

**30. ZJAZD WIOSENNY
SEKCJI STUDENCKIEJ
POLSKIEGO TOWARZYSTWA CHEMICZNEGO**



**Przewieź k. Augustowa
11-14 kwietnia 2013 r.**

Niniejsze materiały konferencyjne zostały przygotowane na podstawie abstraktów nadesłanych przez uczestników Zjazdu Wiosennego 2013. SSPTChem nie ponosi odpowiedzialności za ich treść.

Redakcja naukowa i przygotowanie materiałów do druku

Renata Rybakiewicz

Anna Kundys

Projekt okładki

Dawid Łyżwa

Wydawnictwo

Polskie Towarzystwo Chemiczne

Witamy w Augustowie!

Komitety Organizacyjny wita w Łazach na 30-tym Zjeździe Wiosennym
Sekcji Studenckiej Polskiego Towarzystwa Chemicznego.
Jak co roku przygotowaliśmy wiele atrakcji. Oprócz wystąpień zaproszonych gości
i sesji naukowych, oferujemy możliwość uczestnictwa w warsztatach
przygotowanych przez przedstawicieli firm chemicznych.
Dla Was nie zapomnieliśmy również o zabawach integracyjnych.
Wierzimy, że zarówno program naukowy jak i socjalny, który przygotowaliśmy
będzie satysfakcjonujący, a cała konferencja zaowocuje w nowe doświadczenia,
znajomości i wrażenia.

Życzymy udanego Zjazdu 2013!

Komitety Organizacyjny

inż. Anna Stefaniuk
mgr Dawid Łyżwa
mgr inż. Anna Kundys
Anna Dąbrowska
mgr Renata Rybakiewicz
mgr Krzysztof Dudziński
mgr Tomasz Michałowski
inż. Marek Węclawski

Spis Treści

Informacje Ogólne	6
Szczegółowy Program Zjazdu	8
 Wykłady Plenarne	 14
 Komunikaty Ustne w Sekcjach Tematycznych	 23
Chemia Analityczna i Środowiska	24
Chemia Fizyczna i Teoretyczna	29
Chemia Organiczna i Supramolekularna	36
Chemia Polimerów, Biopolimerów i Przemysłowa	54
Sekcja Interdyscyplinarna	60
 Indeks Prezentacji Posterowych	 71
Prezentacje Posterowe	77
 Indeks Uczestników Zjazdu	 153

Informacje Ogólne

Biuro Konferencji

Biuro A **Czynne w czwartek 11.04.2013 r. w godz. 12:00-20:00**

- rejestracja uczestników
- wydawanie materiałów zjazdowych

Biuro B **Czynne przez cały czas trwania konferencji**

- podbijanie delegacji
- sprawy organizacyjne
- dokonywanie opłat członkowskich
- pozostałe sprawy Polskiego Towarzystwa Chemicznego



Miejsce Obrad

Centrum Wypoczynkowo - Konferencyjne

AUGUSTOWIA

Przewież k. Augustowa

Program Zjazdu

Program Zjazdu

Czwartek, 11.04.2013	
12:00 -18:00	Rejestracja
18:00- 19:00	Słowo powitalne, Kolacja
19:00 -20:00	Wykład Specjalny Dr inż. Jan Ramza, dyrektor działu Badań i Rozwoju Polpharma SA <i>Innowacyjność w Technologii Leków Generycznych</i>
21:00 – ...	Przyjęcie Powitalne
Piątek, 12.04.2013	
09:00 – 09:30	Śniadanie
09:40 – 09:50	<i>Oficjalne Otwarcie Zjazdu Wiosennego 2012 - Anna Stefaniuk</i>
09:50 – 10:40	Wykład Plenarny 1 Dr hab. inż. Jacek Grams <i>Jak zdobyć energię i nie zniszczyć środowiska?</i>
Sekcja Interdyscyplinarna Przewodniczący Sesji: Anna Stefaniuk	
10:40 - 10:55	Monika Chylińska
O-33	<i>Mikroskop Ramana jako narzędzie do badania struktury roślinnych ścian komórkowych owoców i warzyw</i>
10:55 – 11:10	Adrian Fabisiak
O-34	<i>Synteza 5',5'-trifosforanu P¹-N²-(p-chlorobenzyl)-7-metylo-P³-guanozyny – dinukleotydowego analogu 5' końca mRNA</i>
11:10 – 11:25	Paulina Filipczak
O-35	<i>Wpływ nanocząstek srebra na efekt rezonansu ramanowskiego w wodzie</i>
11:25 – 11:40	Tomasz Klucznik
O-36	<i>Muchomor w tabletkach? Czyli o leczniczym zastosowaniu układu izooksazol-3-olowego</i>
11:40 – 11:55	Katarzyna Kulczycka-Mierzejewska
O-37	<i>Antybiotyki kontra bakterie przez pryzmat dynamiki molekularnej</i>
11:55 – 12:05	Przerwa Kawowa
Sekcja Interdyscyplinarna Przewodniczący Sesji: Krzysztof Dudziński	
12:05 – 12:20	Adam Łuczak
O-38	<i>Efekt polaryzacji elektrody bramki w organicznych tranzystorach z efektem polowym</i>

Program Zjazdu

- 12:20 – 12:35 **Marzena Szymańska**
O-40 *Zastosowanie techniki UPLC/MS do identyfikacji soli pirydyniowych w termolizacie trygoneliny*
- 12:35 – 12:50 **Ewelina Wileńska**
O-41 *Kapsułkowanie diod elektroluminescencyjnych opartych na kopolimerze para-fenylenowinyleniu*
- 12:50 – 13:05 **Agnieszka Wronka**
O-42 *Chromatografia jako narzędzie do badań związków kompleksowych*

Chemia Polimerów, Biopolimerów i Przemysłowa

Przewodniczący Sesji: Anna Kundys

- 13:05 – 13:20 **Magdalena Gos**
O--28 *Głony i perspektywy ich energetycznego wykorzystania*
- 13:20 – 13:35 **Diana Rymuska**
O-30 *Modyfikacja powierzchni polieteroeteroketonu (PEEK) plazmą*
- 13:35 – 13:50 **Ilona Warych**
O-31 *Otrzymywanie nanosfer polilaktydowych zawierających substancje aktywne*
- 13:50 – 14:05 **Magdalena Wójtowicz**
O-32 *Modyfikacja poliimidów stosowanych jako materiały membranowe do wydzielania CO₂ z mieszanin gazowych*

14:00 – 15:00 **Obiad**

15:00 – 15:55 **Wykład Plenarny 2**

Dr hab. Agnieszka Szumna, Prof. Nadzw.

