aminowej tego związku umożliwia uzyskanie odpowiednich pochodnych z dobrymi wydajnościami. Uzyskane pochodne badano dalej pod kątem opracowania analitycznej metody oznaczania ich czystości enancjomerycznej stosując techniki wysokosprawnej chromatografii cieczowej na chiralnych fazach stacjonarnych, oraz chromatografii gazowej na chiralnych fazach stacjonarnych.

Wykonano badania nad opracowaniem metody syntezy pochodnych akrylamidu wg reakcji Ugi. Uzyskano szereg nowych aktywnych związków, które przetestowano pod kątem ich

aktywności antynowotworowej. Uzyskano związki charakteryzujące się bardzo wysoką aktywnością biologiczną. Uzyskane wyniki zostały opisane w zgłoszeniu patentowym.

Rozpoczęto badania nad opracowaniem chemoenzymatycznej metody syntezy optycznie czystych amin, pomocników chiralnych do diastereoselektywnej reakcji Ugi. Wykonano badania nad zastosowaniem enzymów do kinetycznego rozdziału (2,5-dimetoksyfenylo) metyloaminy. Jako donoru grupy acetylowej użyto metoksyoctanu metylu uzyskując bardzo wysokie enancjoselektywności w reakcji aminowania katalizowanej przez enzym Novozyme 435. Zastosowanie enancjomerycznie czystej aminy jako substratu do reakcji Ugi daje dwa diastereoizomeryczne produkty, które po rozdzieleniu na kolumnie chromatograficznej zostały poddane reakcji usunięcia grupy zabezpieczającej. Uzyskano dwa enancjomeryczne czyste dipeptydy, co potwierdza przydatność zaproponowanej metody do syntezy nieracemicznych inhibitorów. Po optymalizacji metoda będzie stosowana do syntezy kolejnych inhibitorów.

Temat III: Spektroskopia rezonansowa, optyczna i masowa oraz badania strukturalne związków organicznych.

Zespół I – prof. Witold Danikiewicz

Badania statutowe

W ramach badań statutowych zrealizowano następujące tematy:

- Kontynuowano obliczenia powinowactwa do protonu małych karboanionów (do 5 ciężkich atomów w cząsteczce) wybranymi metodami DFT.
- Rozpoczęto obliczenia metodami DFT mające na celu określenie możliwych dróg przebiegu reakcji nitro- i halonitrozwiązków aromatycznych z czynnikami nukleofilowymi, przede wszystkim karboanionami.
- Wykorzystano technikę HPLC/MS do badania zawartości alkoholi poliprenylowych i produktów ich przemian biochemicznych w wybranych organizmach roślinnych.

Ponadto rozpoczęto – w charakterze współwykonawcy – realizację projektu badawczego Nr N N405 362237 pt. „Wroniec widlasty *Huperzia selago* w kulturze in vitro jako źródło hupercyny A i innych alkaloidów mających aktywność inhibitorów acetylocholinesterazy.” (kierownik: dr W. Szypuła z WUM) zajmując się optymalizacją metod HPLC-MS do identyfikacji alkaloidów w próbkach naturalnych.

Grant N N204 155536 (promotorski) – kierownik prof. Witold Danikiewicz

W roku 2010 r. zakończono realizację grantu promotorskiego „Badanie reakcji karboanionów ze związkami karbonyłowymi i akceptorami Michaela w fazie gazowej”. Wyniki uzyskane w ramach grantu doktorantka opisała w obronionej w czerwcu 2010 r. rozprawie doktorskiej. W ostatnim etapie doktorantka zajmowała się pisaniem rozprawy oraz wykonywaniem obliczeń, mających na celu lepsze zrozumienie mechanizmów badanych reakcji (obliczenia termodynamiczne i modelowanie stanów przejściowych reakcji). Trwają także prace nad publikowaniem otrzymanych wyników. (doktorantka: Beata Wileńska)

Grant N N204 2638 37 – kierownik prof. Witold Danikiewicz

W roku 2010 kontynuowano realizację projektu badawczego własnego „Badania porównawcze technik jonizacji stosowanych w spektrometrii mas w analizie kompleksów metali przejściowych i ligandów organicznych”. Prace realizowano we współpracy z zespołami prof. prof.: D. Gryko, K. Greli i B. Korybuta-Daszkiewicza z IChO PAN. W tym etapie prac zakończono badania procesów utleniania koroli z wykorzystaniem różnych technik

spektrometrii mas, a wyniki opublikowano. Prowadzono także badania ilościowe w celu porównania efektywności źródeł jonizacji pracujących pod ciśnieniem atmosferycznym (ESI, APCI, APPI z dopantem i APPI bez dopanta). Wyznaczone zostały granice wykrywalności tych technik jonizacji dla różnie podstawionych koroli i porfiryn oraz ich kompleksów z metalami przejściowymi (pozyskanych od Zespołu 10), a także dla witaminy B12 i jej pochodnych (pozyskanych od Zespołu 15). Pierwsze wyniki wskazują na lepszą skuteczność jonizacji elektrosprej, która jest w stanie wykrywać badane związki przy stężeniu nawet o dwa rzędy wielkości mniejszym niż inne źródła jonizacji.

Grant POIG 01.02.01-14-054/09 – kierownik prof. Witold Danikiewicz

1.01.2010 r. rozpoczęto realizację projektu badawczego POIG pt. „*Metagenomy jako źródło nowoczesnych narzędzi biotechnologicznych służących do bioremediacji i biotransformacji*” w ramach konsorcjum koordynowanego przez Instytut Biochemii i Biofizyki PAN w Warszawie. W toku realizacji projektu w roku 2010 zostały przeprowadzone następujące działania:

- Utworzono zaplecze merytoryczne w postaci komputerowej bazy danych widm pestycydów, bazy wzorców pestycydów oraz artykułów naukowych i książek z zakresu badań pestycydów, ze szczególnym uwzględnieniem wykorzystania spektrometrii mas.
- Opracowano i zoptymalizowano metody analityczne służące do jednoczesnego oznaczania jakościowego i ilościowego ok. 300 pestycydów techniką HPLC-MS/MS w próbkach gleby.
- Przeprowadzono pomiary kilkunastu wzorcowych próbek pestycydów w celu uzyskania doświadczenia w pracy z określoną klasą związków oraz udoskonalenia opracowanej metody analitycznej.

Grant POIG 01.03.01-14-036/09 – kierownik prof. Witold Danikiewicz

1.01.2010 r. rozpoczęto realizację projektu badawczego POIG pt. „*Zastosowanie pochodnych poliizoprenoidów jako nośników leków i regulatorów metabolizmu*” w ramach konsorcjum koordynowanego przez Instytut Biochemii i Biofizyki PAN w Warszawie. W toku realizacji projektu w roku 2010 zostały przeprowadzone następujące działania:

- Opracowano i zoptymalizowano metody analityczne służących do analizy próbek poliizoprenoidów i ich kationowych pochodnych wykorzystujących jako technikę rozdzielania HPLC, a jako techniki detekcji źródła jonów: elektrosprej (ESI), fotosprej (APPI) oraz jonizację chemiczną pod ciśnieniem atmosferycznym (APCI) (łącznie ok. 200 godz. analiz HPLC-MS próbek biologicznych i wzorców poliizoprenoidów).
- Wykonano pomiary ESI-MS niskiej i wysokiej rozdzielczości zsyntezowanych w Zespole II IChO PAN kationowych pochodnych poliizoprenoidów.

Zespół V – prof. Sławomir Szymański

Badania statutowe

Zinterpretowano ilościowo, zależne od temperatury, widma protonowe [3.3]paracyklofanu - układu naprężonego zawierającego niepłaskie pierścienie benzenowe, który w roztworach występuje w postaci dwóch konformerów: pseudo-krzesło i pseudo-łódź w stanie równowagi dynamicznej. Problem ilościowej interpretacji widm dynamicznych protonów alifatycznych w tym związku przekracza możliwości programów dostępnych w literaturze. Do analizy widm zastosowano własny, zaawansowany algorytm, pozwalający wykorzystać w pełni uproszczenia wynikające z symetrii molekularnej. Na podstawie wyników analizy wyznaczono pierwsze dokładne charakterystyki kinetyki i termodynamiki układu.

Opisano nowy program MSITE i jego zastosowanie do badania oddziaływań koaktywator-białko-ligand witaminowy. Zarówno ta aplikacja jak i opracowany i opublikowany przez nas wcześniej algorytm CCOMP służą do identyfikacji miejsc aktywnych w multikompleksach białkowych odpowiedzialnych za specyficzne działanie witamin/leków.

Grant N N204 187639 – kierownik prof. Sławomir Szymański

Zaproponowano nową interpretację zjawiska tłumionej rotacji kwantowej w spektroskopii NMR, bazującą na stochastycznych zmianach hamiltonianu efektywnego, opisującego oddziaływania spinów jąder atomów tworzących rotator. Nowe podejście umożliwia symulację widm rotatorów 3-, 4- i 6-krotnych metodą Monte Carlo, która dla rotatora 6-krotnego (np. benzen) jest znacznie bardziej stabilna numerycznie niż metoda konwencjonalna z użyciem przestrzeni Liouville'a. Opracowano program komputerowy do takich obliczeń.

Grant N 204 074 32/2022 – kierownik prof. Bohdan Korybut-Daszkiewicz

Opracowano syntezy nowych homo- i heteronuklearnych receptorów molekularnych zbudowanych z dwóch neutralnych jednostek makrocyklicznych kompleksujących jony metali przejściowych, a także otrzymano jedno- i dwustronnie blokowane „osie rotaksanowe” zawierające w swej strukturze takie π -donorowe fragmenty makrocykliczne, jako redoks aktywne centra rozpoznania molekularnego.

Zespół XI – prof. Lech Kozerski

Badania statutowe

Otrzymano szereg pochodnych *N*-sulfinylowych γ , δ , ϵ -laktamów, które miały posłużyć jako odczynniki sulfinylujące. Podjęto próby asymetrycznego utleniania atomu siarki pochodnych sulfenylowych γ , δ , ϵ -laktamów uzyskując słabe nadmiary enancjomeryczne produktu.

Przeprowadzono badania mające na celu wyznaczenie struktury trzeciorzędowej modyfikowanej insuliny ludzkiej A22Gly-B31Arg w roztworze woda/acetonytryl. Wykorzystano w tym celu widma NOESY, TOCSY, DQF-COSY, na podstawie których uzyskano więzy eksperymentalne dotyczące odległości międzyprotonowych i kątów torsyjnych w łańcuchu głównym. Implementowanie tych eksperymentalnych więzów do algorytmu dynamiki molekularnej dało w wyniku obliczeń rodzinę konformacji reprezentującą strukturę trzeciorzędową badanej insuliny. Porównanie tej struktury ze strukturą natywną insuliny ludzkiej pozwala na stwierdzenie, że insulina modyfikowana ma taką samą strukturę łańcucha głównego jak insulina natywna, jedynie koniec C nici B różni się dynamiką, co wynika z przedłużenia insuliny modyfikowanej o jednostkę Arg i wprowadzenia glicyny w położeniu A22.

Grant N N204 1557 36 – kierownik dr Wojciech Bocian

Przeprowadzono badania NMR w obniżonych temperaturach w wodzie oligomeru DNA typu szpilki do włosów (hairpin) w celu określenia warunków dimeryzacji do formy hantli (dumbbell) jako modelu do badania inhibitorów topoizomerazy II.

Przebadano zależność równowagi monomer – dimer w zależności od pH, stężenia szpilki i buforu $K_3PO_4/NaCl$ oraz rozpuszczalnika. Stwierdzono, że w temp. 0 °C przy stężeniu 2 mM w wodzie szpilki równowaga przesunięta jest w kierunku hantli (ca. 90%).

Przeprowadzono badania NMR w obniżonych temperaturach w wodzie oligomeru DNA typu szpilki do włosów (hairpin) w obecności bis-metylenomorfolinowych pochodnych genisteiny i bis-metylenodimetyamino pochodnych genisteiny w pozycjach 6 i 8 w celu określenia stałych

wiązania i określenia sposobu wiązania genisteiny. Udowodniono, że genisteina wiąże się z DNA typu hantli interkalując w przerwach. Jest to pierwszy rezultat w literaturze na ten temat.

