

**SPRAWOZDANIE**  
**Z DZIAŁALNOŚCI NAUKOWO-BADAWCZEJ**  
**INSTYTUTU CHEMII ORGANICZNEJ PAN**  
**ZA ROK 2012**

Rok 2012 był rokiem niewątpliwych osiągnięć naukowych i organizacyjnych Instytutu, a działalność pracowników IChO PAN przyniosła Instytutowi i im samym wiele wyróżnień i zaszczytów. Największym z nich było przyznanie profesorowi Mieczysławowi Mąkoszy Nagrody Fundacji Nauki Polskiej za opracowanie i wprowadzenie do kanonu chemii organicznej nowej reakcji – Zastępczego Podstawienia Nukleofilowego (*Vicarious Nucleophilic Substitution; VNS*). Uroczystość wręczenia Nagrody odbyła się 6 grudnia 2012 roku na Zamku Królewskim w Warszawie w obecności Prezydenta Rzeczypospolitej Polskiej Bronisława Komorowskiego i Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego prof. Barbary Kudryckiej. Bardzo znaczące nagrody otrzymali także inni pracownicy Instytutu: profesor Janusz Jurczak otrzymał Nagrodę Prezesa Rady Ministrów za wybitny dorobek naukowy, dr hab. prof. nadzw. Agnieszka Szumna otrzymała Nagrodę Prezesa Rady Ministrów za swoją rozprawę habilitacyjną, a prof. Daniel T. Gryko został laureatem Nagrody Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego za wybitne osiągnięcia naukowe.

Kadra naukowa Instytutu wzbogaciła się o jednego profesora tytularnego. Został nim dr hab. Jacek Młynarski.

Do niewątpliwych osiągnięć należy także zaliczyć otrzymanie przez prof. Karola Grełę bardzo prestiżowego grantu „Maestro”, przyznawanego przez Narodowe Centrum Nauki najwybitniejszym naukowcom. Prof. Janusz Jurczak, który otrzymał ten grant w roku ubiegłym, w tym roku zainauguował prace w jego ramach.

W roku 2012 powołano jeden nowy zespół naukowy. Otrzymał on numer IX, a jego kierownikiem została dr hab. Agnieszka Szumna. Tematyką badań zespołu jest rozpoznanie molekularne.

Bardzo znaczącym osiągnięciem Instytutu było uzyskanie aż czterech tzw. „Diamentowych grantów” przez studentów, którzy wskazali Instytut jako miejsce wykonywania swojej pracy doktorskiej. Jest to zdecydowanie najlepszy jednostkowy wynik w skali całego kraju. Więcej informacji na temat znajduje się na str. 3.

Rok 2012 upłynął w Instytucie Chemii Organicznej PAN pod znakiem pewnej stabilizacji finansowej. Dotacja na działalność statutową została początkowo przyznana w wysokości znacznie obniżonej w stosunku do roku ubiegłego, ale (po interwencjach środowiska naukowego) została ostatecznie zwiększona i osiągnęła poziom porównywalny z ubiegłorocznym.

Dzięki grantom POIG uzyskanym przez Instytut w latach ubiegłych, a także środkom uzyskiwanym w kolejnych konkursach na projekty badawcze NCN, FNP, MNiSW i innych instytucji, Instytut mógł w roku 2012 prowadzić badania na bardzo wysokim poziomie. Znalazło to odzwierciedlenie w znaczącym wzroście liczby publikacji naukowych, w tym prac publikowanych w wiodących czasopismach o bardzo wysokich wartościach współczynnika wpływu (IF).

W roku 2012 kontynuowano 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*” realizowany przez konsorcjum, którego liderem 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. 25). W skład konsorcjum wchodzi IChO PAN (lider), Instytut Chemii Fizycznej PAN, Politechnika Warszawska, Uniwersytet Gdański, Uniwersytet Łódzki i Politechnika Śląska.

Następne projekty, których beneficjentem jest IChO PAN to:

- Projekt rozwojowy: „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 jest we współpracy z Narodowym Instytutem Zdrowia Publicznego – Państwowym Zakładem Higieny.
- „Opracowanie syntezy substancji farmaceutycznej ezetymibu – selektywnego inhibitora wchłaniania cholesterolu”, realizowany w ramach inicjatywy „INITECH” (kierownik projektu: prof. Marek Chmielewski; projekt zakończony w roku 2012).
- „Zastosowanie farmaceutyczne związków dendrymerycznych zawierających aminokwasy” (kierownik projektu: prof. Zofia Lipkowska).
- „Zastosowanie innowacyjnych metod immobilizacji esterazy lowastatyny do syntezy symwastatyny” (kierownik projektu: prof. Ryszard Ostaszewski).
- „Nowe syntetyczne słodziki i inhibitory słodkiego smaku” (kierownik projektu: prof. Marek Chmielewski).

Kolejne projekty, które IChO PAN realizuje w ramach POIG jako członek konsorcjum, to koordynowane przez 1). Politechnikę Wrocławską: „Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym” (kierownik projektu w IChO PAN: prof. Ryszard Ostaszewski), 2). 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 3). 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). Kolejny projekt to: „Repozytorium Cyfrowe Instytutów Naukowych” (kierownik projektu w IChO: dr Piotr Lipkowski), którego liderem jest Muzeum i Instytut Zoologii PAN.

W roku 2012 został zrealizowany zakup dwóch spektrometrów mas o wysokiej zdolności rozdzielczej, wykorzystujących różne metody jonizacji, pozwalające na wykonanie pomiarów dla praktycznie wszystkich klas związków organicznych. Środki na ten zakup w wysokości 4,7 mln zł zostały przyznane w roku 2011. Zakupione w wyniku przeprowadzonego przetargu przyrządy zostały uruchomione w maju 2012 roku i bardzo znacząco zwiększyły możliwości pomiarowe Laboratorium Spektrometrii Mas Instytutu.

W roku 2012 Instytut zorganizował trzy konferencje naukowe:

1. VIII Polsko-Koreańskie Sympozjum Chemii Organicznej (8th Korea – Poland Joint Symposium on Organic Synthesis), Uniwersytet w Białymstoku, Instytut Chemii, Białystok, 8 - 9.05.2012 r. (zorganizowana wspólnie z Instytutem Chemii UW B).
2. VII Sympozjum „Nuclear Magnetic Resonance in Chemistry, Physics and Biological Sciences”, Instytut Chemii Organicznej PAN, Warszawa, 26-28.09.2012 r.
3. Mikrosympozjum „Renewable Raw Materials in Organic Synthesis”, Instytut Chemii Organicznej PAN, Warszawa, 19.10.2012 r.

Dokładniejsze omówienie wszystkich konferencji znajduje się na str. 12.

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.

W roku 2012 po raz pierwszy odbył się konkurs w ramach programu MNiSW o nazwie „Diamentowe Granty”. Program jest skierowany do młodych ludzi, którzy już na studiach prowadzą badania naukowe. Celem programu jest umożliwienie wcześniejszego rozpoczęcia pracy doktorskiej, jeszcze przed uzyskaniem dyplomu magistra, co ma ułatwić wybitnie uzdolnionym studentom szybsze wejście na drogę kariery naukowej. Zgodnie z założeniami programu, „Diamentowe Granty” będzie otrzymywać co roku 100 najlepszych studentów wszystkich specjalności, jest to więc program bardzo elitarny. Naszym powodem do dumy jest fakt, że aż cztery granty otrzymali studenci, którzy swoje studia doktoranckie mieli zamiar odbywać w IChO PAN i zostali do konkursu zgłoszeni przez Instytut. Są to:

Maciej Giedyk, student Wydziału Chemicznego Politechniki Warszawskiej (*opiekun naukowy dr hab. Dorota Gryko*),

Dawid Lichosyć, student Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego (*opiekun naukowy prof. Janusz Jurczak*),

Adam Michał Trawczyński, student Wydziału Chemicznego Politechniki Warszawskiej (*opiekun naukowy dr hab. Zbigniew Wróbel*),

Karolina Żukowska, studentka Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego (*opiekun naukowy prof. Karol Grela*).

Osoby te rozpoczęły w roku 2102 wykonywanie swoich prac doktorskich w zespołach IChO, z czego trzy z nich – po obronieniu pracy dyplomowej – już jako pełnoprawni doktoranci.

Żadna inna jednostka organizacyjna (instytut lub wydział) nie może poszczycić się taką liczbą przyznanych „Diamentowych Grantów”. Świadczy to najlepiej o bardzo wysokim poziomie naukowym reprezentowanym przez nasz Instytut, a zwłaszcza wyjątkowej pozycji Studium Doktoranckiego IChO PAN.

6 października 2012 r. został przeprowadzony konkursowy egzamin na Studia Doktoranckie IChO PAN, na podstawie którego na Studium zakwalifikowano 14 osób (spośród 24 kandydatów).

#### ***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 104 zadań badawczych (43 statutowych, 61 grantowych), w których uczestniczyły 21 zespołów badawcze.

Od początku roku ogłoszono drukiem **102** publikacje, w tym **86** prac w czasopismach z Listy Filadelfijskiej, **12** prac monograficznych i przeglądowych w wydawnictwach książkowych i periodycznych spoza tej listy, a także **4** prace oryginalne w innych czasopismach recenzo-

wanych spoza w/w listy. Ponadto opublikowano 5 prac o innym charakterze. Dalsze 31 publikacji zostało zaakceptowanych do druku w roku 2013. Zaprezentowano **127** referatów i komunikatów na międzynarodowych zjazdach i konferencjach naukowych (w tym **25** wykładów na zaproszenie organizatorów) oraz **60** – na imprezach krajowych (w tym **16** wykładów na zaproszenie). Uzyskano **6** patentów (w tym 2 międzynarodowe) oraz zgłoszono **4** wnioski patentowe (w tym 2 międzynarodowe).

Tak jak i w latach poprzednich, zdecydowana większość prac została opublikowana w najlepszych czasopismach publikujących prace nie tylko z chemii organicznej, ale innych gałęzi chemii. **Średni IF za rok 2012 wyniósł 3,97**, czyli znacząco więcej niż w roku ubiegłym (**3,11**). Wzrosła także znacząco łączna liczba publikacji (z 92 do 102).

W ciągu roku sprawozdawczego 9 zespołów uzyskało 15 grantów badawczych, w tym 3 w programie Iuventus Plus; 4 Granty Diamentowe; kontynuowano realizację 49 dalszych (w tym 10 z FNP, 1 zagraniczny i 8 z funduszy strukturalnych) indywidualnych projektów badawczych; zakończono 16 grantów (w tym 4 z FNP).

### **Nagrody, wyróżnienia i zaszczyty uzyskane przez pracowników IChO PAN w roku 2012**

W roku 2012 pracownicy Instytutu zostali uhonorowani licznymi nagrodami i wyróżnieniami. Niewątpliwie najważniejszym z nich było przyznanie profesorowi Mieczysławowi Mąkoszy Nagrody Fundacji Nauki Polskiej za opracowanie i wprowadzenie do kanonu chemii organicznej nowej reakcji – Zastępczego Podstawienia Nukleofilowego. Uroczystość wręczenia Nagrody odbyła się 6 grudnia 2012 roku na Zamku Królewskim w Warszawie w obecności Prezydenta Rzeczypospolitej Polskiej Bronisława Komorowskiego i Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego prof. Barbary Kudryckiej. Bardzo znaczące nagrody otrzymali także inni pracownicy Instytutu: profesor Janusz Jurczak otrzymał Nagrodę Prezesa Rady Ministrów za wybitny dorobek naukowy, dr hab. prof. nadzw. Agnieszka Szumna otrzymała Nagrodę Prezesa Rady Ministrów za swoją rozprawę habilitacyjną, a prof. Daniel T. Gryko został laureatem Nagrody Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego za wybitne osiągnięcia naukowe.

Pozostałe nagrody i wyróżnienia:

- Prof. Karol Grela uzyskał prestiżowy grant „Maestro”
- Dr inż. Magdalena Woźnica - Nagroda Prezesa Rady Ministrów za pracę doktorską pt. "Badania strukturalne analogów antybiotyków  $\beta$ -laktamowych przy pomocy dichroizmu kołowego”.
- Prof. Janusz Jurczak - Medal im. Jędrzeja Śniadeckiego, za wybitne osiągnięcia naukowe w chemii (Zarząd Główny Polskiego Towarzystwa Chemicznego).
- Cezary Samojłowicz - Stypendium dla młodych uczonych START 2012 (Fundacja na Rzecz Nauki Polskiej).
- Prof. Janusz Jurczak - Nagroda Dydaktyczna im. Arkadiusza Piekary 2012, za wykłady z chemii organicznej (Rada Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego).
- Prof. Janusz Jurczak - Medal Okolicznościowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, za wybitny wkład w dziedzinę chemii organicznej oraz za kreowanie pozytywnego wizerunku polskiej chemii i nauk chemicznych (Prezydium Zarządu Głównego Polskiego Towarzystwa Chemicznego).
- Cezary Samojłowicz – był laureatem Mazowieckiego Stypendium Doktoranckiego w edycji 2011/2012, który jest projektem realizowanym przez Samorząd Województwa Mazowieckiego.

- Justyna Czaban i Karolina Żukowska – udział w szkoleniu „ACS Green Workshop” organizowanym przez ASC Green Chemistry Institute we współpracy z firmami DSM, Pfizer oraz GlaxoSmithKline oraz Astra Zeneca, 4-5.10.2012, Geleen, Holandia
- Agnieszka Nowak-Król - Stypendium konferencyjne Fundacji na rzecz Nauki Polskiej przyznawane przez Towarzystwo Naukowe Warszawskie (III edycja konkursu)
- Prof. Zofia Lipkowska - Dyplom Minister Nauki i Szkolnictwa Wyższego za projekt pod nazwą: „Dendrymer peptydowy jako składnik kosmetyków bioaktywnych”.
- Magdalena Jawiczuk - pierwsze miejsce za komunikat pt. "*Kompleksy metali przejściowych jako chromofory pomocnicze w badaniach strukturalnych związków transparentnych w zakresie UV-Vis*" na Seminarium: "Postępy w syntezie związków nieracemicznych, Polanica Zdrój (wyboru laureatów dokonała komisja powołana przez Organizatorów).
- Marcin Górecki: grant konferencyjny ufundowany przez COST CMST Action CM1002 - CODECS: CONvergent Distributed Environment for Computational Spectroscopy, na pokrycie kosztów uczestnictwa w konferencji: VOA3 - "Vibrational Optical Activity: Interplay of Theory and Experiment" w Pizie (Włochy).
- Dr Piotr Cmoch: SREBRNY MEDAL na Międzynarodowej Warszawskiej Wystawie Innowacji IWIS 2012 zorganizowanej przez Stowarzyszenie Polskich Wynalazców i Racjonalizatorów za projekt: „*Synteza i badania biologiczne aminokwasowych i peptydowych pochodnych neokryptolepiny jako nowej klasy związków przeciwnowotworowych*”, K. Sidoryk, M. Świtalska, J. Wietrzyk, A. Jaromin, M. Piętka-Ottlik, P. Cmoch, J. Zagrodzka, W. Szczepek, Ł. Kaczmarek, W. Peczyńska-Czoch.

### Informacja o zatrudnieniu

Z początkiem roku prof. Ryszard Ostaszewski rozpoczął pracę w Instytucie Chemii Przemysłowej im. Prof. I. Mościckiego przenosząc tam swoje uprawnienia związane z I-miejscem zatrudnienia. W związku z powyższym od 1 stycznia do 31 grudnia 2012 jego zatrudnienie w IChO wynosiło  $\frac{3}{4}$  etatu.

W dniu 31.12.2012 r. Instytut zatrudniał 167 osób na 157 etatach. Skład personalny przedstawiał się następująco:

- profesorów	-	13
- prof. nadzw.	-	9
- adiunktów dr hab.	-	-
- adiunktów dr	-	5
- asystentów ze stopniem dr	-	19
- asystentów - doktorantów	-	17
- pracowników inż. ze stopniem dr	-	3
- prac. inż.-techn. i obsługa	-	34
- pracowników biblioteki	-	2
- prac. administracji i obsługi	-	23
- doktorantów niezatrudnionych na etacie	-	42

---

Razem - 167

## DZIAŁALNOŚĆ DYDAKTYCZNA IChO PAN W ROKU 2012

### Studia doktoranckie

W roku 2012 Rada Naukowa IChO nadała stopień naukowy doktora nauk chemicznych 8 osobom. Obroniono też 6 rozpraw doktorskich, ale ze względów czasowych Rada Naukowa rozpatrzy wnioski o nadanie tym osobom stopnia naukowego doktora w roku 2013.

Liczba doktorantów odbywających studia doktoranckie w IChO PAN zmieniała się w ciągu w związku z obronami prac doktorskich i przyjęciem nowych słuchaczy - od 1 listopada 2012 roku 14 nowych doktorantów rozpoczęło studia w Instytucie. W dniu 31.12.2012 r. wynosiła ona 64 osoby. Wśród nowoprzyjętych doktorantów były trzy osoby, które uzyskały „Diamentowy grant”. Czwarą z tych osób nie obroniła jeszcze pracy magisterskiej i na razie wykonuje swoją pracę doktorską poza Studium.

Nowoprzyjęci doktoranci wzięli udział w cyklu jednogodzinnych wykładów wstępnych, które przygotowali: prof. W. Danikiewicz, mgr M. Górecki, prof. S. Jarosz, prof. M. Jaszucki, prof. Z. Lipkowska i dr hab. W. Schilf.

W semestrze zimowym 2011/2012 wykłady na Studium Doktoranckim IChO PAN prowadzili: prof. Witold Danikiewicz (*Zaawansowane metody identyfikacji związków organicznych*) i prof. nadzw. Jarosław Jaźwiński (*Zaawansowane techniki NMR w chemii organicznej*). Natomiast w semestrze letnim: prof. S. Jarosz (*Stereochemia Organiczna*), prof. J. Jurczak (seminarium doktoranckie dla I-roku: *Wybrane zagadnienia współczesnej chemii organicznej*) oraz prof. K. Grela (*Nowoczesne metody syntezy organicznej-II*). Wykłady w semestrze zimowym 2012/2013 prowadzili: prof. M. Mąkosza (*Nowoczesne metody syntezy organicznej-I*) oraz prof. nadzw. B. Furman (*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. Jak co roku, dr hab. W. Schilf prowadził wykłady, szkolenia i konsultacje z własnoręcznej obsługi spektrometrów NMR (ok. 30 godzin).

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

W minionym roku w Instytucie 7 studentów wyższych uczelni (głównie warszawskich) wykonywało prace magisterskie (4) i licencjackie (3), 46 (delegowanych przez uczelnię) odbywało praktyki studenckie, a kolejnych 43 ochotniczo uczestniczyło w pracach badawczych.

### **Działalność dydaktyczna na terenie IChO (z wyłączeniem Studium Doktoranckiego)**

1. G. Spólnik (zespół I): Opieka nad praktykami dwóch studentów z Wydziału Nowych Technologii i Chemii Wojskowej Akademii Technicznej. W okresie od 2 lipca do 10 sierpnia zapoznawali się oni z zastosowaniem spektrometrii mas w chemii w teorii i praktyce.
2. G. Spólnik (zespół I): Przeprowadził szkolenie z wykorzystania spektrometrii mas w analizie związków organicznych ze szczególnym uwzględnieniem preparatów farmaceutycznych dla Pana Jarosława Szulfera z firmy Polpharma S.A.
3. M. Olejnik (zespół I): wygłosił wykład pt. „Zastosowanie Spektrometrii Mas w Chemii Organicznej i Biochemii” dla studentów Uniwersytetu im. Kardynała Stefana Wyszyńskiego (w IChO PAN, 4 godziny, umowa o dzieło).
4. M. Olejnik (zespół I): prowadził ćwiczenia pt. „Chromatografia gazowa ze spektrometrią mas” poświęcone analizie GC-MS produktów nitrowania toluenu dla studentów Uniwersytetu im. Kardynała Stefana Wyszyńskiego (w IChO PAN, 6 godzin, umowa o dzieło).
5. M. Olejnik, G. Spólnik (zespół I): prowadzili wykłady i ćwiczenia w ramach zajęć ze stypendystami Krajowego Funduszu na Rzecz Dzieci.
6. G. Spólnik (zespół I): Praktyki w zespole odbywali uczniowie Technikum Chemicznego przez okres 1 miesiąca, w trakcie których zapoznawali się z funkcjonowaniem laboratorium analitycznego oraz zastosowaniem spektrometrii mas w analizie związków organicznych.
7. B. Furman (zespół II) wykład: „ $\beta$ -Laktamy; nowe metody syntezy, nowe własności farmakologiczne” dla uczestników warsztatów Krajowego Funduszu na rzecz Dzieci.
8. M. Chmielewski wykład: „Historia badań nad penicyliną” dla uczestników warsztatów Krajowego Funduszu na rzecz Dzieci.
9. B. Furman (zespół II): warsztaty dla uczestników warsztatów Krajowego Funduszu na rzecz Dzieci prowadzone przez doktorantów i adiunktów zespołu II.
10. S. Jarosz (zespół II) wykład: „Cukry proste w syntezie związków wykazujących aktywność biologiczną” dla Krajowej Fundacji na Rzecz Dzieci
11. Z. Wróbel (zespół VII): opieka nad wykonaniem pracy magisterskiej inż. Adama Trawczyńskiego (Wydział Chemiczny, PW): „Pochodne 5-nitroindolu w syntezie policyklicznych pochodnych indolu” (umowa o pracę)
12. Z. Wróbel (zespół VII): opieka nad pracą inżynierską p. Michała Więclawa (Wydział Chemiczny, PW) (umowa o pracę)
13. Z. Wróbel (zespół VII): opieka nad pracą magisterską p. Magdaleny Królikiewicz (Wydział Chemii, UW) (umowa o pracę).
14. Z. Wróbel (zespół VII): opieka nad stażystką (lipiec 2012) p. Sylwią Kutylą (Wydział Chemii, UW).
15. Z. Wróbel (zespół VII): opieka nad stażystką (sierpień 2012) p. Anną Dąbrowską (Wydział Chemii, UW).
16. Z. Wróbel (zespół VII): opieka nad stażystką (wrzesień 2012) p. Aleksandrą Grabowską (Wydział Chemii, UW).

17. A. Szumna (zespół IX): zajęcia dla dzieci z Funduszu na Rzecz Dzieci Szczególnie Uzdolnionych (1 godz. wykład + 25 godz. zajęcia indywidualne); opieka nad wykonywaną pracą magisterską (od 01.10.2012, umowa zlecenie z grantu POMOST), opieka nad studentem w ramach programu wymiany ERASMUS (3 miesiące, umowa w ramach ERASMUS)
18. M. Wierzbicki (zespół IX): opieka indywidualna nad praktykantami IV roku roku Chemii (w ramach wolontariatu, 6 godz. /tydzień).
19. Z. Lipkowska (zespół XII): Organizacja Warsztatów Chemicznych w ICHO i opieka nad młodzieżą z Krajowego Funduszu na Rzecz Dzieci (1 tydzień).
20. Z. Lipkowska (zespół XII): „Dendrymery – synteza i ich zastosowania biomedyczne” wykład dla młodzieży Krajowego Funduszu na Rzecz Dzieci.
21. Z. Lipkowska (zespół XII): opieka mgr P. Zielińskiej nad stażem Dominiki Ochotnej z Krajowego Funduszu na Rzecz Dzieci, 1 miesiąc. Opieka zespołu nad 2 uczestnikami warsztatów (1 tydzień).
22. Z. Kałuża (zespół XIV): „Technika pracy i środki bezpieczeństwa w laboratorium chemii organicznej” Warsztaty w Instytucie Chemii Organicznej, organizator: Krajowy Fundusz na rzecz Dzieci, 2-7 grudnia, 2012.
23. J. Kowalski (zespół XV): opieka nad pracą magisterską Pauliny Matusiak, stypendystki programu HOMING PLUS.
24. J. Jaźwiński, M. Bugaj-Wońkiewicz, K. Stępień, W. Schilf (zespół XVI): organizacja praktyk studenckich i opieka nad praktykantami z Wojskowej Akademii Technicznej (2 osoby, 6 tygodni każda).
25. O. Staszewska-Krajewska, B. Kamieński (zespół XVI); koordynator: prof. Zofia Lipkowska (zespół XII): Wykład i prezentacja spektrometrów NMR dla uzdolnionej młodzieży z Krajowego Funduszu na Rzecz Dzieci (3-4.12.2012.): „*Magnetyczny rezonans jądrowy*” (3 godz.)
26. M. Bugaj-Wońkiewicz, K. Stępień (zespół XVI); koordynator: prof. J. Frelek (zespół XIII): Opieka nad praktykantami z Technikum Chemicznego nr 27 im. prof. dr J. Zawadzkiego przy ul. Saskiej 78 w Warszawie (maj 2011) – *nauka podstawowej obsługi aparatu NMR, edycji i interpretacji widm NMR (IChO PAN)*
27. W. Schilf (zespół XVI): wykłady, szkolenia i konsultacje z obsługi spektrometrów NMR (ok. 30 godzin).
28. P. Wierzchowski (zespół XXI): opieka nad praktykantką – studentką Politechniki Warszawskiej (cztery tygodnie).