Organiczne kontenery molekularne – od struktury do funkcji

Chemia Organiczna i Supramolekularna

Przewodniczący Sesji: Dawid Łyżwa

- 15:55 – 16:10 **Jolanta Bazan**
O-11 *Tlenek trifenylfosfiny jako prekursor tlenków diaryloalkilofosfin*
- 16:10 – 16:25 **Anna Bujalska**
O-12 *Makrocyclizacja dipodstawionych cyklodekstryn – studium przypadku*
- 16:25 – 16:40 **Bartłomiej Fedorczyk**
O-14 *Synteza peptydów i ich mimetyków o właściwościach antyangiogennych*

16:40 – 16:50 **Przerwa Kawowa**

Program Zjazdu

- 16:50 – 17:05 **Jakub Gromadzki**
O-15 *Rodnikowe reakcje dekarboksylacji w produktach żywnościowych a zagrożenie toksykologiczne*
- 17:05 – 17:20 **Magdalena Jaklińska**
O-16 *Addycja Michaela pochodnych typu >P(O)H do produktów redukcji Bircha - problemy syntetyczne*
- 17:20 – 17:35 **Szymon Jarzyński**
O-17 *Optycznie czyste azirydynyloalkohole jako katalizatory w syntezie asymetrycznej*
- 17:35 – 17:50 **Adrian Kasztelan**
O-18 *Organokataliza w syntezie chiralnych związków trifluorometylowych z czwartorzędowym centrum stereogenicznym*

18:00 – 18:30 **Kolacja**

19:00 – 20:30 Sesja Posterowa

20:30 - ... Impreza integracyjna

Sobota, 13.04.2013

09:00 – 09:30 **Śniadanie**

09:50 – 10:40 **Wykład Plenarny 3**

Dr hab. Leszek Łęczyński, Prof. UG

Badania środowiska polarnego Spitsbergenu

Chemia Fizyczna i Teoretyczna

Przewodniczący Sesji: Anna Dąbrowska

10:40 – 10:55 **Magdalena Bielawska**

O-6 *Wieloskładnikowe mieszaniny związków powierzchniowo czynnych*

10:55 – 11:10 **Agata Fedorczyk**

O-7 *Ilościowa analiza procesu wytwarzania układów hybrydowych polimer przewodzący/nanocząstki złota z wykorzystaniem Elektrochemicznej Mikrowagi Kwarcowej*

11:10 – 11:25 **Anna Jastrząb**

O-8 *Chronopotencjometryczne badanie wpływu składu roztworu elektrolitu na parametry elektryczne dwuwarstwowych membran lipidowych*

11:25 – 11:40 **Ilona Trzcińska**

O-9 *Wolumetryczne badania wodnych roztworów β -cyklodestryny, oktanianu sodu i ich równomolowych mieszanin*

Program Zjazdu

11:40 – 11:55 **Dorota Uber**

- O-10** *Badania eksperymentalne nad preferencjami konformacyjnymi i stabilizacją struktury peptydów na przykładzie białka FBP28 i jego pochodnych*

12:00 – 12:10 **Przerwa kawowa**

Chemia Organiczna i Supramolekularna

Przewodniczący Sesji: Renata Rybakiewicz

12:10 – 12:25 **Paulina Krzemińska**

- O-19** *a – Nitroestry jako substraty w reakcjach fluorowania hydroksymetylowania i w reakcji Michaela*

12:25 – 12:40 **Andrzej Okuniewski**

- O-21** *N-benzoilotiomocznik i jego pochodne*

12:40 – 12:55 **Anna M. Pakulska**

- O-22** *Asymetryczna organokataliza w wodzie – czy jest to możliwe*

12:55 – 13:10 **Marta Słupska**

- O-24** *Reakcja Picteta-Spenglera - otrzymywanie peptydomimetyków tryptofanu*

13:10 – 13:25 **Piotr Sosnowski**

- O-25** *Wykorzystanie drukarki chemicznej ChIP-1000 oraz spektrometru mas MALDI-TOF do obrazowania tkanek*

13:25 – 13:40 **Monika Stompor**

- O-26** *Zastosowanie mikroorganizmów do przekształceń związków chmielu oraz ich pochodnych*

13:40 – 13:55 **Monika Zając**

- O-27** *Reakcje multikomponentowe – atrakcyjne narzędzi w syntezie złożonych połączeń organicznych*

14:00 – 15:00 **Obiad**

Chemia Analityczna i Środowiska

Przewodniczący Sesji: Tomasz Michałowski

15:00 – 15:15 **Marek Kłobucki**

- O-1** *Wino i młodość? Analiza zawartości resweratrolu oraz jego glukozydu w winach metodami chromatograficznymi*

15:15 – 15:30 **Agnieszka Mróz**

- O-2** *Modyfikacja wielościennych nanorurek węglowych i ich zastosowanie do wzbogacania jonów Pt(IV)*

Program Zjazdu

15:30 – 15:45 **Adam Truchlewski**

O-3 *Struktura fenylowych pochodnych kwasu hydrazydoditiokarbazowego*

15:45 – 16:00 **Anna Stefaniuk**

O-4 *Pomiary wydajności kwantowej fotogeneracji metodą kserograficzną w materiałach stosowanych w elektronice organicznej*

15:00 – 20:00 **Gry scenariuszowe**

20:00-.... **Ogłoszenie wyników + Grill pożegnalny**

Niedziela 14.04.2013

9:00 – 9:30 **Śniadanie**

10:00 – 14:30 **Wykwaterowanie**

Wykłady Plenarne



Dr hab. prof. UG Leszek Łęczyński

Uniwersytet Gdański, Instytut Oceanografii

e-mail: ocell@univ.gda.pl

Profesor Leszek Łęczyński jest absolwentem geologii Uniwersytetu Śląskiego o specjalności geologia stosowana. Zatrudniony od 1989 roku w Instytucie Oceanografii Uniwersytetu Gdańskiego, obecnie na stanowisku profesora nadzwyczajnego.

Zainteresowania badawcze związane są z badaniami dna morskiego oraz strefy brzegowej mórz i oceanów dotyczą modelowania procesów morfodynamicznych przybrzeża, metod geofizycznych w geologii morza, metod bezpośredniej dokumentacji geologicznej struktur sedimentacyjnych oraz obiektów archeologicznych na dnie morskim – fotografia podwodna.

Ważniejsze prace badawcze realizowane na brzegu klifowym w Jastrzębiej Górze zakończone rozprawą doktorską w 1996 roku, na wyspach Zielonego Przylądka i wybrzeżach Senegalu w 1999 roku oraz Półwyspie Helskim podsumowane w 2010 roku w pracy habilitacyjnej pt. „Morfolitodynamika przybrzeża Półwyspu Helskiego.