Zespół XII – prof. Zofia Lipkowska

Badania statutowe

Opracowano metodykę syntezy trzech nowych grup dendrymerów zawierających aminokwasy, z wykorzystaniem kwasu 3,5-dihydroksybenzoesowego jako elementu rozgałęziającego i posiadających ramiona o jednakowej bądź różnej długości. W celu optymalizacji selektywności tych związków względem komórek bakteryjnych wprowadzono różne podstawniki na C-końcu.

Kontynuowano badania metodami spektroskopowymi i rentgenograficznymi przemian fazowych nowych materiałów wykazujących w fazie stałej własności termo- i fotochromowe. Eksperymentalnie udowodniono, że tworzenie trwałego rodnika w kryształach fotochromowej odmiany pochodnej 1,3-dioxo-2-indenylidenu zachodzi z przeniesieniem protonu i utworzeniem formy enolowej.

Rozpoczęto prace syntetyczne nad dendrymerycznymi pochodnymi, symulującymi pochodne pepstatyny w ramach grantu MNiSW N404 113639 *Ekspresja izoenzymów Sap7, Sap8 oraz Sap9-10 proteazy aspartylowej a wirulencja Candida albicans* (kierownik prof. Wiesław Kurzątkowski; Narodowy Instytut Zdrowia Publicznego – Państwowy Zakład Higieny), w którym Zespół XII jest głównym wykonawcą części syntetycznej.

Grant N204 239436 – kierownik prof. Zofia Lipkowska

Opracowano wydajną metodykę syntezy na nośniku stałym bibliotek peptydowych dendrymerów 1-szej i 2-giej generacji opartych na lizynie. Prace te wykonano we współpracy z dr J. Janiszewską (IChP), jednym z głównych wykonawców projektu. Wykonano syntezę biblioteki peptydowych dendrymerów bogatych w tryptofan i stwierdzono ich wysokie aktywności antyproliferacyjne względem komórek czerniaka ludzkiego.

We współpracy z dr J. Solecką (Narodowy Instytut Zdrowia Publicznego-Państwowy Zakład Higieny) wykonano badania aktywności przeciwdrobnoustrojowej na szerokiej puli szczepów referencyjnych dla 20 nowych dendrymerycznych peptydów.

Projekt rozwojowy NR13-0153-10 – kierownik prof. Zofia Lipkowska

Projekt zatytułowany: *Założenia technologiczne otrzymywania oraz badania przedkliniczne niskocząsteczkowych peptydowych związków dendrymerycznych o własnościach przeciwdrobnoustrojowych do zastosowań u ludzi i zwierząt* jest realizowany we współpracy z NIZP – PZH. W ramach projektu wykonano syntezy 5 dendrymerów w skali 1 grama i rozpoczęto badania ich aktywności mikrobiologicznej na szerokiej puli szczepów referencyjnych. Dla tych pochodnych zebrano dane fizykochemiczne i spektralne.

Zespół XIII – prof. Jadwiga Frelek

Badania statutowe

Zaobserwowano nowe przegrupowanie pochodnych β,γ -epoksy alkoholi. Stwierdzono, że *O*-tiokarbaminiany β,γ -epoksyalkoholi ulegają przegrupowaniu do karbaminianów α -hydroksy β,γ -tiiranów w następstwie wewnątrzcząsteczkowego „przeniesienia” atomu siarki. Zbadano zastosowanie tego nowego przegrupowania do syntezy pochodnych tiiranów trudno dostępnych na innych drogach. Zbadane przekłady wskazują, że przegrupowanie ma ogólny charakter.

Badania chiralnoptyczne estru metylowego *S*-trolloksu i jego octanu, wsparte analizą konformacyjną i obliczeniami teoretycznymi właściwości dichroicznych, wykazały nieskuteczność reguły helikalności opracowanej przez Antus’a i współpracowników dla

chromoforu chromanowego. Wykazano, że w przypadku tych związków, na znak długofalowego pasma CD występującego przy około 275 nm większy wpływ wywiera chiralność centrum stereogenicznego niż helikalność pierścienia chromanowego.

Grant N N204 123537 (promotorski) – kierownik prof. J. Frelek

Wszystkie zadania badawcze tego grantu zostały zrealizowane, praca doktorska została napisana i złożona. (doktorantka: Magdalena Woźnica)

Grant N N204 0929 35 – kierownik prof. J. Frelek

Zsyntetyzowano cały szereg karbapenamów, w których kluczowym etapem syntetycznym była reakcja metatetycznego zamykania pierścienia pięcioczłonowego (RCM). Uzyskane widma CD otrzymanych produktów zostały porównane z widmami teoretycznymi. W efekcie możliwe było stwierdzenie, iż efekt Cottona występujący przy około 240 nm jest związany z amidowym przejściem $n \rightarrow \pi^*$ a jego znak jest ściśle powiązany z konfiguracją absolutną zwornikowego atomu węgla. Tym samym możliwe było rozszerzenie zakresu stosowalności reguły helikalności, uprzednio opracowanej dla innych układów β -laktamowych, także na karbapenamy.

Grant N N204 187439 - kierownik prof. J. Frelek

Umowę na wykonywanie grantu własnego pod tytułem „Karboksylany dimolibdenu jako chromofory pomocnicze w badaniach strukturalnych transparentnych związków organicznych” podpisano w październiku 2010 r. Sprawozdanie zostanie przedstawione w następnym okresie sprawozdawczym.

Grant N N204 1239 37 – kierownik: prof. J. Wicha

Opracowano totalną syntezę diterpenoidu pochodzenia grzybowego (\pm)-heptemeronu G oraz formalną syntezę diterpenoidu o działaniu antybiotycznym (\pm)-guanakastepenu

Zespół XVI – dr hab. Jarosław Jadźwiński, prof. nadzw.

Badania statutowe

Wykonano serię obliczeń przesunięć chemicznych MRJ dla chinuklidyny, N,N-dimetylo-*sec*-butyloaminy oraz N,N-dimetylo-1-fenylotanoaminy; w przypadku tych ostatnich obliczenia wykonano dla serii rotamerów (w sumie 12 struktur). Na podstawie obliczonej energii cząsteczek oszacowano populacje poszczególnych rotamerów, następnie uśredniono przesunięcia chemiczne ^1H NMR. Obliczenia powtórzono dla adduktów w/w amin z octanem rodu(II), oraz dla wolnych cząsteczek amin o geometrii takiej samej jak w addukcie. Procedura ta pozwoliła na rozdzielenie dwóch czynników wpływających na zmianę przesunięcia chemicznego w wyniku kompleksowania: zmiana konformacji liganda i zamrożenie tej konformacji w addukcie, oraz zmiana struktury elektronowej liganda wywołanej tworzeniem wiązania N-Rh. Analiza wyników wykazała, że dla dwóch ostatnich amin decydującym czynnikiem wpływającym na zmianę przesunięcia chemicznego w kompleksie jest zamrożenie struktury liganda w kompleksie; zmiany te były dobrze odtwarzane przez zastosowane procedury obliczeniowe. W przypadku chinuklidyny, a więc aminy o sztywnej strukturze za zmiany przesunięć chemicznych odpowiadają czynniki elektronowe (tworzenie wiązania N-Rh); te zmiany były źle odtwarzane metodami teoretycznymi. Obliczenia wykonano przy pomocy programu Gaussian (DFT, B3LYP i B3PW91, bazy: LANL2DZ, 6-31G(2d), 6-311G++(2d,p)); m.in. wykorzystując stację obliczeniową IChO PAN umożliwiającą obliczenia na 8 procesorach jednocześnie.

Przeprowadzono wstępne pomiary stałych protonowania i deprotonowania wybranych zasad Schiffa pochodnych antypiryny i aromatycznych hydroksyaldehydów w roztworze acetonitrylu. Przeprowadzono kompleksowe pomiary ^1H , ^{13}C i ^{15}N NMR w roztworach i w fazie stałej w celu określenia właściwości wewnątrzcząsteczkowego wiązania wodorowego.

Wykonano szereg pomiarów heterojądrowego NMR i przeprowadzono analizę wyników biologicznie czynnych związków w ramach programu badania pochodnych cukrów.

Zbadano proces kompleksowania cysteiny oraz selenowych analogów metioniny z solami rodu(II): octanem, tetratryfluorooctanem i pochodną soli Moshera. Praca obejmowała syntezę odpowiednich pochodnych oraz pomiary NMR, w tym pomiary ^{77}Se NMR oraz pomiary czasu relaksacji T_1 .

Kontynuowano pomiary parametrów termodynamicznych wymiany ligandów aminowych w adduktach z solami rodowymi (wsp. z prof. Szymańskim).

W ramach współpracy z IChF PAN kontynuowano pomiary NMR paracyklofanów (^1H , ^{13}C , pomiar sprzężeń ^1H - ^1H , ^{13}C - ^1H , ^{13}C - ^{13}C , pomiary niskotemperaturowe). Wyniki eksperymentalne posłużyły do weryfikacji metod obliczeniowych.

Kontynuowano badania kompleksów soli rodu(II) z ligandami diaminowymi w fazie stałej (metoda CPMAS NMR).

Grant N N204 266739 – kierownik prof. J. Jaźwiński

Wykonano obliczenia dla serii ośmiu azyrydyn zawierających podstawniki przy atomie azotu i w pierścieniu (NR: R = Me, Et, C_3H_7 , C_3H_5 ; CR: R = CN, COOMe, COOtBu, SO_2Ph , Me); obliczenia obejmowały optymalizację struktury, obliczenie energii cząsteczki, oszacowanie populacji konformerów w poszczególnych związkach, oraz obliczenie uśrednionych parametrów NMR (przesunięcia chemiczne, stałe sprzężenia ^1H , ^1H). Na podstawie wyników opracowano prostą metodę identyfikacji struktury azyrydyny (*cis* czy *trans*). Obliczenia powtórzono dla adduktów azyrydyn z solami rodu(II), zakładając różne centra kompleksowania. Na podstawie obliczeń energii określono najbardziej prawdopodobne struktury adduktów. Wykonano również badania kompleksowania soli rodu(II) ze związkami heteroaromatycznymi, analogami pirydyny, zawierającymi atom/atomy azotu oraz funkcję N-tlenkową. Stwierdzono, że centrum wiązania soli rodu zależy od rodzaju tej soli (octan lub tryfluorooctan) i struktury przestrzennej ligandu; kompleksowanie zachodziło bądź poprzez atom azotu, bądź poprzez atom tlenu w N-tlenku. W pewnych przypadkach zaobserwowano tworzenie tzw. adduktów ekwatorialnych.

Zespół XXII – prof. Michał Jaszuski

badania statutowe

Przeprowadzono analizę stałej ekranowania w cząsteczce wodoru i jej izotopomerach. Obliczenia wykonane były metodą sprzężonych klastrów, uwzględniono wpływ temperatury i poprawki relatywistyczne, oraz oceniono efekty nieadiabatyczne.

Zbadano na przykładzie kilku funkcjonałów DFT i wybranych cząsteczek związek pomiędzy obliczanymi energiami pobudzeń trypletowych a dokładnością obliczanych stałych sprzężenia spin-spin w NMR. Wykazano, że przewidując trypletowe niestabilności można ocenić, który funkcjonał daje najbardziej wiarygodne wyniki dla stałych sprzężenia.

Grant N N204 189938 – kierownik prof. M. Jaszuski

Pierwszym zadaniem planowanym w granicie jest analiza dokładności stałych sprzężenia kwadropolowego obliczanych metodami *ab initio* i DFT. Wykonano dokładne obliczenia

metodami sprzężonych klastrów dla stałych sprzężenia kwadрупolowego ^{14}N w serii małych cząsteczek: nitryli i izonitryli. W tych obliczeniach można ocenić dokładność wyników, które będą wzorcem dla dalszych, przybliżonych metod typu DFT. Zgodnie z planem, z funduszy grantowych zakupiono i włączono do sieci IChO PAN komputer.

Temat IV: Współpraca z przemysłem: Poszukiwanie nowych metod wytwarzania leków

W badaniach aplikacyjnych nad syntezą związków o znanej i udokumentowanej działalności terapeutycznej (lub ich półproduktów) zaangażowany jest głównie Zespół VII pod kierunkiem prof. nadzw. Zbigniewa Wróbla. Wszystkie prace objęte są klauzulą poufności.