### **Działalność dydaktyczna poza IChO**

1. W. Danikiewicz: wykład pt. „Zastosowania spektrometrii mas w chemii organicznej i biochemii” dla doktorantów Uniwersytetu im. Mikołaja Kopernika w Toruniu – wykład na terenie Wydziału Chemii UMK w Toruniu, listopad 2012, 15 godzin + egzamin, umowa o dzieło.
2. 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 2012/2013, 2 godziny z 10 (pozostałe 8 godzin w styczniu 2013), umowa o dzieło.
3. B. Furman: Organizacja pokazów w ramach Festiwalu Nauki, Pałac w Jabłonie, 15-16.09.2012.
  4. S. Jarosz: Cukry proste w syntezie związków biologicznie aktywnych; "the chiron approach"; wykład dla doktorantów, Wydział Chemii UW; 2 godziny.
  5. S. Jarosz: Chemia i właściwości cukrów prostych; wykład dla doktorantów, Wydział Chemiczny Politechniki Śląskiej; 4 godziny (umowa o dzieło).
  6. B. Korybut-Daszkiewicz - umowa o pracę, UKSW, wykłady i ćwiczenia z chemii organicznej; ok. 150 godzin.
  7. J. Młynarski: Seminarium magisterskie w Zakładzie Chemii Organicznej Uniwersytetu Jagiellońskiego (15 godzin, umowa o pracę).
  8. J. Młynarski: prowadzenie 4 prac dyplomowych w Zakładzie Chemii Organicznej UJ.
  9. J. Młynarski: prowadzenie 7 prac doktorskich w Zakładzie Chemii Organicznej UJ.
  10. J. Młynarski wykład: „Chemia Organiczna” dla studentów Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego (60 godzin, umowa o pracę).
  11. J. Młynarski: wykład „Chemia Organiczna” dla studentów Wydziału Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii Uniwersytetu Jagiellońskiego (45 godzin, umowa o pracę).
  12. J. Młynarski: wykład „Nowoczesna synteza stereoselektywna” dla studentów Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego (30 godzin, umowa o pracę).
  13. J. Młynarski: wykłady do studentów chemii Université d'Orleans, Institut de Chimique et Analytique (wykład – 12 godzin, kontrakt *visiting professor*).
  14. J. Jurczak: Wydział Chemii – ustawowe pensum dydaktyczne; 180 godzin.
  15. T. Boiński – opieka indywidualna nad praktykantami II roku Nanotechnologii oraz III roku Chemii (10 godz./tydzień). Prowadzenie kółka chemicznego z przygotowaniem do olimpiady chemicznej w Liceum im. Władysława IV w Warszawie (umowa zlecenie).
  16. D.T. Gryko: wykład monograficzny „Chemia koloru” (15 godzin), Wydział Chemiczny Politechniki Warszawskiej (umowa o pracę).
  17. D.T. Gryko: szkoła "Bioinspired Materials for Solar Energy Utilization" finansowana przez LLP Erasmus Intensive Programme (9-21.07.2012 – Heraklion, Grecja). Wykłady dla studentów, 6 godzin.
  18. L. Kozerski: wykład „Wprowadzenie do interpretacji widm NMR związków organicznych” 3 x 4 godz. na Studium Doktoranckim UAM w Poznaniu, 01-02, 2012.
  19. R. Kawęcki: wykłady i ćwiczenia ze studentami Uniwersytet Przyrodniczo Humanistyczny Siedlce, 210 godz.
  20. D. Gryko: *Kobalamina – czy to tylko witamina*, Krajowy Fundusz na rzecz Dzieci, Serock, 27.04.2012, 2h.
  21. J. Jaźwiński: cykl wykładów „Chemia organiczna III/IV” dla studentów Szkoły Nauk Ścisłych Uniwersytetu im. Kardynała Stefana Wyszyńskiego (SNS UKSW) (60 godzin) (umowa o dzieło z UKSW).

22. J. Jaźwiński: koordynacja wykładów oraz wykłady ze spektroskopii NMR, spektroskopii UV/VIS oraz IR dla studentów SNS UKSW (J. Jaźwiński, 6 godzin, M. Bugaj-Wołukaniec 10 godzin). (umowa o dzieło z UKSW).
23. R. Ostaszewski: wykłady Instytut Biotechnologii Wydział Chemiczny PW „Elementy chemii Bioorganicznej” 15 godzin, (umowa o dzieło).
24. R. Ostaszewski: Sesja sprawozdawcza projektu: „Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym” Nr Projektu: POIG.01.03.01-00-158/09, 3-5.12.2012, Łódź.
25. R. Ostaszewski: wykład dla doktorantów P.Śl. „Zastosowanie enzymów do syntezy nieracemicznych związków bioorganicznych” Miłówka, wykład 4 godzinny.
26. Prof. Mieczysław Mąkosza – Akademia im. J. Długosza w Częstochowie – wykłady z chemii organicznej.

### **Warsztaty Chemiczne dla stypendystów Krajowego Funduszu na Rzecz Dzieci**

W dniach 3-7.12.2012 zorganizowano w ICHO PAN kolejną edycję warsztatów chemicznych, w których uczestniczyła grupa 20 stypendystów z klas 1-3 liceum. 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 i bibliotece instytutu. Młodzież włączono w codzienną działalność Instytutu umożliwiając aktywny udział pracach 12 zespołów badawczych. Zajęcia rozpoczynały 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. W roku bieżącym młodzież miała okazję uczestniczyć w wykładzie ogólnoinstytutowym. Nadzór nad zajęciami sprawowała prof. Zofia Lipkowska

### **Praktyki dla uczniów szkół średnich**

Zajęcia 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 2012. Zajęcia prowadziły panie: Alicja Dziedzic i mgr Agata Suszczyńska oraz panowie: dr inż. Michał Karchier i mgr inż. Marcin Górecki, pracownicy Zespołu XIII. Nadzór nad zajęciami sprawowała prof. dr hab. Jadwiga Frelek. W zajęciach aktywnie uczestniczyli również pracownicy innych zespołów: dr Magdalena Zimnicka (Zespół I), dr Marta Bugaj, dr inż. Rafał Głaszcza i mgr Kamila Stępień (wszyscy Zespół XVI) oraz pani Bożena Żak i mgr Ewa Czykiel (obie Zespół XVII).

Zajęcia trwały w sumie 120 godzin.

## **XXI Zimowa Szkoła Nowoczesnej Chemii Organicznej**

Wzorem lat ubiegłych Instytut Chemii Organicznej PAN zorganizował XXI Zimową Szkołę Nowoczesnej Chemii Organicznej. Szkoła odbyła się w dniach 26 lutego - 3 marca 2012 r. w Szczyrku. Uczestniczyło w niej 20 studentów reprezentujących 15 wydziałów chemicznych z całego kraju. Wykłady i panele dyskusyjne prowadziło 7 profesorów Instytutu (W. Danikiewicz, M. Chmielewski, K. Grela, D.T. Gryko, S. Jarosz, J. Jurczak, M. Mąkosza).

### **WYKŁADY WYGŁOSZONE W RAMACH SEMINARIÓW OGÓLNOINSTYTUTOWYCH W ROKU 2012**

**Prof. Sławomir Jarosz** „Syntezy cukrów wyższych i co z tego może wynikać?”

**Prof. Jadwiga Frelek** „Dichroizm kołowy w analizie stereochemicznej substancji bioaktywnych”

**Dr hab. Bartłomiej Furman**, prof. nadzw. „ $\beta$ -Laktamy – nowe metody syntezy, nowe własności farmakologiczne”

**Prof. A. G. Coutsolelosa** „New hybrid materials, based on substituted porphyrin rings, for solar energy conversion”

**Prof. S. Adilov** „Design and synthesis of trans-A2D2-porphyrins for molecular storage and non-linear optics”

**Prof. Janusz Jurczak** „Chiralne rozpoznanie jonów”

**Prof. Curt Wentrup** „Interconversion of Reactive Intermediates: Nitrenes, Nitrene Ylides and Diradicals”

**Prof. Karol Grela** „Metateza olefin - nowości z frontu”

**Prof. Bartosz A. Grzybowski** „Organic Chemistry in the 21st Century: Synthetic Networks and Systems”

**Prof. Bartosz A. Grzybowski** „Physical Chemistry of Cancer Cells”

**Prof. Hans-Georg Kuball** „Chirality of oriented molecules, aggregates and phases Optical methods and interpretation of chirality measurements of chiral isotropic and anisotropic systems”

**Prof. Ryszard Ostaszewski** „Zastosowanie hydrolaz w stereoselektywnej syntezie związków o wysokiej aktywności biologicznej”

**Dr Y. Queneau** „Carbohydrates” at the frontier of green chemistry and bioorganic applications”

**Dr hab. Z. Kaluza, prof. nadzw.** „Asymetryczna synteza związków biologicznie czynnych i ligandów diaminowych”

**Prof. Daniel T. Gryko** „Nowe, heterocykliczne barwniki funkcjonalne – synteza i właściwości optyczne”

**Prof. Mieczysław Mąkosza** „Zastępcze nukleofilowe podstawienie wodoru”

## KONFERENCJE ZORGANIZOWANE PRZEZ ICHO PAN W ROKU 2012

### Konferencje międzynarodowe

#### 1. VIII Polsko-Koreańskie Sympozjum Chemii Organicznej (8th Korea – Poland Joint Symposium on Organic Synthesis), Uniwersytet w Białymstoku, Instytut Chemii, Białystok, 8 - 9.05.2012 r.

VIII Polsko-Koreańskie Sympozjum Chemii Organicznej zostało zorganizowane przez Instytut Chemii Organicznej PAN w Warszawie oraz Uniwersytet w Białymstoku. Te bilateralne sympozja mają celu integrację środowiska chemików polskich i koreańskich co powinno prowadzić (i prowadzi) do wspólnych projektów badawczych. W obu krajach chemia jest bardzo dobrze rozwinięta i lokuje się w czołówce nauk w świecie. Partnerzy koreańscy i polscy kooperują w pracach nad rozwojem syntetycznych i biotechnologicznych metod skierowanych na otrzymanie produktów o interesujących właściwościach biologicznych i/lub nowych materiałów. Poza oczywistym celem naukowym takich spotkań jest jeszcze inny aspekt: poznanie zupełnie innego kulturowo i geograficznie kraju jakim dla Polaków jest Republika Korei Płd. (i odwrotnie). Konferencje organizowane są naprzemiennie przez stronę koreańską (KOSEF obecnie NRF) oraz polską (Instytut Chemii Organicznej; także we współpracy z Uniwersytetami w Polsce).

VIII Sympozjum odbyło się na terenie Uniwersytetu w Białymstoku. W ramach dwudniowej sesji naukowej wykłady wygłosiło 10 naukowców z Polski, w tym pięcioro z Instytutu Chemii Organicznej PAN oraz siedmiu naukowców koreańskich. Przedstawili oni najnowsze wyniki prac badawczych prowadzonych w obszarze syntezy organicznej, chemii nowych materiałów oraz spektroskopii związków organicznych. Goście koreańscy mieli także okazję poznać najciekawsze miejsca Podlasia, w tym Puszcę Białowieską, Tykocin i zamieszkałą przez ludność tatarską wieś Kruszyniany.

#### 2. VII Sympozjum „Nuclear Magnetic Resonance In Chemistry, Physics And Biological Sciences”, Instytut Chemii Organicznej PAN, Warszawa, 26-28.09.2012 r.

W dniach 26-28 września 2012 odbyło się w Warszawie Sympozjum pod hasłem „*Nuclear Magnetic Resonance in Chemistry, Physics and Biological Sciences*”. Instytut Chemii Organicznej PAN organizował je już po raz siódmy. Było to (organizowane teraz cyklicznie co dwa lata) interdyscyplinarne spotkanie naukowe, adresowane do specjalistów z zakresu zastosowań magnetycznego rezonansu jądrowego w chemii, fizyce oraz naukach biologicznych. W tym roku gościem honorowym był profesor Hans W. Spiess (*The Max Planck Institute, Mainz, Niemcy*), prezes Międzynarodowego Towarzystwa Rezonansu Magnetycznego ISMAR (*International Society of Magnetic Resonance*), który wygłosił wykład plenarny zatytułowany „*Magnetic Resonance Studies of Organic Functional Systems*”.

W sympozjum wzięło udział 114 osób, w tym goście z Wielkiej Brytanii, Stanów Zjednoczonych, Niemiec, Francji, Czech, Rosji, Kanady, Chin, Australii, Danii, Szwecji oraz Hiszpanii. Wygłoszono 40 wykładów i komunikatów oraz zaprezentowano 50 posterów. Tematyka obejmowała wszystkie dziedziny współczesnego magnetycznego rezonansu jądrowego, poczynając od aspektów teoretycznych, a kończąc na zastosowaniach analitycznych.

Sympozja naukowe tego typu stwarzają doskonałą możliwość prezentacji wyników prac badawczych dla młodych naukowców. Jest to również okazja do spotkania i wymiany

poglądów z doświadczonymi reprezentantami różnych środowisk. Na uwagę zasługuje wyjątkowo liczny w tym roku udział młodych pracowników naukowych, którzy zdecydowali się przedstawić rezultaty swoich badań w formie 15-minutowych komunikatów ustnych (łącznie 13 prezentacji) oraz podczas sesji posterowej (32 z 50 wystawionych plakatów). Tradycyjnie przeprowadzono też konkurs „*Young Scientist Contest*” i nagrodzono najlepszy komunikat ustny oraz najlepszy plakat.

Kolejne Sympozjum z tego cyklu odbędzie się w Instytucie Chemii Organicznej PAN w Warszawie we wrześniu 2014 roku.

### **3. Mikrosympozjum „Renewable raw materials in organic synthesis”, Instytut Chemii Organicznej PAN, Warszawa, 19.10.2012 r.**

W dniu 19 października 2012 r. odbyło się na terenie Instytutu Chemii Organicznej sympozjum pt. „*Renewable raw materials in organic synthesis*”. Jednym z celów sympozjum było uczczenie 70. rocznicy urodzin prof. Marka Chmielewskiego, członka Polskiej Akademii Nauk i obecnego Wiceprezesa PAN, wieloletniego dyrektora IChO PAN, a przede wszystkim wybitnego specjalisty w dziedzinie chemii cukrów i  $\beta$ -laktamów. W ramach sympozjum zostało wygłoszonych 8 wykładów, z czego 4 przez zaproszonych gości zagranicznych. W pierwszym wykładzie prof. Janusz Jurczak przedstawił sylwetkę Jubilata, wykorzystując w tym celu wiele archiwalnych zdjęć i innych materiałów. Następnie prof. nadzw. Bartłomiej Furman, wieloletni współpracownik prof. Chmielewskiego, zaprezentował jego główne dokonania naukowe. W dalszej części sympozjum pozostali wykładowcy [prof. prof.: Alberto Brandi (Włochy), Janine Cossy (Francja), Andreas Kirschning (Niemcy), Richard Schmidt (Niemcy) oraz Marian Mikołajczyk i Sławomir Jarosz] przedstawili wyniki swoich prac, w których wykorzystywali m. in. naturalne związki organiczne jako substraty w swoich syntezach.

## WAŻNIEJSZE WYNIKI INSTYTUTU W 2012 ROKU

### W badaniach podstawowych

- Ustalenie, które metody jonizacji pod ciśnieniem atmosferycznym najlepiej nadają się do badania układów porfirynowych wolnych i zawierających skompleksowane jony metali przejściowych. (Zesp. I)
- Opracowanie pełnej syntezy substancji farmaceutycznej Ezetymib. Opatentowana procedura syntezy opiera się na oryginalnych transformacjach opracowanych z zespołem II IChO PAN i jest dogodną alternatywą dla istniejących już metod. (Zesp. II)
- Opracowanie użytecznej metody syntezy acetonidu aldehydu L-glicerynowego i jego pochodnych. (Zesp. II)
- Opracowanie nowego rodzaju katalizatorów do enancjoselektywnej metatezy posiadających chiralny ligand NHC. (Zesp. III)
- Wykazanie, że reakcja aldolowa chiralnych, optycznie czystych aldehydów katalizowana naturalną L-proliną daje produkty o odwrotnej konfiguracji niż w przypadku katalizy D-proliną. (Zesp. IV)
- Opracowanie (w oparciu o własny model tłumionej rotacji kwantowej) kwantowej teorii relaksacji spin-sieci protonowanych grup metylowych w kryształach molekularnych. (Zesp. V)
- Opracowanie *syn*- i *anti*-selektywnych organokatalizatorów reakcji aldolowej hydroksy- i dihydroksyacetony, oraz ich zastosowanie w syntezie monosacharydów. (Zesp. VI)
- Zaplanowanie i wprowadzenie do praktyki badawczej nowej klasy receptorów anionów tzw. „niedomkniętych kryptandów” (ang. *unclosed cryptands*). (Zesp. VIII)
- Opracowanie nowej efektywnej metody syntezy pillar[5]arenów. (Zesp. IX)
- Opracowanie nowej, ogólnej metody syntezy pochodnych pirolo[3,2-*b*]pirolu. (Zesp. X)
- Synteza nowych związków (z grupy pochodnych kamptotecyny) aktywnych biologicznie na komórki raka piersi, okrężnicy i białaczki. (Zesp. XI)
- Oznaczenie trzeciorzędowej struktury modyfikowanej insuliny ludzkiej LysPro w roztworze wodnym. (Zesp. XI)
- Synteza i wszechstronne badania biologiczne kilku nietoksycznych dendrymerów aktywnych selektywnie na bakterie Gram-ujemne. (Zesp. XII)
- Wykazanie przydatności dichroizmu kołowego do rozróżniania form polimorficznych, chiralnych, aktywnych substancji farmaceutycznych (API) wraz z opracowaniem metodologii pomiarowej CD w fazie stałej. (Zesp. XIII)
- Opracowanie syntezy pochodnej ‘*Clikable*’ witaminy B<sub>12</sub> posiadającej grupę –N<sub>3</sub> w pozycji 5’ jednostki rybozowej i wykazanie jej reaktywności w katalizowanej miedzią reakcji cykloaddycji terminalnych alkinów do azydków. (Zesp. XV)
- Synteza niebieskiej pochodnej kwasu kobrynowego – kobryketonu (Zesp. XV)

- Odtworzenie zmian przesunięć chemicznych  $^1\text{H}$  i  $^{15}\text{N}$  NMR oraz ich kierunku w serii adduktów tetrakarboksylanów rodu(II) oraz tetraimidowej soli rodu(II) na drodze obliczeń DFT. (Zesp. XVI)
- Synteza i zbadanie nowych adduktów polimerycznych ("polimerów koordynacyjnych"). (Zesp. XVI)
- Opracowanie metodyki pomiarów NMR do określenia położenia atomu wodoru w mostku wodorowym w zasadach Schiffa; zastosowanie sprzężeń spin-spin węgiel-kadm i azot-kadm do badania struktury kompleksów zasad Schiffa. (Zesp. XVI)
- Opracowanie metody dynamicznego rozdziału kinetycznego kwasu 3-hydroksy-3-(*p*-nitrofenylo)pronionowego wykorzystującego współdziałanie enzymów oraz katalizatorów metalicznych. (Zesp. XX)
- Opracowanie enzymatycznego wariantu reakcji Ugi. (Zesp. XX)
- Stwierdzenie obecności efektu synergicznego w mieszaninach enzymów w reakcjach prowadzonych w rozpuszczalnikach organicznych. (Zesp. XX)
- Potwierdzenie zaproponowanego wcześniej katalitycznego mechanizmu rozkładu wodoronadtlenku. (Zesp. XXI)
- Wykonanie bardzo dokładne obliczenia stałej sprzężenia spin-spin w cząsteczce HD. W połączeniu z nowymi danymi eksperymentalnymi daje to oszacowanie błędów wynikających zarówno z przybliżeń w teoretycznych metodach chemii kwantowej, jak też w interpretacji widma NMR. (Zesp. XXII)

## W BADANIACH APLIKACYJNYCH

### Patenty przyznane

1. Aleksandra Rajnisz; Jolanta Janiszewska; Jolanta Solecka; Zofia Lipkowska; „*Nowe peptydowe związki dendrymeryczne o strukturze amfifilowej i ich zastosowanie medyczne*”; PL212415
2. Tadeusz Chojnacki, Ewa Ciepichał, Wiesław Jankowski, Ewa Kula-Świeżewska, Marek Chmielewski, Marek Masnyk, Robert Łysek, Zbigniew Madeja, „*Trimetyloaminowe pochodne poli-cis i poli-trans liniowych oligomerów izoprenowych, sposób ich wytwarzania oraz ich zastosowanie*” PL211824 (wspólnie z IBB)
3. Ryszard Ostaszewski; Waldemar Kurek; Dorota Patralska; Dominik Koszelewski „*Sposób wykrywania i/lub oznaczania aktywności enzymatycznej esterazy lowastatyny z użyciem substratu fluoro/chromogennego, zestaw do wykrywania i/lub oznaczania aktywności esterazy lowastatyny oraz zastosowanie substratu fluoro/chromogennego do pozaustrojowego wykrywania i/lub oznaczania aktywności enzymatycznej*” PL212182
4. Ryszard Ostaszewski; Waldemar Kurek; Dorota Patralska; Dominik Koszelewski „*Enzym esteraza lowastatyny osadzony na nośniku nierozpuszczalnym w wodzie, sposób osadzania enzymu, zastosowanie enzymu esterazy lowastatyny osadzonego na nośniku nierozpuszczalnym w wodzie, przepływowy reaktor biokatalityczny ze złożem oraz sposób wytwarzania i/lub oczyszczania symwastatyny*” PL 211815

5. Zofia Lipkowska, Piotr Polcyn, Andrzej Lipkowski „*Dendrimeric Compounds Comprising Amino Acids, Hyperbranched Core Compound, Process For Preparation Of Dendrimeric Compounds Comprising Amino Acids And Hyperbranched Core Compound, And Use Thereof*” AU(5.07.2012 -2009292741 )
6. Ryszard Ostaszewski; Waldemar Kurek; Dorota Patralska; Dominik Koszelewski „*Lovastatin esterase enzyme immobilized on solid support, process for enzyme immobilization, use of immobilized enzyme, biocatalytic flow reactor and process for preparation and/or purification of simvastatin*” RU(3.09.2012 – 2010122385 /10(031818))

### Patenty zgłoszone

1. M. Chmielewski, B. Furman, S. Stecko, I. Panfil, M. Jurczak, P. Mikołajczyk, M. Soluch, “*Process for the preparation of carbapenemic compounds*”, Int. Patent Appl. PCT/PL2012/050005 (14.02.2012); WO 2012/112061 A1.
2. M. Śnieżek, I. Panfil, S. Stecko, M. Soluch, M. Mikołajczyk, M. Michalak, B. Furman, M. Chmielewski, „*Metod for synthesis of the substituted azetidiones and intermediates for their synthesis*”; Int. Patent Appl. PCT/PL2012/056022 (15.06.2012)
3. L. Kozerski, R. Kawęcki, B. Naumczuk, K. Hyz, W. Bocian, E. Bednarek, J. Sitkowski, K. Wiktorska, K. Lubelska „*Pochodne kamptotecyny, sposób ich otrzymywania i zastosowanie*” P 401 345 L.
4. Z. Kałuża, R. Ćwiek, P. Niedziejko „*Pochodne 1,3-dihydrospiro[indeno-2,2'-pirolidyno]-1-aminy, sposób ich otrzymywania i zastosowanie*” krajowe zgłoszenie patentowe P. 401 056, data przyjęcia: 2012-10-04



**WYKAZ REALIZOWANYCH INDYWIDUALNYCH  
PROJEKTÓW BADAWCZYCH**

Rodzaj projektu, Tytuł projektu	Kierownik projektu	Okres realizacji
1	2	3
<b>a) Krajowe:</b>		
<b>1/ finansowane ze środków MNiSW i NCN</b>		
1. Badania metodą NMR chemii, właściwości fizykochemicznych i kompleksów molekularnych z oligomerami DNA wybranych inhibitorów topoiizomerazy I i II ( <i>własny</i> ) <b>N N204 155736</b>	dr W. Bocian	2009-2012
2. Synteza i badanie własności peptydowych dendrymerów oddziałujących z biomembranami ( <i>własny</i> ) <b>N N204 239436</b>	prof. Z. Lipkowska	2009-2012
3. Synteza i zastosowanie katalizatorów o opóźnionej inicjacji w reakcjach metatezy ( <i>własny</i> ) <b>N N204 157636</b>	prof. K. Grela	2009-2012
4. Karbenowe kompleksy rutenu zawierające zmodyfikowane ligandy anionowe, jako katalizatory reakcji metatezy ( <i>promotorski</i> ) <b>N N204 155436</b>	prof. K. Grela	2009-2011 (przedł. do 2012)
5. Reakcja Kinugasy - nowa, asymetryczna metoda syntezy karbapenamów, karbacefamów, klawamów i oksacefamów ( <i>własny</i> ) <b>N N204 156036</b>	prof. M. Chmielewski	2009-2012
6. Asymetryczna synteza alkaloidów <i>Erythrina</i> ( <i>własny</i> ) <b>N N204 123437</b>	dr hab. Z. Kałuża	2009-2012
7. Synteza ciekłych porfiryn i koroli o wysokim współczynniku absorpcji dwufotonowej ( <i>własny</i> ) <b>N N204 123837</b>	prof. D.T. Gryko	2009-2012
8. Badania porównawcze technik jonizacji stosowanych w spektrometrii mas w analizie kompleksów metali przejściowych i ligandów organicznych ( <i>własny</i> ) <b>N N204 263837</b>	prof. W. Danikiewicz	2009-2012

9. Zastosowanie hydroksy- i dihydroksyacetonu w asymetrycznej syntezie związków polihydroksylowych ( <i>promotorski</i> ) N N204 124037 ( <i>przedłużony na 2012</i> )	dr hab. J. Młynarski	2009-2011 (przedł. do 2012)
10. Nowe metody syntezy policyklicznych pochodnych indolu ( <i>własny</i> ) N N204 193038	prof. K. Wojciechowski	2010-2013
11. Synteza polihydroksyloowanych pochodnych aminocyklopentanu, analogów związków o interesujących właściwościach biologicznych ( <i>promotorski</i> ) N N204 178438	prof. S. Jarosz	2010-2012
12. Stereoselektywna, katalizowana proliną, synteza związków polihydroksylowych o długich łańcuchach oraz dużych pierścieniach karbocyklicznych ( <i>promotorski</i> ) N N204 175938	prof. S. Jarosz	2010-2012
13. Synteza C <sub>2</sub> -symetrycznych diamin i ich zastosowanie w asymetrycznej katalizie ( <i>promotorski</i> ) N N204 271538	dr hab. Z. Kałuża	2010-2012
14. Organokatalityczne C-H hydroksylowanie – kataliza enaminowa i dienaminowa ( <i>własny</i> ) N N204 187139	dr hab. D. Gryko	2010-2013
15. 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> ) N N204 266739	dr hab. J. Jaźwiński	2010-2013
16. Karboksylany dimolibdenu, jako chromofory pomocnicze w badaniach strukturalnych transparentnych związków organicznych ( <i>własny</i> ) N N204 187439	prof. J. Frelek	2010-2013
17. Kwantowo-mechaniczna teoria spinowej relaksacji jądrowej rotatorów molekularnych ( <i>własny</i> ) N N204 187639	prof. S. Szymański	2010-2013
18. Chiralne kapsuły molekularne jako środowisko reakcji chemicznych i kontrolowanych procesów dynamicznych ( <i>własny</i> ) N N204187839	dr hab. A. Szumna	2010-2013