W latach 2011 oraz 2012 uczestnik wypraw polarnych na Spitsbergen. W rejonie fiordu Bellsund wykonywał badania transformacji lodowców, batymetryczne, fizyko-chemiczne wód i zawiesin oraz litologiczne i geochemiczne osadów zalegających na morskim dnie.

Autor ponad 40 publikacji, 20 referatów w konferencjach naukowych polskich i zagranicznych, zrealizował 8 projektów naukowych finansowanych przez KBN, Ministerstwo Szkolnictwa Wyższego i Nauki oraz w ramach badań własnych. Wypromował ponad 30 magistrów i jednego doktora. Dorobek ekspercki to ponad 80 pozycji dotyczących zagadnień hydrogeologicznych, geologiczno-inżynierskich, archeologicznych oraz związanych z badaniami morskimi.

Posiada uprawnienia Ministra Środowiska do wykonywania, dozoru i kierowania pracami geologicznymi w zakresie hydrogeologii (V-1376) oraz geologii inżynierskiej (VI-0378), do wykonywania prac podwodnych (707/97) oraz kierownika robót nurkowych (812/97).

Członek Gdańskiego Towarzystwa Naukowego, Stowarzyszenia Geomorfologów Polskich, Stowarzyszenia Hydrogeologów Polskich, w latach 2004-2012 sekretarz Sekcji Geologii Morza Komitetu Badań Morza Polskiej Akademii Nauk.

Badania środowiska polarnego Spitsbergenu

Prof. UG, dr hab. Leszek Łęczyński

Uniwersytet Gdański, Instytut Oceanografii

81-378 Gdynia ul. Piłsudskiego 46

e-mail : ocell@univ.gda.pl

Pierwsze polskie badania na Spitsbergenie rozpoczęły się wraz z przybyciem na wyspę polskiej wyprawy naukowej w 1934 roku i następnych, w latach 1936 i 1938. Nowy etap rozpoczął się od końca lat pięćdziesiątych w oparciu o zbudowaną w roku 1957 przez profesora Stanisława Siedleckiego stację polarną prowadzącą od końca lat siedemdziesiątych badania w systemie całorocznym. W kolejnych latach tworzone były nowe bazy uniwersyteckie między innymi Uniwersytetu Wrocławskiego zlokalizowana pod Lodowcem Werenskiolda, Uniwersytetu im. M. Kopernika w Toruniu - na obszarze Kaffioyra, Uniwersytetu im. Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie - w Calypsobyen, w rejonie Bellsundu oraz Uniwersytetu im. A. Mickiewicza w Poznaniu na obszarze Petuniabukta.

Niepowtarzalność przyrodnicza Spitsbergenu związana jest z jego położeniem geograficznym, charakterem współczesnego zlodowacenia, zróżnicowaniem przestrzennym stref uwalnianych od lodu oraz stałego współoddziaływanie systemu lądowego i morskiego.

Stacje regionalne, stanowią doskonałą możliwość realizacji programów badawczych i uzyskania wieloletnich, standaryzowanych wyników badań do studiów porównawczych w skali regionalnej i globalnej. Do najważniejszych tematów badawczych realizowanych dotychczas na Spitsbergenie zaliczyć należy :

- wpływ czynników globalnych, regionalnych i lokalnych na charakter współczesnego zlodowacenia Spitsbergenu,
- rozpoznanie i określenie mechanizmów współczesnej glacjacji i deglacjacji,
- uwarunkowania, przebieg i skutki współczesnych procesów geomorfologicznych w zasięgu różnych typów geoekosystemów polarnych,
- wpływ antropopresji na funkcjonowanie współczesnych geoekosystemów polarnych.

Obecnie w ramach współpracy międzyuczelnianej wykorzystywane są możliwości prowadzenia specjalistycznych badań w oparciu o potencjał naukowy i specjalistyczną aparaturę. Badania głównie prowadzone są w okresie letnim od czerwca do września i każdorazowo są wyzwaniem organizacyjnym oraz logistycznym. Prace w strefie polarnej związane są z koniecznością dostarczenia żywności, aparatury naukowej, środków łączności oraz przede wszystkim zapewnienie bezpieczeństwa pracującym w terenie naukowcom. Niniejsza prezentacja powstała na bazie doświadczeń autora uzyskanych w ramach udziału w latach 2011 – 2012 w letnich ekspedycjach badawczych realizowanych w fiordach Hornsundu i Bellsundu i ma na celu przybliżenie tematyki polarnej oraz zachęcenie włączania się do badań.



Dr hab. Agnieszka Szumna, Prof. Nadzw.

Instytut Chemii Organicznej PAN

e-mail: agnieszka.szumna@icho.edu.pl

Agnieszka Szumna pochodzi z Kraśnika Lubelskiego. Ukończyła Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, gdzie w 1997 roku obroniła pracę magisterską z zakresu krystalografii (promotor prof. Janusz Jurczak i prof. Zofia Lipkowska). W tym samym roku rozpoczęła studia doktoranckie w Instytucie Chemii Organicznej PAN w grupie badawczej prof. Janusza Jurczaka. W grupie tej zajmowała się badaniami właściwości kompleksujących makrocyklicznych polilaktamów. Oprócz badań kompleksowania kationów, rozpoczęła systematyczne badania nad zupełnie nową tematyką w zespole, a mianowicie nad możliwością kompleksowania anionów.

W czasie stażu podoktorskiego, który odbywała w zespole prof. Atwooda w University of Missouri, Columbia, USA (2001-2003) zajmowała się syntezą receptorów ditopowych (receptorów kationów i anionów jednocześnie) i możliwościami modyfikacji różnego rodzaju makrocyklicznych związków metaloorganicznych (typu kompleksów kanapkowych) w celu wiązania jonów TcO_4^- oraz ReO_4^- z odpadów radioaktywnych.

Po powrocie ze stażu naukowego rozpoczęła niezależną pracę naukową w ICHO PAN na tzw. Szybkiej Ścieżce Habilitacyjnej w dziedzinie rozpoznania molekularnego. Praca habilitacyjna dotyczyła syntezy, badań struktury i właściwości kompleksujących nowych chiralnych kontenerów molekularnych. Pracę habilitacyjną obroniła w 2010r roku.