W badania te są zaangażowane również inne zespoły, które – poza działalnością statutową – opracowują i wykonują badania wstępne nad opracowaniem metod otrzymywania ważnych półproduktów w syntezie farmaceutyków. Współpraca dotyczy zarówno firm zagranicznych jak i (co jest bardzo istotne) krajowych. W szczególności w badania zaangażowane są zespoły XIV (prof. nadzw. Zbigniew Kałuża) oraz XX (prof. Ryszard Ostaszewski).

Liczba zleceń przemysłowych (krajowych i zagranicznych) – 10 (6 krajowych)

INFORMACJA O DZIAŁALNOŚCI USŁUGOWEJ INSTYTUTU

Zespół I – prof. Witold Danikiewicz (Zespół Spektrometrii Mas)

W ramach działalności usługowej Zespołu I w okresie od 1 stycznia do 14 grudnia 2010 roku wykonano pomiary widm masowych dla ok. **3890 próbek**. Zestawienie rodzajów pomiarów przedstawia poniższa tabela:

Rodzaj pomiaru	Usługi dla IChO PAN	Usługi dla klientów zewnętrznych
Widma EI niskiej rozdzielczości	400	375
Widma EI niskiej i wysokiej rozdzielczości	280	87
Widma ESI (electrospray) niskiej rozdzielczości	1435	215
Widma ESI (electrospray) niskiej i wysokiej rozdzielczości	398	160
Pomiary FD niskiej rozdzielczości	46	18
Pomiary FD niskiej i wysokiej rozdzielczości	65	-
Pomiary GC/MS	120 godz.	84 godz.
Pomiary LC/MS	8 godz.	6 godz.

Tabela nie uwzględnia badań ok. 400 próbek w ramach prac własnych i współpracy z innymi ośrodkami naukowymi.

Prowadzono kompleksowe badania (przede wszystkim HPLC/MS i GC/MS), w ramach działalności Laboratorium Analizy Leków na potrzeby klientów zewnętrznych. Ich celem była identyfikacja zanieczyszczeń w lekach, kosmetykach, lub ich składnikach, oraz opracowanie dokumentacji spektralnej wybranych zanieczyszczeń na zlecenie firm farmaceutycznych i kosmetycznych. W okresie sprawozdawczym zakończono 30 badań tego typu dla 8 firm.

Zespół XII – prof. Zofia Lipkowska (Pracownia RTG)

Na rzecz zespołów Instytutu Chemii Organicznej PAN, w ramach współpracy i prac własnych wykonano 90 pomiarów i 50 oznaczeń struktury. Zaktualizowano zasoby Cambridge Crystallographic Data Base i zapewniono doradztwo osobom przygotowującym prace doktorskie w zakresie wykorzystania danych strukturalnych. Na dyfraktometrze Bruker AXS wprowadzono nowy system do zbierania i obróbki danych eksperymentalnych oraz oprogramowanie do obliczeń krystalograficznych.

Zespół XIII – prof. Jadwiga Frelek

Pomiary usługowe w zakresie IR, UV-VIS:

W roku 2010 w Pracowni Spektroskopii Optycznej wykonano 1339 widma w podczerwieni, w tym 752 widma na zlecenie pracowników IChO, a 497 widm dla zleceniodawców zewnętrznych. Ponadto na spektrofotometrze Cary 100 wykonano 189 widm w nadfiolecie i świetle widzialnym, z czego 84 widm na zlecenie spoza Instytutu.

Pomiary usługowe w zakresie CD.

W roku 2010 w Pracowni Spektroskopii Optycznej wykonano 2808 widm CD w tym 267 widm dla zleceniodawców zewnętrznych. Ponadto wykonano 445 widm UV-vis.

Zespół XVI – działalność serwisowa NMR w roku 2010

W roku 2010 działalność serwisowa zespołu NMR obejmowała wykonywanie pomiarów NMR na potrzeby Instytutu oraz ośrodków zewnętrznych, konserwacji i utrzymania w ruchu aparatów NMR oraz usuwanie drobnych awarii sprzętu. Zespół serwisowy dysponował w roku 2010 pięcioma spektrometrami NMR: Varian Gemini BB 200, Varian Mercury 400, Bruker Avance DRX-500, Varian-NMR-vnmrs 500 i Varian-NMR-vnmrs 600. Kontynuowano prace związane z usprawnieniem i konserwacją usługowego laboratorium NMR. Przystosowano i oddano do samoobsługowego użytku aparat Varian Mercury 400.

W pracowni serwisowej na aparatach obsługiwanych przez zespół serwisowy NMR wykonano ogółem 6070 pomiarów:

Pomiar/Aparat	Varian 400	Bruker 500	Varian 500	Varian 600	Razem
^1H NMR	238	842	1171	642	2893
^{13}C NMR	137	459	740	447	1783
Pomiary specjalistyczne (inne jądra, pomiary 2D, relaksacja etc.)	31	377	353	633	1394
					6070

Na spektrometrze samoobsługowym Varian 2000BB wykonano pomiary zajmujące 1439 godz. W ramach samoobsługi na aparacie Varian Mercury 4000 (od 1.X.2010) wykonano pomiary zajmujące 237 godz.

Zespół XVII – (Pracownia Analizy Elementarnej)

W Pracowni Analizy Elementarnej zatrudnione są trzy osoby:

W okresie sprawozdawczym zostały wykonane oznaczenia procentowej zawartości pierwiastków: C, H, N, S, Cl, Br, J, F oraz popiołu w substancjach organicznych w następujących ilościach:

3392 – oznaczeń dla IChO

1778 – oznaczeń zleconych przez inne ośrodki badawcze

300 – oznaczeń zleconych przez Laboratorium Analizy Leków IChO PAN

RAZEM: 5470 - oznaczeń

Ponadto wykonano **13** precyzyjnych naważek dla IChO PAN i **210** naważki dla IChF PAN.

W okresie 04-29.05.2010 czworo uczniów z Technikum Chemicznego odbywało praktyki zawodowe w naszej pracowni.

Wykaz ośrodków badawczych zlecających wykonanie analiz:

Nazwa zleceniodawcy (ilość oznaczeń): IChF PAN (592), Instytut Farmaceutyczny (240), Adamed (236), UW (170), Chemipan (118), PW (70), oraz CELON PHARMA sp. z o.o., Nobilus ENT, Uniwersytet Warmińsko-Mazurski, Fluorochemika Poland sp. z o.o., UAM, Ipochem, UMK, UwB, P.Śl., Mera Bellows sp. z o.o., Hitar Synthesis, Bujno Syntesis sp. z o.o.

Sprawozdanie Biblioteki IChO PAN za rok 2010

W okresie sprawozdawczym w Bibliotece udostępniano:

1. komputerowe katalogi biblioteczne	1 (Horizon)
2. komputerowe bazy danych	2 (Beilstein, SCI Finder)
3. komputerowe bibliograficzne bazy danych	11
w tym:	
- abstraktowe	2 (Web of Knowledge, INSPEC)
- pełnotekstowe	6 (Science-Direct, Proquest, ACS, RSC Springer, WILEY, Science, Nature, EBSCO)

W 2009 r. uzyskano następujący przyrost zbiorów:

- Wydawnictwa zwarte (książki)	103 jedn. inwent.
- Wydawnictwa ciągłe (czasopisma)	120 jedn. inwent.
- prace doktorskie	6 jedn. inwent.
- zbiory specjalne	-
- mikroformy	-

Łączna liczba woluminów

- książek	12413	jedn. inwent.
- czasopism	13270	jedn. inwent.
- prac doktorskich	274	jedn. inwent.
- zbiory specjalne	267	jedn. inwent.
- mikroformy	2	jedn. inwent.

Liczba tytułów prenumerowanych czasopism polskich 4

Liczba tytułów prenumerowanych czasopism zagranicznych 26

Liczba korzystających: 2904 (dane wspólne z IChF)

SPIS PUBLIKACJI

Monografie i przeglądy

1. *Chem. Soc. Rev.* "Inherently chiral concave molecules-from synthesis to applications", A. Szumna, 2010, 39, 4274-4285 **20,086**
2. *Coord. Chem. Rev.* "Tetraimine macrocyclic transition metal complexes as building blocks for molecular devices", B. Korybut Daszkiewicz, R. Bilewicz, K. Woźniak, 2010, 54, 1637-1660. **11,225**
3. *Curr. Org. Chem.* "Polyhydroxylated carbobicyclic sugar mimics. Part 1. Synthesis of racemic derivatives", M. Nowogródzki, S. Jarosz, 2010, 14, 533-545. **2,879**
4. *Curr. Org. Chem.* "Polyhydroxylated carbobicyclic sugar mimics. Part 2. The chiron approach to bicyclic systems", M. Nowogródzki, S. Jarosz, 2010, 14, 601-613. **2,879**
5. *Curr. Org. Chem.* "Stereochemical assignment of b-lactam antibiotics and their analogous by electronic circular dichroism spectroscopy", M. Woźnica, P. Kowalska, R. Łysek, M. Masnyk, M. Górecki, M. Kwit, F. Furche, J. Frelek, 2010, 14, 1022-1036. **2,879**
6. *Nuclear Magnetic Resonance, vol. 39 (Specialist Periodical Reports)*, ed. G.A.Webb and K. Kamińska-Trela, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, "NMR Books and Reviews", W. Schilf, 2010, 39, 1-41.
7. *Nuclear Magnetic Resonance, vol. 39 (Specialist Periodical Reports)*, ed. G.A.Webb and K. Kamińska-Trela, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, "Applications of Spin-Spin Coupling Constants", K. Kamińska-Trela, J. Wójcik, 2010, 39, 179-226.
8. *Chem. Soc. Rev.* "Nucleophilic substitution of hydrogen in electron-deficient arenes, a general process of great practical value", M. Mąkosza, 2010, 39, 2855-2868. **20,086**
9. *Encyclopedia of Catalysis*, M. Mąkosza, M. Fedoryński, "Phase Transfer Catalysis" Wiley 2010.
10. *Springer Science Netherlands* "The Influence of the Anionic Counter-Ion on the Activity of Ammonium Substituted Hoveyda-Type Olefin Metathesis Catalysts in Aqueous Media" in "Green Metathesis Chemistry", NATO Science for Peace and Security Series A: Chemistry and Biology; (V. Dragutan, A. Demonceau, I. Dragutan, E. Sh. Finkelshtein, A.; Eds.), Ł. Gułajski,; K. Grela, 2010, 49-56.
11. *Springer Netherlands* "Ruthenium Catalysts Bearing Carboxylate Ligand" in "Green Metathesis Chemistry", R. Gawin, K. Grela, (NATO Science for Peace and Security Series A: Chemistry and Biology; V. Dragutan, A. Demonceau, I. Dragutan, E. Sh. Finkelshtein, Eds.), 2010, 57-69.
12. *Novel Concepts in Catalysis and Chemical Reactors* P. Kielbasiński, R. Ostaszewski, W. Szymański, „Enzymatic Catalysis Today and tomorrow”, (A. Cybulski, J. A. Moulijn, A. Stankiewicz, Ed. WILEY-VCH 2010), 95-120.
13. *Wiad. Chem.* „Asymetryczna Reakcja Aldolowa: Część I – Nowe Koncepcje, Katalizatory i ich Zastosowanie w Syntezie Produktów Naturalnych”, M. Stodulski, J. Młynarski, 2010 64, 435-466.
14. *Wiadomości Chemiczne* „Asymetryczna Reakcja Aldolowa: Część II – Reakcja Aldolowa w Roztworach Wodnych”, Paradowska, J.; Rogozińska, M.; Młynarski, J. 2010 64 599-628.