19. Trudne przypadki metatezy krzyżowej olefin – nowe warunki i katalizatory ( <i>własny</i> ) <b>N N204 404940</b>	prof. K. Grela	2011-2014
20. Makrocycliczne kompleksy metali, jako komponenty receptorów i urządzeń molekularnych ( <i>własny</i> ) <b>N N204 151640</b>	prof. B. Korybut-Daszkiewicz	2011-2014
21. Badania nad enancjoselektywną totalną syntezą diterpenoidów pochodzenia grzybowego (-)-guanakastenu A i (-)-heptemeronu G oraz nad chemoenzymatycznym rozdziałem optycznym recemicznych gamma-hydroksy-alfa,beta-nienasyconych ketonów ( <i>OPUS</i> ) <b>UMO-2011/01/B/ST5/00827</b>	prof. J. Wicha	2011-2014
22. Badania wpływu efektów konformacyjnych na widma ECD enonów cisoidowych ( <i>OPUS</i> ) <b>UMO-2011/01/B/ST5/06413</b>	prof. J. Frelek	2011-2014
23. Biomimetyczne organokatalizatory: zastosowanie chiralnych amin pierwszorzędowych w syntezie asymetrycznej ( <i>OPUS</i> ) <b>UMO-2011/03/B/ST5/03126</b>	prof. J. Młynarski	2012-2015
24. Nowe podejście do rozpoznania chiralnego organicznych kationów i anionów - dynamiczna chemia kombinatoryjna ( <i>MAESTRO</i> ) <b>UMO-2011/02/A/ST5/00439</b>	prof. J. Jurczak	2012-2017
25. Rozpoznanie molekularne za pomocą spektrometrii mas: badania właściwości niekowalencyjnych kompleksów ligandów receptorów melanokortinowych ( <i>SONATA</i> ) <b>UMO-2011/03/D/ST4/03067</b>	dr M. Zimmnicka	2012-2015
26. 1,3-Dipolarna cykloaddycja N-tlenków azyn i fluoroalkenów z podstawnikiem heteroarlowym - otrzymanie nowej klasy barwników fluorescencyjnych ( <i>SONATA</i> ) <b>UMO-2011/03/D/ST5/06066</b>	dr R. Loska	2012-2015
27. Karbenowe kompleksy rutenu zawierające ugrupowanie chinonowe jako katalizatory reakcji metatezy przeciwdziałające izomeryzacji wiązania podwójnego ( <i>SONATA</i> ) <b>UMO-2011/03/D/ST5/06079</b>	dr inż. A. Kajetanowicz	2012-2015

28. Azamakrocykliczne kompleksy metali przejściowych jako elektroaktywne elementy strukturalne do konstrukcji rotaksanowego przełącznika molekularnego ( <i>PRELUDIUM</i> ) <b>UMO-2011/01/N/ST5/05560</b>	mgr inż. M. Woźny	2011-2013
29. Neutralne homo- i heteronuklearne bismakrocykliczne kompleksy metali jako komponenty układów topologicznie związanych ( <i>PRELUDIUM</i> ) <b>UMO-2011/01/N/ST5/05558</b>	mgr I. Mames	2011-2013
30. Porfiryny w reakcji Huisgena - czy insercja miedzi jest nieunikniona? ( <i>PRELUDIUM</i> ) <b>UMO-2011/01/N/ST5/05613</b>	mgr inż. M. Chromiński	2011-2013
31. Wydajna synteza enancjomerycznie czystych trans-A <sub>2</sub> B <sub>2</sub> -porfiryn i biokatalityczny rozdział alkoholi pierwszorzędowych ( <i>PRELUDIUM</i> ) <b>UMO-2011/01/N/ST5/05633</b>	mgr inż. A. Nowak-Król	2011-2013
32. Dynamiczna chemia kombinatoryjna w poszukiwaniu selektywnych receptorów na aniony ( <i>PRELUDIUM</i> ) <b>UMO-2011/01/N/ST5/05520</b>	mgr F. Ulatowski	2011-2013
33. Funkcjonalizacja cząsteczek POSS® (Polyhedral Oligomeric Silsesquioxanes) za pomocą metatezy krzyżowej olefin ( <i>PRELUDIUM</i> ) <b>UMO-2011/01/N/ST5/05638</b>	mgr J. Czaban	2011-2013
34. Zastosowanie nitronów pochodzenia cukrowego jako bloków budulcowych w syntezie karbapenamów i karbapenemów ( <i>PRELUDIUM</i> ) <b>UMO-2011/03/N/ST5/04435</b>	mgr M. Maciejko	2012-2014
35. Zaawansowane techniki dichroizmu kołowego jako wartościowe narzędzie w badaniach strukturalnych związków o znaczeniu farmakologicznym ( <i>PRELUDIUM</i> ) <b>UMO-2011/03/N/ST4/02426</b>	mgr inż. M. Górecki	2012-2015
36. Reakcje multikomponentowe, metatezy oraz biotransformacje jako użyteczne narzędzia w syntezie peptydomimetyków o aktywności przeciwnowotworowej ( <i>PRELUDIUM</i> ) <b>UMO-2011/03/N/ST5/04353</b>	mgr inż. Sz. Kłossowski	2012-2014

37. Założenia technologiczne otrzymywania oraz badania przedkliniczne niskocząsteczkowych peptydowych związków dendrymerycznych o właściwościach przeciwdrobnoustrojowych do zastosowań u ludzi i zwierząt (projekt rozwojowy) <b>NR13-0153-10</b>	prof. Z. Lipkowska	2010-2013
38. Badania chiralooptyczne trójcyklicznych oksa-analogów cefalosporyn, posiadających układ chromanu <b>IUVENTUS PLUS IP2011 061771</b>	dr inż. M. Woźnica	2012-2013
39. Badania właściwości i struktury układu tioamidowego w modelowych ditipeptoidach - potencjalnych jednostkach budulcowych w syntezie związków biologicznie czynnych <b>IUVENTUS PLUS IP2011 064171</b>	dr M. Zimnicka	2012-2014
40. Wykorzystanie reakcji przegrupowania Overmana/cyklizacji w syntezie azotowych związków heterocyklicznych <b>IUVENTUS PLUS IP2011 051871</b>	dr S. Stecko	2012-2014
41. Synteza katalizatorów na bazie ligandów chinolinowych o opóźnionej inicjacji w metatezie olefin i ich testowanie w syntezie związków biologicznie czynnych <b>DIAMENTOWY GRANT 0140/DIA/2012/41</b>	K. Żukowska	2012-2015
42. Projektowanie, synteza, analiza strukturalna i badania właściwości kompleksujących makrocyklicznych receptorów anionów <b>DIAMENTOWY GRANT 0141/DIA/2012/41</b>	D. Lichosyt	2012-2015
43. Biokatalityczne transformacje hydrofobowych pochodnych witaminy B12 <b>DIAMENTOWY GRANT 0145/DIA/2012/41</b>	M. Giedyk	2012-2014
44. Otrzymywanie o-nitrozoaryloamin w reakcji nukleofilowego podstawienia wodoru w nitroarenach i ich zastosowanie w syntezie azotowych związków heterocyklicznych o potencjalnej czynności biologicznej <b>DIAMENTOWY GRANT 0146/DIA/2012/41</b>	A. Trawczyński	2012-2015
<b>2/ finansowane ze środków FNP</b>		
45. Blokery optyczne oparte na porfirynach i korolach o rozbudowanym chromoforze (program VENTURES) <b>Ventures/2009-4/6</b>	mgr A. Nowak-Król	2009-2012

46. Rozpoznanie chiralne anionów karboksylanowych o szczególnym znaczeniu biologicznym (program VENTURES) <b>Ventures/2009-4/8</b>	mgr F. Ulatowski	2009-2012
47. Fotochemiczna kontrola kompleksowania anionów przez syntetyczne receptory (program VENTURES) <b>Ventures/2010-5/1</b>	mgr K. Dąbrowa	2010-2012
48. Nowe metody oczyszczania produktów reakcji metatezy. Modyfikacje rutenowych katalizatorów metatezy umożliwiające łatwiejsze oczyszczanie mieszaniny reakcyjnej przy pomocy nanofiltracji (VENTURES) <b>Ventures/2011-7/3</b>	mgr. J. Czaban	2011-2012
49. Novel approach towards NO-free activators of sGC enzyme for medical treatment of heart diseases (TEAM) <b>TEAM-2009-3/4</b>	dr hab. D. Gryko	2009-2013
50. Novel chromophores for two-photon excitation fluorescence microscopy and optical limiting (TEAM) <b>TEAM-2009-4/3</b>	prof. D.T. Gryko	2010-2014
51. DNA Modyfication using Multifunctional Merocyclic Complexes <b>HOMING PLUS/2011-3/6</b>	dr J. Kowalski	2011-2013
<b>b) finansowane z innych źródeł</b>		
52. Zastosowanie farmaceutycznych związków dendrymerycznych zawierających aminokwasy <b>POIG.01.03.02-00-030/08</b>	prof. Z. Lipkowska	2009-2013
53. Cukry, jako surowce odnawialne w syntezie produktów o wysokiej wartości dodanej <b>POIG.01.01.02-14-102/09</b>	prof. S. Jarosz	2010-2014
54. Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym <b>POIG.01.03.01-00-158/09</b>	prof. R. Ostaszewski	2010-2014
55. Metagenomy, jako źródło nowoczesnych narzędzi biotechnologicznych służących do bioremediacji i biotransformacji <b>POIG.01.01.02-14-054/09</b>	prof. W. Danikiewicz	2010-2014
56. Zastosowanie pochodnych poliizoprenoidów, jako nośników leków i regulatorów metabolizmu <b>POIG.01.03.01-14-036/09</b>	prof. W. Danikiewicz, prof. M. Chmielewski	2010-2013

57. Zastosowanie innowacyjnych metod immobilizacji esterazy lowastatyny do syntezy symwastatyny <b>POIG.01.03.02-00-013/09</b>	prof. R. Ostaszewski	2010-2013
58. Repozytorium cyfrowe Instytutów Naukowych <b>POIG.02.03.02-00-043/10</b>	dr P. Lipkowski	2011-2013
59. Ochrona patentowa w zakresie skutecznych innowacyjnych inhibitorów tioredoksyny <b>POIG.01.03.02-00-067/10</b>	prof. R. Ostaszewski	2010-2015
60. Opracowanie syntezy substancji farmaceutycznej ezetymibu – selektywnego inhibitora wchłaniania cholesterolu (INITECH) <b>ZPB/51/64927/IT2/10</b>	prof. M. Chmielewski	2010-2012
61. Zielone katalizatory dla zrównoważonej produkcji w przemyśle chemicznym, agrochemicznym i farmaceutycznym <b>3/3/POL-SIN/2012</b>	Prof. K. Grela	2012-2015

## INFORMACJA O WSPÓLPRACY NAUKOWEJ Z ZAGRANICĄ W ROKU 2012

### *Zespół III (kierownik - prof. Karol Grela)*

W ramach grantu Ventures pani Justyna Czaban utrzymuje współpracę zagraniczną z zespołem prof. Dietera Vogta (Holandia). W jej ramach pani Czaban wyjeżdżała na miesięczny pobyt do Eindhoven, gdzie wykonała testy nanofiltracyjne otrzymanych przez siebie kompleksów rutenu.

W ramach Grantu Polsko Singapurskiego zespół współpracuje z Prof. Philipem Wai Hong Chanem i dr. Dragoslavem Vidoviciem (na etapie planowania badań).

### *Zespół VII (kierownik - dr hab. Zbigniew Wróbel)*

LONZA – 2 zlecenia na opracowanie i optymalizację syntezy Medetomidyny.

### *Zespół VIII (kierownik - prof. Janusz Jurczak)*

Kontynuacja współpracy z grupą Prof. K. Matyjaszewskiego z Carnegie-Mellon University, Pittsburgh, USA w zakresie wysokociśnieniowej syntezy polimerów (nieformalne).

Rozpoczęto współpracę z grupą Prof. B.A. Grzybowski z Northwestern University, Evanstone, USA w zakresie zastosowań sieciowych metod informatycznych w syntezie organicznej (nieformalne).

### *Zespół IX (kierownik - dr hab. Agnieszka Szumna)*

W ramach programu wymiany ERASMUS i współpracy z dr Ramona Danac, w zespole IX odbywała 3-miesięczny staż studentka Raluca Rusu (University of Iași, Rumunia). Umowa w ramach programu wymiany ERASMUS. Publikacja w przygotowaniu.

### *Zespół X (kierownik - prof. Daniel T. Gryko)*

Kontynuowano współpracę z dr Mireille Blanchard-Desce, która bada  $\sigma_2$  dla pochodnych nieporfirynoidowych. Tegoroczna współpraca zaowocowała 3 publikacjami: CHEM-EUR. J.; Y. M. Poronik; V. Hugues; M. Blanchard-Desce; D. T. Gryko; **2012**; 18; 9258-9266; J. MAT. CHEM.; K. Skonieczny; A. I. Ciuciu; E. Nichols; V. Hugues; M. Blanchard-Desce; L. Flamigni; D. T. Gryko; **2012**; 22; 20649-20664; CHEM-ASIAN. J.; M. Tasior; V. Hugues; M. Blanchard-Desce; D. T. Gryko; **2012**; 7; 2656-2661.

Kontynuowano także współpracę z dr Lucia Flamigni, w zespole której wykonywane są czasowo-rozdzielcze pomiary widm absorpcji. Współpraca ta doprowadziła do napisania trzech publikacji w br: CHEM-ASIAN. J.; L. Flamigni; A.I. Ciuciu; H. Langhals; B. Böck; D.T. Gryko; **2012**; 7; 582-592; J. MAT. CHEM.; K. Skonieczny; A. I. Ciuciu; E. Nichols; V. Hugues; M. Blanchard-Desce; L. Flamigni; D. T. Gryko; **2012**; 22; 20649-20664; CHEM. EUR. J.; R. Voloshchuk; D. T. Gryko; M. Chotkowski; A. I. Ciuciu; L. Flamigni; **2012**; 18; 14845-14859.

Kontynuowana jest na szeroką skalę, trwająca już od kilku lat współpraca z zespołem prof. Aleksandra Rebane (Montana State University). Prof. Gryko spotkał się z prof. Rebane w wrześniu br w Bolonii (przy okazji spotkania grantu ITN-TOPBIO). Zespół z Bozeman zbadał już kilkadziesiąt porfirynoidów, a w tej chwili bada kolejne 20 związków. Informacje



uzyskane z Bozeman są niezwykle cenne w dalszym projektowaniu związków charakterze brokerów optycznych. Stały się one przedmiotem jednej zaakceptowanej i dwóch wysłanych do druku publikacji (CHEMPHYSCHEM; A. Nowak-Król; C. J. Wilson; M. Drobizhev; D. V. Kondratuk; A. Rebane; H. L. Anderson; D. T. Gryko; **2012**; *13*; 3966-3972). W ostatnim okresie nawiązano też współpracę z US Air Force Laboratory w Deyton. Pracownicy zespołu dr Cooper'a zbadali absorpcję stanów trypletowych dla kilku wyselekcjonowanych porfiryn.

*Zespół XII (kierownik - prof. Zofia Lipkowska)*

University of Osaka (Japonia) – prof. Koichi Tanaka; kontynuowano nieformalną współpracę w dziedzinie badania struktury i własności związków nowych materiałów fotochromowych oraz katalizatorów typu MOF. Wyniki opracowano w postaci 2 publikacji (w wykazie zadań statutowych).

*Zespół XIII (kierownik - prof. Jadwiga Frelek)*

Polsko-Węgierski projekt badawczy "Kompleksy wybranych produktów naturalnych z dwurdzeniowymi karboksylanami metali przejściowych: synteza, teoretyczne i eksperymentalne badania przy pomocy ECD, VCD, FTIR i NMR" na lata 2011 – 2013. W ramach projektu w roku 2012 prowadziliśmy eksperymentalne i teoretyczne badania elektronowego i oscylacyjnego dichroizmu kołowego (ECD i VCD) kompleksów dirodowych z nowymi typami ligandów, takimi jak różne alfa- i beta-aminokwasy oraz dipeptydy. Skoncentrowaliśmy się przede wszystkim na pomiarach w fazie stałej. Uzyskane wyniki pozwoliły stwierdzić, iż takie eksperymentalno-teoretyczne podejście jest bardzo użyteczne w badaniach strukturalnych, a szczególnie w badaniach efektów konformacyjnych przedmiotowych związków. Wpływy spowodowane wkładami aromatycznymi, obecnością różnych konformerów w próżni, roztworze i ciele stałym oraz zależności rozpuszczalnikowe mogą powodować trudności interpretacyjne uzyskanych wyników. Uzyskane wyniki zostały zaprezentowane w formie posteru na 32<sup>nd</sup> Europejskim Sympozjum Peptydowym w Atenach, Grecja, (2-7 IX 2012).

*Zespół XV (kierownik - dr hab. Dorota Gryko)*

Dr. Emil Martin - *The University of Texas Health Science Center at Houston*

Dr. Marie-Francoise Doursout - *The University of Texas Medical School at Houston, Department of Anesthesiology*

W ramach współpracy zsyntetyzowane przez nas związki zostały poddane badaniom biologicznym. Wykazano, że hydrofilowy heptaamid aktywuje enzym znacznie lepiej niż wyjściowy Factor B zarówno w badaniach *in vitro* jak i *in vivo*.

Wykazaliśmy, że cząsteczki hybrydowe złożone z estru kwasu kobrynowego z protoporfiryną IX aktywują sGC, co więcej efektywniej oddziałują z enzymem niż mieszanina wyjściowych bloków budulcowych. Zaobserwowano zatem nie tylko sumaryczny efekt wywołany przez pochodne kwasu kobrynowego i protoporfiryny IX, ale również dodatkowy efekt wynikający z połączenia obu fragmentów w jedną cząsteczkę. Badania te pozwalają przypuszczać, że możliwe jest otrzymanie aktywatorów rozpuszczalnej cykazy guanylowej oddziałujących z dwiema domenami jednocześnie.

Otrzymane wyniki wykazały, że najbardziej aktywne połączenie hybrydowe z łącznikiem diglikolowym związane po stronie witaminowej wiązaniem amidowym, natomiast po stronie

porfirynowej estrowym jest najlepszym aktywatorem. W przypadku hybryd, w których obie jednostki związane były grupami amidowymi zdolność do aktywowania sGC była zbliżona, co oznacza znikomy wpływ długości łącznika.

*Wspólne publikacje:*

1. J. PHARM. AND EXP. THERAPEUT.; Cobinamides Are Novel Coactivators of Nitric Oxide Receptor That Target Soluble Guanylyl Cyclase Catalytic Domain; Sharina, I.; Sobolevsky, M.; Doursout, M-F.; Gryko, D.; Martin, E.; **2012**, 340, 723-732; 3,828
2. J. MED. CHEM.; Vitamin B<sub>12</sub> derivatives as activators of soluble guanylyl cyclase; ó Proinsias K, Gryko D.T., Hisaeda Y, Martin E, Sessler J.L., Gryko D.; **2012**, 55, 8943-8947; 5,248
3. EUR. J. ORG. CHEM., Protoporphyrin IX/Cobyrinate Derived Hybrids – Novel Activators of Soluble Guanylyl Cyclase; Chromiński, M.; Gryko, D.; **2012**, accepted; 3,329
4. MED. CHEM. LETT.; Synthesis of New Hydrophilic and Hydrophobic Cobinamides as NO-Independent sGC Activator; ó Proinsias, K.; Giedyk, M.; Sharina, I. G.; Martin, E.; Gryko, D.; **2012**, 3, 476-479; 3,355

*Wspólne wystąpienia:*

- a) *Protoporphyrin IX/Cobinamide Derived Hybrids Novel Activators of Soluble Guanylyl Cyclase*, B<sub>12</sub> Symposium, Nancy, Francja, 20-22.09.2012
- b) *New tetrapyrrole derivatives as NO independent sGC activators*, Kangwon National University, Chuncheon, Korea, 7.07.2012
- c) *Modification of natural tetrapyrroles: the quest for new NO-independent sGC activators*, 7th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-7), Jeju, Korea, 31.06 - 6.07.2012
- d) *Vitamin B<sub>12</sub> modifications: the quest for new guanylyl cyclase activators*, Vitamin B<sub>12</sub> Symposium, Nancy, France 20 – 22. 09.2012.

## CZĘŚĆ SZCZEGÓŁOWA SPRAWOZDANIA

### *Temat I: Nowe reakcje, reagenty i metody syntezy organicznej*

#### **Zespół II – dr hab. Bartłomiej Furman, prof. nadzw.**

##### *Badania statutowe:*

Wyselekcjonowano karbenowy kompleks miedzi (I), który skutecznie katalizuje reakcję addycji terminalnych acetylenów do trifluorometyloketonów.

Opracowano reakcję przegrupowania acetalu winylowych i zastosowano ją w syntezie  $\beta$ -alkoksy ketonów użytecznych bloków budulcowych w syntezie organicznej.

*Grant (INITECH) ZPB/51/64927/IT2/10 - kierownik prof. M. Chmielewski*

Opracowano pełną syntezę substancji farmaceutycznej Ezetymib. Opatentowana procedura syntezy opiera się na oryginalnych rozwiązaniach metodologicznych opracowanych z zespołem II IChO PAN i jest dogodną alternatywą dla istniejących już metod.

Opracowano użyteczną metodę syntezy acetonidu aldehydu L-glicerynowego i jego pochodnych.

*Grant POIG.01.01.02-14-102/09 „Cukry” - kierownik: prof. M. Chmielewski*

- Wykorzystano laktamy pochodzenia cukrowego w syntezie polihydroksylowych indolizydy i chinolizydy.
- Zsyntetyzowano i scharakteryzowano wodoronadtlenki cukrowe pochodne hekso- i pentopiranoz.
- Zastosowanie liniowych chiralnych nitronów i nieracemicznych acetylenów w syntezie enancjomerycznie wzbogaconych azetydynonów.
- Wykorzystano procesy tandemowe (przegrupowanie sigmatropowe/cyklizacja) w syntezie azotowych związków heterocyklicznych.

#### **Zespół III – prof. Karol Grela**

##### *Badania statutowe:*

Przeprowadzono szereg modelowych reakcji metatezy z udziałem halogenopochodnych olefin, dienów oraz alkeninów.

Kontynuowano badania nad enancjoselektywną reakcją metatezy. Dokonano syntezy szeregu enancjomerycznie czystych soli NHC, oraz kompleksów rutenu. Przeprowadzono serię modelowych reakcji asymetrycznej metatezy, potwierdzających aktywność katalizatorów. W reakcjach uzyskano wysokie nadmiary enancjomeryczne.

*Grant NCN „Sonata” (UMO 2011/03/D/ST5/06079) - kierownik: dr Anna Kajetanowicz*

Rozpoczęto syntezę soli NHC zawierających ugrupowanie chinonowe połączone z atomem azotu w imidazolu jak również pochodne imidazoliny podstawione w pozycji 4. Otrzymane sole zostaną wykorzystane, jako ligandy w syntezie rutenowych katalizatorów do metatezy olefin.

*Grant MNiSW „Diamentowy” (0140/DIA/2012/41) - kierownik Karolina Żukowska*

Zoptymalizowano syntezę szeregu ligandów chinolinowych koniecznych do otrzymania planowanych kompleksów rutenu. W toku badań otrzymano pierwszy z katalizatorów i potwierdzono jego aktywność w reakcji metatezy z zamknięciem pierścienia.

*Grant FNP „Ventures” (2011-7/3)- kierownik: mgr Justyna Czaban*

W trakcie prac badawczych przeprowadzono syntezę ligandów połączonych z tagiem zwiększającym masę. W tym celu wykorzystano polisiloksany. Następnie, zmodyfikowane ligandy przyłączono do kompleksów rutenowych, sprawdzono aktywność nowych kompleksów oraz dla jednego wykonano testy w układzie ciągłym z wykorzystaniem nanofiltracji. Testy nanofiltracyjne wykonane zostały na układzie zbudowanym na Politechnice w Eindhoven. Natomiast, jako reakcję modelową postanowiono przeprowadzić metatezę zamknięcia pierścienia diallilo malonianu dietylu. W układzie zastosowana została membrana PuraMem S280 o przepuszczalności MWCO=600. Reakcja trwała 170 godzin. W tym czasie zużyto 728 ml substratu. Najwyższa osiągnięta konwersja wynosiła 45%. Obliczono TOF dla procesu, który wyniósł 659. Podczas trwania reakcji zbierano próbki, które następnie zbadano przy pomocy ICP MS w celu sprawdzenia czy katalizator przechodzi przez membranę. Okazało się iż w przesączu znajduje się tylko 19 ppm Ru.

*Grant NCN (UMO 2011/01/N/ST5/05638) - kierownik: mgr J. Czaban*

Badania rozpoczęto od sprawdzenia czy możliwa jest reakcja homometatezy allilopochodnej POSS-u. Okazało się, że ten związek jest całkowicie niepodatny na reakcję homometatezy. Zoptymalizowano warunki reakcji metatezy krzyżowej allilo-polisiloksanu z dwoma wybranymi partnerami. W tym celu sprawdzono aktywności większości dostępnych kompleksów rutenu. Optymalizację procesu zaczęto od reakcji allilo pochodnej polisiloksanu z akrylanem *tert*-butylu. Kolejnym modelowym substratem do reakcji krzyżowej metatezy był ester dimetylowy kwasu heksenediowego. Badania te wykazały, że kompleksy typu Grubbsa, jakie zazwyczaj używane są w tego typu przekształceniach, nie są najlepszymi katalizatorami. Również kompleksy indenylidenowe nie dały wysokich wydajności reakcji metatezy. Najlepsze wydajności otrzymano dla kompleksów typu Hoveydy.

*Grant NCN No NN204404940 - kierownik: prof. K. Grela*

Kontynuowano badania „trudnych przypadków” reakcji metatezy. Zakończono syntezę związków modelowych i zoptymalizowano warunki reakcji metatezy krzyżowej partnerów ubogich w elektrony z różnymi olefinami. Sprawdzono aktywności dużej liczby alkilidennowych kompleksów rutenu, w tym nowego katalizatora Umicore™ M51. Zbadano wpływ rozpuszczalnika, temperatury i czasu prowadzenia procesu. Wybrane najtrudniejsze reakcje przeprowadzono w reaktorze mikrofalowym. W reakcji CM *n*-olefin sprawdzono wpływ podciśnienia i dodatków na wydajność i selektywność reakcji. Udało się przeprowadzić tę reakcję używając zaledwie 200-50 ppm katalizatora.

*Grant NCBiR Polsko-Signapurski - kierownik: prof. K. Grela*

Rozpoczęcie projektu, podpisanie umów, konsultacje z partnerami dot. organizacji współpracy, planowanie syntez. Okres realizacji: 2012 – 2015.