Od 2012 roku kieruje zespołem IX ICHO PAN („Rozpoznanie molekularne”). Działalność naukowa zespołu skupia się na różnych aspektach rozpoznania molekularnego ze szczególnym uwzględnieniem rozpoznania chiralnego. Zespół zajmuje się syntezą nowych związków typu kawitandów i kapsuł molekularnych zdolnych do rozpoznawania innych cząsteczek chiralnych oraz potencjalnie służących jako molekularne reaktory dla reakcji asymetrycznych. Szczególną uwagę poświęca badaniom struktury i dynamiki cząsteczek oraz charakterystyce oddziaływań niekowalencyjnych w supramolekularnych kompleksach typu gość-gospodarz (używając różnorodnych technik spektralnych obejmujących rentgenowską analizę strukturalną, NMR, oraz dichroizm kołowy).

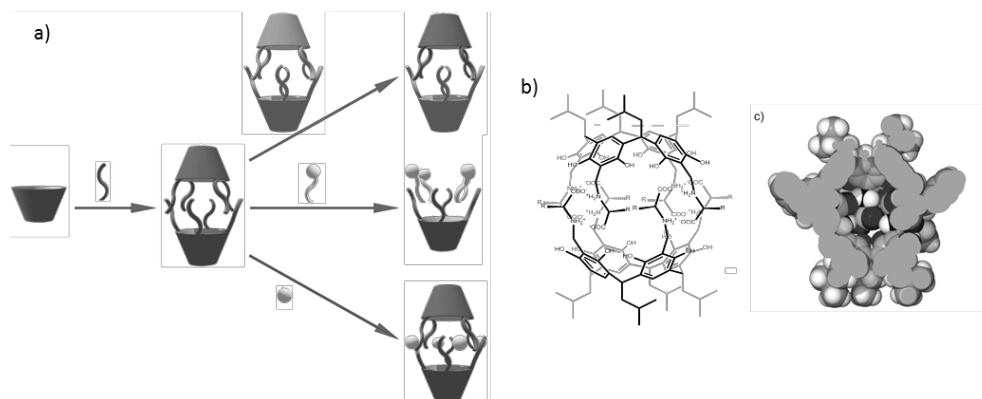
Agnieszka Szumna jest laureatką grantu POMOST finansowanego przez Fundację na Rzecz Nauki Polskiej. W swoim dorobku poszczycić się również może osiągnięciami jak: Wyróżnienie pracy magisterskiej, Uniwersytet Warszawski (1995), Wyróżnienie pracy doktorskiej, IChO PAN (2001), Nagroda Prezesa Rady Ministrów za wybitną habilitację (2011), Nagroda Naukowa im. Włodzimierza Kołosa (2011).

Organiczne kontenery molekularne – od struktury do funkcji

Agnieszka Szumna^a^a Instytut Chemii Organicznej PAN, Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa

Odpowiednie wydzielenie przestrzeni jest kluczowe dla wszystkich układów biologicznych. To dzięki temu, że każdy proces zachodzi w innym wydzielonym miejscu, które ma odpowiednie pH, odpowiedni zestaw enzymów (liposomy, pęcherzyki) czy też po prostu odpowiednią geometrię (miejsce aktywne enzymu), komórka może przeprowadzać miliony, nieraz przeciwstawnych, reakcji jednocześnie. Konstrukcja syntetycznych cząsteczek, które zdolne są do przestrzennego odizolowania skompleksowanych cząsteczek od zewnętrznego środowiska (kontenerów molekularnych) jest krokiem chemii w kierunku układów wielokomponentowych i wieloreakcyjnych, takich, jakie obserwujemy w układach biologicznych. Molekularne kontenery są znacznie prostsze od związków występujących w Naturze, dlatego też służą do wielu badań modelowych reakcji lub badań dynamiki (dzięki odizolowaniu od środowiska niektóre procesy ulegają spowolnieniu). Poza mimiką układów biologicznych można stworzyć zupełnie nowe zastosowania, np. kontenery molekularne mogą służyć do przechowywania a następnie kontrolowanego uwalniania gazów, a także substancji nietrwałych. Mogą też działać jako nanoreaktory do prowadzenia w nich różnego rodzaju nowych reakcji.

Podczas wykładu przedstawiony zostanie krótki przegląd zaznaczonych dotychczas kontenerów molekularnych i ich zastosowań, oraz nasze podejście do konstrukcji kontenerów o polarnym i chiralnym wnętrzu.



Rysunek 1. a) różne strategie niekowalencyjnej asocjacji kapsuł molekularnych, b) otrzymana kapsuła o odwróconej polarność, c) jej struktura w ciele stałym.

Literatura:

- [1] B. Kuberski, A. Szumna, *Chem. Commun.*, **2009**, 1959.
- [2] A. Szumna, *Chem. Commun.*, **2009**, 4191-4193.
- [3] A. Szumna, *Chem. Eur. J.*, **2009**, 15, 12381.
- [4] M. Wierzbicki, A. Szumna, *Chem. Commun.*, **2013**, zaakceptowana.



INNOVATIVE ECONOMY
NATIONAL COHESION STRATEGY



EUROPEAN UNION
EUROPEAN REGIONAL
DEVELOPMENT FUND





Dr hab. inż. Jacek Grams

Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej

Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka

e-mail: jacek.grams@p.lodz.pl

Dr hab. inż. Jacek Grams w 1997 roku ukończył studia na Wydziale Chemicznym Politechniki Łódzkiej. Jego dalsza kariera naukowa jest ściśle związana z działalnością w Instytucie Chemii Ogólnej i Ekologicznej PŁ, w którym pracuje od 2001 roku. Jest autorem około 60 publikacji naukowych oraz monografii pt. „New Trends and Potentialities of ToF-SIMS in Surface Studies”. Główne obszary jego zainteresowań naukowych to kataliza, zastosowanie spektrometrii mas w badaniach powierzchni ciał stałych oraz ochrona środowiska. Obecnie zajmuje się syntezą i charakterystyką właściwości katalizatorów wykorzystywanych w procesach przeróbki biomasy lignocelulozowej.

Jacek Grams przebywał na stażach naukowych w Hogeschool Zeeland we Vlissingen (Holandia), na Uniwersytecie Ludwika Pasteura w Strasburgu (Francja) oraz na Uniwersytecie w Limerick (Irlandia). Jest członkiem Zespołu interdyscyplinarnego Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego do spraw działalności upowszechniającej naukę w zakresie wydawnictw naukowych oraz członkiem Uczelnianej Komisji PŁ do spraw zrównoważonego rozwoju.