Artykuły oryginalne

1. *Tetrahedron* „Synthesis of 5-aminoisoxazolines from N-allyl compounds and nitrile oxides via tandem isomerization-1,3-dipolar cycloaddition”, P. Bujak, S. Krompiec, J. Malarz, M. Krompiec, M. Filapek, W. Danikiewicz, M. Kania, K. Gębarowska, I. Grudzka, 2010, 66, 5972-5981. **3,219**
2. *J. Pharm. Biomed. Anal.* „Identification of radiolysis products of solid thiamphenicol”, B. Marciniak, M. Stawny, W. Danikiewicz, G. Spólnik, E. Jaroszkiewicz, M. Needham, 2010, 53, 826-832. **2,453**
3. *J. Mass Spectrom.* „Mass spectrometry studies on meso-substituted corroles and their photochemical decomposition products”, P. Świder, A. Nowak-Król, R. Voloshchuk, J. P. Lewtak, D. T. Gryko, W. Danikiewicz, 2010, 45, 1443–1451. **3,411**
4. *Tetrahedron* “Intramolecular substitution reaction involving pi-nucleophiles and acyliminium cations generated from azetidion-2-ones”, B. Grzeszczyk, B. Szechner, B. Furman, M. Chmielewski, 2010, 66, 3904-3911. **3,219**
5. *J. Org. Chem.* “Ferrier-Petasis rearrangement of 4-vinyloxy-azetidion-2-ones: an entry to carbapenams and carbacephams”, A. Kozioł, B. Grzeszczyk, A. Kozioł, O. Staszewska-Krajewska, B. Furman, M. Chmielewski 2010, 75, 6990-6993. **4,219**
6. *Tetrahedron* “Synthesis of 4-arylazetidionones via intramolecular alkylation of nucleophilic arenes using acyliminium cations”, B. Zambroń, B. Furman, M. Masnyk, P. Kalicki, M. Chmielewski 2010, 66, 8974-8981. **3,219**
7. *J. Org. Chem.* “Direct, catalytic synthesis of carbapenams via cycloaddition/rearrangement cascade reaction: unexpected dacetyles’ structure effect” A. Mames, S. Stecko, P. Mikołajczyk, M. Soluch, B. Furman, M. Chmielewski, 2010, 75, 7580-7587. **4,219**
8. *Carbohydr. Res.* “Glycosyl hydroperoxides derived from 2-deoxysugars”, B. Szechner, Z. Urbanczyk-Lipkowska, M. Chmielewski, 2010, 345, 2464–2468. **2,025**
9. *Tetrahedron* "Ruthenium Catalysts Bearing Chelating Carboxylate Ligands: Application to Metathesis Reactions in Water”, R. Gawin, P. Czarnecka, K. Grela, 2010, 66, 1051-1056 (Symposium-in-Print thematic issue of Green Chemistry). **3,219**
10. *Organometallics* "Latent Thermo-Switchable Olefin Metathesis Initiators Bearing a Pyridyl-Functionalized Chelating Carbene: Influence of the Leaving Group's Rigidity on the Catalyst's Performance", A. Szadkowska, X. Gstrein, D. Burtscher, K. Jarzemska, K. Woźniak, C. Slugovc, K. Grela, 2010, 29, 117-124. **4,204**
11. *Tetrahedron*, "2-Substituted nitrones and isomeric hydroxylamines - obtained via aluminium amalgam reduction of nitro nitriles and ketones - a new access to convenient intermediates for nitroso carbonyl compounds preparation", K. Grela, L. Konopski, 2010, 66, 3608-3613. **3,219**
12. *Tetrahedron*, "A convenient synthesis of deuterium labeled tertiary aliphatic nitro ketones and nitriles - starting materials for preparation of deuterated cyclic nitrones, isomeric hydroxylamines, and corresponding C-nitroso compounds", K. Grela, L. Konopski, 2010, 66, 3614-3622. **3,219**
13. *Chem. Eur. J.* "Studies on Electronic Effects in O-, N- and S-Chelated Ruthenium Olefin-Metathesis Catalysts", E. Tzur, A. Szadkowska, A. Ben-Asuly, A. Makal, I. Goldberg, K. Woźniak, K. Grela, N. G. Lemcoff, 2010, 16, 8726-8737. **5,382**

14. *Synlett* "Olefin Cross-Metathesis with 3-Nitropropene" T. Wdowik, C. Samojłowicz, M. Jawiczuk, A. Zarecki K. Grela, 2010, 2931-2935. **2,718**
15. *Heterocycles* "Application of Sugar Allyl Tin Derivatives for the Preparation of Heterocyclic Compounds", M. Magdycz, P. Cmoch, S. Jarosz, 2010, 80, 1303-1318. **1,165**
16. *Org. Letters* "Amino-Acid Templated Assembly of Sucrose-Derived Macrocycles", B. Lewandowski, S. Jarosz 2010, 12, 2532-2535. **5,42**
17. *J. Carbohydr. Chem.* "Synthesis of 6-Phosphonate, 6,6'-di-Phosphonate and 6,6'-di-Phosphine Derivatives of Sucrose", A. Gaweł, S. Jarosz, 2010, 29, 332-347. **1,197**
18. *J. Fluorine Chem.* "Sodium dithionite initiated fluoroalkylation of trimethoxybenzenes, mesitylene and pyrroles with BrCF₂CF₂Br", W. Dmowski, K. Piasecka-Maciejewska, 2010, 131, 746-750. **1,73**
19. *J. Phys. Chem. A* "Structure and Dynamics of [3.3]Paracyclophane as Studied by Nuclear Magnetic Resonance, and Density Functional Theory Calculations", H. Dodziuk, S. Szymański, J. Jaźwiński, M. E. Marchwiany, H. Hopf, 2010, 114, 10467-10473. **2,899**
20. *J. Phys. Org. Chem.* "Origin of significant solvent effects on ¹J(CC) spin-spin coupling in some acetylenes: hydrogen bonding and solvent polarity", Z. Biedrzycka, K. Kamińska-Trela, M. Wilanowski, 2010, 23, 483-487. **1,602**
21. *J. Steroid Biochem. Molec. Biol.* "MSITE: A new computational tool for comparison of homological proteins in holo form", W. Sicińska, P. Rotkiewicz, 2010, 121, 34-42. **2,655**
22. *Dalton Trans.* "Interactions of dithiolated tetraazamacrocyclic copper(II) and nickel(II) complexes self-assembled on gold electrodes with p-electron deficient molecules in solution", U. E. Wawrzyniak, M. Woźny, I. Mames, B. Pałys, B. Korybut-Daszkiewicz, R. Bilewicz, 2010, 39, 730-735. **4,081**
23. *Inorg. Chem.* "Face-to-Face Dinuclear Scaffolds Composed of Tetraazamacrocyclic Charged and Neutral Complexes", K. Szczepaniak, U. E. Wawrzyniak, J. Kowalski, I. Mames, R. Bilewicz, P. Kalicki, B. Korybut-Daszkiewicz 2010, 49, 4491-4498. **4,657**
24. *Tetrahedron Lett.* "Direct asymmetric hydroxymetylation of ketones in homogeneous aqueous solvents", M. Pasternak, J. Paradowska, M. Rogozińska, J. Mlynarski, 2010, 51, 4088-4090. **2,66**
25. *Synlett* "Short and Simple Method of Synthesis of Some Pyrrolo[3,2-*b*]quinoline Derivatives from Easily Available Nitrobenzene Derivatives", Z. Wróbel, K. Wojciechowski, A. Kwast, N. Gajda, 2010, 2435- 2438. **2,718**
26. *Synthesis* "Simple Synthesis of *N*-Aryl-2-nitrosoanilines in the Reaction of Nitroarenes with Aniline Anion Derivatives", Z. Wróbel, A. Kwast, 2010, 3865-3872. **2,572**
27. *Synthesis* „A Traceless, Solid-Supported Synthesis of β-Turn Mimetics Based on the Hexahydropyrazino[1,2-*a*]pyrazine-1,2-dione Scaffold", A. Mieczkowski, W. Koźmiński J. Jurczak, 2010, 221-232. **2,572**
28. *J. Org. Chem.* „Enantioselective Construction of *Cis*-2,6-Disubstituted Dihydropyrans: Total Synthesis of (-)-Centrolobine", W. Chaładaj, R. Kowalczyk, J. Jurczak, 2010, 75, 1740-1743. **4,219**
29. *Org. Lett.* „7,7'-Diureido-2,2'-diindolylmethanes: Anion Receptors Effective in a Highly Competitive Solvent, Methanol", P. Dydio, T. Zieliński, J. Jurczak, 2010, 12, 1076-1078. **5,42**

30. *Tetrahedron* „Addition of gamma-silyloxyallyltins on ethyl glyoxylate: evaluation of the influence of the experimental conditions on the stereochemical course of the reaction”, A. Lumbroso, P. Kwiatkowski, A. Blonska, E. Le Grogne, I. Beaudet, J. Jurczak, S. Jarosz, J. P. Quintard, 2010, *66*, 1570-1580. **3,219**
31. *Tetrahedron* „A traceless solid-supported synthesis of novel pyrazinediazepinedione derivatives”, A. Mieczkowski, J. Jurczak, 2010, *66*, 2514-2519. **3,219**
32. *Synlett* „Oxo-Diels-Alder Reaction of Danishefsky's Diene with Aldehydes, Catalyzed by Chiral Tridentate Chromium(III)-Schiff Base Complexes”, S. Mięśowicz, W. Chaładaj, J. Jurczak, 2010, 1421-1425. **2,718**
33. *Tetrahedron* „Dynamic combinatorial libraries of macrocycles derived from phthalic aldehydes and alpha,omega-diamines”, M. Ceborska, A. Tarnowska, K. Ziach, J. Jurczak 2010, *66*, 9532-9537. **3,219**
34. *Phys. Chem. Chem. Phys.* “Solvent polarity effect on intramolecular electron transfer in a corrole-naphthalene bisimide dyad”, L. Flamigni, D. Wyrostek, R. Voloshchuk, D.T. Gryko, 2010, *12*, 474-483. **4,116**
35. *Chem. Asian J.* “*Trans*-A₂B-corroles bearing coumarin moiety – from synthesis to photophysics”, M. Tasior, D. T. Gryko, D. J. Pielacińska, A. Zanelli, L. Flamigni, 2010, *5*, 130-140. **4,373**
36. *J. Org. Chem.* “Strongly emitting fluorophores based on 1-azaperylene scaffold”, D.T. Gryko, J. Piechowska, M. Gałęzowski, 2010, *75*, 1297-1300. **4,219**
37. *Chem. Asian J.* “Liquid porphyrins”, A. Nowak-Król, D. Gryko, D.T. Gryko, 2010, *5*, 904-909. **4,373**
38. *Org. Lett.* “Unprecedented 1,3-dipolar cycloaddition – from 1,4,5,8-naphthalene bis-imides to a new heterocyclic skeleton”, D.T. Gryko, M.K. Rogacki, J. Klajn, M. Gałęzowski, D. K. Stępień, M. K. Cyrański, 2010, *12*, 2020-2023. **5,42**
39. *J. Am. Chem. Soc.* “Reversible O-O Bond Cleavage and Formation between Mn(IV)–Peroxo and Mn(V)–Oxo Corroles”, S. H. Kim, H. Park, M. S. Seo, M. Kubo, T. Ogura, J. Klajn, D. T. Gryko, J. S. Valentine, W. Nam, 2010, *132*, 14030-14032. **8,58**
40. *J. Porphyrins Phthalocyanines* “Synthesis, physicochemical properties and electrochemistry of novel morpholine substituted phthalocyanines”, A. Kalkan Burat, A. Koca, J. P. Lewtak, D. T. Gryko, 2010, *14*, 605-614. **1,255**
41. *Chem. Commun.* “*meso*-Alkylidene (*m*-benzi)pentaphyrin: a modified pentaphyrin bearing exocyclic double bonds at *meso*-positions”, S.-D. Jeong, A. Nowak-Król, Y. Kim, S.-J. Kim, D. T. Gryko, C.-H. Lee, 2010, 8737-8739. **5,504**
42. *Magn. Reson. Chem.* “Topotecan tautomerism and reactivity. ESI MS and ¹H/¹³C NMR study”, K. Hyz, R. Kawęcki, W. Bocian, E. Bednarek, J. Sitkowski, L. Kozerski, 2010, *48*, 575-584. **1,612**
43. *J. Pharm. Biomed. Anal.* “An Assessment of Polydispersed Species in Unfractionated and Low Molecular Weight Heparins Diffusion Ordered Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy Method”, E. Bednarek, J. Sitkowski, W. Bocian, B. Mulloy, L. Kozerski, 2010, *53*, 302-308. **2,453**
44. *Magn. Reson. Chem.* “Structural correlations for ¹H, ¹³C and ¹⁵N NMR coordination shifts in Au(III), Pd(II) and Pt(II) chloride complexes with lutidine and collidine”, L. Pazderski, T. Pawlak, J. Sitkowski, L. Kozerski, E. Szłyk, 2010, *48* 417-426. **1,612**