## **Zespół VI – prof. Jacek Młynarski**

*Badania statutowe:*

Ustalono, że zastosowanie organokatalizatorów zawierających elementy strukturalne seryny, w asymetrycznej reakcji aldolowej dihydroksyacetonu i aldehydu (*R*)-glicerynowego prowa-

dzi do otrzymania dwóch ketoheksos o konfiguracji *syn*. Zastosowanie katalizatorów zawierających odpowiednio cząsteczki **D**- i **L**-proliny prowadzi do otrzymania dwóch ketoheksos o konfiguracji *anti*. W ten sposób otrzymaliśmy naturalne ketoheksosy, a ich konfiguracja została potwierdzona metodami CD.

Równolegle badano reakcję Michaela ze szczególnym zainteresowaniem reakcjami prowadzonymi w obecności wody. Stwierdzono, że reakcje aldehydów alifatycznych z akceptorami Michaela mogą być katalizowane prostymi chiralnymi  $\alpha$ -aminoalkoholami, co dotychczas nie było odnotowane w literaturze.

*Grant NCN 2011/03/B/ST5/03126 - kierownik: prof. J. Młynarski*

Umowa grantowa podpisana 10/2012, nie uzyskano więc jeszcze wyników prac badawczych.

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

*Badania statutowe:*

Kontynuowano prace związane z syntezą 2-nitrozodiaryloamin. Badano wpływ podstawników zarówno w nitrozwiązku jak i w anilinie na przebieg reakcji, w tym regioselektywność, w przypadkach, gdy to było możliwe.

Zbadano wpływ grupy nitrozowej na reakcję aromatycznego nukleofilowego podstawienia nukleofilami tlenowymi i azotowymi w 2-nitrozodiaryloaminach posiadających podstawniki, mogące pełnić rolę grup odchodzących. Okazało się, że w odróżnieniu od analogów z grupą nitrową, w odpowiednich 2-nitrozodiaryloaminach szczególnie aktywowana na podstawienie aromatyczne jest grupa w pozycji *para*- względem grupy nitrozowej. Zsyntetyzowano tą drogą szereg 2-nitrozodiaryloamin podstawionych w poz. *para*- nukleofilami tlenowymi a w szczególności azotowymi nieosiągalne metodą bezpośredniej reakcji nitroarenu z aniliną.

Kontynuowano badanie 2-nitrozodiaryloamin jako substratów do dalszych reakcji. W szczególności badano reakcję 2-nitrozodiaryloamin z alkilowanymi estrami kwasu cyjanooctowego. W najprostszym przypadku obserwowano powstawanie 4-N-tlenków chinoksalin-2(H)-onów. W niektórych przypadkach okazało się, że z jedną cząsteczką 2-nitrozodiaryloaminy reagują dwie cząsteczki alkilowanego estru kwasu cyjanooctowego przy czym jedna tworzy układ chinoksalin-2(H)-onu a druga po przyłączeniu w poz. *meta*-(!) zamyka pierścień oksindolu.

### **Zespół IX – dr hab. Agnieszka Szumna**

*Badania statutowe:*

Celem było otrzymanie nowych platform makrocyclicznych do konstrukcji supramolekularnych sensorów lub nanoreaktrów. Opracowana została nowatorska metoda syntezy pillar[5]arenów z zastosowaniem kwasu trifluorooctowego jako katalizatora w zastępstwie katalizatorów o charakterze kwasów Lewisa ( $\text{BF}_3 \times \text{Et}_2\text{O}$ ,  $\text{FeCl}_3$ ,  $\text{AlCl}_3$ ). Pozwoliło to na syntezę tego bloku budulcowego z wyższą wydajnością, a dodatkowo wyeliminowało konieczność stosowania ściśle bezwodnych warunków. Stwierdzono, że w zaproponowanych warunkach reakcja przebiega na sposób odwracalny i jest templatowana cząsteczkami rozpuszczalnika. W luce pillar[5]arenu selektywnie kompleksowane są DCM oraz DCE za pomocą oddziaływań typu wiązania wodorowego oraz oddziaływania halogen- $\pi$ . Te oddziaływania są kluczową siłą napędową reakcji makrocyclizacji. Zbadano również możliwości otrzymania zupełnie nowych makrocyclicznych bloków budulcowych na drodze termodynamicznie kontrolowanej reakcji templatowej. W wyniku tych prac udało się otrzymać dwa nieznanne dotychczas związki makrocycliczne.

*Grant NCN N204 187839 - kierownik: dr hab. A. Szumna*

Kontynuowano badania nad reaktywnością małych cząsteczek organicznych we wnętrzu chiralnych kapsuł o odwróconej polarności. Zbadano kompleksowanie potencjalnych substratów reakcji Norrish-Yanga, hydrolizy epoksydów oraz reakcji Darzensa we wnętrzu kapsuł. Scharakteryzowano powstające kompleksy za pomocą NMR (kompleksy o różnych stechiometriach oraz kompleksy z kilkoma cząsteczkami jednocześnie). Przeprowadzono badania ich reaktywności we wnętrzu kapsuł. Reakcje indukowane były na sposób termiczny oraz fotochemiczny. W żadnym przypadku nie stwierdzono reakcji we wnętrzu kapsuły. Wykazano natomiast bardzo wysoką selektywność kompleksowania dla enancjomerów produktu jednej z reakcji: 1,2-trans-cykloheksanodiolu (>99%). Planowane jest wykorzystanie tego faktu do rozdziału mieszanin enancjomerów. Dodatkowo zbadano możliwość utworzenia nowych kapsuł hybrydowych. Przeprowadzono efektywnie sterowaną chiralnym sortowaniem syntezę hybrydowych kapsuł zbudowanych z półsfery, które nie mogą być otrzymane niezależnie.

*Grant FNP POMOST/2011-4/10 - kierownik dr hab. A. Szumna*

W ramach tego grantu przeprowadzono syntezę podstawowych bloków budulcowych, związków makrocyklicznych, które mają posłużyć jako zręby kapsuł do dalszej modyfikacji. Otrzymano wyjściowy rezorcyn[4]aren, pillar[6]aren oraz pillar[5]aren. Przeprowadzono reakcję Mannicha rezorcyn[4]arenu z różnymi aminokwasami, aby sprawdzić wpływ łańcucha bocznego na tworzenie się asocjatów. Przy użyciu metod NMR zbadano również, jakie proste pochodne aminokwasów mogą być kompleksowane. W wyniku badań oraz w oparciu o dostępne struktury krystalograficzne zaprojektowano dipeptydy, które mają największe szanse na (1) utworzenie kapsuły i (2) uniknięcie niepożądanego procesu samo-enkapsulacji. Zostały wytypowane następujące dipeptydy: Gly-LVal, Gly-LPhg, Gly-LPhe, LPhg-Gly, LPhg-DPhg i rozpoczęta została ich synteza.

## **Zespół VIII – prof. Janusz Jurczak**

*Badania statutowe:*

Dokonano, w oparciu o enancjoselektywną reakcję cyklokondensacji Danishefsky'ego, formalnej syntezy optycznie czystego kwasu galantyminowego. Skonstruowano kilka nowych platform aromatycznych dla receptorów na aniony, z których uzyskano chiralne pochodne w wyniku reakcji z aminokwasami i cukrami, a następnie scharakteryzowano odpowiednie kompleksy pod względem strukturalnym i spektralnym.

Kontynuowano badania stałych trwałości kompleksów makrocyklicznych receptorów z różnego typu gośćmi, głównie o charakterze anionów (siarczany, węglany), techniką miareczkowania mikrokalorymetrycznego i wykazano dobrą zgodność tak otrzymanych danych z wynikami osiągniętymi na innych drogach.

*Grant POIG.01.01.02-14-102/09 (Cukry) - kierownik: prof. J. Jurczak*

Uzyskano szereg nowych, wysoce efektywnych chiralnych receptorów na aniony, zawierających w swej strukturze cukrowe bloki budulcowe. Ponadto przeprowadziliśmy z powodzeniem syntezę szeregu pochodnych cyklodekstryn, także potencjalnie użytecznych w rozpoznaniu chiralnym.

*Grant „MAESTRO” UMO-2011/02/A/ST5/00439*

Rozpoczęto przygotowania do podjęcia prac badawczych w ramach grantu.

## Zespół X – prof. Daniel T. Gryko

### *Badania statutowe:*

Prowadzono prace nad otrzymaniem układów dwuchromoforowych składających się z korolu i dodatkowego chromoforu. Otrzymano szereg związków, w których korol połączony jest z imidami aromatycznymi. Badano układy, w których korol spełnia rolę donora elektronów i akceptora energii. Kontynuowano prace nad syntezą porfiryn o rozszerzonym chromoforze. Zsyntetyzowano szereg porfiryn z podstawnikami indolowymi w pozycji *mezo*, które posłużą jako substraty do reakcji oksydacyjnego sprzęgania.

*Grant FNP - Program Ventures (Ventures /2009-4/6) - kierownik: Agnieszka Nowak-Król*

Prowadzono prace nad otrzymaniem blokera optycznego o odpowiednich cechach drugorzędowych. Otrzymano bis-porfirynę, w której jednostki porfirynowe połączone zostały mostkiem dietyldiketopiropirolowym oraz *trans*-A<sub>2</sub>B<sub>2</sub>-porfiryny podstawione dwoma ugrupowaniami trialkoksyfenyłowymi oraz dwoma trialkoksyfenyloetynowymi. Przeprowadzone badania strukturalne oraz fotofizyczne wykazały, że związki te mają charakter ciekłokrystaliczny i duży przekrój czynny na absorpcję dwufotonową.

*Grant FNP TEAM (No TEAM-2009-4/3) - kierownik: prof. D. T. Gryko*

Otrzymano szereg platform fluorescencyjnych, pochodnych imidazoli, diketopirolopiroli (DPP), merocyjanin, pirolo[3,2-*b*]pirolo, kumaryn i pikolin. Zbadano ich właściwości spektroskopowe i fotofizyczne. Prowadzone są badania zmierzające do wykorzystania tego typu związków do barwienia komórek w mikroskopii fluorescencyjnej. Zsyntetyzowano również szereg porfiryn o rozszerzonym chromoforze i podstawnikach ułatwiających rozpuszczalność.

## Zespół XIV – dr hab. Zbigniew Kaluża, prof. nadzw.

### *Badania statutowe:*

Kontynuowano prace związane z projektowaniem, syntezą oraz zastosowaniem w asymetrycznej katalizie nowych ligandów. Celem badań była dalsza optymalizacja struktury tryklicyjnych ligandów diaminowych. Wychodząc z L-proliny otrzymano szereg diamin, zawierających różne podstawniki na obu atomach azotu; nie wpłynęło to jednak znacząco na wzrost stereoselektywności testowej reakcji nitroaldolowej. Lepsze rezultaty osiągnięto modyfikując podstawnik naftalenometylowego na atomie N-2; zaobserwowano dość znaczny wzrost enancjoselektywności tej reakcji. Rezultatem tych badań jest zgłoszenie patentowe P.401 056 (2012-10-04).

*Grant promotorski N N204 271538 - kierownik: dr hab. Z. Kaluża*

Celem badań było dokończenie testów otrzymanych w poprzednim okresie ligandów w asymetrycznych reakcjach: nitroaldolowej i karbamoilowania mezo-dioli. C<sub>2</sub>-Symetryczne diaminy (pochodne L-proliny oraz kwasu L-winowego) w testowej reakcji benzaldehydu z nitrometanem katalizowanej kompleksami octanu miedzi(II) dawały odpowiednie β-nitroalkohole z dobrymi nadmiarami enancjomerycznymi (do 87% ee.).

Przeprowadzono próby asymetrycznego karbamoilowania testowego 1,2-cykloheksanodiolu. Niestety w reakcjach katalizowanych kompleksami otrzymanych diaminami, zarówno z tryflanem jak i chlorkiem miedzi(II) otrzymano z dobrą wydajnością wyłącznie mieszaniny racemiczne monokarbaminianów.

*Grant N N204 123437 - kierownik: dr hab. Z. Kałuża (własny)*

Celem badań było dokończenie syntezy kilku naturalnych alkaloidów (+)-erysotramidyny, (+)-erysotryny i (+)-dihydro-erysotryny. Otrzymane uprzednio [z kwasu (L)-jabłkowego] odpowiednie (Z)-jodki winylowe, poddano cyklizacji Heck'a, a następnie z powstałej demetoksy-erysotramidyny otrzymano (w wyniku metylowania w warunkach PTC) (+)-erysotramidynę. W podobny sposób otrzymano erysotramidynę. Redukcja glinowodorkiem litu otrzymanego alkaloidu dała kolejny związek naturalny (+)-erysotrinę. Związki zawierające szkielet (+)-dihydroerysotryny otrzymano na drodze wewnątrzcząsteczkowej 1,4-addycji miedziorganicznej pochodnej wygenerowanej z odpowiednich jodków.

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

*Badania statutowe:*

Synteza fotolabilnych znaczników opartych na witaminie B<sub>12</sub> do określenia struktury enzymu sGC. - jest to zadanie nowe

Zsyntetyzowano pochodną hydrofobowej witaminy B<sub>12</sub> zawierającą grupę *p*-azydo perfluorofenyłową, która posłuży do określenia miejsca wiązania pochodnych kwasu kobrynowego oraz struktury enzymu sGC.

*Grant NN 204 187139 - kierownik: dr. hab. D. Gryko*

Wykazano, że w reakcjach organokatalitycznego fotochemicznego utleniania aldehydów w pozycji  $\alpha$  istotną rolę odgrywa budowa katalizatora hybrydowego, spełniającego funkcję fotouczulacza. Wraz ze wzrostem liczby jednostek prolinowych w porfirynie wzrasta efektywność katalizatora.

*Grant TEAM/2009-3/4 - kierownik: dr. hab. D. Gryko*

Opracowano syntezy:

- a) tzw. 'clickable' witaminy B<sub>12</sub> tzn. pochodnej posiadającej grupę –N<sub>3</sub> w pozycji 5' jednostki rybozy;
- b) fosforanowych pochodnych porfiryn z odpowiednich alkoholi i fenoli; c) heptaamidów kwasu kobrynowego.

*Grant 2011/01/N/ST5/05613 - kierownik: dr. hab. D. Gryko*

Wykazano, że użycie zarówno [(Phen)Cu(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NO<sub>3</sub>] jak i Cp\*Ru(COD)Cl pozwala na przeprowadzenie reakcji cykloaddycji porfirynowych pochodnych posiadających terminalne ugrupowanie alkinowe lub azydkowe z alifatycznymi bądź aromatycznymi odpowiednikami z uniknięciem insercji metalu do pierścienia tetrapirrolowego.

*Grant Diamentowy No DI2011014541- kierownik: Maciej Giedyk*

Heptaester metylowy kwasu kobrynowego poddano reakcjom aminolizy w obecności różnych enzymów. W przypadku użycia stężonych roztworów, reakcja daje dwa regioizomeryczne amidy; niestety, okazało się, że nie jest to proces katalizowany enzymatycznie.

### **Zespół XXI – dr Piotr Wierzchowski**

*Badania statutowe:*

Badano reakcję rozkładu wodoronadtlenku cykloheksylu w celu określenia jej mechanizmu i kinetyki w środowisku alkalicznym wobec katalizatora kobaltowego. Wykonano pomiary



kinetyki rozkładu wodoronadtlenku cykloheksylu w obecności dodatków istotnie wpływających na selektywność (fenolu i TEMPO). Uzyskane wyniki posłużyły do pozytywnej weryfikacji uprzednio zaproponowanego modelu kinetycznego. Wykonano obliczenia metodą DFT kilkudziesięciu struktur kompleksów cztero-koordynacyjnego kobaltu, które są istotne jako struktury reagentów, stanów przejściowych i produktów pośrednich w trakcie przemiany wodoronadtlenku. Wszystkie te działania były wykonane w celu pełniejszego udokumentowania zaproponowanego mechanizmu reakcji.

*Prace na zamówienie:*

W 2012 roku zespół przyjął do wykonania duże zlecenie wykonania pracy naukowej dla Zakładów Azotowych Tarnów. Obejmowało ono badania nowych katalizatorów i kokatalizatorów zwiększających selektywność otrzymywania wodoronadtlenku w reakcji utleniania cykloheksanu. Skonstruowano nowe stanowisko badawcze. Wykonano serię pomiarów nowych kokatalizatorów współpracujących z obecnie stosowanym w Tarnowie. Przygotowano duże opracowanie obejmujące omówienie nowych danych jakie pojawiły się w ostatnich latach w literaturze naukowej i patentowej oraz wynik badań własnych.

### **Zespół XXIII – prof. Krzysztof Wojciechowski**

*Badania statutowe:*

Kontynuowano badania nad wykorzystaniem produktów reakcji nukleofilowego podstawienia wodoru w nitroarenach do syntezy skondensowanych pochodnych heterocykli azotowych

*Grant No NN204 193 038 - kierownik: prof. K. Wojciechowski*

Opracowano metodę syntezy pochodnych 4-cyjanochinoliny z cyjanków 2-nitrobenzylowych. Opracowano metodę syntezy pirolofenazyn z nitroindoli i amin aromatycznych.

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

### **Zespół IV – prof. Sławomir Jarosz**

*Badania statutowe:*

Otrzymany uprzednio C12-poli-alkohol z wolnymi terminalnymi grupami OH poddano konwersji do di-olefiny, a następnie próbom (nieskutecznym) reakcji cyklizacji w warunkach RCM. Inne podejście to podwójne allilowanie prowadzące do odpowiedniej homologowanej di-olefiny. Alternatywna próba obejmowała utlenienie do di-aldehydu i reakcję z bromkiem winylomagnezowym prowadzącej do czterech diastereoizomerycznych alkoholi allilowych. Obie te pochodne ulegały cyklizacji w warunkach RCM. Złożono pracę doktorską (Anna Osuch-Kwiatkowska).

Otrzymano prekursor (enon) cukru wyższego o 12 atomach węgla w łańcuchu poprzez reakcję fosfonianu pochodnego D-galaktozy z aldehydem 'ksylozowym'. Ten związek będzie przedmiotem wspólnych badań z grupą prof. Zbigniewa Witczaka z USA.

Przeprowadzono syntezę i badania biologiczne saponin lupanowych ze zmodyfikowanym szkieletem lupanowym [przedłużony łańcuch węglowy w pozycji 28 oraz modyfikacja wiąza-

nia podwójnego 20(29)]. Opracowano nową, preparatywną metodę syntezy disacharydu OSW-1.

Opracowano pierwszą preparatywną metodę syntezy rodanków anomerycznych o konfiguracji 1,2-*cis* i zaproponowano mechanizm reakcji.

*Grant NN 204 175938 (promotorski) - kierownik: prof. S. Jarosz*

Zrealizowano reakcję aldolową pomiędzy izopropylidenową pochodną dihydroksyacetonu i 2,3:4,5-di-*O*-izopropylideno-**D**-arabinozą. Reakcja katalizowana **L**-proliną prowadziła głównie do *anti*-aldolu o konfiguracji *SS* na nowo powstałych centrach stereogenicznych, podczas gdy w reakcji katalizowanej **D**-proliną powstawał przeciwny *RR*-aldol. Opracowano metodę konwersji tych aldoli do alditoli. Została złożona praca doktorska (doktorant: Maciej Cieplak).

*Grant NN 204 178438 (promotorski) - kierownik: prof. S. Jarosz*

Otrzymano w pełni odbezpieczoną pochodną bicykliczną zawierającą atom azotu w pierścieniu 7-członowym. Związek ten poddano badaniom biologicznym; nie wykazał on jednak znaczącej aktywności. Została złożona praca doktorska (doktorantka: Marta Magdycz).

*Grant POIG.01.01.02-14-102/09 (Cukry) - kierownik: prof. S. Jarosz*

Prace w tym projekcie podzielone są na dwa nurty:

### *1. Synteza i właściwości bicyklicznych mimetyków cukrów prostych*

Otrzymane w roku 2011 dienocukry poddano próbom reakcji prowadzących do układów dekaliny; próby zakończyły się niestety niepowodzeniem. Udało się jednak te dienocukry przeprowadzić w odpowiednie oksymy, które w reakcji cykloaddycji oksym-olefina dały izo-oksazoliny, będące substratami w kolejnych etapach. Poprawiono również ścieżkę syntetyczną prowadzącą do dienocukrów, poprzez zamianę glukozydu metylu na glukozyd *tert*-butylo-difenylosililowy, co zwiększyło wydajność newralgicznego etapu hydrolizy glikozydu.

Kontynuowano badania nad metodami syntezy wysoce sfunekjonalizowanych pochodnych bicyklo[4.4.0]dekanu i bicyklo[4.5.0]undekanu, mogących zawierać w pierścieniu także heteroatomy (N, S, O). Opracowano metodologię otrzymywania prekursorów takich pochodnych, wykorzystując jako etap kluczowy syntezę typu „one pot”: addycja Michaela – reakcja aldolowa.

Opracowano metodę syntezy w pełni hydroksylowanych karbocyklicznych mimetyków cukrów oraz takich, zawierających atom azotu w jednym z pierścieni. Po odbezpieczeniu, oba typy mimetyków poddano badaniom biologicznym. Niestety, żadna z pochodnych nie wykazała istotnej aktywności.

### *2. Chemia sacharozy: synteza i właściwości kompleksujące makrocyclicznych receptorów.*

Otrzymano szereg nowych aza-koronandów z rdzeniem sacharozy. Zbadano ich właściwości kompleksujące w stosunku do  $\alpha$ -fenyloetyloaminy; wykazano, że selektywnie kompleksują one *S*-izomer. Opracowano skuteczną metodę otrzymywania makrocyclicznych diamidów zawierających rdzeń sacharozy.

Prowadzone są syntezy zmierzające do układów makrocyclicznych zawierających dwie jednostki sacharozowe. Otrzymano prekursor takich związków poprzez połączenie odpowiednio aktywowanych jednostek disacharydowych na drodze reakcji Hornera-Wadswortha-Emmonsa, w wyniku czego powstała otwarto-łańcuchowa pochodna. Obecnie pracujemy nad cyklizacją układu (połączenie ‘końców’).

Rozpoczęto badania nad selektywną funkcjonalizacją pozycji terminalnych w 2,3,3',4,4'-penta-*O*-benzylosacharozie. Otrzymano, z dobrymi wydajnościami, szereg pochodnych selektywnie aktywowanych w pozycjach terminalnych, które będą wykorzystane w syntezie receptorów o charakterze eterów koronowych (również o symetrii C-2), lariatów i kryptandów.

## **Zespół XX – prof. Ryszard Ostaszewski**

### *Badania statutowe:*

Wykonano badania nad opracowaniem nowego wariantu reakcji Ugi katalizowanej przez enzymy. Stwierdzono, że w reakcji powstaje nowy produkt trzykomponentowej reakcji Ugi'ego, który nie powstaje bez obecności enzymu. Temat nie był kontynuacją badań poprzednich.

*Grant POIG.01.03.01-00-158/09 (Biotransformacje) – kierownik prof. R. Ostaszewski*

W ramach realizacji zadania I: „Chemoenzymatyczna synteza wybranych leków generycznych” wykonano badania nad metodyką rozdziału racemicznego kwasu 3-hydrokso-3-(*p*-nitrofenylo)propionowego (rozdział: kinetyczny i dynamiczny). Stwierdzono, że na proces rozdziału kinetycznego ma ogromny wpływ zastosowany enzym a zastosowanie kilku enzymów w reakcjach prowadzonych w rozpuszczalnikach organicznych daje znakomite efekty. Wykazano, że zaobserwowany efekt synergiczny działania enzymów zależy silnie od zawartości wody w mieszaninach reakcyjnych.

W zadaniu II: „Chemoenzymatyczna synteza nowych związków o działaniu antynowotworowym”, kontynuowano badania nad zastosowaniem reakcji Ugi'ego w syntezie nowych inhibitorów układu: tioredoksyna – reduktaza tioredoksyny. Uzyskano szereg nowych związków, które zostały poddane badaniom na wybranych liniach komórkowych.

*Grant MNiSzW 1276/B/P01/2011/40 (WUM) - wykonawca w IChO: prof. R. Ostaszewski*

Wykonano badania wstępne nad opracowaniem nowego typu inhibitorów układu tioredoksyny - reduktaza tioredoksyny. Stwierdzono, że tripeptydy, które są produktami reakcji Ugi'ego, posiadające grupę chloroacylową na *N*-końcu są dobrymi inhibitorami tego układu.

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

## **Zespół I – prof. Witold Danikiewicz**

### *Badania statutowe:*

W ramach tych badań zrealizowano następujące tematy:

Wykonano obliczenia powinowactwa do protonu anionów ok. 50 podstawionych kwasów benzoesowych i innych kwasów aromatycznych. Wykorzystano w nich wybrane metody DFT oraz metody złożone G3MP2 i G4MP2.

Rozpoczęto obliczenia mające na celu ustalenie wpływu rodzaju i położenia podstawników w pierścieniu nitrobenzenu na względną szybkość addycji czynników nukleofilowych.

Wykonano badania metodą HPLC/MS dotyczące oznaczenia zawartości prenoli i dolicholi w korzeniach włoskowatych *Arabidopsis Thaliana* w zależności od dostępności cukrów.

Badano wybrane reakcje akceptorów Michaela z syntonami rodników siarczanowych w fazie wodnej za pomocą techniki HPLC-MS/MS.

Optymalizowano metody identyfikacji fosfolipidów izolowanych z komórek bakterii i pierwotniaków z wykorzystaniem technik HPLC-MS w fazach normalnych i odwróconych.

Prowadzono badania trwałości kompleksów niekowalencyjnych cyklodekstryn z kwasem foliowym z wykorzystaniem spektrometrii mas.

*Grant POIG.01.03.01-14-036/09 (Poliprenole)- kierownik: prof. W. Danikiewicz*

Rozpoczęto badania możliwości zastosowania techniki UPLC/ESI-MS do oznaczeń alkoholi poliizoprenoidów i ich pochodnych oraz rozpoczęto badania nad identyfikacją estrów poliizoprenoidów za pomocą techniki MS i LC/MS.

*Grant POIG 01.01.02-14-054/09 (Metagenomy)- kierownik: prof. W. Danikiewicz*

Kontynuowano prace mające na celu opracowanie metod wykorzystujących HPLC-MS i GC-MS do śledzenia zmian zawartości pestycydów w próbkach hodowli bakteryjnych na pożywkach zawierających środki ochrony roślin jako źródło pokarmu dla bakterii.

*Grant MNiSW N N204 263 837 (własny)- kierownik: prof. W. Danikiewicz*

Zakończono badania katalizatorów salenowych za pomocą różnych technik jonizacji (ESI, APCI, APPI i FD) w celu ustalenia, które metody zapewniają najwyższą czułość pomiaru. Grant został zakończony 4.10.2012 – opracowano i złożono raport końcowy.