Jego działalność dydaktyczna jest związana z prowadzeniem m.in. takich wykładów jak: Chemia Ogólna i Nieorganiczna, Chemia Analityczna, Zagrożenia Cywilizacyjne dla Środowiska i Zrównoważony Rozwój oraz Alternatywne Źródła Energii. Dr hab. inż. Jacek Grams bierze również czynny udział w popularyzacji chemii wśród dzieci i młodzieży. Jest opiekunem Koła Naukowego Studentów „Trotyl” na Wydziale Chemicznym PŁ. Prowadzi zajęcia w ramach Międzyszkolnego Koła Młodych Chemików. Brał udział w Festiwalach Nauki w Łodzi i Tomaszowie Mazowieckim oraz w wykładach na Uniwersytetach Dziecięcych w Łodzi, Bielsku Białej, Zielonej Górze i Gorzowie Wlkp. W 2010 roku współorganizował I Młodzieżową Konferencję Chemiczną „Chemia dla ochrony środowiska – synergizm czy antagonizm”, która odbyła się na Wydziale Chemicznym Politechniki Łódzkiej.

Jak zdobyć energię i nie zniszczyć środowiska?

Jacek Grams

*Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka
e-mail: jacek.grams@p.lodz.pl*

Rosnące zapotrzebowanie na energię na świecie związane jest przede wszystkim z szybkim rozwojem produkcji przemysłowej. Okazuje się jednak, że czerpanie energii ze źródeł konwencjonalnych ma negatywny wpływ na stan środowiska przyrodniczego. W związku z tym, zgodnie z zasadą zrównoważonego rozwoju, podejmuje się intensywne działania, które mają na celu opracowanie metod pozyskiwania energii ze źródeł odnawialnych. W konsekwencji powinno to ograniczyć presję jaką wywiera człowiek na otaczające go ekosystemy. Powstaje jednak pytanie, czy wykorzystanie alternatywnych źródeł energii nie niesie za sobą kolejnych problemów i ograniczeń? Należy również zastanowić się nad rolą chemii oraz chemików w opisywanych powyżej działaniach.

W trakcie niniejszej prezentacji omówiony zostanie wpływ konwencjonalnych metod pozyskiwania energii na środowisko przyrodnicze. Przedstawione będą sposoby zmniejszenia negatywnych skutków rozwoju cywilizacji. Są one nierozzerwalnie związane z wykorzystaniem alternatywnych źródeł energii. Dlatego w dalszej części wykładu zostaną zaprezentowane przykłady wykorzystania potencjału: promieniowania słonecznego (związanego z parowaniem wody i opadami, ruchami atmosfery, nagrzewaniem atmosfery i powierzchni Ziemi, energią fal, prądami oceanicznymi i przyrostem biomasy), rozpadu izotopów promieniotwórczych we wnętrzu Ziemi (energia geotermalna) oraz grawitacji Księżyca (pływy wód).

Z uwagi na obserwowane w ostatnich latach duże zainteresowanie procesami przeróbki biomasy w kolejnej części prezentacji przedstawione zostaną wyniki badań termicznej konwersji biomasy lignocelulozowej prowadzonej przy użyciu nośnikowych katalizatorów niklowych. Okazuje się, że optymalizacja układów katalitycznych, w zależności od warunków prowadzenia powyższego procesu, może prowadzić do znacznego zwiększenia udziału wodoru w uzyskiwanej frakcji gazowej lub otrzymania frakcji ciekłej o składzie umożliwiającym jej łatwiejszą obróbkę w dalszych etapach produkcji biopaliwa.

Praca zrealizowana w ramach projektu finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki
Nr 2011/03/B/ST5/03270.



Dr inż. Jan Ramza

Polpharma SA

Dział Badań i Rozwoju

Jan Ramza (ur. 1958), Studia Magisterskie ukończone w 1982, Wydział Chemii Politechniki Warszawskiej (Technologia Organiczna); Doktor Nauk Chemicznych 1991, Instytut Chemii Organicznej PAN (Warszawa). Zakres prac badawczych obejmował syntezy stereoselektywne cukrów i ich pochodnych i został pomyślnie zakończony w postaci totalnej syntezy Tunikaminy – naturalnego inhibitora glikozydaz.

Staże podoktorskie: 1992 Rafineria ropy naftowej w Brunei (inżynieria chemiczna i systemy zapewnienia jakości), 1993 University of Arizona, Tucson, US (syntezy glikopeptydów), 1994 University of Claude Bernard, Lyon, France (zastosowanie katalitycznej metatezy do pochodnych cukrowych).

18 lat doświadczenia w pracy w przemyśle farmaceutycznym, ze szczególnym uwzględnieniem substancji aktywnych. Zaangażowanie w działalność dotyczącą projektowania i syntez nowych substancji aktywnych, opracowania chemicznych procesów wytwórczych, poprawy i optymalizacji procesowej, skalowania procesów, przygotowania i składania dokumentacji rejestracyjnej. Zatrudniony w kilku instytucjach przemysłowo-badawczych takich jak: Instytut Farmaceutyczny (w Warszawie), Cambridge Major Laboratories, (Milwaukee, US) i aktualnie (od 2005) w ZF Polpharma SA, Departament Badań i Rozwoju (Starogard Gdański).

Aktualny zakres działalności obejmuje planowanie, organizację i nadzorowanie prac rozwojowych w obszarze technologii i analityki substancji generycznych w wielu obszarach terapeutycznych. Zainteresowania badawcze skupiają się na opracowaniach i wdrożeniach stereoselektywnych metod syntez, oraz innowacyjnych metod separacji i oczyszczania substancji (w tym np. opracowanie platformy technologicznej do selektywnego katalitycznego glikozydowania).

Współautor ponad 25 publikacji naukowych i 8 patentów i zgłoszeń patentowych. Ekspert of Komisji Europejskiej w VII Programie Ramowym.

Innowacyjność w Technologii Leków Generycznych

Polpharma SA

Dział Badań i Rozwoju

Plan prezentacji:

- ✓ Co to jest lek generyczny – definicja i przykłady
- ✓ Podstawowe informacje o firmie Polpharma – skala działania, lokalizacja geograficzna, podstawowe obszary biznesu, osiągnięcia w zakresie innowacyjności
- ✓ Podstawowe informacje dotyczące rynku farmaceutycznego ze szczególnym uwzględnieniem rynku leków generycznych – z kim konkurujemy, jaka jest skala działania
- ✓ Wymagania formalne dotyczące procesów wytwarzania substancji aktywnych API – wyjaśnienie podstawowych definicji – ASMF, GMP, biorównoważność, wymagania rejestracyjne, patenty produktowe, procesowe i inne (jako elementy walki konkurencyjnej)
- ✓ Wymagania dotyczące konkurencyjności – innowacyjność procesów, a koszty wytwarzania; czy możliwa jest innowacyjność produktów generycznych?
- ✓ Przykłady praktycznego zastosowania wiedzy chemicznej do zdobywania konkurencyjnej przewagi na rynku – z aktualnego portfela produktowego i projektowego Polpharmy
- ✓ Współpraca przemysłu z nauką – korzyści i trudności – jak działać skutecznie.