45. *Magn. Reson. Chem.* “¹H assignment corrections and ¹H, ¹³C and ¹⁵N NMR coordination shifts structural correlations in Fe(II), Ru(II) and Os(II) cationic complexes with 2,2’ bipiridine and 1,10-phenantroline”, L. Pazderski, T. Pawlak, J. Sitkowski, L. Kozerski, E. Szłyk, 2010 48 450-457. **1,612**
46. *J. Mol. Struct.* “The structure of N-allyl-(5-phenyl-[1,3,4]thiadiazol-2-yl) amine in solution and the solid state studied by the ¹H, ¹³C, ¹⁵N NMR spectroscopy and X- ray crystallography”, L. Strzemecka, Z. Urbanczyk-Lipkowska, 2010, 970, 1-13. **1,551**
47. *J. Mol. Struct.* “Structural characterization of 6,6’-bis(substituted)-5,5’-bi-1,2,4-triazines as potential N-heterocyclic ligands for the extraction of nuclear waste”, D. Branowska, Z. Karczmarzyk, A. Rykowski, W. Wysocki, E. Olender, Z. Urbanczyk-Lipkowska P. Kalicki, 2010, 979, 186-193. **1,551**
48. *Acta Crystallogr. E. - Structure Reports on line* “5,6,7,8-Tetrahydroquinoline 1-oxide hemihydrate”, Z. Karczmarzyk, T. M.Lipinska, W. Wysocki, Z. Urbanczyk-Lipkowska, P. Kalicki, 2010, E66, o806-o807. **0,411**
49. *Acta Crystallogr. E. - Structure Reports on line* “6-(2-Chloro-benzyl)-1-(4-chlorophenyl)-7-hydroxy-2,3-dihydro-1H-imidazo[1,2-a]-pyrimidin-5-one”, W. Wysocki, D. Matosiuk, M. Rzadkowska, Z. Karczmarzyk, Z. Urbanczyk-Lipkowska, P. Kalicki, 2010, E66, o2742-2743. **0,411**
50. *J. Org. Chem.* "Structure - chiroptical properties relationship of carbapenams by experiment and theory", M. Woźnica, M. Masnyk, S. Stecko, A. Mames, B. Furman, M. Chmielewski, J. Frelek, 2010, 75, 7219-7226. **4,219**
51. *J. Org. Chem.* "Steric Control of α - and β -Alkylation of Azulenone Intermediates in a Guanacastepene A Synthesis", H. Wang, K. Michalak, M. Michalak, G. Jiménez-Osés, J. Wicha, K.N. Houk, 2010, 75, 762-766. **4,219**
52. *Tetrahedron Lett.* "A facile construction of the tricyclic 5-7-6 scaffold of fungi- derived diterpenoids. The first total synthesis of (+/-)- heptemerone G and a new approach to Danishefsky's intermediate for a guanacastepene A synthesis", K. Michalak, M. Michalak, J. Wicha, 2010, 51, 4344-4346. **2,66**
53. *J. Org. Chem.* "Rearrangement of 2,3-Epoxy Alcohol Dimethylthiocarbamate Derivatives. Synthesis of 2,3-Epithio Alcohol Derivatives under Mild Conditions", P. Kalicki, M. Karchier, K. Michalak, J. Wicha, 2010, 75, 5388-5391. **4,219**
54. *J. Org. Chem.* "Construction of the Tricyclic 5-7-6 Scaffold of Fungi-Derived Diterpenoids. Total Synthesis of (\pm)-Heptemerone G and an Approach to Danishefsky's Intermediate for Guanacastepene A Synthesis", K. Michalak, M. Michalak, J. Wicha, 2010, 75, 8337-8350. **4,219**
55. *Org. Lett.* “New hydrophilic vitamin B₁₂ derivatives via ring-opening reactions of c-lactone”, K. Proinsias, J. L. Sessler, S. Kurcoń, D. Gryko, 2010, 12, 4674–4677. **5,42**
56. *Tetrahedron: Asymmetry* „Adducts of rhodium(II) tetraacylates with methionine and its derivatives: ¹H and ¹³C nuclear magnetic resonance spectroscopy and chiral recognition”, R. Głaszczka, J. Jaźwiński, B. Kamiński, M. Kamińska, 2010, 21, 2346-2355. **2,625**
57. *J. Chem. Phys. A* “Structure and Dynamics of [3.3]paracyclophane as Studied by NMR and DFT Calculations”, H. Dodziuk, S. Szymański, J. Jaźwiński, M. Marchwiany, H. Hopf, 2010, 114, 10467-10473. **3,093**

58. *J. Phys. Org. Chem.* „Origin of significant solvent effects on $^1J(\text{CC})$ spin-spin coupling in some acetylenes; hydrogen bonding and solvent polarity”, Z. Biedrzycka, K. Kamińska-Trela, M. Witanowski, 2010, 23, 483-487. **1,602**
59. *J. Mol. Struct.* “Spectroscopic and theoretical studies of the protonation of N-(5-nitrosalicylidene)-ethylamine”, K. Pyta, P. Przybylski, W. Schilf, B. Kołodziej, A. Szady-Chelmieńska, B. Brzezinski, 2010, 967, 140-146. **1,551**
60. *J. Mol. Struct.* ”X-ray, spectroscopic and computational studies of the tautomeric structure of a new hydrazone of 5-nitrosalicylaldehyde with indole-3-acetic hydrazide”, K. Pyta, P. Przybylski, A. Huczynski, A. Hoser, K. Woźniak, W. Schilf, B. Kamiński, E. Grech, B. Brzezinski, 2010, 970, 147-154. **1,551**
61. *Eur. J. Med. Chem.*, Synthesis and *in vitro* antiproliferative activity of 5-alkyl-12(*H*)-quino[3,4-*b*] [1,4]benzothiazinium salts, A. Zięba, A. Sochanik, A. Szurko, M. Rams, A. Mrozek, P. Cmoch, 2010, 45, 4733-4739. **3,269**
62. *Tetrahedron*, “Novel approach to synthesis of substituted 3-aminoquinolines from nitroarenes and protected ethyl aminocrotonate”, R. Bujok, A. Kwast, P. Cmoch, Z. Wróbel, 2010, 66, 698-708. **3,219**
63. *J. Med. Chem.* „The studies on the synthesis of all stereoisomers of MG-132 proteasome inhibitors in the tumor targeting approach”, M. Mroczkiewicz, K. Winkler, D. Nowis, G. Placha, J. Golab, R. Ostaszewski, 2010, 53, 1509-1518, **4,802**
64. *Tetrahedron* „Study on the synthesis and molecular recognition of new receptors for selective complexation of carboxylic acids”, M. Orłowska, M. Mroczkiewicz, K. Guzowa, R. Ostaszewski, A.M. Kłonkowski, 2010, 66, 2486 -2491. **3,219**
65. *J. Phys. Chem. A.* “Alternative approach to the standardization of NMR spectra. Direct measurement of nuclear magnetic shielding in molecules”, K. Jackowski, M. Jaszuński, M. Wilczek, 2010, 114, 2471-2475 **2,899**
66. *Mol. Phys.* “Spin-spin coupling constants and triplet instabilities in Kohn-Sham theory”, O. B. Lutnaes, T. Helgaker, M. Jaszuński, 2010, 108, 2579-2590 **1,634**
67. *J. Org. Chem.* “Diastereoselective Synthesis of Tetrahydrofurans from Aryl 3-Chloropropylsulfoxides and Aldehydes”, Z. Komsta, M. Barbasiewicz, M. Mąkosza, 2010, 75, 3251-3259. **4,219**
68. *Eur. J. Org. Chem.* “Oxidative Nucleophilic Substitution of Hydrogen in Nitroarenes with Carbanions of Protected Serine and Threonine Esters”, D. Sulikowski, M. Mąkosza 2010, 4218-4226. **3,096**
69. *Eur. J. Org. Chem.* Varvounis G “tele Nucleophilic Substitutions of Hydrogen in *m*-(Trichloromethyl)nitrobenzenes with Cyano and Ester Carbanions”, M. Surowiec, D. Belekos, M. Makosza, 2010, 3501-3506. **3,096**
70. *Eur. J. Org. Chem.* “Intramolecular Addition of gamma-Chloro Carbanions to Electrophilic Groups: Synthesis of Tricyclic Tetrahydrofurans, Pyrrolidines, and Cyclopentanes”, A. Wojtasiewicz, M. Barbasiewicz, M. Mąkosza 2010, 1885-1894. **3,096**
71. *Tetrahedron* “Synthesis of substituted tetrahydrofurans via intermolecular reactions of gamma-chlorocarbanions of 3-substituted 3-chloro-propylphenyl sulfones with aldehydes”, A. Brandt, A. Wojtasiewicz, M. Śnieżek, M. Mąkosza 2010, 66, 3378-3385. **3,219**

72. *Synlett* "Synthesis of Diethyl alpha-(o-Nitroaryl) phosphoglycines via Oxidative Nucleophilic Substitution of Hydrogen in Nitroarenes", M. Mąkosza, D. Sulikowski 2010, 1666-1668. **2,718**

Publikacje inne

1. *Beilstein J. Org. Chem.*, K. Grela, "Progress in metathesis chemistry" 2010, 6, 1089-1090 (Editorial remarks, Guest editor of the issue).
2. "The Study of Selectivity of Cyclohexane Oxidation Using Transition Metal Complexes with Porphyrins as Catalysts." P.T. Wierzchowski, Warsaw, 2010, (raport poufny, recenzowany),
3. *Proceedings of the 31st European Peptide Symposium*. M. Lebl, M. Meldal, K.J. Jensen, T. Hoeg-Jensen (Editors) *European peptide Society*. M. Sowińska, A. Lesniak, A.W. Lipkowski, Z. Urbanczyk-Lipkowska, Dendrimeric peptides with affinity to opioid receptors –complexation studies. 2010, 592-593.

Prace przyjęte do druku

Monografie + rozdziały

1. *Pure Appl. Chem.* A. Szadkowska; C. Samojłowicz; K.Grela, "Enhancement of ruthenium catalyzed olefin metathesis reactions: searching for new catalyst or new reaction conditions?".
2. *Proven Carbohydrate Methods*, Functionalization of terminal positions of sucrose. Part I: Synthesis of 2,3,3',4,4'-penta-*O*-benzyl-sucrose and differentiation of the terminal positions (1,6,6'). M. Mach, A. Zawisza, B. Lewandowski, S. Jarosz
3. *Proven Carbohydrate Methods*, Functionalization of terminal positions of sucrose. Part II: Preparation of 1',2,3,3',4,4'-hexa-*O*-benzyl-sucrose and its "elongated" diol [6,6'-bis-*O*-(2-hydroxyethyl) derivative], B. Lewandowski, A. Listkowski, S. Jarosz
4. *Science of Synthesis* O. El-Sepelgy; M. Raczka; J. Mlynarski, Asymmetric Aldol Reaction, in Reference Library: Water in Organic Synthesis, Shu Kobayashi (Ed.), Georg Thieme Verlag, 2010/2011
5. Enantio-selective homogeneous supported catalysis, S. Buda; M. Pasternak; J. Mlynarski, Aqueous phase asymmetric catalysis, Radovan Šebesta, Eds. RSC Books Editorial, Cambridge, 2010/2011
6. *Advances in Chiroptical Methods* J. Frelek, W. Woźnica, A. Butkiewicz –"The Amide Chromophore in Bi- and Polycyclic b-Lactam Ring Systems" publikowane w: (2 Volume Set), edytorzy: Nina Berova, Prasad Polavarapu, Koji Nakanishi, and Robert W. Woody; wydawca: John Wiley & Sons, Inc., planowany termin ukazania: sierpień 2011.
7. *Nuclear Magnetic Resonance, vol. 40 (Specialist Periodical Reports)*, ed. K. Kamińska-Trela, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, "NMR Books and Reviews", W. Schilf.
8. *Nuclear Magnetic Resonance, vol. 40 (Specialist Periodical Reports)*, ed. K. Kamińska-Trela, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, Applications of Spin-Spin Coupling Constants, K. Kamińska-Trela, J. Wójcik, 2011, 40,

9. *Nuclear Magnetic Resonance, vol. 40 (Specialist Periodical Reports)*, ed. K. Kamienska-Trela, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, "Theoretical Aspects of Spin-Spin Coupling Constants" J. Jąźwiński 2011, 40,
10. *Handbook of Computational Chemistry* M. Jaszuński, A. Rizzo, K. Ruud, Molecular electric, magnetic and optical properties, (Springer, artykuł przeglądowy)
11. *Targets in Heterocyclic Systems - Chemistry and Properties* M. Mąkosza, K. Wojciechowski „Nucleophilic Substitution of Hydrogen – An Efficient Tool Synthesis of Heterocyclic Compounds” *Soc. Chim. Italiana*.