*Grant Iuventus Plus IP2011064171- kierownik: dr Magdalena Zimnicka*

Wykonano syntezę części związków modelowych, które będą następnie wykorzystane do dalszych badań. Wykonano również część badań teoretycznych konformacji modelowych ditiopetoidów, hybryd stanowiących połączenie jednostki tiopeptoidów i peptoidów oraz dipeptoidów jako związków porównawczych za pomocą metod chemii kwantowej (DFT).

*Grant 2011/03/D/ST4/03067 - kierownik: dr Magdalena Zimnicka*

Wykonano część badań mających na celu dobranie warunków pomiarów pozwalających na badania kompleksów niekowalencyjnych takich jak: wybór rozpuszczalnika, pH roztworów, stężenie receptora i liganda, dobór warunków pomiarów widm masowych (potencjał deklasteringu, potencjał ogniskowania, napięcie).

*Grant 2011/03/D/ST5/06066 – kierownik dr Rafał Loska*

Otrzymano serię 10 difluoroalkenów, a następnie zbadano ich reakcje z *N*-tlenkiem chinoliny i innymi wybranymi *N*-tlenkami azyn.

*Grant MNiSW N N405 362237(kierownik: dr W. Szypuła - WUM); wykonawca w IChO: prof. W. Danikiewicz*

Kontynuowano prace nad optymalizacją metod HPLC-MS do identyfikacji alkaloidów w próbkach naturalnych.

## **Zespół V – prof. Sławomir Szymański**

*Badania statutowe:*

Zsyntetyzowano serię makrocyklicznych kompleksów Cu(II) i Ni(II) zbudowanych z jednej lub dwóch 16-członowych jednostek cyklidenowych kompleksujących jony metali. Stwierdzono, że ligandy 16-członowe stabilizują kompleksy miedzi i niklu nie tylko na trzecim ale także pierwszym stopniu utlenienia. Przeprowadzono syntezę cyklicznych oligomerów zbudowanych

wanych z kationów imidazoliowych połączonych mostkami *p*-ksylenowymi i ustalono struktury cyklicznego dimeru, trimeru i tetrameru.

Metodą iteracyjnej analizy protonowych widm NMR szeregu cyklofenów (cyklofanów, w których mostki spinające pierścienie benzenowe są nienasycone) wyznaczono dokładne wartości stałych sprzężenia spinowo-spinowego oraz przesunięć chemicznych, które skonfrontowano z obliczonymi teoretycznie, z użyciem metod chemii kwantowej.

*Grant NN204 151640 - kierownik: prof. Bogdan Korybut-Daszkiewicz*

Otrzymano dwie serie bis-makrocyklicznych neutralnych kompleksów zbudowanych z dwóch jednostek makrocyklicznych zawierających jony Ni(II) i Cu(II). Otrzymano wszystkie cztery możliwe kombinacje kompleksów homo- i hetero-nuklearnych o różnych rozmiarach luki. Na podstawie badań MS stwierdzono powstawanie rotaksanów w reakcjach z wykorzystaniem  $\pi$ -akceptorowych, kationowych kompleksów tetraazamakrocyklicznych zawierających grupy blokujące w łańcuchach bocznych i eterów dibenzokoronowych jako  $\pi$ -donorów. Zsyntetyzowano i przebadano oddziaływania z różnymi eterami koronowymi serii różnie podstawionych makrocyklicznych kompleksów miedzi(II). Stwierdzono tworzenie się pseudorotaksanów w roztworze.

*Grant NCN 2011/01/N/ST5/05560 (Preludium) - kierownik: Mateusz Woźny*

Opracowano metody syntezy potencjalnych „osi rotaksanowych” zawierających dwie neutralne jednostki makrocykliczne. Przeprowadzono próby syntezy rotaksanów zawierających kompleksy neutralne jako elementy „osi” i kationowe kompleksy bis-makrocykliczne. Na podstawie badań ESI-MS stwierdzono powstawanie rotaksanów lecz nie udało się ich wyodrębnić preparatywnie.

*Grant NCN 2011/01/N/ST5/05558 (Preludium) - kierownik: Iwona Mames*

Otrzymano serię bis-makrocyklicznych, neutralnych kompleksów miedzi(II) i niklu(II), które tworzą kompleksy gość-gospodarz z ubogimi w elektrony cząsteczkami takimi jak TCNQ, kation NN'-dimetylo-4,4'-bipirydylowy oraz kationy cyklidenowych kompleksów niklu(II) i miedzi(II). Kompleksy te zidentyfikowano metodami elektrochemicznymi i spektroskopowymi.

*Grant NN204 187639 - kierownik: prof. S. Szymański*

W oparciu o własny model tłumionej rotacji kwantowej opracowano kwantową teorię relaksacji spin-sieć protonowanych grup metylowych w kryształach molekularnych. Wykorzystując literaturowe dane eksperymentalne, przedstawiono wstępne, przekonujące potwierdzenie opracowanej teorii.

*Grant FNP 2011-3/6 (HOMING PLUS) - kierownik: dr Jarosław Kowalski*

W wyniku prac nad syntezą syntezą analogów DNA, opartych o cyklidenowe kompleksy metali przejściowych, otrzymano monomery bazujące na triformylometanie i serinolu oraz triformylometanie i L-treoninalu. Monomery te zostaną wykorzystane do syntezy cyklidenowych analogów DNA na drodze samoorganizacji.

## **Zespół XI – prof. Lech Kozerski**

### *Badania statutowe*

Wykonano badania struktury trzeciorzędowej insuliny B28Lys-B29Pro w rozpuszczalniku wodno-organicznym i w wodzie. Stwierdzono, że są one bardzo podobne i w takim samym

stopniu zbliżone do struktury w kryształach. Sieć wiązań wodorowych jest identyczna w obydwu rozpuszczalnikach.

Udowodniono, że rozpuszczalnik wodno-organiczny ( $H_2O/CD_3CN$ , 73/27 vol.%) zachowuje strukturę natywną obserwowaną w wodzie a niszczy strukturę czwartorzędową (multi-mery) Tym samym wprowadziliśmy nowy rozpuszczalnik do bazy mediów, w których można wyznaczać strukturę monomeru białek

*Grant MNiSW NN204 131836 - kierownik: Wojciech Bocian*

Prowadzono badania nad syntezą aminoalkilowanych pochodnych metabolitu irinotekanu o symbolu SN38. Testowano różne warianty syntezy typu Mannicha. Zsyntezowano nowe pochodne aminoalkilowe kamptotecyny wykazujące właściwości samoistnego wiązania kowalencyjnego oligomerów DNA. Wysłano zgłoszenie patentowe dotyczące syntezy, właściwości biologicznych i możliwości zastosowania w terapii przeciwnowotworowej

## **Zespół XII – prof. Zofia Lipkowska**

*Badania statutowe:*

Wprowadzono do syntezy dendrymerów (o strukturze mieszanej organiczno-aminokwasowej) nowy element rozgałęziający: bis(3-aminopropyl)aminę. Zastosowanie takiego bloku budulcowego pozwala na syntezę gęsto upakowanych dendrymerów.

Kontynuowano badania metodami spektroskopowymi i rentgenograficznymi nowych chiralnych materiałów o strukturze MOF (metal-organic-framework) do wykorzystania jako katalizatory o porowatej strukturze w stereoselektywnych reakcjach organicznych.

*Grant MNiSW NN204 239436 - kierownik: prof. Z. Lipkowska*

W wyniku jego realizacji otrzymano kilka nowych grup dendrymerów o strukturze mieszanej organiczno-aminokwasowej, aktywnych przeciwdrobnoustrojowo w warunkach fizjologicznego stężenia soli. Dla niektórych z nich znaleziono potrójny mechanizm działania przeciwdrobnoustrojowego. Projekt zakończono.

*Grant NCBiR: NR13-0153-10 (rozwojowy) - kierownik: prof. Z. Lipkowska*

Projekt jest realizowany we współpracy z zespołem dr J. Soleckiej z NIZP-PZH: Przeprowadzono syntezę w skali wielkolaboratoryjnej oraz badania mikrobiologiczne dla wyselekcjonowanych związków o najlepszych właściwościach wobec szpitalnych izolatów bakterii *S. aureus*, i *E. coli*.

## **Zespół XIII – prof. Jadwiga Frelek**

*Badania statutowe:*

Opracowano skuteczną metodę określania konfiguracji absolutnej nowopowstającego centrum stereogenicznego w reakcji enzymatycznej transestryfikacji prochiralnego 1-(((1,3-dihydroxypropan-2-yl)oxy)methyl)-5-methyl-pyrimidine-2,4(1*H*,3*H*)-dionu z wykorzystaniem połączonej eksperymentalno-teoretycznej analizy widm elektronowego dichroizmu kołowego.

Uzyskane wyniki umożliwiły określenie wpływu zarówno rozpuszczalników, jak i czynników acylujących na enancjoselektywność enzymatycznej reakcji transestryfikacji przy użyciu lipazy (EC 3.1.1.3) Amano PS z *Burkholderia cepacia*.

*Grant No NN204 187439 - kierownik: prof. J. Frelek*

Znaleziono alternatywne do tetraoctanu dimolibdenu tetrakarboksylany w postaci tetraizowalerianu i tetrapivalanu dimolibdenu mogące służyć jako chromofory pomocnicze w badaniach dichroicznych i ustalaniu konfiguracji absolutnej związków transparentnych w zakresie UV-VIS.

*Grant NCN No. UMO 2011/01/B/ST5/06413 - kierownik: prof. J. Frelek*

Bazując na eksperymentalno-teoretycznej analizie wyników dichroizmu kołowego znaleziono korelację pomiędzy konformacją pierścienia cyklopentanonowego w steroidowych *cis*-enonach a znakiem efektu Cottona odpowiadającym enonowemu przejściu  $n \rightarrow \pi^*$ .

*Grant NCN No UMO-2011/01/B/ST5/00827 - kierownik: prof. Jerzy Wicha*

Wychodząc z 2-furylometylokarbinolu, opracowano wydajną metodę otrzymywania optycznie czynnego (*S*)-4-hydroksy-2-metylcyclopent-2-en-1-onu, głównego związku pośredniego w syntezie guanakastepenu i heptemeronu.

*Grant NCN No UMO-2011/03/N/ST4/02426 - kierownik: mgr inż. Marcin Górecki*

W oparciu o wyniki spektroskopii elektronowego i oscylacyjnego dichroizmu kołowego linezolidu, antybiotyku o znaczeniu farmaceutycznym, wykazano możliwość wykorzystania tych metod do rozróżniania form polimorficznych, tym samym stwarzając podstawy nowej metody badań chiralnych aktywnych substancji farmaceutycznych (API) wykazujących zjawisko polimorfizmu.

*Grant IUVENTUS PLUS No IP2011061771 - kierownik: dr inż. Magdalena Woźnica*

Na podstawie wyników pomiarów eksperymentalnych wspartych obliczeniami TD DFT stwierdzono, iż reguła helikalności może być skutecznie stosowana do określania konfiguracji absolutnej zwornikowego atomu węgla C6 w trójcyklicznych analogach cefalosporyn zawierających układ chromanu.

## **Zespół XVI – dr hab. Jarosław Jaźwiński, prof. nadzw.**

### *Badania statutowe:*

Stosując metody magnetycznego rezonansu jądrowego zbadano występowanie i struktury wewnątrzcząsteczkowego wiązania wodorowego w pochodnych kwasu dehydrooctowego i *p*-fenylenodiaminy oraz szeregiem podstawionych aldehydów salicylowych; pochodnych 4-aminoantypiryny i podstawionych aldehydów salicylowych oraz pochodnych argininy i podstawionych aldehydów salicylowych i ich kompleksów z kadmem. Na podstawie analizy przesunięć chemicznych  $^{15}\text{N}$  i  $^{13}\text{C}$  oraz sprzężeń spin-spin wodor-azot określono położenie atomu wodoru w mostkach. Otrzymano polimeryczne addukty dimerycznych soli rodu i molibdenu z bipirydynami i diaminami aromatycznymi; addukty te zbadano metodami pomiarów NMR w ciele stałym ( $^{15}\text{N}$  i  $^{13}\text{C}$  CPMAS NMR). Na podstawie tych pomiarów stwierdzono występowanie dobrze zdefiniowanych polimerycznych struktur tych adduktów.

*Grant NN204 266739 - kierownik: dr hab. J. Jaźwiński*

Zastosowano metody DFT do obliczenia przesunięć chemicznych  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  i  $^{15}\text{N}$  oraz zmian tych przesunięć pod wpływem kompleksowania soli rodu w serii ligandów organicznych: policyklicznych ligandów tlenowych oraz poliheteroatomowych pochodnych pirydyn. W obliczeniach zastosowano funkcjonały B3LYP i B3PW91 oraz bazy 6-311G++(2d,p), cc-pVDZ i cc-pVTZ dla atomów C, H, N, O i F, oraz bazy LANL2DZ i Stuttgart dla atomów rodu. Na drodze teoretycznej odtworzono jakościowo zmiany przesunięć chemicznych dla

jąder  $^1\text{H}$  i  $^{15}\text{N}$ . W przypadku jąder  $^{13}\text{C}$  wyniki okazały się są zbyt niedokładne do praktycznych zastosowań. Rozpoczęto syntezę nowych chiralnych dimerycznych soli rodu(II).

### **Zespół XXII – prof. Michał Jaszuński**

#### *Badania statutowe:*

W badaniach stałej sprzężenia spin-spin w cząsteczce HD stwierdzono, że istotna dla porównania z nowym wynikiem eksperymentalnym jest bardzo dokładna analiza efektów rowibracyjnych (błąd przybliżonych obliczeń przekracza błąd obliczenia tej stałej dla geometrii minimum). Przeprowadzono także, dla innych molekuł, pierwsze obliczenia stałych ekranowania NMR, w których najistotniejsze są efekty relatywistyczne.

*Grant NCN DEC-2011/01/B/ST4/06588 - kierownik: prof. K. Jackowski, UW; Wykonawca w IChO – prof. Michał Jaszuński*

Opublikowano w Progress NMR Spectr. artykuł przeglądowy poświęcony analizie jądrowych momentów magnetycznych na podstawie widm NMR, a następnie wykorzystywaniu dokładnych wyników w bezpośrednich pomiarach stałych ekranowania.

### **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) dotyczących syntezy – 2 zagraniczne, 1 krajowe.



## 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 21 grudnia 2012 roku wykonano pomiary widm masowych dla ok. **3550 próbek**. Zestawienie rodzajów pomiarów przedstawia poniższa tabela:

Rodzaj pomiaru	Usługi dla IChO PAN	Usługi dla klientów zewnętrznych
Widma niskiej rozdzielczości	1507	432
Widma niskiej i wysokiej rozdzielczości	1195	297
Pomiary GC/MS	47	22
Pomiary LC/MS	wyszczególniono w opisie współpracy	

Wykonano ok. 300 godz. analiz LC-MS oraz GC-MS w ramach krótkoterminowej współpracy oraz odpłatnych zleceń z ośrodków naukowych z całej Polski, dla próbek chemicznych, farmaceutycznych, środowiskowych oraz pochodzenia naturalnego, których wyniki wykorzystane zostały przez zleceniodawców głównie jako materiał dokumentacyjny prowadzonych badań.

### Zespół XII – prof. Zofia Lipkowska (Pracownia RTG)

Na rzecz zespołów Instytutu Chemii Organicznej PAN, w ramach współpracy i prac własnych wykonano 66 pomiarów i 35 oznaczeń struktury oraz 1 oznaczenie dla klienta zewnętrznego. W ramach współpracy z Uniwersytetem Przyrodniczo-Humanistycznym w Siedlcach oraz University of Osaka (Japonia) oznaczono odpowiednio 4 i 9 struktur. Zaktualizowano zasoby Cambridge Crystallographic Data Base i zapewniono doradztwo osobom przygotowującym prace doktorskie w zakresie wykorzystania danych strukturalnych.

### Zespół XIII – prof. Jadwiga Frelek

W roku 2012 w Pracowni Spektroskopii Optycznej wykonano 1442 widma w podczerwieni, w tym 1021 widm na zlecenia pracowników IChO (z uwzględnieniem badań własnych, tj. 177 widma) a 421 widm dla zleceniodawców zewnętrznych. Pomiary te zajęły 757 godzin 15 minut. W okresie sprawozdawczym wykonano także 2805 widm w nadfiolecie i świetle widzialnym z czego 441 widm na zlecenie spoza Instytutu a 2364 widma na zlecenia wewnętrzne (łącznie 752 godzin pracy aparatów). W zakresie elektronowego dichroizmu kołowego w roku 2012 wykonano łącznie 5077 widma w tym 1405 widm na zlecenia spoza Instytutu a 3672 na zlecenia wewnętrzne (łącznie 1572 godziny pracy aparatów oraz 315 godzin pracy *on-line* HPLC/ECD). Z kolei w zakresie oscylacyjnego dichroizmu kołowego (VCD) w roku 2012 wykonano łącznie 111 widm w tym 25 na zlecenia zewnętrzne a 86 na zlecenia wewnętrzne (pomiary widm VCD zajęły łącznie 1155 godzin).

## Zespół XVI – działalność serwisowa NMR w roku 2012

Aparat	widma $^1\text{H}$	widma $^{13}\text{C}$	inne pomiary
Pomiary na rzecz IChO PAN			
Varian 600	778	625	1061
Varian 500	1396	933	428
Bruker 500	680	455	305
<b>Razem</b>	<b>2854</b>	<b>2013</b>	<b>1794</b>
Varian 400	1493 godziny dzienne, 651 godzin nocnych (widma $^1\text{H}$ i $^{13}\text{C}$ NMR)		
Varian 400	759 godzin (widma $^1\text{H}$ i $^{13}\text{C}$ NMR)		
Varian 600	193	153	215
Varian 500	479	288	81
Bruker 500	395	163	21
<b>Razem</b>	<b>1067</b>	<b>604</b>	<b>317</b>

W sumie na aparatach wysokopolowych wykonano 3930 widm  $^1\text{H}$  NMR, 2617 widm  $^{13}\text{C}$  NMR i 2111 pomiarów specjalnych (głównie widm 2D).

## Zespół XVII – Pracownia Analizy Elementarnej

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

**2910** – oznaczeń dla IChO

**1410** – oznaczeń zleconych przez inne ośrodki badawcze

**228** – oznaczeń zleconych przez Laboratorium Analizy Leków IChO PAN

**RAZEM: 4548 – oznaczeń**

Ponadto wykonano **106** precyzyjnych naważek dla IChO PAN i **94** naważki dla IChF PAN.

W okresie 21.05-01.06.2012 czworo uczniów z Technikum Chemicznego odbywało praktyki zawodowe w naszej pracowni.

Nowe urządzenia: Titrator T50 firmy METTLER TOLEDO.

## Sprawozdanie Biblioteki IChO PAN za rok 2012

W okresie sprawozdawczym w Bibliotece udostępniano:

1. komputerowe katalogi biblioteczne (Horizon)
2. komputerowe bazy danych (Reaxys, SCI Finder)
3. komputerowe bibliograficzne bazy danych

w tym:

- abstraktowe (Web of Knowledge, INSPEC)

- pełnotekstowe (Science-Direct, Proquest, ACS, RSC Springer, WILEY, Science, Nature, EBSCO)

W 2012 r. uzyskano następujący przyrost zbiorów:

- wydawnictwa zwarte (książki)	93	jedn. inwent.
- wydawnictwa ciągle (czasopisma)	59	jedn. inwent.
- prace doktorskie	6	jedn. inwent.
- zbiory specjalne	-	
- mikroformy	-	

Łączna liczba woluminów

- książek	12540	jedn. inwent.
- czasopism	13392	jedn. inwent.
- prac doktorskich	292	jedn. inwent.
- zbiory specjalne	-	jedn. inwent.
- mikroformy	2	jedn. inwent.

Liczba tytułów prenumerowanych czasopism polskich 4

Liczba tytułów prenumerowanych czasopism zagranicznych 15

Liczba korzystających: 2203 (dane wspólne z IChF)

## PUBLIKACJE ICHO PAN W ROKU 2012

### a) monografie (lub ich rozdziały)

1. S. Blechert, S. Stecko "C-C bond formation (metathesis) in *Comprehensive Chirality*" by H. Yamamoto & E. Carreira (eds.); Elsevier Science, Amsterdam **2012**; (ISBN: 9780080951676); Vol. 4, pp. 33-73
2. B. Furman, S. Stecko "Carbohydrate Derived Auxiliaries. Mono (and Disaccharide) Derivatives) in *Comprehensive Chirality*" by H. Yamamoto & E. Carreira (eds.); Elsevier Science, Amsterdam **2012**; (ISBN: 9780080951676); Vol. 3., pp. 279-358
3. Torborg, C.; Samojłowicz, C.; Grela, K. "Metathesis Reactions" in *Science of Synthesis: Methods of Molecular Transformations Vol. 2011/5: Water in Organic Synthesis*, Ed. S. Kobayashi, Georg Thieme Verlag KG, Section 3.6, **2012**, pp. 225-256
4. S. Jarosz; M. Nowogrodzki; M. Magdycz; M. A. Potopnyk; "Carbocyclic sugar mimics" in RSC Special Periodic Reports Carbohydr. Chem.; **2012**; vol. 37; chapter 11; 303 - 325.
5. B. Gut, J. Mlynarski, "Prebiotic Asymmetric Aldol Reaction - Insight into Neogenesis of Sugars" w monografii The Soai Reaction and Related Topic, Palyi, G.; Zucchi, C.; Caglioti, L. (Eds.) Artestampa - Accademia Nazionale di Scienze, Lettere ed Arti, Modena, **2012**, pp. 197-213
6. O. El-Sepelgy, M. Woyciechowska, J. Mlynarski, "Asymmetric Aldol Reaction" w monografii Science of Synthesis Reference Library: Water in Organic Synthesis, Shu Kobayashi (Ed.) Georg Thieme Verlag, **2012**, pp. 353-384
7. S. Buda, M. Pasternak, J. Mlynarski, "Aqueous phase asymmetric catalysis" w monografii Enantioselective homogeneous supported catalysis (Radovan Šebesta, Eds.) RSC **2012**, pp. 206-236
8. Comprehensive Chiroptical Spectroscopy "Some inherently chiral chromophores – empirical rules and quantum chemical calculations" M. Kwit, P. Skowronek, J. Gawroński, J. Frelek, M. Woźnica, A. Butkiewicz; Tom II, Rozdział 3 pt. Edytorzy: N. Berova, P.L. Polavarapu, K. Nakanishi, R.W. Woody; Wiley, marzec **2012**.
9. NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE, SPECIALIST PERIODICAL REPORTS, "NMR Books and Reviews", vol. 41 ed. K. Kamińska-Trela, *The Royal Society of Chemistry*, Cambridge, **2012**; W. Schilf, **2012**, 41, 1-37
10. NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE, SPECIALIST PERIODICAL REPORTS, "Theoretical Aspects of Spin-Spin Coupling Constants", vol. 41 ed. K. Kamińska-Trela, *The Royal Society of Chemistry*, Cambridge, **2012**; J. Jaźwiński, **2012**, 41, 119-147.
11. NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE, SPECIALIST PERIODICAL REPORTS, "Applications of Spin-Spin Coupling Constants", vol. 41 ed. K. Kamińska-Trela, *The Royal Society of Chemistry*, Cambridge, **2012**; Kamińska-Trela, Jacek Wójcik, **2012**, 41, 148-195.
12. HANDBOOK OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY, "Molecular electric, magnetic and optical properties" M. Jaszuński, A. Rizzo, K. Ruud; Springer, 2012 (wyd. J. Leszczynski), rozdział 11, str. 361-441.