**Komunikaty Ustne
w Sekcjach Tematycznych**

Komunikaty Ustne

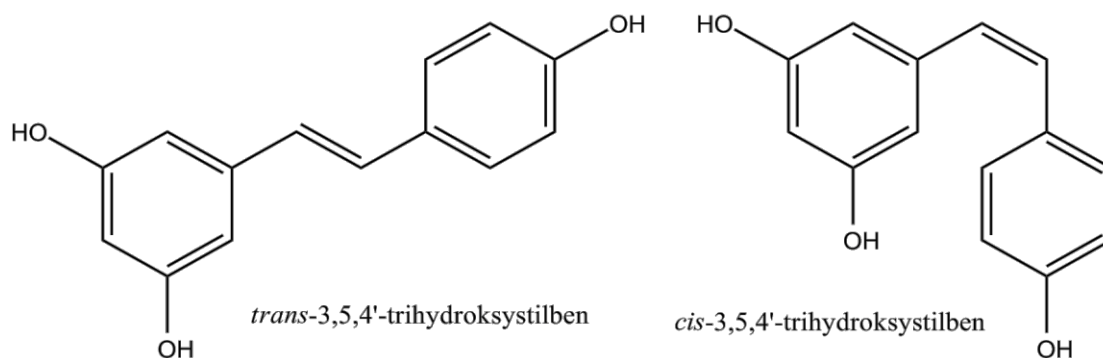
Chemia Analityczna i Środowiska

Wino i młodość? Analiza zawartości resweratrolu oraz jego glukozydu w winach metodami chromatograficznymi

Marek Kłobucki, Paweł Pawłowicz, Andrzej Draus

Katedra Chemii, Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu
ul. Norwida 25/27, 50-375 Wrocław
email: marek.klobucki@gmail.com

Resweratrol jest jednym z najciekawszych i najbardziej poznanych polifenoli z grupy stilbenoidów. Związek ten wykazuje różnorodną aktywność biologiczną. Udokumentowano m.in. jego działanie antynowotworowe, grzybobójcze, antywirusowe, neuro i kardioprotekcyjne.^[1] Resweratrol występuje w dwóch konformacjach: *trans* i *cis*. Naturalnie znajduje się w skórcie oraz nasionach roślin. W winach znajduje się również glukozyd resweratrolu (piceid, polydatyna).^[2] Specyficzne działanie resweratrolu prowadzi do wydłużenia życia komórek, a wino jest jednym z jego głównych źródeł.^[3]



Rysunek 1. Izomery *trans* oraz *cis* resweratrolu.

Materiał badawczy stanowiły wina powszechnie dostępne w dyskontach spożywczych oraz wina z prywatnych źródeł. Zawartość resweratrolu i jego glukozydu oznaczono za pomocą wysokosprawnej chromatografii cieczowej (HPLC). Analizowano zawartość związków pod względem rodzaju wina (np. wytrawne czy słodkie), szczepu winorośli (np. Malbec, Pinot Noir) oraz kraju pochodzenia (np. Hiszpania, Argentyna).

Literatura:

- [1] Robert E. King, Joshua A. Bomser, David B. Min, *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*, **2006**, 5, 65-70.
- [2] Al. Romero-Pérez, M. Ibern-Gómez, RM. Lamuela-Raventós, MC. de La Torre-Boronat, *J Agric Food Chem.*, **1999**, 47 (4), 1533-6.
- [3] K.T. Howitz, K.J. Bitterman, H.Y. Cohen i wsp., *Nature*, **2003**, 425, 191-196.

Modyfikacja wielościennych nanorurek węglowych i ich zastosowanie do wzbogacania jonów Pt(IV)

Agnieszka Mróz, Ryszard Dobrowolski

*Uniwersytet Marii Curie Skłodowskiej, Wydział Chemii, Zakład Chemii Analitycznej
i Analizy Instrumentalnej, Pl. M.C. Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin*

Platyna jest jednym z metali szlachetnych należącym do grupy platynowców (PGEs- platinum group elements). W ostatnich latach najwięcej platyny wykorzystuje przemysł motoryzacyjny do produkcji katalizatorów samochodowych (w połączeniach z rodem) oraz medycyna, gdzie niektóre związki platyny są stosowane jako leki przeciwnowotworowe. Platyna jest stosowana również w różnych procesach przemysłowych jako katalizator, w jubilerstwie, elektronice oraz do wyrobu sprzętu laboratoryjnego^[1].

Wzrastająca zawartość platyny w otoczeniu człowieka, jej dobra biodostępność oraz działanie toksyczne niektórych jej związków przyczyniają się do konieczności monitorowania jej stężeń w środowisku naturalnym. Oznaczanie platyny w próbkach środowiskowych stwarza różne problemy analityczne, wynikające głównie z bardzo niskich zawartości (na poziomie ng/g lub pg/g) oraz przeszkadzającego wpływu składników matrycowych obecnych w dużym nadmiarze w stosunku do analitu. Połączenie selektywnych technik wydzielania/ wzbogacania tego metalu z technikami detekcji charakteryzującymi się niskimi granicami wykrywalności analitu pozwala na uzyskanie wiarygodnych wyników oznaczeń platyny w różnych materiałach^[2].

Wśród selektywnych technik wzbogacania czołowe miejsce zajmuje technika ekstrakcji do fazy stałej (SPE- solid phase extraction). Zastosowanie w niej nanorurek węglowych (CNTs- carbon nanotubes) jako sorbentów jonów metali zyskuje ostatnio wiele uwagi ze względu na wyjątkowe właściwości tych materiałów. Modyfikacja CNTs przez utlenienie lub wprowadzenie odpowiednich grup funkcyjnych może znacznie poprawić właściwości adsorpcyjne tych materiałów^[3].

W pracy przedstawiono wpływ modyfikacji nanorurek węglowych na ich właściwości adsorpcyjne jonów Pt(IV). Zbadano wpływ pH, jonów chlorkowych i azotanowych(V) na adsorpcję Pt(IV) na modyfikowanych CNTs oraz wyznaczono izotermy adsorpcji. Określono również stopień desorpcji platyny z badanych materiałów przy zastosowaniu różnych czynników desorbujących.