Prace oryginalne

1. *Forensic Science International*, D. Błachut, W. Danikiewicz, K. Wojtasiewicz, M. Olejnik, I. Kalinowska, J. Szawkało, Z. Czarnocki, „The synthesis, mass spectrometric properties and identification of some N,N-di-(β -arylisopropyl)formamides related to the synthesis of ring-modified amphetamines”, przyjęty do druku 7.08.2010 r., dostępny online jako Early View.
2. *Chem. Eur. J.* A. Poater; F. Ragone; A. Correa; A. Szadkowska; M. Barbasiewicz; K. Grela; L. Cavallo, "Mechanistic Insights on the *Cis-Trans* Isomerization of Ruthenium Complexes Relevant to Olefin Metathesis Catalysts"
3. *Synlett* S. Shafi; M. Kędziołek; K. Grela, "Cross Metathesis of N-Allylamines and α,β -Unsaturated Carbonyl Compounds: A One-Pot Synthesis of Substituted Pyrroles".
4. *Arkivoc* C. Samojłowicz; K. Grela, "Olefin metathesis reactions of sulfur-containing alkenes and dienes" (invited paper).
5. *Organometallics* K. Grela; A. Szadkowska; K. Żukowska; A. Pazio; K. Wozniak; R. Kadyrov, "Ruthenium Olefin Metathesis Catalysts Containing Six Membered Sulfone and Sulfoamide Chelating Ligands",
6. *Synth. Comm.*, Application of 1',2,3,3',4,4'-hexa-*O*-benzylsucrose in the preparation of sucrose macrocycles *via* a click chemistry route, B. Lewandowski, S. Jarosz.
7. *J. Carbohydr. Chem.*, Differentiation of the primary hydroxyl groups in 2,3,3',4,4'-penta-*O*-benzylsucrose: synthesis of sucrose mono-phosphine – potential ligand for asymmetric catalysis, J. Burdyńska, B. Lewandowski, S. Jarosz,
8. *Eur. J. Inorg. Chem.* The Role of the C–H $\cdots\pi$ Interactions in the Cyclisation Reactions Leading to New Aryl-Bridged Tetraazamacrocyclic Complexes of Copper and Nickel, R. Kamiński, J. Kowalski, I. Mames, B. Korybut-Daszkiewicz, S. Domagała, K. Woźniak
9. *J. Chem. Phys.* "A Heuristic Model of Damped Quantum Rotation Effects in Nuclear Magnetic Resonance Spectra" S. Szymański
10. *Tetrahedron Asymmetry* M. Stodulski; A. Maminska; J. Mlynarski, Asymmetric aldol-Tishchenko reaction catalyzed by Yb-complexes with basic amino acid-derived ligands
11. *Eur. Polym. J.* L. Mueller, W. Jakubowski, K. Matyjaszewski, J. Pietrasik, P. Kwiatkowski, W. Chaladaj, J. Jurczak „Synthesis of high molecular weight polystyrene using AGET ATRP under high pressure”, *doi:10.1016/j.eurpolymj.2010.10.006*
12. *CrystEngComm.*, Z. Urbanczyk-Lipkowska, P. Kalicki, S. Gawinkowski, J. Waluk, M. Yokoyama; K. Tanaka 1,4-bis(1,3-dioxo-2-indenylidene)cyclohexane: polymorphism,

DOI: 10.1039/C0CE00509F.

13. *Macromol. Rapid. Commun.* J. Pietrasik, C. Ming Hui, W. Chaladaj, H. Dong, J. Choi, J. Jurczak, M. R. Bockstaller, K. Matyjaszewski „Silica-Polymethacrylate Hybrid Particles Synthesized Using High-Pressure Atom Transfer Radical Polymerization”, DOI: 10.1002/marc.201000531
14. *Eur. J. Org. Chem.* W. Chaladaj, J. Jurczak „Formal Synthesis of Galantinic Acid via oxo-Diels-Alder Methodology.
15. *Tetrahedron Letters*, Ł. Weseliński, E. Słyk, J. Jurczak „The highly enantioselective 1,3-dipolar cycloaddition of alkyl glyoxylate-derived nitrones to E-crotonaldehyde catalyzed by hybrid diamines” 2011, 52, 381–384
16. *J. Mass Spectrom.* P. Świder, A. Nowak-Król, R. Voloshchuk, J. P. Lewtak, D. T. Gryko, W. Danikiewicz, ‘Mass spectrometry studies on *meso*-substituted corroles and their decomposition products’,
17. *Dalton Trans.* „Hydrogen bonding in Schiff bases – NMR, structural and experimental charge density studies”, A. Makal, W. Schilf, B. Kamiński, A. Szady-Chelmieńska, E. Grech, K. Woźniak, 2011, 40, 421-430
18. *Theor. Chem. Acc.* M. Jaszuński, G. Łach, K. Strasburger, NMR shielding constants in hydrogen molecule isotopomers.
19. *Arkivoc* M. Mąkosza, M. Chromiński, D. Sulikowski,” Synthesis of nitroaryl derivatives of glycine via oxidative nucleophilic substitution of hydrogen in nitroarenes” 2011 (vi) pp. 82 - 91
20. *Compt. Rend. Chim.* “Synthesis of iminosugars via 1,3-dipolar cycloadditions reactions of nitrones to alpha,beta-unsaturated sugar aldono lactones” S. Stecko, M. Jurczak, I. Panfil, B. Furman, B. Grzeszczyk, M. Chmielewski
21. *Arkivoc* “Quinidine catalyzed reaction between 4-formyloxyazetidyn-2-one and some thiophenols, thiols and alcohols” A. Kozioł, E. Altieri, B. Furman, J. Solecka, M. Chmielewski,

Uzyskane patenty

Stabilna postać farmaceutyczna leku przeciwnowotworowego oraz sposób wytwarzania stabilnej postaci farmaceutycznej leku przeciwnowotworowego, twórcy: S. Janicki, W. Karaś, M. Znitowska, Z Mroczek, A. Tyrała, I. Czarnecka, Uprawnieni: Zakłady Farmaceutyczne Polfa S.A., Instytut Chemii Organicznej PAN, Akademia Medyczna Gdańsk, UP Bułgarii pat nr 65985, data przyznania patentu: 31.08.2010

WYKAZ WYKŁADÓW, KOMUNIKATÓW I POSTERÓW PRZEDSTAWIONYCH NA KONFERENCJACH NAUKOWYCH

IMPREZY MIĘDZYNARODOWE

XI Netherlands Catalysis and Chemistry Conference (Noordwijkrhout, Holandia), marzec 2010.

Poster:

1. J. Lewtak "Synthesis of π -expanded porphyrins".

6th Flash Conference ERA-Chemistry, Roscoff, Francja, 28 lutego - 5 marca 2010

Wykład:

2. K. Grela "Motivational tools in challenging olefin metathesis reactions",

CaRLa Winter School, Niemcy, Heidelberg, 6-12 marca 2010

Poster:

3. A. Szadkowska, R. Kadyrov, K. Grela "Electronic and Steric Influences on Activity of Ruthenium Complexes Containing S-Donor Ligands"

12. Frühjahrssymposium – JungChemikerForum, Getynga, 17- 20 marzec 2010

Komunikat:

4. C. Samojłowicz, M. Bieniek, K. Grela „The Doping Effect of Fluorinated Aromatic Solvent on the Rate of Ruthenium Catalyzed Olefin Metathesis”

Poster:

5. A. Koziol, B. Furman, M. Chmielewski, "An asymmetric synthesis of mono- and bicyclic β -lactams"
6. T. Wdowik, C. Samojłowicz, A. Zarecki, K. Grela „Cross metathesis with α,ω -nitroolefines”
7. J. Paradowska "Direct asymmetric aldol reaction - an easy way to make sugars"
8. M. Rogozińska "Synthesis of Optically Active Warfarin"

International School of Liquid Crystals, 13-20 April, 2010, Erice (Italy).

Poster:

9. J. Grolik, J. Eilmes, J. Frelek, B. Donnio, D. Guillon "Chiral liquid crystalline dibenzotetraaza[14]annulenes – syntheses and characterization of mesomorphic properties".

25th Central European NMR Meeting, Valtice (Czechy), 25 – 28 kwiecień 2010

Wykład:

10. M. Bugaj, K. Kamińska-Trela „Carbon-carbon spin-spin couplings $^nJ(\text{CC})$ vs. molecular geometry in 3-halogenoacrylic acids and their methyl esters. Experiment and theory”.
11. J. Jaźwiński, B. Kamiński, A. Sadlej “Adducts of diamines with dimeric rhodium tetraacylate – application of ^{13}C and ^{15}N CP-MAS NMR”

28th Informal Meeting on Mass Spectrometry, Koszeg, Węgry, 02-06.05.2010

Poster:

12. B. Słomińska, B. Korybut-Daszkiewicz, W. Danikiewicz “Mass spectrometry as a useful tool to investigate transition metal macrocyclic complexes”.
13. P. Świder, R. Voloshchuk, Danikiewicz, D. T. Gryko “Application of tandem mass spectrometry in the studies of the oxidation products of corroles”

Revolution in catalysis, Warszawa, 7-10 maj 2010

Komunikat:

14. A. Koziol, B. Furman, M. Chmielewski „A novel entry to asymmetric synthesis of azetidiones”.
15. Cezary Samojłowicz, Michał Bieniek, Karol Grela „The Doping Effect of Fluorinated Aromatic Solvent on the Rate of Ruthenium Catalyzed Olefin Metathesis”
16. Olena Vakuliuk "t-BuOLi can alone promote the direct arylation of pyrrole derivatives".
17. R. Ostaszewski, D. Koszelewski, A. Wóltańska, M. Ćwiklak, „Application of Enzymes to the Synthesis of Chiral Carboxylic Acids”
18. S. Stecko “An entry to carbapenams via asymmetric Kinugasa reaction involving cyclic nitrones and terminal acetylenes”
19. Rafał Loska “Iron-catalyzed Mizoroki-Heck cross-coupling reaction with styrenes”
20. Mikołaj Chromiński “Thioamides as effective organocatalysts for the direct asymmetric aldol reaction”

1st Annual World Congress of Asymmetric Synthesis 2010, Pekin (Chiny), 19-21 maja 2010

Wykład:

21. J. Młynarski “Synthetic Applications of Direct Asymmetric Aldol Reactions in Water”

IIIrd International Mini-Symposium Advances in Organocatalysis and Related Problems, May 25th 2010 Łódź

Wykład:

22. Z. Kałuża “Synthesis of Alkaloid-like Ligands and their Application in Asymmetric Catalysis”.

23. Dorota Gryko, "L-Prolinethioamides – efficient organocatalysts for the direct asymmetric aldol reaction".

FEBS/IUBMB Workshop, Spetses, Grecja, 19-24.06.2010

Poster:

24. M. Kania, K. Skorupińska–Tudek, M. Wojtas, E. Świeżewska, W. Danikiewicz "Atmospheric pressure photoionization mass spectrometry as the valuable method for identification of polyisoprenoid alcohols in natural samples".

11th Tetrahedron Symposium - Frontiers of Organic Chemistry, 22 - 25 czerwiec 2010, Pekin, Chiny

Poster:

25. B. Zambroń „Alkylations of nucleophilic arenes using four-membered acyliminium cations. A new entry to monocyclic 4-aryl-azetidinones”

26. B. Furman "Straightforward Methodology for the Stereoselective Synthesis of Benzo[a]- and Indolo[2,3-a]quinolizidines”

Gordon Research Conference – Heterocyclic compounds, Newport, USA, 20.06 – 25.06.2010

Poster:

27. Dorota Gryko, E. Martin, J. L. Sessler, 'Synthesis and biological activity of hybrid molecule comprising of porphyrin and factor B'.