**b) podręczniki akademickie (lub ich rozdziały)**

nie było

**c) publikacje ukazujące się w czasopismach recenzowanych, wyróżnionych przez Journal Citation Reports (JCR, lista A)**

1. ORG. BIOMOL. CHEM. „*Structural diversity in native cyclodextrins/folic acid complexes - from [2]-rotaxane to exclusion compound*”; M. Ceborska; M. Zimnicka; M. Pietrzak; A. Troć; M. Koźbiał; J. Lipkowski; **2012**; *10*; 5186-5188. **3,696**
2. J. MASS SPECTROM. „*Reactions of nitrophenide and halonitrophenide ions with acrylonitrile and alkyl acrylates in the gas phase: addition to the carbonyl group versus Michael addition*”; M. Zimnicka; B. Wileńska; O. Sekiguchi; E. Uggerud; W. Danikiewicz; **2012**, *47*, 425-438. **3,268**
3. INT. J. MASS SPECTROM. „*Reactions of nitrophenide and halonitrophenide ions with acrylonitrile and alkyl acrylates in the gas phase. The case of [M-2]<sup>-</sup> ion formation*”; M. Zimnicka; O. Sekiguchi; E. Uggerud; W. Danikiewicz; **2012**, *316-318*, 76-83. **2,549**
4. CARBOHYDR. RES. “*Structure of lipid A from a stem-nodulating bacterium Azorhizobium caulinodans*”; A. Choma; I. Komanińska; A. Turska-Szewczuk; W. Danikiewicz; G. Spólnik; **2012**, *352*, 126-136. **2,332**
5. RAPID COMMUN. MASS SPECTROM. “*Atmospheric pressure photoionization mass spectrometry as a valuable method for the identification of polyisoprenoid alcohols*”; M. Kania; K. Skorupińska-Tudek; E. Świeżewska; W. Danikiewicz; **2012**, *26*, 1705-1710. **2,790**
6. TETRAHEDRON “*An isomerization – 1,3-dipolar cycloaddition tandem reaction towards the synthesis of 3-aryl-4-methyl-5-O-substituted isoxazolines from O-allyl compounds*”; S. Krompiec; P. Bujak; J. Malarz; M. Krompiec; Ł. Skórka; T. Pluta; W. Danikiewicz; M. Kania; J. Kusz; **2012**, *68*, 6018-6031. **3,025**
7. NAT. PROD. COMMUN. “*Search for Bioactive Compounds from Cantharellus cibarius*”; W.M. Daniewski; W. Danikiewicz; W.M. Golebiewski; M. Gucma; A. Lysik; J. Grodner; E. Przybysz; **2012**, *7*, 917-918. **1,242**
8. PROPELLANTS EXPLOSIVES PYROTECHNICS “*Synthesis, Structure, and Explosive Properties of a New Trinitrate Derivative of an Unexpected Condensation Product of Nitromethane with Glyoxal*”; S. Cudzilo; M. Nita; A. Chołuj; M. Szala; W. Danikiewicz; G. Spólnik; S. Krompiec; S. Michalik; M. Krompiec; A. Świtlicka; **2012**, *37*, 261-266. **1,101**
9. TETRAHEDRON “*Asymmetric Kinugasa reactions involving six-membered nitrones* B. Grzeszczyk, K. Poławska, Y.M. Shaker, S. Stecko, A. Mames, M. Woźnica, M. Chmielewski, B. Furman, **2012**, *68*, 10633-10639. **3,025**
10. TETRAHEDRON “*Synthesis of N,4-diaryl substituted β-lactams via Kinugasa cycloaddition/ rearrangement reaction*” M. Michalak, M. Stodulski, S. Stecko, M. Woźnica, O. Staszewska-Krajewska, P. Kalicki, B. Furman, J. Frelek, M. Chmielewski **2012**, *68*, 10806-10817. **3,025**
11. SYNTHESIS “*Practical one-pot synthesis of protected L-glyceraldehyde derivatives*” S. Stecko, M. Michalak, M. Stodulski, Ł. Mucha, K. Parda, B. Furman, M. Chmielewski, **2012**, 2695-2698. **2,466**

12. SYNTHESIS “*An entry to carbapenem antibiotics scaffold via asymmetric Kinugasa reaction*” M. Maciejko, S. Stecko, O. Staszewska-Krajewska, M. Jurczak, B. Furman, M. Chmielewski, **2012**, 2825-2839. **2,466**
13. ADV. SYNTH. CATAL. “*Catalytic and Structural Studies of HoveydaGrubbs Type Pre-Catalysts Bearing Modified Ether Ligands*” Guidone, S.; Blondiaux, E.; Samojłowicz, C.; Gułajski, Ł.; Kędziorek, M.; Malińska, M.; Pazio, A.; Woźniak, K.; Grela, K.; Doppiu, A.; Cazin, C. S. J. **2012**, 354, 2734–2742. **6,048**
14. CHEM. EUR. J. “*Ruthenium–Amido Complexes: Synthesis, Structure, and Catalytic Activity in Olefin Metathesis*” Pietraszuk, C.; Rogalski, S.; Powąła, B.; Miętkiewski, M.; Kubicki, M.; Spółnik, G.; Danikiewicz, W.; Woźniak, K.; Pazio, A.; Szadkowska, A.; Kozłowska, A.; Grela, K. **2012**, 18, 6465–6469. **5,925**
15. ADV. SYNTH. CATAL. “*Olefin Metathesis on a TLC Plate as a Tool for a High-Throughput Screening of Catalyst-Substrate Sets*” Cabrera, J.; Padilla, R.; Dehn, R.; Deuerlein, S.; Gułajski, Ł.; Chomiszczak, E.; Teles, J. H.; Limbach, M.; Grela, K. **2012**, 354, 1043-1051. **6,048**
16. CATAL. COMMUN. “*Ruthenium metathesis catalyst bearing chelating carboxylate ligand immobilized on mesoporous molecular sieve SBA-15*” Bek, D.; Gawin, R.; Grela, K.; Balcar, H. **2012**, 21, 42-45. **2,986**
17. EUR. J. INORG. CHEM. “*Synthesis of stable ruthenium olefin metathesis catalysts with mixed anionic ligands*” Gawin, R.; Grela, K. **2012**, 1477–1484. **3,049**
18. ORGANOMETALLICS “*Thermal Switchability of N-Chelating Hoveyda-type Catalyst Containing a Secondary Amine Ligand*” Żukowska, K.; Szadkowska, A.; Pazio, A. E.; Woźniak, K.; Grela, K. **2012**, 31, 462-469. **3,963**
19. ORG. LETT. “*Short Synthesis of Diamide-Linked Sucrose Macrocycles*” M.A. Potopnyk; P. Cmoch; S. Jarosz; **2012**; 14; 4258 – 4261. **5,862**
20. TETRAHEDRON:ASYMMETRY “*Synthesis of higher carbon sugars from dihydroxyacetone and D-arabinose; an organocatalytic approach*”; M. Cieplak; M. Ceborska; P. Cmoch; S. Jarosz; **2012**; 23; 1213 – 1217. **2,652**
21. TETRAHEDRON:ASYMMETRY “*Novel sucrose-based macrocyclic receptors for enantioselective recognition of chiral ammonium cations*” M. A. Potopnyk; B. Lewandowski; S. Jarosz; **2012**; 23; 1474 – 1479. **2,652**
22. TETRAHEDRON:ASYMMETRY “*Synthesis of highly oxygenated decalins from sugar allyltins. An access to sulfur and phosphorus derivatives*” M. Nowogródzki; M. Malik; S. Jarosz; **2012**; 23; 1501 – 1511. **2,652**
23. TETRAHEDRON “*Influence of bromide ions on the synthesis of anomeric thiocyanates*” P. Cmoch; Z. Pakulski; **2012**; 68; 7435 – 7440. **3,025**
24. J. FLUORINE CHEM. “*1,2-Dibromotetrafluoroethane (Freon 114B2) as a building block for fluorine compounds*” W. Dmowski; **2012**; 142; 6 – 13. **2,033**
25. EUR. J. INORG. CHEM. “*Flexible Mono- and Bis-tetraazamacrocyclic Complexes of Copper and Nickel Stabilizing Different Oxidation States*” S. Domagała, J. Małecka, A. Michałowicz, I. Mames, B. Kamiński, M. Woźny, R. Bilewicz, B. Korybut-Daszkiewicz, K. Woźniak; **2012**, 3680-3692. **3,049**

26. DALTON TRANS. “Pseudorotaxane based on tetraazamacrocyclic copper complex and dibenzocrown ether” J. Małecka, I. Mames, M. Woźny, B. Korybut-Daszkiewicz, R. Bilewicz; **2012**, *41*, 12452–12456. **3,838**
27. MAGN. RESON. CHEM. “Structure and NMR spectra of cyclophanes with unsaturated bridges (cyclophanes)” H. Dodziuk, T. B. Demissie, K. Ruud, S. Szymański, J. Jazwiński, H. Hopf; **2012**, *50*, 449–457. **1,437**
28. J. CHEM. PHYS. “Spin-lattice relaxation of the methyl group protons in solids revisited: Damped quantum rotation approach” S. Szymański; **2012**, *137*, 034513 (1-15). **3,333**
29. CHEM. COMMUN. “General Switch in Regioselectivity in the Mukaiyama Aldol Reaction of Silyloxyfuran with Aldehydes in Aqueous Solvents”; M. Woyciechowska; G. Forcher; S. Buda; J. Mlynarski; **2012**; *48*; 11029-11031; **6,169**
30. EUR. J. ORG. CHEM. “Direct Aldol Reaction of Pyruvic Derivatives: Catalytic Attempt to Synthesise Ulosonic Acids”; O. El-Sepelgy; D. Schwarzer; P. Oskwarek; J. Mlynarski; **2012**; *14*; 2724-2727. **3,329**
31. CHEM. SOC. REV. “Organocatalytic Synthesis of Carbohydrates”; B. Gut; J. Mlynarski; **2012**; *41*; 587-596. **28,760**
32. J. ORG. CHEM. “Direct Asymmetric Aldol Reaction inspired by Two Types of Aldolases: Water Compatible Organocatalysts and ZnII Complexes”; J. Paradowska; M. Pasternak; B. Gut; B. Gryzłó; J. Mlynarski; **2012**; *77*, 173-187. **4,450**
33. SYNLETT “Expedient Synthesis of 1-Hydroxy-4- and 1-Hydroxy-6-nitroindoles” Bujok, R.; Wróbel, Z.; Wojciechowski, K. **2012**, 1315-1320. **2,710**
34. SYNLETT “New simple synthesis of quinoline-4-carbonitriles” Bujok, R., Trawczyński, A., Wróbel, Z., Wojciechowski, K. **2012**, *23*, 2682 – 2686. **2,710**
35. TETRAHEDRON:ASYMMETRY “The Asymmetric Organocatalytic 1,3-Dipolar Cycloaddition of Alkyl Pyruvate-derived Nitrones and  $\alpha,\beta$ -Unsaturated Aldehydes”; Ł. Weseliński, E. Kalinowska, J. Jurczak; **2012**, *23*, 246-270. **2,652**
36. LETT. ORG. CHEM. “Synthesis of New Tripodal Hydroxybenzoic Esters and their Reaction with Tris-(2-aminoethyl)-amine under High Pressure Conditions”; M. Ceborska, J. Jurczak; **2012**, *9*, 114-117. **0,82**
37. TETRAHEDRON LETT., “High-pressure transesterification of sterically hindered esters”; J. Romański, P. Nowak, K. Kosiński, J. Jurczak; **2012**, *53*, 5287-5289. **2,683**
38. CHEM. EUR. J. “7,7'-Diamino-2,2'-diindolylmethane: A Building Block for Highly Efficient and Selective Anion Receptors – Studies in Solution and in the Solid State”; P. Dydio, D. Lichosyt, T. Zieliński, J. Jurczak; **2012**, *18*, 13686-13701. **5,925**
39. ORG. LETT.; “Unclosed Cryptands”: A Point of Departure for Developing Potent Neutral Anion Receptors” K. Dąbrowa, M. Pawlak, P. Duszewski, J. Jurczak; **2012**, *14*, 6298-6301. **5,862**
40. TETRAHEDRON “A facile, moisture-insensitive method for synthesis of pillar[5]arenes-the solvent templation by halogen bonds”; T. Boinski, A. Szumna; **2012**; *68*; 9419-9422. **3,025**
41. CHEM. ASIAN J. “Improving the photoinduced charge separation parameters in corrole/perylene carboximide dyads by tuning the redox and spectroscopic properties of the components”; L. Flamigni; A.I. Ciuciu; H. Langhals; B. Böck; D.T. Gryko; **2012**, *7*, 582-592. **4,500**

42. J. PHYS. CHEM. A “12-Hydroxy-1-azaperylene - Limiting Case of the ESIPT System: Enol-Keto Tautomerization in  $S_0$  and  $S_1$  States”; I. Deperasińska; D.T. Gryko; E. Karpiuk; B. Kozankiewicz; A. Makarewicz; J. Piechowska; **2012**, *116*, 2109-2116. **2,946**
43. CHEM. SOC. REV. “5-Substituted dipyrroles: synthesis and reactivity”; D. T. Gryko; D. Gryko; C.-H. Lee; **2012**, *41*, 3780-3789. **28,760**
44. ORG. LETT. “Bright, color-tunable fluorescent dyes based on  $\pi$ -expanded diketopyrrolopyrroles”; M. Grzybowski; E. Glodkowska-Mrowka; T. Stoklosa; D.T. Gryko; **2012**, *14*, 2670-2673. **5,862**
45. CHEM. EUR. J. “Octupolar merocyanine dyes – a novel class of nonlinear optical chromophores”; Y. M. Poronik; V. Hugues; M. Blanchard-Desce; D.T. Gryko; **2012**, *18*, 9258-9266. **5,925**
46. CHEM. ASIAN. J. “Selective cycloaddition of tetracyanoethene (TCNE) and 7,7,8,8-tetracyano-*p*-quinodimethane (TCNQ) to meso-substituted phenylethynyl porphyrins”; D. Koszelewski; A. Nowak-Król; D.T. Gryko; **2012**, *7*, 1887-1894. **4,500**
47. CHEM. COMMUN. “Calix[4]pyrroles bearing proximally meso-meso linking straps: synthesis and anion binding properties”; J. -Y. Park; K. Skonieczny; N. Aratani; A. Osuka; D.T. Gryko; C.-H. Lee; **2012**, *48*, 8060-8062. **6,169**
48. J. PHYS. CHEM. A “Excited State Intramolecular Proton Transfer in Electron-rich and Electron-poor Derivatives of 10-Hydroxybenzo[*h*]quinolone” J. Piechowska; K. Huttunen; D.T. Gryko, Z. Wróbel; H. Lemmetyinen; N. V. Tkachenko; **2012**, *116*, 9614-9620. **2,946**
49. CHEM. COMMUN. “Synthesis of  $\pi$ -extended porphyrins via intramolecular oxidative coupling” J. P. Lewtak; D. T. Gryko; **2012**, *48*, 10069-10086. **6,169**
50. J. MAT. CHEM. “Bright, emission tunable fluorescent dyes based on imidazole and  $\pi$ -expanded imidazole” K. Skonieczny; A. I. Ciuciu; E. Nichols; V. Hugues; M. Blanchard-Desce; L. Flamigni; D.T. Gryko **2012**, *22*, 20649-20664. **5,968**
51. CHEM. COMMUN. “Synthesis of a Lithium Corrole and its Use as a Reagent for the Preparation of Cyclopentadienyl Zirconium and Titanium Corrole Complexes” H.L. Buckley; W. A. Chomitz; B. Koszarna; M. Tasiór; D.T. Gryko; P. J. Brothers; J. Arnold; **2012**, *48*, 10766-10768. **6,169**
52. CHEM. ASIAN. J. “Benzo[1,2-*d*:4,5-*d'*]bisimidazoles as a Convenient Platform Towards Dyes Capable of Excited State Intramolecular Proton Transfer and of Two Photon Absorption” M. Tasiór; V. Hugues; M. Blanchard-Desce; D.T. Gryko; **2012**, *7*, 2656-2661. **4,500**
53. CHEM. EUR. J. “Photoinduced electron transfer in an amine-corrole-perylene bisimide assembly: charge separation over terminal components favoured by solvent polarity”; R. Voloshchuk; D.T. Gryko; M. Chotkowski; A. I. Ciuciu; L. Flamigni; **2012**, *18*, 14845-14859. **5,925**
54. CHEMPHYSICHEM “Amplified two-photon absorption in trans- $A_2B_2$ -porphyrins bearing nitrophenylethynyl substituents”; A. Nowak-Król; C. J. Wilson; M. Drobizhev; D. V. Kondratuk; A. Rebane; H. L. Anderson; D. T. Gryko; **2012**, *13*, 3966-3972. **3,412**
55. SYNTHESIS “General and efficient protocol for formylation of aromatic and heterocyclic phenols”; K. Skonieczny; G. Charalambidis; M. Tasiór; M. Krzeszewski; A. Kalkan-Burat; A. G. Coutsolelos; D. T. Gryko; **2012**, *44*, 3683-3687. **2,466**



56. ACTA PHYS. POL. A “*Fluorescence Microscopy of Corrole-Single Silver Nanowire Hybrid Nanostructures*”; N. Czechowski; M. Olejnik; A. Nowak-Król; D. Piątkowski; W. Heiss; D. T. Gryko; S. Maćkowski; **2012**, *122*, 333-336. **0,444**
57. J. PHYS. CHEM. A “*Low Temperature Spectra of the Analogues of 10-Hydroxybenzo[h]quinoline as an Indication of Barrierless ES IPT*”; I. Deperasińska; D.T. Gryko; E. Karpiuk; B. Kozankiewicz; A. Makarewicz; J. Piechowska; **2012**, *116*, 12049-12055. **2,946**
58. J. BIOMOL. “*NMR Recombinant A22G–B31R-human insulin. A22 addition introduces conformational mobility in B chain C-terminus*” P. Borowicz, E. Bednarek, W. Bocian, J. Sitkowski, B. Jaworska, J. Mikołajczyk, T. Głabski, D. Stadnik, W. Surmacz, M. Bogiel, L. Kozerski, **2012**, *52*, 365–370. **3,612**
59. J. ANTIBIOTICS “*N-acetyl-3,4-dihydroxy-L-phenylalanine, a second identified bioactive metabolite produced by Streptomyces sp. 8812*”; J. Solecka, A. Rajnisz, M. Postek, J. Zajko, R. Kawęcki, V. Havlicek, E. Bednarek, L. Kozerski, **2012** *65*, 219-221. **1,651**
60. TETRAHEDRON “*Approaches to the enantioselective synthesis of ferrugine and its analogues*”; R. Lazny; M. Sienkiewicz; T. Olenski; Z. Urbanczyk-Lipkowska; P. Kalicki; **2012**, *68*, 8236-8244. **3,025**
61. BULL. CHEM. SOC. JPN. “*Enantioselective Ring-Opening; Reaction of Epoxides with MeOH Catalyzed by Homochiral Metal-Organic Framework*”; K. Tanaka; K. Otani; T. Murase; S. Nishihote; Z. Urbanczyk-Lipkowska; **2012**, *85*, 709-714. **1,436**
62. BULL. CHEM. SOC. JPN “*Solid-State Photochromism of 5-tert-Butyl-2-hydroxyisophthalaldehyde*” K. Tanaka; Y. Watanabe; P. Kalicki; Z. Urbanczyk-Lipkowska; **2012**, *8*, 727-729. **1,436**
63. BIOORG. MED. CHEM. LETT.; “*Novel dendrimeric lipopeptides with antifungal activity*”; J. Janiszewska; M. Sowinska; A. Rajnisz; J. Solecka; I. Lacka; S. Milewski; Z. Urbanczyk-Lipkowska; **2012**, *22*, 1388-1393. **2,554**
64. BEILSTEIN J. ORG. CHEM.; “*Determination of the relative configuration of tropinone and granatanone aldols by using TBDMS ethers*”; R. Lazny; A. Nodzewska; K. Sidorowicz; P. Kalicki; **2012**, *8*, 1877-1883. **2,517**
65. ACTA CRYST. „*2-(3-Chloro-5,6-diphenyl-2,5-dihydro-1,2,4-triazin-5-yl)-2-methylpropanenitrile*“; E. E. Wolinska; Z. Karczmarzyk; A. Rykowski; Z. Urbanczyk-Lipkowska; P. Kalicki; **2012**, *68*, o1938. **0,347**
66. TETRAHEDRON “*An entry to N,4-diaryl substituted  $\beta$ -lactams via Kinugasa cycloaddition/ rearrangement reaction*”; M. Michalak, M. Stodulski, S. Stecko, M. Woźnica, O. Staszewska-Krajewska, B. Furman, J. Frelek, M. Chmielewski; **2012**, *68*, 10806-10817. **3,025**
67. CHEM. COMM. “*Distinguishing between polymorphic forms of linezolid by solid phase electronic and vibrational circular dichroism*”; J. Frelek, M. Górecki, M. Łaszcz, A. Suszczyńska, E. Vass, W. J. Szczepek; **2012**, *48*, 5295-5297. **6,169**
68. TETRAHEDRON “*New chiral discotics with helical organization of the mesophase – liquid crystalline derivatives of dibenzotetraaza[14]annulene*”; J. Grolik, Ł. Dudek, J. Eilmes, A. Eilmes, M. Górecki, J. Frelek, B. Heinrich, B. Donnio; **2012**, *68*, 3875-3884. **3,025**

69. TETRAHEDRON:ASYMMETRY “*Enantioselective enzymatic desymmetrization of the prochiral pyrimidine acyclonucleoside*”, R. Kołodziejska, M. Górecki, J. Frelek, M. Dramiński; **2012**, 23, 683-689. **2,652**
70. EUR. J. ORG. CHEM. “*Hydrophobic Vitamin B<sub>12</sub> Derivatives: Unprecedented Formation of a 7-Membered Lactam*”; ó Proinsias, K.; Kurcoń, S.; Gryko, D.; **2012**, 1, 154-159. **3,329**
71. MED. CHEM. LETT. “*Synthesis of New Hydrophilic and Hydrophobic Cobinamides as NO-Independent sGC Activator*”; ó Proinsias, K.; Giedyk, M.; Sharina, I. G.; Martin, E.; Gryko, D.; **2012**, 3, 476-479. **3,355**
72. J. PHARM. EXP. THERAPEUT. “*Cobinamides Are Novel Coactivators of Nitric Oxide Receptor That Target Soluble Guanylyl Cyclase Catalytic Domain*”; Sharina, I.; Sobolevsky, M.; Doursout, M-F.; Gryko, D.; Martin, E.; **2012**, 340, 723-732. **3,828**
73. SYNLETT “*An Efficient Method for Phosphorylation of Alcohols: Preparation of Porphyrin-Derived Phosphate*”; Pisarek, S.; Bednarski, H.; Gryko, D.; **2012**, 23, 2667-2671. **2,710**
74. J. MED. CHEM. “*Vitamin B<sub>12</sub> derivatives as activators of soluble guanylyl cyclase*”; ó Proinsias K, Gryko D.T., Hisaeda Y, Martin E, Sessler J.L., Gryko D.; **2012**, 55, 8943-8947. **5,248**
75. POLYHEDRON “*On different coordination of Ni<sup>II</sup>, Zn<sup>II</sup> and Cd<sup>II</sup> cations in their model Schiff base complexes – single crystal X-Ray and solid state NMR studies*”; A.A. Hoser, W. Schilf, A. Szady-Chelmieńska, B. Kołodziej, B. Kamieński, E. Grech, K. Woźniak; **2012**, 31, 241-248. **2,057**
76. J. MED. CHEM. “*Synthesis and Biological Evaluation of New Amino Acid and Dipeptide Derivatives of Neocryptolepine as Anticancer Agents*”; K. Sidoryk, M. Świtalska, J. Wietrzyk, A. Jaromin, M. Piętka-Ottlik, P. Cmoch, J. Zagrodzka, W. Szczepek, Ł. Kaczmarek, W. Peczyńska-Czoch **2012**, 55, 5077-5087. **5,248**
77. J. MED. CHEM. “*Studies towards novel peptidomimetic inhibitors of thioredoxin-thioredoxin reductase system*” S. Kłossowski, A. Muchowicz, M. Firczuk, M. Świech, A. Redzej, J. Golab, R. Ostaszewski, **2012**, 55, 55-67. **5,248**
78. J. MOL. CAT. B “*The studies on chemoenzymatic synthesis of Femoxetine*” D. Koszelewski, A. Brodzka, R. Ostaszewski, **2012**, 82, 96 – 101. **2,701**
79. TETRAHEDRON:ASYMMETRY “*A new chemoenzymatic approach to the synthesis of chiral 4-aryl-1,4-dihydro-2H-isoquinolins via enzymatic resolution of 2-acetyl-4-phenyl-1,4-dihydro-2H-isoquinolin-3-one*” M. Ćwiklak, D. Koszelewski, R. Ostaszewski, **2012**, 1256-1261. **2,652**
80. INT. J. QUANTUM CHEM. “*Coupled cluster and DFT calculations of <sup>14</sup>N nuclear quadrupole coupling constants*”; A. Brzyska, M. Jaszuski; **2012**; 112, 2281-2286. **1,357**
81. COMP. THEOR. CHEM. “*Theoretical studies of the dependence of nuclear quadrupole coupling constants on intermolecular forces*”; A. Brzyska, K. Woliński, M. Jaszuski; **2012**; 983; 54-60; (**1,437** – IF wg poprzedniej nazwy czasopisma, *J. Mol. Struct. THEOCHEM*)
82. CHEM. PHYS. LETT. “*Coupled cluster study of NMR shielding of alkali metal ions in water complexes and magnetic moments of alkali metal nuclei*”; A. Antušek, D. Kędziera, A. Kaczmarek-Kędziera, M. Jaszuski; **2012**, 532, 1-8. **2,337**

83. *PROGR. NUCL. MAGN. RESON. SPECTROSC.* “*The determination of accurate nuclear magnetic dipole moments and direct measurement of NMR shielding constants*”; M. Jaszuński, A. Antušek, P. Garbacz, K. Jackowski, W. Makulski, M. Wilczek; **2012**, 67, 49-63. **5,214**
84. *MOL. PHYS.* “*The NMR indirect nuclear spin-spin coupling constant of the HD molecule*”; T. Helgaker, M. Jaszuński, P. Garbacz, K. Jackowski; **2012**, 110, 2611-2617. **1,819**
85. *HELV. CHIM. ACTA*; “*Intermolecular Reactions of gamma-Halocarbanions - Stepwise Analogs of 1,3-Dipolar Cycloaddition*”; M. Barbasiewicz, M. Mąkosza; **2012**, 95, 1871-1890. **1,478**
86. *J. PHYS. ORG. CHEM.*; “*Relationship between structure and efficiency of atropisomeric phosphine ligands in homogeneous catalytic asymmetric hydrogenation*” M. Pietrusiewicz, O. Demchuk; **2012**, 25 1006-1011. **1,963**

**e) publikacje w innych czasopismach recenzowanych, wymienionych w aktualnym wykazie czasopism punktowanych Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego (lista B)**

1. *WIADOMOŚCI CHEMICZNE*; „*Droga pod słońce. Wczesna historia witaminy D*”; J. Wicha, **2012**, 66, 672-696.
2. *WIADOMOŚCI CHEMICZNE* „*Biokatalityczne metody otrzymywania nieracemicznych alkoholi aryloallilowych*” S. Szymkuć, R. Ostaszewski, 66, **2012**, 1- 26.
3. *COPERNICAN LETTERS* “*Studies toward chemoenzymatic synthesis of nonracemic  $\alpha$ -bromophenylacetic acid*” A. Żądło, R. Ostaszewski, **2012**, 3, 171-177.
4. *COPERNICAN LETTERS* “*The studies on enzymatic kinetic resolution of racemic  $\alpha,\alpha$ -disubstituted  $\beta$ -ketoesters*” C. Wiśniewska, R. Ostaszewski, **2012**, 3, 153-158.

**f) pozostałe publikacje naukowe**

1. *PLANTA MEDICA*; „*New A-type Trimeric and tetrameric procyanidins from Peanuts skins*”; M.K. Jamróz, M.H. Davey, S. Kaźmierski, W. Danikiewicz, G. Spólnik, J.A. Gliński; **2012**; 78; 1207 (abstrakt komunikatu z *International Congress on Natural Products Research on Global Change, Natural Products and Human Health/8th Joint Meeting of AFERP, ASP, GA, PSE and SIF*; New York, 28.07 - 1.08.2012).
2. *PLANTA MEDICA*; „*Biological and phytochemical studies of Huperzia selago (L.) Bernh. ex Schrank et Mart. (Huperziaceae)*”; W.J. Szypuła, P. Mistrzak, O. Olszowska, A.K. Kiss, A. Adamczyk, G. Czapski, M. Kania, B. Wileńska, W. Danikiewicz; **2012**; 78; 1234 ((abstrakt komunikatu z *International Congress on Natural Products Research on Global Change, Natural Products and Human Health/8th Joint Meeting of AFERP, ASP, GA, PSE and SIF*; New York, 28.07 - 1.08.2012).
3. *ANNUAL REPORT 2011* “*The Institutes of Organic and Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences – From Past to Present*” Z. Pakulski; Polish Academy of Sciences; **2012**, 104 - 111.

4. Raport poufny dla ZA Tarnów Grupa Azoty „Poprawa selektywności procesu utleniania cykloheksanu. Badania nad optymalizacją procesu wytwarzania wodoronadtlenku cykloheksylu” Piotr T. Wierzchowski, 61 stron, Warszawa, **2012**.
5. POLSKA CHEMIA W UNII EUROPEJSKIEJ Duże projekty naukowo badawcze współfinansowane przez UE (wg stanu na 31.12.2011r.), Warszawa, **2012**.