Na podstawie przeprowadzonych badań wykazano, że pojemności adsorpcyjne modyfikowanych CNTs względem jonów Pt(IV) są bardzo duże, co stwarza możliwość ich praktycznego zastosowania w etapie wzbogacania procedury analitycznej oznaczania platyny w próbkach środowiskowych.

Literatura:

- [1] B. Leśniewska, K. Pyrżyńska, B. Godlewska-Żyłkiewicz, *Wiadomości Chemiczne*, 2001, 55, 331-351.
- [2] E. Mladenova, I. Karadjova, D.L. Tsalev, *Journal of Separation Science*, 2012, 35, 1249-1265.
- [3] C. Herrero Latorre, J. Alvarez Mendez, J. Barciela Garcia, S. Garcia Martin, R.M. Pena Crecente, *Analytica Chimica Acta* 2012, 749, 16-35.

Struktura fenylowych pochodnych kwasu hydrazydoditiokarbazowego

Adam Truchlewski^{a,b}, Małgorzata Szczesio^a, Andrzej Olczak^a, Marek L. Główka^a

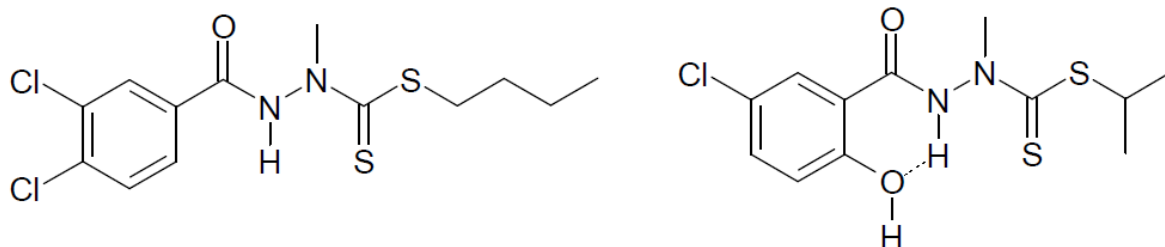
Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka, ul. Żeromskiego 116, 90-924 Łódź

^a Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej, ^b Koło Naukowe „TROTYL”

Z powodu pojawienia się szczepów bakterii *M. tuberculosis* opornych na obecnie stosowane leki, zespół H. Foksa z Gdańskiego Uniwersytetu Medycznego zsyntezował szereg nowych tuberkulostatyków. Początkowo otrzymane były pochodne 2-pirydynowe i 2-pirazynowe, w których koplanarność pierścienia aromatycznego wynika z wewnątrzcząsteczkowego wiązania wodorowego między atomem azotu w pozycji *orto* pierścienia, a atomem wodoru sąsiedniej grupy amidowej.

W wyniku przeprowadzonych przez nasz zespół badań rentgenograficznych tych związków stwierdziliśmy, że duże znaczenie dla aktywności ma możliwość zachowania planarności cząsteczki.^[1,2] W kolejnym cyklu badań okazało się, że pochodne fenyłowe wykazują podobną aktywność, choć pierścień fenyłowy nie jest zdolny do tworzenia wewnątrzcząsteczkowych wiązań wodorowych utrzymujących jego koplanarność z sąsiadującym układem sprzężonym, jak to miało miejsce w 2-pirydynowych i 2-pirazynowych analogach. W wyniku tej zmiany większość związków wykazuje skrócenie pierścienia aromatycznego w stosunku do pozostałej części cząsteczki.^[3]

Wyznaczyliśmy strukturę 2 nowych związków (Schemat), różniących się podstawnikami pierścienia fenyłowego, przy czym jednym z nich jest podstawnik hydroksylowy w pozycji *orto*. Analizę zależności orientacji pierścienia fenyłowego od najczęściej występujących w związkach aktywnych podstawników *orto* przeprowadziliśmy na podstawie bazy CSD.^[4] Największe skrócenie pierścienia wykazują związki posiadające atom chloru w pozycji *orto*, co jest spowodowane jego dużą zawadą steryczną. Najmniejsze zaś skrócenie wykazują pochodne hydroksylową, zdolne do tworzenia wewnątrzcząsteczkowego wiązania wodorowego, determinującego płaskość cząsteczki.



Literatura:

- [1] A. Olczak, M. Szczesio, J. Gołka, C. Orlewska, K. Gobis, H. Foks, M. L. Główka, *Acta Cryst. C*, 67, 2011, 37.
- [2] M. Szczesio, A. Olczak, J. Gołka, K. Gobis, H. Foks, M. L. Główka, *Acta Cryst. C*, 67, 2011, 23.
- [3] M. Szczesio, A. Olczak, K. Gobis, H. Foks, M. L. Główka, *Acta Cryst. C*, 68, 2012, 99.
- [4] F. H. Allen, *Acta Cryst.*, 58, 2002, 380.

Pomiary wydajności kwantowej fotogeneracji metodą kserograficzną w materiałach stosowanych w elektronice organicznej

Anna Stefaniuk^{1,2,3}, Jarosław Jung¹

¹*Katedra Fizyki Molekularnej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka*

²*Studenckie Koło Naukowe Chemików TROTYL*

³*e-mail: anna.stefaniuk@hotmail.com*

Idealny fotoprzewodnik (materiał przewodzący prąd elektryczny pod wpływem światła) charakteryzuje się niskim przewodnictwem w ciemności, które wzrasta po oświetleniu^[1].

Właściwości elektro-optyczne półprzewodników organicznych zwykle nie dorównują właściwościom fotoprzewodników nieorganicznych. Jednak ze względu na możliwość wytwarzania wielkopowierzchniowych elastycznych urządzeń elektronicznych oraz niski koszt produkcji w ciągu ostatnich lat nastąpił gwałtowny wzrost zainteresowania tymi materiałami.

W ciemności w fotoprzewodnikach płynie tzw. „prąd ciemny” wywołany przepływem nośników ładunku generowanych termicznie. Po oświetleniu silnie absorbowanym światłem zachodzi zjawisko fotogeneracji, a następnie transport nośników ładunku.

Wydajność fotogeneracji nośników ładunku decyduje o jakości fotoprzewodników polimerowych. Spośród znanych metod pomiaru tej wielkości na uwagę zasługuje metoda kserograficzna^[2,3], zwana także metodą pomiaru zaniku fotoindukowanego potencjału powierzchniowego. Pomiary kserograficzne przeprowadzane są w trzech etapach:

1. Ładowanie powierzchni próbki umieszczonej na metalowym podłożu (o potencjale 0 V) do potencjału początkowego U_p poprzez rozładowanie koronowe.
2. Przesunięcie próbki pod elektrodę kontrolną i pomiar zaniku potencjału powierzchniowego w ciemności.
3. Pomiar zaniku fotoindukowanego potencjału powierzchniowego.