6th Biannual Balticum Organicum Syntheticum, 27-30.06.2010 Ryga, Łotwa

Poster:

28. S. Mięśowicz, W. Chaładaj, J. Jurczak "Oxo-Diels-Alder Reaction of Danishefsky's Diene with Aldehydes, Catalyzed by Chiral Tridentate Chromium(III)-Schiff Base Complexes”

29. J. Majer, P. Kwiatkowski, J. Jurczak "Asymmetric Friedel-Crafts reaction of pyrroles with butyl gloxylate”

30. W. Chaładaj, J. Jurczak "Origin of the asymmetric induction in metallosalen-catalyzed reactions of aldehydes”

31. P. Kwiatkowski „Organocatalytic Michael reaction under high pressure: synthesis of gamma-nitroketones with a quaternary stereogenic centers”

32. K. Dudziński, P. Kwiatkowski „Effect of pressure in organocatalytic reaction of indoles with beta,beta-disubstituted nitroalkenes”

33. D. Łyżwa, P. Kwiatkowski „Enones in organocatalytic Friedel-Crafts reaction under high pressure”

34. A. Osuch-Kwiatkowska, S. Jarosz, Stereoselective Approach to C₁₂ Carbocyclic Derivatives from Sugar Precursors

6th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (Santa Ana, USA), lipiec 2010

Wykład:

35. D. T. Gryko, 'Meso-substituted corroles – from synthesis to spectroscopy and photophysics'.

A WorldWide Magnetic Resonance Conference, Florence, July 4-9, 2010, Joint EUROMAR 2010 and 17th ISMAR Conference

Wykład:

36. K. Jackowski, M. Jaszński, M. Wilczek, NMR shielding constants and nuclear magnetic moments - ab initio methods of quantum chemistry and experiment

17th International Symposium on Homogeneous Catalysis, Poznań 4-9 lipiec 2010

Wykład:

37. K. Grela "Olefin metathesis: new catalysts or new conditions?"

Poster:

38. M. Śnieżek „1,3-Dipolar cycloaddition of sugar derivatives esters or lactones with diaryl”.

39. A. Mames "An entry to carbapenamams via asymmetric kinugasa reaction involving cyclic nirtones and terminal acetylenes"

40. P. Szcześniak "Chiral cyclic imines as building block in the synthesis of indolizidines"

41. R. Gawin, "Ruthenium metathesis catalysts bearing chelating carboxylate ligands"

42. T. Wdowik, Cezary Samojłowicz, Magdalena Jawiczuk, Andrzej Zarecki, Karol Grela „Cross metathesis with α,ω -nitroolefines”

43. J. Czaban, K. Leszczyńska, R. Krischnan, G. Gerritsen, H. Siddique, K. Grela "Making Olefin Metathesis POSS-ible. Preparation of POSSTM bearing Ru-catalyst for continuous and multi-batch processes"

44. K. Żukowska, A. Szadkowska, K. Grela „New Thermally Switchable Olefin Metathesis Initiators”

45. P. Kwiatkowski, K. Dudziński, D. Łyżwa „Organocatalytic Michael Reaction under High Pressure: Asymmetric Synthesis of gamma-Nitroketones with a Quaternary Stereogenic Centers”

46. J. Majer, P. Kwiatkowski, J. Jurczak "Asymmetric Friedel-Crafts reaction of pyrroles with butyl gloxylate"

47. W. Chaładaj, J. Jurczak "Origin of the asymmetric induction in metallosalen-catalyzed reactions of aldehydes"

12th Belgian Organic Synthesis Symposium (Namur, Belgium), 11-16 lipiec 2010.

Poster:

48. O. Vakuliuk "t-BuOLi can alone promote the direct arylation of pyrrole derivatives".

49. J. Piechowska 'Strongly emitting fluorophores based on 1-azaperylene scaffold'.

50. Z. Pakulski, M. Piekutowska-Głaszczka, P. Sawalich, Anomeric thiocyanates as starting materials for the synthesis of novel type of glycosyl donors

MOLMAT 2010 Conference, July 5-8, 2010, Montpellier, Francja

Poster:

51. R. Ostaszewski, Sz. Kłossowski, D. Koszelewski "Application of Ugi Multicomponent Reaction to the Synthesis of Luminescence Materials".

JOINT EUROMAR and 17th ISMAR Conference, Florence, Italy 5-10 July 2010.

Poster:

52. K. Hyz , W. Bocian, R. Kawęcki, E. Bednarek, J. Sitkowski, L. Kozerski „A dumbbell double nicked duplex dodecamer DNA with PEG6 tether”

23rd International Liquid Crystal Conference , 11-16 July 2010, Kraków, Poland.

Poster:

53. J. Grolik, J. Eilmes, J. Frelek, B. Donnio, D. Guillon □ "Synthesis and properties of new chiral liquid crystalline dibenzotetraaza[14]annulenes".

XXIII IUPAC Symposium on Photochemistry (Ferrara, Włochy), 11-16 lipiec 2010.

Poster:

54. R. Voloshchuk, "Solvent polarity effect on intramolecular electron transfer in a corrole-naphthalene bisimide dyad".

22nd International Symposium on Chirality, Chirality2010, July 12 – 15, 2010, Sapporo, Japan.

Wykład:

55. J. Frelek "Circular dichroism spectroscopy as a valuable tool in stereochemical studies of bioactive compounds" –

XVI European Symposium on Fluorine Chemistry, 18-23.07.2010, Ljubiana, Slovenia.

Poster:

56. W. Dmowski, Z. Urbanczyk-Lipkowska, K. Maciejewska: Unique sodium dithionite initiated coupling of CF₃CHClBr with aromatics, synthesis and structure of trifluoromethyl-bis(aryl)methanes.

IVth International Conference CBC-2010 "Modern Aspects of Chemistry of Heterocycles" sierpień, 2010 r., Sankt-Petersburg, Rosja

Wykład:

57. M. Mąkosza, R. Loska „Synthesis of perfluoroalkyl heterocycles *via* nucleophilic substitution of hydrogen”

18th International Conference on Organic Synthesis, Norwegia, Bergen, 1-6 sierpnia 2010

Wykład:

58. K. Grela “Motivational tools in challenging olefin metathesis reactions”

Poster:

59. A. Szadkowska, R. Kadyrov, K. Grela "Exploring Potentiality of Ruthenium Catalysts Based on Sulfur Moiety"

60. K. Żukowska, A. Szadkowska, K. Grela „New Thermally Switchable Olefin Metathesis Initiators”

61. J. Czaban, K. Leszczyńska, R. Krischnan, G. Gerritsen, H. Siddique, K. Grela "Making Olefin Metathesis POSS-ible. Preparation of POSSTM bearing Ru-catalyst for continuous and multi-batch processes"

62. A. Kajetanowicz, E. Abbenhuis, G. Gerritsen, K. Grela “POSS-itive results in synthesis of new POSSTM bearing metathesis catalysts for continuous and multi-batch processes”

63. A. Nowak-Król 'Substituted porphyrins: no longer just a solid'.

64. R. Ćwiek, Z. Kałuża: “Synthesis of Novel C₂-Symmetric Piperazines and their Application in Desymmetrization of meso-1,2-diols”

66. R. A. Loska, ‘Bioconjugates of Protoporphyrin IX and Vitamin B₁₂ as Drug Candidates for Treatment of Hypertension’.

67. M. Magdycz, S. Jarosz; Stereoselective synthesis of highly oxygenated heterocyclic compound from sugar allyl tin derivatives

68. A. Osuch-Kwiatkowska, S. Jarosz, Stereoselective Approach to C₁₂ Carbocyclic Derivatives from Sugar Precursors

69. M. A. Potopnyk, B. Lewandowski, S. Jarosz, New sucrose macrocycle, 18th International Conference on Organic Synthesis

240th ACS National Meeting & Exposition Boston, on August 22-26 2010.

Poster:

70. R. Ostaszewski, M. Mroczkiewicz, S. Kłossowski “Chemoenzymatic approach to the synthesis of bioactive tripeptide mimetics for treatment of cancer”

XXIVth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry (Wiedeń, Austria), 23-27 sierpień 2010.

Poster:

71. J. Klajn, 'Unprecedented 1,3-Dipolar Cycloaddition: From 1,4,5,8-Naphtalene Bisimides to a New Heterocyclic Skeleton'.

3rd EuCheMS Chemistry Congress (Norymberga, Niemcy), 29.08.-02.09.2010.

Poster:

72. O. Vakuliuk, "t-BuOLi can alone promote the direct arylation of pyrrole derivatives".

73. A. Butkiewicz, J. Frelek, R. K. Wojcieszczyk, W. J. Szczepek "Synthesis, structure and chiroptical properties of steroidal cisoid enones.

74. J. Frelek, M. Woźnica "Structure \square optical and biological activity relationship of penicillin carbaanalogues – the experimental and theoretical study"

75. M. Karchier, J. Wicha "A New Rearrangement of 2,3-Epoxy Alcohols Dimethylthiocarbamate Derivatives. Synthesis of 2,3-Epithio Alcohols Derivatives".

76. A. Wóltanska, M. Cwiklak, R. Ostaszewski, „Studies of the Application of enzymes to the Stereoselective Synthesis of 3-phenyl-4-pentenoic acid”;

77. S. Kłossowski, I. Ziuzia, A. Szokalska, M. Swiech, J. Gołąb, R. Ostaszewski “Synthesis and biological evaluation of new thioredoxin inhibitors”

78. M. A. Potopnyk, B. Lewandowski, S. Jarosz, “Synthesis of new sucrose macrocycle”

79. M. Magdycz, S. Jarosz “Stereoselective synthesis of highly oxygenated heterocyclic compound from sugar allyltin derivatives”

XVth International Workshop On Quantum Atomic And Molecular Tunneling In Solids And Other Condensed Phases, Darmstadt (Germany), September 5-9, 2010

Poster:

80. S. Szymański "Monte-Carlo simulations of damped quantum rotation effects in NMR spectra"

31st European Peptide Symposium, 5-9 Sept. 2010, Copenhagen, Danmark.

Poster:

81. M. Sowińska, A. Lesniak, A. W. Lipkowski, Z. Urbanczyk-Lipkowska, Dendrimeric peptides with affinity to opioid receptors – complexation studies

VIth Symposium on Nuclear Magnetic Resonance in Chemistry, Physics and Biological Sciences, Warszawa, 22-24 września 2010 r.

Wykład:

82. S. Szymański "Monte-Carlo simulations of damped quantum rotation effects in NMR spectra"

83. J. Frelek \square "Dirhodium tetraacetate as an auxiliary chromophore in chiroptical studies on *vic*-amino alcohols"

84. J. Jaźwiński Adducts of dimeric thodium (II) salts with organic ligands in the solution and solid phase: a nuclear magnetic resonance study

Poster:

85. K. Płońska-Ocypa, I. Sibilska, W. Sicińska, H. F. DeLuca, R. R. Siciński ¹H NMR as a tool for configurational and conformational assignment of the intermediates and the final products in the synthesis of 2-methylene-19-norvitamin D analogs"

86. H. Dodziuk, S. Szymański, J. Jaźwiński, T.B. Demissie, H. Hopf, "Dynamic NMR spectra and accurate chemical shifts and coupling constants of [2.3]Paracyclophane"

87. J. Jaźwiński, R. Głaszczka Adducts of dirhodium(II) tetraacylates with derivatives of selenomethionine – nuclear magnetic resonance studies

88. J. Nowicka-Scheibe, W. Schilf, W. Sawka-Dobrowolska, J. Sośnicki Synthesis of cis-3-(benzoxazol-2-yl)-cyclopentanecarboxylic acid from D,L-camphorquinone and o-aminophenols *via* oxidative ring opening. Study of the reaction pathway by NMR spectroscopy

The 20th International Conference on Physical Organic Chemistry, 22-28.09.2010, Busan, Republika Korei

Poster:

89. F. Ulatowski, J. Jurczak "Chiral recognition of carboxylate anions by hybrid pyrrole-aminoacid host molecules",

8th International Congress of Young Chemists "YoungChem2010", Polska, Reda, 6-10 października 2010

Wykład:

90. K. Grela "Olefin metathesis: new catalysts or new conditions?"

Komunikat:

91. C. Samojłowicz, M. Bieniek, K. Grela „The Doping Effect of Fluorinated Aromatic Solvent on the Rate of Ruthenium Catalyzed Olefin Metathesis”

92. M. Chromiński, ‘ „Click” approach towards molecular hybrids of vitamin B₁₂ and protoporphyrin IX – in search of new NO free drugs for heart diseases’

Poster:

93. T. Wdowik, C. Samojłowicz, M. Jawiczuk, A. Zarecki, K. Grela „Olefin Cross-Metathesis with 3-Nitropropene”

November 1 - 3, 2010, ANAL & BIOANAL 2010: International Conference and Exhibition on Analytical and BioAnalytical Techniques: Pharmaceutical R & D Summit, Hyderabad, India

Wykład:

94. J. Frelek, "Structure Elucidation of Bioactive Compounds by means of Circular Dichroism Spectroscopy".

International Symposium on Antimicrobial Research 3-5 Nov. 2010. Valladolid. Spain.