## PRACE PRZYJĘTE DO DRUKU W ROKU 2012

1. BBA – MOL. CELL BIOL. L.; „*Sugar availability modulates polyisoprenoid and phytosterol profiles in Arabidopsis thaliana hairy root culture*”; A. Józwiak; M. Ples; K. Skorupińska-Tudek; M. Kania; M. Dydak; W. Danikiewicz; E. Świeżewska; **2013**, 1831, 438-447.
2. CURRENT PHARMACEUTICAL ANALYSIS; “*Radiostability of Ketoconazole in the Solid State*”; Barbara Marciniak, Katarzyna Dettlaff, Witold Danikiewicz, Grzegorz Spólnik, Ewa Jaroszkiewicz, Marek Naskrent; **2013**, 9, 102-113.
3. APPL. CATAL. A - GEN.; “*Solvent-free Ru-catalyzed isomerization of allyloxyalcohols: methods for highly selective synthesis of 1-propenyloxyalcohols*”; M. Urbala; S. Krompiec; M. Penkala; W. Danikiewicz; M. Grela; **2013**; 451, 101-111.
4. J. PORPHYR. PHTHALOCYANINES; “*Design and synthesis of protoporphyrin IX/vitamin B12 molecular hybrids via CuAAC reaction*”; R. Loska; A. Janiga; D. Gryko; **2013**; w druku (DOI: 10.1142/S1088424612501350).
5. CHEMSUSCHEM “*Batchwise and Continuous Nanofiltration of POSS®-tagged Grubbs-Hoveyda Type Olefin Metathesis Catalysts*” Kajetanowicz, A.; Czaban, J.; Krishnan, G. J.; Malińska, M.; Woźniak, K.; Siddique, H.; Peeva, L. G.; Livingston, A. G.; Grela, K. in press DOI: 10.1002/cssc.201200466.
6. MONATSCHE.; “*An Efficient Synthesis of Novel Sucrose-Containing Dilactams*”; M. A. Potopnyk; S. Jarosz; DOI: 10.1007/s00706-012-0894-2.
7. NEW DEVELOPMENTS AND STRATEGIES “*Sweet’ sucrose macrocycles via a ‘click chemistry’ route; Click Chemistry in Glycoscience*” M. A. Potopnyk; S. Jarosz; **2013**, rozdział 9, str. 235-250 (Wiley; Ed. Z.J. Witczak, R. Bielski; ISBN: 978-1-1182-7533-7).
8. INORG. CHIM. ACTA; “*Synthesis of non-symmetrically substituted tetraimine macrocyclic complexes of copper(II) and nickel(II)*”; M. Woźny, I. Mames, B. Korybut-Daszkiewicz; **2013**, 395, 160-168.
9. DALTON TRANS.; “*Neutral bis-macrocyclic nickel(II) and copper(II) complexes as  $\pi$ -donor receptors*”; I. Mames, U. E. Wawrzyniak, M. Woźny, R. Bilewicz, B. Korybut-Daszkiewicz; **2013**, DOI: 10.1039/C2DT32386A.
10. ADV. SYNTH. CATAL.; “*Biomimetic Direct Aldol Reaction of Pyruvate Esters with Chiral Aldehydes*”; O. El-Sepelgy; J. Mlynarski; DOI: 10.1002/adsc.201200914.
11. DYES AND PIGMENTS; “*Vibrational properties of new corrole-fullerene dyad and its components*”; K. Lewandowska; B. Barszcz; J. Wolak; A. Graja; M. Grzybowski; D. T. Gryko; **2013**, 96, 249-255.
12. J. PHYS. CHEM. C; “*Photoinduced Charge Transfer in Porphyrin–Cobaloxime and Corrole–Cobaloxime Hybrids*”; K. Peuntinger, T. Lazarides, D. Dafnomili, G.

- Charalambidis, G. Landrou, A. Kahnt, R. Sabatini, D. W. McCamant, D. T. Gryko, A. G. Coutsolelos, D. M. Guldi; przyjęte do druku, DOI: <http://dx.doi.org/10.1021/jp311766s>.
13. J. PHYS. CHEM. C; “*Dynamics of Intramolecular Excited State Proton Transfer in Emission Tunable, Highly Luminescent Imidazole Derivatives*”; A. I. Ciuciu, K. Skonieczny, D. Koszelewski, D. T. Gryko, L. Flamigni; przyjęte do druku, DOI: 10.1021/jp-2012-096538.
  14. J. ORG. CHEM; “*Photoinduced isomerization of 23-oxosapogenins. Conformational analysis and spectroscopic characterization of 22-isosapogenins*”; I. Jastrzębska, M. Górecki, J. Frelek, R. Santillane, L. Siergiejczyk, J. W. Morzycki; DOI:10.1021/jo3022549\_
  15. J. PORPH. PHTAL; “*Design and Synthesis of Protoporphyrin IX/Vitamin B<sub>12</sub> Molecular Hybrids via CuAAC Reaction*”; Loska, R.; Janiga, A.; Gryko, D.; **2012**, accepted.
  16. EUR. J. ORG. CHEM.; “*Protoporphyrin IX/Cobyrinate Derived Hybrids – Novel Activators of Soluble Guanylyl Cyclase*”; Chromiński, M.; Gryko, D.; **2012**, accepted.
  17. CHEM. EUR. J; “*Clickable vitamin B<sub>12</sub>*”; Chromiński, M.; Gryko, D.; **2012**, accepted.
  18. EUR. J. ORG. CHEM.; “*Homo- and heterogeneous  $\alpha$ -pinene photooxidation using protoporphyrin derived amide*”; Trytek, M.; Lipke, A.; Majdan, M.; Pisarek, S.; Gryko, D.; **2012**, accepted.
  19. NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE, SPECIALIST PERIODICAL REPORTS, “*NMR Books and Reviews*”, vol. 42 ed. K. Kamińska-Trela, “The Royal Society of Chemistry, Cambridge, **2013**; W. Schilf, **2013**, 42.
  20. NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE, SPECIALIST PERIODICAL REPORTS, “*Theoretical Aspects of Spin-Spin Coupling Constants*”, vol. 42 ed. K. Kamińska-Trela, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, **2013**; J. Jaźwiński, **2013**, 42.
  21. NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE, SPECIALIST PERIODICAL REPORTS, “*Applications of Spin-Spin Coupling Constants*”, vol. 42 ed. K. Kamińska-Trela, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, **2013**; K. Kamińska-Trela, Jacek Wójcik, **2013**, 42.
  22. J. MOL. STRUCT., W. Schilf, B. Kamiński, K. Užarević, “*Nitrogen and carbon CPDAS NMR investigations of keto-enol tautomerism in asymmetric o-hydroxy Schiff bases*”, **2012**; (praca w druku, DOI: 10.1061/j.molstruct.2012.10.004).
  23. TETRAHEDRON; “*Sugar-based monodentate phosphoramidite ligands for Cu-catalyzed enantioselective conjugate addition to enones*”; T. Bauer, M. Majdecki, J. Jurczak; DOI: 10.1016/j.tet.2012.12.049.
  24. CHEM COMMUN “*Ruthenium nitronate complexes as tunable catalysts for olefin metathesis and other transformations*” Wdowik, T.; Samojłowicz, C.; Jawiczuk, M.; Malińska, M.; Woźniak, K.; Grela, K. **2013**, 49, 674-676.
  25. SYNTHESIS: „*Regioselective Aromatic Nucleophilic Substitution in N-Aryl-2-nitrosoanilines with Oxygen and Nitrogen Nucleophiles*” Wróbel, Z., Stachowska, K., Kwast, A. **2013**, 45, 0127–0133.
  26. J. MOL. STRUCT.; “*Complexation of oxygen ligands with dimeric rhodium(II) tetrakis(trifluoroacetate) in chloroform: <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C NMR and DFT studies*”, R. Głaszczka, J. Jaźwiński, **2013**; 1036; 78-89.

27. Rozdział w książce *Sustainable Catalysts: “Challenges and Practice for the Pharmaceutical & Fine Chemicals Industries”* (Eds.: M. Hii, P. J. Dunn, J. K. Krische), Wiley-VCH, Weinheim: J. Czaban, C. Torborg, K. Grela “Olefin Metathesis: from Academic Concepts to Commercial Catalysts”.
28. Krystyna Kamińska-Trela i Jacek Wójcik, “*Application of  $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$  spin-spin couplings in structural studies on organic compounds*” rozdział 11, ok. 50 stron druku: w podręczniku pt.: *High Resolution NMR Spectroscopy, Understanding Molecules and their Electronic Structures*, wydawca R.H. Contreras, wydawnictwo Elsevier.
29. TETRAHEDRON-ASYMMETRY “*Thermal and  $\text{Sc}(\text{OTf})_3$  catalyzed 1,3-dipolar cycloaddition of open-chain nitrones to  $\alpha,\beta$ -unsaturated lactones: combined experimental and computational studies*”; M. Śnieżek, S. Stecko, I. Panfil, B. Furman, Z. Urbańczyk-Lipkowska, M. Chmielewski; publikacja przyjęta do druku.
30. Dorota Gryko, Dominika Walaszek, rozdział “*C-C Bond Formation by Aldol Reaction*” w książce *Stereoselective Organocatalysis: Bond Formation Methodologies and Activation Modes*, edited by Ramon Rios Torres, **2013**.
31. HELV. CHIM. ACTA “*Efficient Synthesis of  $N$ -Arylquinoxalin-2(1H)-ones via Cyclocondensation of 2-Nitroso- $N$ -arylanilines with Functionalized Alkyl Acetates*” Wróbel, Z., Stachowska, K., Kwast, A., Gościak, A., Królikiewicz, M., Pawłowski, R., Turska, I. **2012**: doi: 10.1002/hlca.201200304

## WYKAZ WYKŁADÓW, KOMUNIKATÓW I POSTERÓW PRZEDSTAWIONYCH NA KONFERENCJACH NAUKOWYCH

### IMPREZY MIĘDZYNARODOWE

#### 77th Annual Meeting of the Israel Chemical Society, Ramat Gan, Izrael, 7-8.02.2012

wykład

1. K. Grela, *Olefin metathesis: tools and targets*

#### Joint Conference of German Mass Spectrometry Society and Polish Mass Spectrometry Society, Poznań, 4-7.03.2012

wykład

2. W. Danikiewicz; “*Gas-phase ions: where mass spectrometry begins*”
3. M. Zimnicka; „*Fragmentation Mechanisms of Bioorganic Ions*”

poster

4. M. Zimnicka, O. Sekiguchi, E. Uggerud, W. Danikiewicz; *Reactions of nitrophenide and halonitrophenide ions with acrylonitrile and alkyl acrylates in the gas phase. The case of  $[M-2]^-$  ion formation*”
5. P. Świder, P. Wyrębek, S. Ostrowski, W. Danikiewicz; “*Cycloreversion and other reactions of  $[M+H]^+$  and  $[M-H]^-$  ions of chlorins under the collision-induced dissociation conditions*”
6. A. Troć, G. Spólnik, W. Danikiewicz, P. Żak, C. Pietraszuk, B. Marciniak; “*Studies on functionalised silsesquioxanes by ESI and APPI mass spectrometry techniques*”
7. G. Spólnik, M. Kania, A. Sobczak, L. Lipiński, A. Dziembowski, W. Danikiewicz; “*Organochlorine pesticides and their metabolite analysis in soil samples and microbiological cultures by GC-MS*”
8. B. Słomińska, R. Gawin, K. Grela, W. Danikiewicz; “*Comparison of the sensitivity of ESI, APCI and APPI methods for the MS analysis of the olefin metathesis reaction catalysts*”
9. M. Kania, M. Palusinska-Szys, A. Turska-Szewczuk, R. Russa, W. Danikiewicz; “*Profiling of phospholipids in Acanthamoeba castellanii by LC/MS technique*”
10. E. Góreczna-Skrzyńska, E. Drabik, M. Sochacki, M. J. Potrzebowski, W. J. Szczepek, J. Frelek “*Electron ionization mass spectrometry studies of selected analogous of linezolid*”

#### International Symposium on Electronic/Optic Functional Molecules (ISEOFM), Szanghaj, Chiny, 11-13.03.2012

poster

11. A. Nowak-Król, “*Straightforward synthesis, photophysical and optical limiting properties of  $\pi$ -expanded porphyrins*”

**53<sup>rd</sup> ENC CONFERENCE, Miami, Florida, USA, 10-15 – 20.04.2012**

*poster*

12. E. Bednarek, W. Bocian, J. Sitkowski, B. Naumczuk, L. Kozerski „*Chemistry and DNA-complexes of topoisomerase I inhibitors*”
13. W. Bocian, E. Bednarek, J. Sitkowski, P. Borowicz, D. Kurzynoga, D. Mickiewicz-Syguła, B. Tejchman-Małecka, M. Pawłowska, L. Kozerski „*Human Insulin and its Analogues, Aggregation and Dynamic Studiem by NM*”

**27<sup>th</sup> Central European NMR Meeting, Valtice, Czechy, 22-25.04.2012**

*komunikat*

14. J. Jaźwiński, R. Głaszczka, "Adducts of rhodium(II) tetratrifluoroacetate with oxygenic ligands: <sup>1</sup>H NMR, <sup>13</sup>C NMR and DFT studies"

**30<sup>th</sup> Informal Meeting on Mass Spectrometry; Olomouc, Czechy; 29.04 – 03.05.2012**

*poster*

15. M. Zimnicka, M. Ceborska, M. Pietrzak, A. Troć, M. Koźbiał, J. Lipkowski; „*Mass spectrometry studies of structural diversity in cyclodextrins/folic acid complexes – from [2]-rotaxane to exclusion compound*”
16. G. Spólnik, M. Kania, A. Sobczak, L. Lipiński, A. Dziembowski, W. Danikiewicz; „*HPLC-MS/MS qualitative and quantitative analysis of pesticides in soil samples*”
17. M. Kania, A. Józwiak, M. Płes, A. Baczewska, W. Dmuchowski, W. Danikiewicz, E. Świeżewska; „*LC-MS analysis of polyisoprenoid alcohols and their esters in natural samples*”

**8th Korea-Poland Joint Symposium on Organic Chemistry, Białystok, 8-9.05.2012**

*wyklady*

18. D. Gryko, „*Modification of natural tetrapyrroles: the quest for new NO-independent sGC activators*”
19. S. Jarosz, “*Synthesis of Carbobicyclic Sugar Mimics*”
20. Witold Danikiewicz; „*Mass spectrometer as the ‘all-in-one’ chemical reactor and analyzer – studies on the gas-phase chemistry of aromatic carbanions*”
21. J. Młynarski, „*Organocatalytic Synthesis of Carbohydrates*”
22. J. Jurczak; „*Neutral Anions Receptors Effective in Highly Competitive Solvents*”

**BIT’s Annual World Congress of Catalytic Asymmetric Synthesis, Pekin 12-14.05.2012**

*wykład*

23. R. Ostaszewski “*A New Approach to the Synthesis of Chiral Ester Based on Dynamic Kinetic Resolution of Carboxylic Acids*”



**Modern Synthetic Methods & Chiral Conference, Prague, 14-16.05.2012**

wykład

24. K. Grela, "Catalysts for New Tasks: Preparation and Applications of New Catalysts for Olefin Metathesis"

**GECOM-CONCOORD Conference, Métabief, Francja, 3-8.06.2012**

wykład

25. K. Grela, "Rational Design and Evaluation of Upgraded Grubbs/Hoveyda Olefin Metathesis Catalysts"

**Symposium de Chimie Organique en Centre, Auvergne-Limousin, Francja, 4-7.06.2012**

poster

26. C. Nicolas, R. Pluta, M. Pasternak-Suder, J. Mlynarski, O. R. Martin, "Convenient Preparation of Protected D- and L-Isoserinal : Use in the Asymmetric (Organocatalyzed) Synthesis of Iminosugars"

**The XVIth International Workshop on Quantum Atomic and Molecular Tunneling in Solids and Other Condensed Phases, Santa Fe, New Mexico, USA, 10-14.06.2012**

wykład

27. S. Szymański, "Quenching of coherent tunneling and quantum-to-classical transition in solid state dynamics of CH<sub>3</sub> groups investigated by NMR spectroscopy methods. A revisionist view"

poster

28. S. Szymański, "Proton spin-lattice relaxation of the CH group revisited. A damped quantum rotation approach"

**The 24th International Symposium on Chirality, Fort Worth, USA (Texas), 10-13.06.2012**

wykład

29. J. Frelek "Circular dichroism spectroscopy as valuable tool in solving stereochemical problems"  
30. J. Frelek "The on-line HPLC/CD and NMR spectroscopies in stereochemical analysis of complex reaction mixtures"

poster

31. M. Górecki, S. Witkowski, J. Frelek "Chiroptical study of Trolox derivatives"  
32. M. Jawiczuk, M. Górecki, A. Suszczyńska, J. Frelek "The utility of selected dimolybdenum carboxylates in chiroptical studiem of vic-diols"  
33. D. Madej, M. Woźnica, M. Grajda, M. Masnyk, J. Frelek "Spontaneous stereospecific epoxidation of a diene unit in bicyclic  $\alpha$ -lactams under aerobic conditions"

**International Symposium on Metal Complexes 2012, Lisbon, Portugal, 18-22.06.2012**

*poster*

34. M. Woźny, I. Mames, B. Korybut-Daszkiewicz, “*Rotaxanes and catenanes containing units of azamacrocyclic complexes of Cu(II) and Ni(II)*”
35. I. Mames, M. Woźny, B. Korybut-Daszkiewicz, “*Molecular Necklaces Containing Transition Metal Ions*”

**13th Tetrahedron Symposium, Amsterdam, Holandia, 26-29.06.2012**

*poster*

36. M.A. Potopnyk; S. Jarosz, “*Synthesis macrocyclic dilactams containing the sucrose subunit and isophthalic or 2,6-pyridinedicarboxylic amides*”
37. S. Kłossowski, A. Muchowicz, J. Golab, R. Ostaszewski: “*Structure – activity relationship studies of thioredoxin system inhibitors with  $\alpha$ -acyloxymethacrylic fragment*”
38. A. Żądło, R. Ostaszewski „*Synergistic interaction between hydrolases as an efficient tool in the synthesis of esters – a case study*”
39. M. Ćwiklak, R. Ostaszewski „*The studies on tandem metal-enzyme catalysed synthesis of nonracemic 3-hydroxy-3-arylcarboxylic esters*”
40. A. Brodzka, R. Ostaszewski „*The Studies on Enzymatic Kinetic Resolution of selected carboxylic acids*”
41. C. Wisniewska, R. Ostaszewski „*Ethyl acetoacetate as a donor of ethoxy group in enzymatic estrification of carboxylic acids*”

**Natural Anticancer Drugs (NAD 2012), Olomouc (Czechy), 30.06 – 4.07.2012,**

*poster*

42. J. Oklestkova; L. Rarova; P. Cmoch; Z. Pakulski; M. Strnad, “*Potential anticancer properties of lupane-type saponins*”

**7th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-7) Jeju, Korea, 31.06 – 6.07.2012**

*wykład*

43. D.T. Gryko, “*Novel  $\pi$ -extended porphyrins—synthesis and non-linear optical properties*”

*poster*

44. D. Gryko „*Modification of natural tetrapyrroles: the quest for new NO-independent sGC activators*”
45. P. Wyřbek; A. Osuch-Kwiatkowska; Z. Pakulski; S. Jarosz; S. Ostrowski, “*Synthesis of Sugar-decorated Hydrophilic Porphyrins*”

46. D. Koszelewski, "Low-melting  $\pi$ -expanded Porphyrins Synthesis And Optical Properties (poster), Selective Cycloaddition Of Tetracyanoethene To Meso-substituted Phenylethynyl Porphyrins"
47. A. Nowak-Król, "Liquid  $\pi$ -expanded porphyrins: synthesis, non-linear properties, and thermal behavior; Non-scrambling synthesis of trans- $A_2B_2$ -phenylethynylporphyrins"

**3<sup>rd</sup> Molecular Sensors & Molecular Logic Gates, Seoul, Korea, 8-11.07.2012**

wykład

48. D.T. Gryko, "Bright, Color-Tunable Fluorescent Dyes Based on  $\pi$ -Expanded Diketopyrrolopyrroles"

**7th Asian European Symposium on Metal Mediated Efficient Organic Synthesis, Tarragona, Hiszpania, 22-27.07.2012**

wykład

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

**26th International Carbohydrate Symposium (ICS2012) Madrid, Spain, 22-27.07.2012**

komunikat

50. S. Jarosz, "Synthesis of Carbobicyclic Sugar Mimics"

komunikat (flash presentation) i poster

51. J. Młynarski, "Organocatalytic Synthesis of Carbohydrates"

poster

52. P. Gołebiowska, J. Młynarski, "Total Synthesis of Pandarosides E-J"
53. Sz. Buda, J. Młynarski, "Stereochemistry control in glycosylation via modified 2-O-benzyl group"

**International Congress on Natural Products Research on Global Change, Natural Products and Human Health/8th Joint Meeting of AFERP, ASP, GA, PSE and SIF; New York, 28.07 - 1.08.2012**

poster

54. M.K. Jamróz, M.H. Davey, S. Kaźmierski, W. Danikiewicz, G. Spólnik, J.A. Gliński; „New A-type Trimeric and tetrameric procyanidins from Peanuts skins"
55. W.J. Szypuła, P. Mistrzak, O. Olszowska, A.K. Kiss, A. Adamczyk, G. Czapski, M. Kania, B. Wileńska, W. Danikiewicz; „Biological and phytochemical studies of *Huperzia selago* (L.) Bernh. ex Schrank et Mart. (Huperziaceae)"

**244th American Chemical Society National Meeting & Exposition, Philadelphia, USA, 19-23.08.2012**

*wykład*

56. M. Chmielewski, M. Maciejko, S. Stecko, B. Furman, “*Diastereoselective Kinugasa reaction as an entry to carbapenem antibiotics*”

*komunikat ustny*

57. J. Czaban “*New possibilities of purification of metathesis reaction*”  
58. K. Żukowska “*2nd vs. 3rd Generation of Sulfur-Chelated Hoveyda Catalysts: a Synthetic and Mechanistic Comparison*”  
59. K. Grela, “*N-Heterocyclic Carbenes in Catalytic Olefin Metathesis*”

*poster*

60. J. Czaban „*Modification of N-heterocyclic unsaturated carbene ligands for Ru-based olefin metathesis catalysts: Catalyst separation by nanofiltration*”

**EUROMAR 2012 Lyon, France, 19 – 25.08.2012.**

*poster*

61. B. Naumczuk, K. Hyz, W. Bocian, J. Sitkowski, E. Bednarek, R. Kawęcki, L. Kozerski „*Chemistry and DNA-complexes of topoisomerase I inhibitors*”

**4th EuCheMS Chemistry Congress, Praga Czeska, Czechy, 26-30.08.12**

*wykład*

62. A. Szumna, “*Chiral capsules with reversed polarity*”

**5<sup>th</sup> Baltic Meeting on Microbial Carbohydrates, Suzdal, Rosja, 2-6.09.2012**

*poster*

63. A. Turska-Szewczuk, R. Russa, I. Komaniecka, M. Palusińska-Szys, W. Danikiewicz, G. Spólnik, H. Pietras, A. Choma; *Structural studies of an outer core tetrasaccharide isolated from the lipopolysaccharide of Rhizobium leguminosarum bv. trifolii strain 24*  
64. A. Choma, I. Komaniecka, A. Turska-Szewczuk, W. Danikiewicz, G. Spólnik; *Determination of secondary fatty acid positions in the lipid a from azorhizobium caulinodans HAMBI 216*

**32<sup>nd</sup> European Peptide Symposium, Athens, Greece, 2-7.09.2012.**

*poster*

65. K. Knapp, M. Górecki, M. Hollosi, E. Vass, Z. Majer "Chiroptical spectroscopic investigation on diamide peptide models"

**Supramolecular Systems in Chemistry and Biology, Francja, Strasbourg, 05-08.09.2012**

*komunikat ustny*

66. Granda, J Jurczak; „*Amides of Glucuronic Acid as Anion Receptors Effective in Chiral Recognition*”

*poster*

67. P. Duszewski, J. Jurczak; „*Synthesis of lariat macrocycles aiming for chiral recognition of anions*”
68. D. Lichosyt, J. Jurczak; „*Tetramides with azulene moieties as synthetic anion receptors*”
69. P. Niedbała, K. Dąbrowa, J. Jurczak; „*Azo derivatives of D-glucopyranose as photoswitchable receptors in chiral anion recognition*”
70. E. Słyk, J. Jurczak; „*Simple Glucosamine-based Receptors for Chiral Recognition of Amino Acid Anions*”
71. F. Ulatowski, J. Jurczak; „*Chiral recognition properties of urea amino acid based C<sub>2</sub> symmetrical receptors for anions*”

**3-rd International Symposium on Biomedical Applications of Dendrimers, Toledo, Hiszpania, 5-8.09.2012.**

*poster*

72. Z. Urbanczyk-Lipkowska, M. Sowinska, P. Zielinska, M. Zimnicka, J. Solecka, A. Rajnisz, T. Lind, M. Cárdenas, „*Structure and properties of dendrimeric peptide mimics towards understanding antimicrobial activity*”.