Wykład:

95. M. Sowinska, P. Polcyn, P. Zielińska, A. M. Rajnisz, J. Solecka, Z. Urbanczyk-Lipkowska "Amphiphilic dendrimeric peptides with affinity to bacterial membranes – polyvalency vs. selectivity.

8th Symposium on Chemical Approach to Chirality 2010, Tokio (Japonia), 1 grudnia 2010

Wykład:

96. J. Młynarski "Synthetic Applications of Direct Asymmetric Aldol Reactions in Water"

XVIIth INTERNATIONAL WINTER SCHOOL ON COORDINATION CHEMISTRY, Karpacz, 6–10 grudzień 2010

Wykład:

97. B. Korybut-Daszkiewicz "Macrocyclic metal complexes as building blocks of molecular devices".

Poster:

98. K. Suracka, A. Bieńko, J. Mroziński, R. Kruszyński, B. Korybut-Daszkiewicz, "Heterometallic, Ferrimagnetic Molecular Nanomagnet of Cu(II) and Cr(III)"

Pacificchem 2010 -International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, Honolulu, USA

Wykład:

99. Janusz Jurczak "Neutral anion receptors effective in highly competitive solvents"

KONFERENCJE KRAJOWE

VII Warszawskie Seminarium Doktorantów Chemików ChemSession'10 (Warszawa, Polska).

Poster:

100. Agnieszka Nowak-Król, „Liquid porfirins – no longer just a solid“

101. Sabina Pisarek, 'Design and synthesis of protoporphyrin IX derivatives for no-free regulation of sGC enzyme'.

102. Sylwester Kurcoń, 'Selective modification of hydrophobic vitamin B₁₂ derivatives'.

103. Dominika Pielacińska, 'Design and synthesis of protoporphyrin IX derivatives for NO-free regulation of sGC enzyme'.

104. Anita Kożuch, 'Połączenia witaminy B₁₂ I protoporfiryny IX jako związki o potencjalnym znaczeniu terapeutycznym'.

105. Mikołaj Chromiński, Katarzyna Osytek, 'Synteza hybryd witaminy B₁₂ i protoporfiryny IX jako potencjalnych aktywatorów cyklazy'

106. M. Cieplak, S. Jarosz, Synteza związków polihydroksylowych o długich łańcuchach

XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, „Nowe procesy katalityczne” 15-17.03.2010 Kraków

Komunikat:

107. P. T. Wierzchowski, „Badanie reakcji inicjujących autoutlenienie cykloheksanu”

II Konferencja Polskiego Towarzystwa Spektrometrii Mas, Poznań, 24-26.03.2010 r

Poster:

108. B. Słomińska, W. Danikiewicz, B. Korybut-Daszkiewicz “Studies on tetraazamacrocycles by mass spectrometry techniques”

109. B. Wileńska, P. Świder, W. Danikiewicz “Application of the DFT methods for modeling of the gas phase reaction paths”

VII Multidyscyplinarna Konferencja Nauki o Leku, Zakopane, 10-12 maj 2010

Wykład:

110. M. Chmielewski, "From unsaturated sugar α,β -lactones to β -lactams. The synthesis. Od α,β -nienasyconych laktonów cukrowych do syntezy β -laktamów” B. Furman „Cykliczne enaminy jako bloki budulcowe w syntezie związków naturalnych i biologicznie czynnych”
112. K. Grela „Metateza olefin jako nowe narzędzie w syntezie związków bioaktywnych”

113. Z. Lipkowska, P. Polcyn, P. Zielińska, A. M. Rajnisz, J. Solecka „Design of novel peptide dendrimers: antimicrobial and anticancer activity”.

114. L. Kozerski „Zastosowanie DOSY NMR w badaniach naukowych i kontroli leków”

115. R. Ostaszewski, M. Mroczkiewicz, Sz. Kłossowski „Chemoenzymatic approach to the synthesis of bioactive tripeptide mimetics for treatment of cancer”

Komuniakt:

116. A. Koziol, B. Furman, M. Chmielewski, “An asymmetric synthesis of 4-aryloxyazetidines and 3,4-benzo-2-hydroxycephams”

117. Z. Kałuża „Stereoselektywna synteza alkaloidów izochinolinowych zawierających centrum stereogeniczne na czwartorzędowym atomie węgla”

Poster:

118. M. Soluch "A Novel Method for the Synthesis of Ezetimibe Precursor"

119. A. Mames "An entry to carbapenams via asymmetric Kinugasa reaction involving cyclic nitrones and terminal acetylenes"

120. P. Szcześniak „Nowa metoda syntezy Benzochinolizydyn”

121. M. Soluch "Straightforward Methodology for the Stereoselective Synthesis of Benzo[a]- and Indolo[2,3-a]quinolizidines"

122. J. Dyniewicz, Z. Urbanczyk-Lipkowska, A. W. Lipkowski, Development of dendrimeric somatostatin analogues
123. M. Sowińska, Anna Lesniak, A. W. Lipkowski, Z. Urbanczyk-Lipkowska, Dendrimeric peptides with affinity to opioid receptors – complexation properties
124. J. Janiszewska, J. Solecka, A. Rajnisz, Z. Urbańczyk-Lipkowska, Basic low molecular weight dendrimeric peptides designed for better membrane recognition
125. Sz. Kłossowski, I. Ziuzia, A. Szokalska, M. Swiech, J. Gołąb, R. Ostaszewski, „Synteza oraz badania biologiczne układu tioredoksyna – reduktaza tioredoksyny”

Sympozjum PTBioch i PTChem, (UW Warszawa) 22.05.2010

Wykład:

126. S. Jarosz, Chemia sacharozy, czyli co można zrobić ze zwykłego cukru

ChemoFor , Warszawa, 25.05.10

Poster:

127. A. Kozuch, ‘Połączenia witaminy B₁₂ I protoporfiryny IX jako związki o potencjalnym znaczeniu terapeutycznym’.
128. M. Chromiński, K. Osytek, ‘Synteza hybryd witaminy B₁₂ i protoporfiryny IX jako potencjalnych aktywatorów cyklazy’.

52 Konwersatorium Krystalograficzne, 24-26.06.2010, Wrocław.

Wykład:

129. P. Kalicki, Z. Urbańczyk-Lipkowska, M. Yokoyama, K. Tanaka „Dwie formy 1,4-bis(1.3-dioxo –2-indenylideno)cykloheksanu: własności termo- i fotochromowe”.

Poster:

130. W. Wysocki, D. Matosiuk, Z. Karczmarzyk, M. Rządowska, E. Szacoń, P. Kalicki, Z. Urbańczyk-Lipkowska: Synteza i struktura 1-(3,4-dichlorofenilo)-6-fenilo-7-hydroksy-2,3-dihydro-1*H*-imidazo[1,2- α]pirymidyn-5-onu

Kryształy Molekularne (Polanica Zdrój), wrzesień 2010

Wykład:

131. D. T. Gryko, ‘Mezo-podstawione korole – od syntezy i spektroskopii do fotofizyki’,

53 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego – Gliwice, Polska, wrzesień 2010.

Wykład:

132. R. Ostaszewski „Zastosowanie enzymów do syntezy związków o wysokiej aktywności biologicznej”.

133. Z. Urbańczyk-Lipkowska, M. Sowińska, P. Zielińska, J. Janiszewska, A. Rajnisz, J. Solecka „Synteza i własności biologiczne nowych amfifilowych związków dendrymerycznych”

Poster:

134. S. Kłossowski, R. Ostaszewski „Nowy pomocnik chiralny w diastereoselektywnej reakcji Ugi’ego”

45th Meeting of the Polish Biochemical Society, Wisła, 20-23 wrzesień 2010

Poster:

135. K. Gawarecka, E. Ciepichał-Głodowska, E. Kaczorowska, M. Kania, W. Danikiewicz, E. Świeżewska „Studies on the role of prenyl lipids in formation of DNA adducts”.

V Seminarium - Postępy w Syntezie Związków Nieracemicznych, Kudowa Zdrój (Polska), 13-16 października 2010

Wykład:

136. J. Młynarski „Asymetryczna reakcja aldolowa w wodzie“

137. J. Wicha "Badania nad syntezą totalną terpenoidów o trójcyklicznym szkielecie węglowym 5-8-5"

138. P. Kwiatkowski, K. Dudziński, D. Łyżwa, Ł. Weseliński „Wpływ wysokiego ciśnienia na trudne reakcje organokatalityczne”

139. J. Jurczak „Pochodne pirolu i benzopirolu jako efektywne receptory anionów: Czy będą one skuteczne także w rozpoznaniu chiralnym?”

Komunikat:

140. Z. Kałuża. „Synteza enancjomerycznie czystych diaminy i ich zastosowanie w symetrycznej katalizie”

141. W. Chaładaj, J. Jurczak "Enancjoselektywna synteza cis-2,6-dipodstawionych dihydropirany. Synteza totalna (-)-centrolobiny i innych związków biologicznie aktywnych."

142. Ł. J. Weseliński, E. Słyk, J. Jurczak "Hybrydowe diaminy jako organokatalizatory 1,3-dipolarnej cykloaddycji nitronów"

Mini-Symposium „Złoty Jubileusz Katalizy Międzyfazowej” Warszawa, grudzień 2010

Wykład:

143. K. Wojciechowski – „Indole, oksindole, benzosultamy..... z elementami katalizy międzyfazowej”

XLIII Ogólnopolskie Seminarium na Temat Magnetycznego Rezonansu Jądrowego i Jego Zastosowań, Kraków 1-2.12.2010

Wykład:

144. R. Głaszczka, J. Jaźwiński Badanie metodami NMR kompleksów N-tlenków związków heteroaromatycznych z dimerycznymi solami rodu(II)

Poster:

145. H. Dodziuk, S. Szymański, J. Jaźwiński, M. E. Marchwiany, H. Hopf, "Dynamic Nuclear Magnetic Resonance Spectra and Accurate Chemical Shifts and Coupling Constants of [3.3]Paracyclophane"

Konferencja Ministra Zdrowia i Państwowej Inspekcji Sanitarnej, Dopalacze – nowe wyzwania dla skutecznego działania instytucji publicznych Warszawa 8.12.2010

Wykład:

146. L. Kozerski, Identyfikacja czynnych składników chemicznych dopalaczy metodą NMR

Wykłady wygłoszone zagranicą na zaproszenie instytucji naukowych:

Pracownicy IChO PAN wygłosili szereg wykładów w placówkach zagranicznych takich jak:

Zurich University (prof. Karol Grela), Firmenich SA (prof. Karol Grela), École Polytechnique Fédérale de Lausanne (prof. Karol Grela), Université d'Orleans (prof. Jacek Młynarski), Université du Maine (prof. Jacek Młynarski), Institut de Chimie Moléculaire de Reims (ICMR, prof. Jacek Młynarski), The University of Tokyo (prof. Jacek Młynarski), Kangwoon University, (Korea Płd., Daniel T. Gryko), Korea University (Daniel T. Gryko), Kyoto University (Daniel T. Gryko), Tohoku University (Daniel T. Gryko), Johns Hopkins University (Daniel T. Gryko).

Wykłady wygłoszone w Polsce na zaproszenie instytucji naukowych:

Pracownicy IChO PAN wygłosili również wykłady w polskich placówkach naukowych:

Uniwersytet Śląski (prof. Witold Danikiewicz), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Oddział Warszawski (prof. Dorota Gryko).