**Polish – German Biochemical Societies Joint Meeting, Biochemistry for health and environment, Poznań; 11.09-14.09.2012.**

*poster*

73. M. Palusinska-Szys, M. Kania, E. Wisniewska, W. Danikiewicz, T. Urbanik-Sypniewska. „*Legionella dumoffii utilizes extracellular ethanolamine to synthesis of phosphatidylethanolamine and phosphatidylcholine*”

**International Conference „Catalysis In Organic Synthesis”, Moskwa, Rosja, 15-20.09.2012**

*poster*

74. Maria Rogozińska, Anna Adamkiewicz, Jacek Młynarski, „*Synthesis of optically active warfarin*”
75. Osama El-Sepelgy, Jacek Młynarski, poster: „*Asymmetric cross aldol reaction of pyruvic derivatives: Biomimetic synthesis of ulosonic acids*”
76. Sebastian Baś, Jacek Młynarski, poster: „*Development of new type catalyst In direct asymmetric aldol reaction of aromatic ketones*”

77. Monika Pasternak-Suder, Jacek Młynarski, poster: „*Organocatalytic synthesis of deoxyketoses and iminosugars*”
78. T. Bauer, M. Majdecki, J. Jurczak; „*Carbohydrate-derived phosphoramidite ligands for enantioselective Cu-catalyzed 1,4-conjugate addition of diethylzinc to enones*”
79. P. Hamankiewicz, J. Jurczak; „*Synthesis of D-glucosamine derivatives and their application as organocatalysts in the asymmetric Michael reaction*”
80. P. Stępnia, J. Jurczak; „ *$\beta$ -Cyclodextrin with  $\alpha$ -amino acid derivatives – new potent chiral hybrids*”
81. Ł. Mucha, B. Furman, „*Lithium–Halogen Exchange Initiated Intramolecular Aryllithium Additions to Dihydropyridones*”
82. P. Szcześniak, B. Furman, „*Direct Chemoselective Synthesis of Polyhydroxylated Quinolizidine Enaminones From Inert Sugar-Derived Lactams*”
83. K. Szymczak, B. Furman, „*Bicyclic Enaminones As Building Blocks In The Synthesis Of Azaphenalenenes And Related Compounds*”
84. E. Maziarz, B. Furman, „*Vinyl Acetals To Beta-Alkoxy Ketones By Tebbe Methylation And Acid-Induced Rearrangement*”
85. M. Maciejko, S. Stecko, B. Furman, M. Chmielewski, „*An Entry To Carbapenamams via Asymmetric Kinugasa Reaction Involving Cyclic Nitrones Deriver From Sugars And Terminal Acetylenes*”
86. O. Staszewska-Krajewska, Magdalena Maciejko, Bartłomiej Furman, „*A Simple Method For Assignment Of The Relative Stereochemistry Of Clavamams And Carbapenamams*”

**Post-Conference Symposium „Frontiers of Organometallic Chemistry” Moskwa, Rosja, 15-20.09.2012**

*poster*

87. M. Rogozińska, A. Adamkiewicz, J. Młynarski, „*Synthesis of optically active warfarin*”

**Vitamin B12 Symposium, Nancy, France 20 – 22. 09.2012**

*komunikat ustny*

88. D. Gryko „*Vitamin B<sub>12</sub> modifications: the quest for new guanylyl cyclase activators*”
89. M. Chromiński, „*Protoporphyrin IX/Cobinamide Derived Hybrids Novel Activators of Soluble Guanylyl Cyclase*”

**Frontiers of Organometallic Chemistry, Rosja, Sankt-Petersburg, 21-22.09.2012**

*poster*

90. P. Hamankiewicz, T. Bauer, J. Jurczak; „*Synthesis of D-glucosamine derivatives and their application as chiral ligands in an asymmetric alkylation in allylic position*”

91. P. Stępniaak, J. Jurczak; „Carbene ligands incorporated to  $\beta$ -Cyclodextrins – 1,2,3-triazolylidene derivatives”
92. Ł. Mucha, B. Furman, “Lithium–Halogen Exchange Initiated Intramolecular Aryllithium Additions to Dihydropyridones”
93. P. Szcześniak, B. Furman, “Direct Chemoselective Synthesis of Polyhydroxylated Quinolizidine Enaminones From Inert Sugar-Derived Lactams”
94. K. Szymczak, B. Furman, “Bicyclic Enaminones As Building Blocks In The Synthesis Of Azaphenalenenes And Related Compounds”
95. E. Maziarz, B. Furman, “Vinyl Acetals To Beta-Alkoxy Ketones By Tebbe Methylation And Acid-Induced Rearrangement”
96. M. Maciejko, S. Stecko, B. Furman, M. Chmielewski, “An Entry To Carbapenamams via Asymmetric Kinugasa Reaction Involving Cyclic Nitrones Deriver From Sugars And Terminal Acetylenes”
97. O. Staszewska-Krajewska , Magdalena Maciejko, Bartłomiej Furman, “A Simple Method For Assignment Of The Relative Stereochemistry Of Clavams And Carbapenamams”

**Vibrational Optical Activity: Interplay of Theory and Experiment, Piza, Italy, 23-27.09.2012**

poster

98. M. Górecki, S. Witkowski, J. Frelek "Chromane helicity rule – scope and challenges based on ECD and VCD study of various Trolox derivatives"

**VII<sup>th</sup> Symposium Nuclear Magnetic Resonance in Chemistry, Physics and Biological Sciences, Warsaw, Poland, 26-28.09.2012**

komunikat ustny

99. S. Szymański, “Quenching of coherent tunneling and quantum-to-classical transition in solid state dynamics of CH<sub>3</sub> groups investigated by NMR spectroscopy methods. A revisionist view”
100. M. Jaszuński, “The determination of accurate shielding constants and nuclear magnetic moments”

poster

101. S. Szymański, “Proton spin-lattice relaxation of the CH group revisited. A damped quantum rotation approach”
102. L. Kozerski, E. Bednarek, W. Bocian, J. Sitkowski, P. Borowicz, S. Błażej-Sosnowska, M. Bogiem, W. Surmacz-Chwedoruk „Novel Recombinant Human Insulin Analogues, NMR structure In Water/Acetonitrile Solution and Aggregation Properties In Water”
103. W. Bocian, E. Bednarek, J. Sitkowski, L. Kozerski, P. Borowicz, D. Kurzynoga, D. Mickiewicz-Syguła, B. Tejchman-Małecka, M. Pawłowska „Human Insulin Analogues, Aggregation and Dynamice Studium by NMR”

104. J. Jaźwiński, R. Głaszczka, P. Cmoch "Adducts of rhodium(II) dimeric salts with organic ligands:  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  NMR and DFT studies"

**YoungChem 2012, International Congress of Young Chemists, Gdańsk, 10-14.10.2012 r.**

*wykład*

105. J. Jurczak; „Neutral Anions Receptors Effective in Highly Competitive Solvents”  
106. M. Mąkosza “Nucleophilic Substitution of Hydrogen in Electron-Deficient Arenes. Missing Part of the Aromatic Substitution Puzzle”

*komunikat ustny*

107. M. Chromiński „Protoporphyrin IX/Cobinamide Derived Hybrids Novel Activators of Soluble Guanylyl Cyclase”

*poster*

108. C. Samojłowicz, S. Guidone, E. Blondiaux, Ł. Gułajski, M. Kędziorek, M. Malińska, A. Pazio, K. Woźniak, K. Grela, A. Doppiu, C.S.J. Cazin “Catalytic and structural studies of Hoveyda-Grubbs type pre-catalysts bearing modified ether ligands”  
109. I. Mames, B. Korybut-Daszkiewicz, “Molecular Necklaces Containing Transition Metal Ions”  
110. J. Kowalski, I. Mames, A. Rodger, “The Interaction of Cyclidenes with DNA”  
111. M. Chromiński, D. Gryko „Clickable vitamin B<sub>12</sub>”  
112. M. Karczewski, D. Gryko „Ruthenium catalyzed Huisgen reaction: a new era in modifications of porphyrin systems”  
113. A. Zieleniewska, D. Gryko „Huisgen reaction of porphyrins with no copper insertion – is it possible?”

**Microsymposium: Renewable raw materials in organic synthesis; Warszawa, 19.10.2012**

*wykład*

114. B. Furman „ $\beta$ -Laktamy - nowe metody syntezy, nowe własności farmakologiczne”  
115. S. Jarosz, “Synthesis of Carbocyclic Sugar Mimics”  
116. J. Jurczak, „Marka Chmielewskiego perygrynacje po chemii... i nie tylko”

**International Conference on Antimicrobial Research, Lizbona, Portugalia, 21-24.11.2012.**

*komunikat ustny*

117. M. Sowińska, J. Solecka, A. Rajnisz, Z. Urbańczyk-Lipkowska, “Design of novel non-hemolytic amphiphilic dendrimers selective on Gram-negative bacteria”



**6<sup>th</sup> International Symposium on Macro- and Supramolecular Architectures and Materials (MAM-12), Coimbatore (India), 21–25.11.2012**

*poster*

118. R. Luboradzki; Z. Pakulski; A. Wasiak, “*Sugar-based two-component organogels*”

**13<sup>th</sup> Tetrahedron Symposium – Asia Edition; Taipei, Taiwan; 27-30.11.2012 r.**

*poster*

119. P. Szcześniak, B. Furman “*A practical synthesis of sugar-derived imines: Useful synthons for the synthesis of polyhydroxylated alkaloids*”
120. M. Maciejko, S. Stecko, A. Mames, B. Furman, M. Chmielewski “*Kinugasa reactions involving sugar-derived nitrones toward the synthesis of carbapenams*”
121. B. Furman, P. Szcześniak, K. Szymczak, “*Synthesis and utility of monocyclic and bicyclic enamines in the synthesis of piperidine-containing natural products and biologically active compounds*”
122. M. Chmielewski, M. Maciejko, S. Stecko, B. Furman, “*An entry to carbapenem antibiotics scaffold via asymmetric Kinugasa reaction*”
123. Z. Urbanczyk-Lipkowska, M. Sowinska, P. Zielinska, M. Zimnicka, J. Solecka, A. Rajnisz, T. Lind, Cárdenas, I. Łącka, Sł. Milewski “*The molecular basis for antimicrobial activity of a novel dendrimeric peptides*”.
124. P. Zielińska, A. M. Rajnisz, J. Solecka, M. Bochyńska, A. W. Lipkowski, Z. Urbańczyk-Lipkowska, “*Effect of D-tryptophan substitution on the activity and toxicity of tryptophan-rich antimicrobial dendrimers*”.

**Materials Research Society Fall Meeting, Boston, USA, 26.11-03.12.2011**

*poster*

125. D.T. Gryko, “*Liquid  $\pi$ -Expanded Porphyrins as Optical Limiters*”

**XVIII-th International Winter School on Coordination Chemistry, Karpacz, Poland 3-7.12.2012.**

*wykład*

126. B. Korybut-Daszkiewicz, I. Mames and M. Woźny, “*Tetraimine Macrocyclic Transition Metal Complexes as Building Blocks for Molecular Receptors*”

## IMPREZY KRAJOWE

### 29 Wiosenny Zjazd Sekcji Studenckiej PTChem; Łazy, 18-22.04.2012

poster

1. A. Radziejewska, F. Ulatowski, J. Jurczak; „Czwartorzędowe pochodne glukozaminy jako potencjalne katalizatory PTC”

### Sesja Sprawozdawczo-Szkoleniowa Użytkowników ICM, Sterdyń, 19-22.04.2012

komunikat ustny + poster

2. M. Górecki "Określanie konfiguracji absolutnej acylowych pochodnych tyminy przy użyciu spektroskopii elektronowego dichroizmu kołowego (ECD)"
3. M. Woźnica "Badania chiralooptyczne trójcyklicznych oksaanalogów cefalosporyn posiadających układ chromanu”

### ChemSession 2012, IX warszawskie seminarium doktorantów chemików, Warszawa, 10.05.2012 r.

poster

4. J. Jurczak; “Pochodne pirolu i benzopirolu jako efektywne receptory anionów: czy będą one skuteczne także w rozpoznaniu chiralnym”
5. C. Samojłowicz, E.. Borré, M. Mauduit, K. Grela, “Microwave-Assisted Ruthenium Catalysed Olefin Metathesis in Fluorinated Aromatic Hydrocarbons: a Beneficial Combination”
6. A. Nowak-Król, “Straightforward synthesis, photophysical, and optical limiting properties of  $\pi$ -expanded porphyrins”
7. M. Grzybowski, „Novel, fluorescent dyes based on  $\pi$ -expanded diketopyrrolopyrroles”
8. A. Janiga, „Synteza porfiryn o rozszerzonym układzie  $\pi$ -elektronowym”
9. A. Purc, „Pochodne 4,6-diarylo-3-cyjano-2-metylopirydyny jako potencjalne barwniki do zastosowań w mikroskopii fluorescencyjnej”
10. Ł. Banach, D. Gryko, „Synteza hybryd molekularnych złożonych z witaminy B<sub>12</sub> i protoporfiryny IX”
11. M. Giedyk, K. ó Proinsias, D. Gryko „Synteza nowych hydrofilowych i hydrofobowych pochodnych kobinamidu i ich potencjał jako niezależnych od tlenu azotu aktywatorów sGC”
12. S. Kurcoń, D. Gryko „Mezo- oraz d- funkcjonalizowane hydrofobowe pochodne witaminy B<sub>12</sub>”
13. M. Woźny, I. Mames, B. Korybut-Daszkiewicz, „Rotaksany i katenany zawierające jednostki azamakrocyclicznych kompleksów Ni(II) i Cu(II)”
14. I. Mames, M. Woźny, B. Korybut-Daszkiewicz, “Molecular Necklaces Containing Transition Metal Ions”

## VIII Interdyscyplinarna Konferencja Nauki o Leku, Rawa Mazowiecka, 30.05-3.06.2012.

### wykład

15. L. Kozerski, "Molecular complexes of topo I and II inhibitors from camptothecin and flavonoid families with model DNA oligomers. Search for sequence specific binding. Verification of biological assays on atomic coordinates level".
16. L. Kozerski, „Zastosowanie nowoczesnych technik NMR do badań strukturalnych w chemii bioorganicznej, chemii leków, suplementów diety i nowych narkotyków syntetycznych”
17. S. Kłossowski, A. Muchowicz, J. Gołąb R. Ostaszewski „Studies toward Novel Peptidomimetic Inhibitors of Thioredoxin–Thioredoxin Reductase System”
18. Z. Lipkowska, M. Sowińska, P. Zielińska, M. Zimnicka, J. Solecka, A. M. Rajnisz, T. Lind, M. Cárdenas, „Supramolecular assembly and properties of dendrimeric peptide mimics”.

### poster

19. M. Sowińska, J. Solecka, A. Rajnisz, M. Bochyńska, A.W. Lipkowski, Z. Urbańczyk-Lipkowska, „Novel Amphiphilic Dendrimers as Antibacterial and Antitumor Agents”
20. P. Zielińska, A. M. Rajnisz, J. Solecka, M. Bochyńska, A. W. Lipkowski, Z. Urbanczyk-Lipkowska, „Wpływ podstawienia D-tryptofanem na aktywność biologiczną peptydowych dendrymerów”.
21. J. Frelek, M. Górecki, M. Łaszcz, A. Suszczyńska, E. Vass, W. J. Szczepiek "Analiza form polimorficznych linezolidu metodami ECD i VCD w fazie stałej"
22. S. Kłossowski, A. Muchowicz, J. Gołąb R. „Synthesis of marker compounds for detailed explanation of the mechanism of anticancer activity of peptidomimetics with  $\beta$ -ayloxymethacrylic fragment”

## VI Kopernikańskie Seminarium Doktoranckie, Toruń, 13-15.06.2012

### poster

23. M. Giedyk, K. ó Proinsias, D. Gryko „Synthesis of new hydrophilic cobinamides and their potential as no-independent sGC activators”
24. S. Pisarek, D. Gryko „Projektowanie i synteza nowych pochodnych protoporfiryny IX jako potencjalnych aktywatorów rozpuszczalnej cyklazy guanylanowej (sGC)”
25. S. Kłossowski, A. Muchowicz, J. Gołąb, R. Ostaszewski „Badania nad chemoenzymatyczną syntezą nowych inhibitorów układu tioredoksyny – reduktazy tioredoksyny”
26. A. Żądło, R. Ostaszewski „Chemoenzymatyczna synteza nieracemicznych  $\alpha$ -halogenokwasów karboksylowych”
27. M. Ćwiklak, R. Ostaszewski: "Badania nad zastosowaniem enzymów do reakcji rozdziału kinetycznego i dynamicznego rozdziału kinetycznego  $\alpha$ - i  $\beta$ -podstawionych kwasów karboksylowych"

28. A. Brodzka, R. Ostaszewski "Badania nad opracowaniem chemoenzymatycznej metody syntezy nieracemicznych pochodnych kwasów 3-arylo-4-pentenowych"
29. C. Wiśniewska, R. Ostaszewski „Badania nad enzymatycznym rozdziałem kinetycznym adduktów reakcji Baylisa-Hillmana”

#### **Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław, 5-7.07.2012.**

*poster*

30. P. Kalicki, Z. Urbanczyk-Lipkowska, K. Tanaka, „Chiralne kompleksy Cu(II) jako asymetryczne katalizatory enancjoselektywnej reakcji aldolowej”,

#### **7 Kongres Technologii Chemicznej, Kraków, 8-12.07.2012.**

*komunikat*

31. J. Janiszewska, Z. Urbańczyk-Lipkowska, J. Solecka, A. Rajnisz, „Małocząsteczkowe dendrimery peptydowe jako źródło nowych związków bakteriostatycznych”.

#### **55 Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok, 16-20.09.2012**

*Wykład*

32. W. Danikiewicz; “Zastosowanie spektrometrii mas w połączeniu z metodami obliczeniowymi do badania reakcji karboanionów w fazie gazowej”
33. S. Jarosz; „Od cukrów wyższych do karbobicyklicznych mimetyków”,
34. Z. Pakulski; P. Cmoch; „Rodanki anomeryczne – synteza i wykorzystanie”
35. J. Młynarski, „Organokataliza: wartościowe narzędzie w syntezie cukrów”
36. J. Jurczak; “Fotoprzełączalne receptory anionów”
37. J. Frelek; "Dichroizm kołowy w analizie stereochemicznej substancji bioaktywnych"
38. R. Ostaszewski; „Nowe metody syntezy nieracemicznych estrów kwasów karboksylowych wykorzystujące enzymatyczny rozdział kinetyczny i dynamiczny rozdział kinetyczny”
39. R. Ostaszewski; „Nowe strategie syntezy peptydomimetyków wykorzystujące reakcję Ugięgo”

#### **Nano-Biotechnologia PL 2012, 17-18.09.2012**

*prezentacja ustna*

40. H. Hibner, R. Ostaszewski „Studies towards stereoselective bionanocatalysis on gold nanoparticles”

## **Postępy w Syntezie Związków Nieracemicznych, Polanica Zdrój, 16-19.10.2012**

### *wykład*

41. J. Młynarski, „*Organokataliza: wartościowe narzędzie w syntezie cukrów*”
42. J. Jurczak; „*Pochodne pirolu jako efektywne receptory anionów: czy będą one skuteczne także w rozpoznaniu chiralnym*”
43. J. Frelek "Dichroizm kołowy w analizie stereochemicznej-podstawy i zastosowanie"

### *wykład sekcyjny*

44. M. Woźnica "Stereochemiczna analiza złożonych mieszanin reakcyjnych za pomocą HPLC z detekcją CD oraz NMR”

### *komunikat*

45. M. Jawiczuk "Kompleksy metali przejściowych jako chromofory pomocnicze w badaniach strukturalnych związków transparentnych w zakresie UV-Vis"
46. B. Gut, J. Młynarski, „*Synteza de novo aldoz w środowisku wodnym*”
47. M. Woyciechowska, J. Młynarski, „*Regioselektywna reakcja Mukaiyamy siloksyfuranów prowadzona w obecności wody*”
48. P. Gołębiowska, J. Młynarski, „*Synteza totalna Pandarozydów*”
49. S. Baś, J. Młynarski, „*Poszukiwanie nowych, efektywnych katalizatorów dla asymetrycznej reakcji aldolowej z udziałem aromatycznych hydroksyketonów*”
50. Sz. Buda, J. Młynarski, „*Stereochemiczna kontrola glikozydowania z zastosowaniem zmodyfikowanych grup benzyłowych*”
51. M. Pasternak-Suder, J. Młynarski, „*Organokatalityczna synteza ketoheksos i iminocukrów*”
52. M. Dygas, Z. Kałuża, „*Asymetryczna synteza alkaloidów Erythrina*”

## **VI International Warsaw Invention Show IWIS 2012, Warszawa, Politechnika Warszawska, 16-19.10.2012.**

### *poster*

53. Z. Kałuża, R. Cwiek, A. Bielawska, K. Bielawski. “*New derivatives of Octahydro-pyrazin-[2,1-a:5,4-a']-diisoquinoline and their application*”

## **Postępy w syntezie związków nieracemicznych, Polanica Zdrój, 16-19-10.2012**

### *komunikat ustny*

54. P. Hamankiewicz, J. Jurczak; „*Synteza pochodnych D-glukozaminy oraz ich zastosowanie jako organokatalizatorów w asymetrycznej reakcji Michaela*”
55. P. Stępniaak, J. Jurczak; „*Hybrydowe pochodne aminokwasów i  $\beta$ -cyklodekstryny*”

### XXXVII Ogólnopolska Szkoła Chemii, Gdańsk – Sobieszewo 7 – 11.11.2012

56. A. Dąbrowska, A. Grabowska, S. Kutyla, Z. Wróbel, "Expedient synthesis of 6-nitro-N-hydroxyindole derivatives via alcohols formed by the addition of 2,4-dinitrotoluene to various aldehydes"

### XLIV GÓLNOPOLSKIE SEMINARIUM NA TEMAT MAGNETYCZNEGO REZONANSU JĄDROWEGO, Kraków, 3-4.12.2012 r.

poster

57. S. Szymański, H. Dodziuk, M. Pietrzak, J. Jaźwiński, T. Beyene Demissie, H. Hopf, „Dynamika konformacyjna [3.n]paracyklofanów ( $n = 2 - 4$ ) w widmach NMR. Wyznaczenie oddzielnych parametrów Arrheniusa dla dwóch procesów konformacyjnych w [4.3]paracyklofanie”
58. S. Szymański, H. Dodziuk, M. Pietrzak, Jarosław Jaźwiński, T. B. Demissie, H. Hopf „Dynamika konformacyjna [3.n]paracyklofanów ( $n = 2 - 4$ ) w widmach NMR. Wyznaczenie oddzielnych parametrów Arrheniusa dla dwóch procesów konformacyjnych w [4.3]paracyklofanie”

komunikat

59. J. Jaźwiński, "Addukty ligandów azotowych z tetrakarboksyłowymi i tetraimidowymi solami rodzaju (II); spektroskopia NMR i obliczenia DFT"

### XVIII-th International Winter School on Coordination Chemistry, Karpacz, Poland 3-7.12.2012

poster

60. K. Suracka, A. Bieńko, J. Mroziński, R. Kruszyński, D. Bieńko, B. Korybut-Daszkiewicz, „Prussian Blue Analogues with Macrocyclic Precursors”

### WYKŁADY WYGŁOSZONE ZAGRANICĄ NA ZAPROSZENIE INSTYTUCJI NAUKOWYCH

1. **B. Furman** "β-Lactams - new methods of synthesis, new profile of pharmacological activities", Universität zu Köln, 7.05.2012;
2. **K. Grela**, „Olefin metathesis” Uniwersytet Ben Guriona w Negev, Izrael, 9 lutego 2012 (wykład na uniwersytecie)
3. **S. Szymański**, "The dynamics of methyl group in NMR spectroscopy. A revisionist view", wykład na zaproszenie, XXX Mitteldeutsches-Rezonanz-Treffen, University of Leipzig, Leipzig, RFN, Nov. 12, 2012.
4. **J. Młynarski**, "Organocatalytic Synthesis of Carbohydrates", Institut für Organische Chemie, Universität Lipsk, Niemcy
5. **J. Młynarski**, "Organocatalytic Synthesis of Carbohydrates", HAS' Chemical Research Center, Hungarian Academy of Sciences, Budapeszt, Węgry
6. **J. Młynarski**, "Asymmetric Aldol Reaction in Aqueous Media, University of Turku, Turku, Finlandia

7. **D.T. Gryko**, University of Copenhagen, Kopenhaga, Dania, maj 2012
8. **D.T. Gryko**, BASF-Schweiz, Bazylea, Szwajcaria, sierpień 2012
9. **D.T. Gryko**, University of Florence, Florencja, Włochy, wrzesień 2012
10. **D. Gryko** „*New tetrapyrrole derivatives as NO independent sGC activators*” Kangwon National University; Chuncheon, Korea, 7.07.2012
11. **D. Gryko**, „*Vitamin B<sub>12</sub> chemistry – breaking the mold*”, The University of Innsbruck Innsbruck, Austria, 26.11.2012
12. **M. Mąkosza**, wykład “*Nucleophilic Substitution of Hydrogen in Electron-Deficient Arenes. Missing Part of the Aromatic Substitution Puzzle*” Uniwersytety w Bratysławie, Lublanie, Genewie, Darmstadzie
13. **M. Mąkosza**, wykład „*Nucleophilic Substitution of Hydrogen in the Synthesis of Heterocyclic Compounds*” firma Lonza (Visp, Szwajcaria) i firma Krka (Nowe Mesto, Słowenia).
14. **M. Mąkosza**, wykład “*Nucleophilic Substitution of Hydrogen in Electron-Deficient Arenes. Missing Part of the Aromatic Substitution Puzzle*” University of Huddersfield, University of Leeds, University of Manchester.

#### WYKŁADY WYGŁOSZONE W POLSCE NA ZAPROSZENIE INSTYTUCJI NAUKOWYCH

1. **B. Furman** „*Cyklizacje z zastosowaniem  $\pi$ -nukleofili*”, Politechnika Rzeszowska, Rzeszów, 5.06.2012 r.
2. **B. Furman** „ *$\beta$ -Laktamy - nowe metody syntezy, nowe właściwości farmakologiczne*”, Politechnika Rzeszowska, Rzeszów, 6.06.2012 r.
3. **S. Stecko** „*Wykorzystanie cyklicznych nitronów w syntezie związków biologicznie aktywnych*”, Politechnika Śląska, Gliwice, 21.11.2012 r.
4. **J. Jurczak**; „*Chiralne rozpoznanie anionów organicznych*” Sesja Poznańskiego Oddziału PTChem, Poznań, 12.06.2012 .
5. **J. Jurczak**; „*Rozpoznanie chiralne w chemii i biologii*” Inauguracja roku akademickiego 2012/2013 w Wydziałach Biologii i Chemii UW, Warszawa, 28.09.2012.
6. **L. Kozerski**, „*Identyfikacja struktur substancji psychoaktywnych w dopalaczach metodą NMR*”, Konferencja Eurolab 2012, *Doping, Dopalacze, Detoks*, Warszawa, 20-22. 03. 2012, wykład na zaproszenie, 25 min.
7. **R. Ostaszewski** „*Zastosowanie wysokosprawnej chromatografii cieczowej do analizy składu enancjomerycznego wybranych peptydomimetyków*” Analityczne zastosowania chromatografii cieczowej, Warszawa 20-21.10.2012, aula Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, ul. Pasteura 1, Warszawa, wykład na zaproszenie.
8. **R. Ostaszewski** „*Metody biokatalityczne w syntezie związków nieracemicznych o znaczeniu farmaceutycznym*” wykład na zaproszenie w Instytucie Farmaceutycznym 11.2012.
9. **M. Mąkosza** „*Nukleofilowe podstawienie wodoru w nitroarenach. Pełny obraz podstawienia w arenach*” CBMM, Łódź, Politechnika Łódzka.