Spośród innych metod wyróżnia ją brak konieczności nanoszenia elektrod na próbkę, co znacznie ułatwia preparatykę próbek fotoprzewodników, a także eliminuje wpływ efektu fotowstrzykiwania nośników ładunku z oświetlanej elektrody na końcowy wynik pomiarów.

Literatura:

- [1]. A. Rybak, Fotoprzewodnictwo dyskotycznych materiałów organicznych, Politechnika Łódzka, Łódź 2006;
- [2]. J. Jung, Influence of bimolecular recombination on the photogeneration yield values determined by xerographic method, *Synthetic Metals*, Vol. 162, p. 1073–1078, 2012;
- [3]. I. Glowacki, J. Jung, J. Ulanski, A. Rybak, Conductivity Measurements w: *Polymer Science: A Comprehensive Reference*, Amsterdam: Elsevier BV, Vol. 2, p. 847–877, 2012.

Komunikaty Ustne

Chemia Fizyczna i Teoretyczna

Nowoczesne układy kontrolowanego uwalniania leków

Anna Dąbrowska^a, Marta Gawel^b, Agnieszka Kierys^c

^{abc} Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, Wydział Chemii, Zakład Adsorpcji

Pl. M. Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin

^a adabrowska90@o2.pl, ^b agnieszka.kierys@umcs.lublin.pl

Systemy kontrolowanego uwalniania leków są bardzo popularnym zagadnieniem ostatnich lat. Jest to interesująca alternatywa dla tradycyjnego dostarczania poszczególnych dawek leku, gdzie stężenie substancji aktywnej w organizmie nie utrzymuje się na określonym poziomie przez długi czas, ale ma charakter skokowy i wymaga stałej kontroli. Nowoczesna metoda jest metodą wygodniejszą, jednak bardziej skomplikowaną ze względu na ograniczone możliwości dostarczania substancji. Wymagane są nośniki substancji aktywnych o określonych właściwościach. Grupą materiałów, która cieszy się dużą popularnością w dziedzinie kontrolowanego uwalniania są kompozyty związków organicznych i nieorganicznych. Jest to nowa klasa struktur porowatych. O rosnącym zainteresowaniu tego typu układami świadczy liczba publikacji, które pojawiły się w ostatnim czasie.

Wykazano, że uwalnianie leków z nośników na bazie polimeru może być uzyskane przez kontrolowanie prostego procesu dyfuzji.^[1] Jednak efektywność takich układów jest ograniczona m.in. przez stabilność, porowatość i biokompatybilność. Powszechnie wiadomo, że użycie nieorganicznych nanonapełniaczy może poprawić właściwości mechaniczne, termofizyczne i elektryczne kompozytów opartych na polimerach. Odpowiednią stabilność i porowatość można otrzymać przez zastosowanie kompozytów polimerowo-krzemionkowych. Można w ten sposób oczekiwać kontroli uwalniania przez wiele godzin.

W prezentacji szczegółowo omówiony zostanie kompozyt krzemionkowo-polimerowy, który może służyć jako nośnik w procesie kontrolowanego uwalniania. Kompozyt został zsyntetyzowany metodą polegającą na nasączeniu wstępnie otrzymanego materiału polimerowego o pożądanej porowatej strukturze w **tetraetoksylanie** TEOS. ^[2, 3] W wyniku oddziaływań między komponentami układu podczas pęcznienia i w procesie kondensacji SiO₂, dyfuzja leku jest znacząco ograniczona i może być z powodzeniem kontrolowana.

Literatura:

- [1] Bernkop-Schnürch, A., Scholler, S., and Biebel, R.G. *Journal of Controlled Release*, (2000), 66, 39.
- [2] Zaleski R., Kierys A., Grochowicz M., Dziadosz M., Goworek J., *Journal of Colloid and Interface Science*, (2011) 358, 268.
- [3] Zaleski R., Kierys A., Dziadosz M., Goworek J., Halasz I. *RSC Advances*, (2012) 2 3729.

Wieloskładnikowe mieszaniny związków powierzchniowo czynnych

Magdalena Bielawska, Bronisław Jańczuk, Anna Zdziennicka
*Zakład Zjawisk Międzyfazowych, Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemii UMCS,
Pl. Marii Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin*

Związki powierzchniowo czynne są szeroko stosowane w życiu codziennym i różnych gałęziach przemysłu, stanowią one ważny składnik wielu produktów, np. środków czyszczących, kosmetyków czy farb. Wykazują właściwości piorące, myjące, zwilżające czy dyspergujące, ale także bakteriobójcze i antyelektrostatyczne. W praktyce stosuje się najczęściej mieszaniny kilku związków powierzchniowo czynnych (surfaktantów i kosurfaktantów), ze względu na możliwość wystąpienia tzw. efektu synergetycznego np. w redukcji napięcia powierzchniowego roztworu^[1]. Dlatego też zbadano właściwości powierzchniowe, objętościowe i zwilżające układów czteroskładnikowych - wodnych roztworów mieszaniny dwóch klasycznych surfaktantów (kationowego bromku heksadecylotrimetyloamoniowego i niejonowego Tritonu X-100 oraz anionowego dodecylosiarczanu sodu i Tritonu X-100) z alkoholem krótkołańcuchowym (metanolem, etanolem lub n-propanolem). Wykonano pomiary równowagowego napięcia powierzchniowego, gęstości, lepkości, przewodności właściwej, dynamicznego rozpraszania światła oraz kąta zwilżania badanych roztworów do powierzchni modelowych polimerów: apolarnego politetrafluoroetyleny i monopolarnego nylonu-6. Badania prowadzono w całym zakresie stężenia alkoholi jak również szerokim zakresie stężenia surfaktantów, tak, że zarówno surfaktanty jak i alkohol mogły występować w roztworze w postaci monomerycznej lub zagregowanej. Pomiary wykonano w temperaturze 293 K.

Literatura:

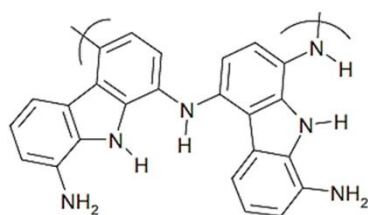
[1] M.J. Rosen, *Surfactants and Interfacial Phenomena*; Wiley-Interscience, New York, 2004, 379.

Ilościowa analiza procesu wytwarzania układów hybrydowych polimer przewodzący/nanocząstki złota z wykorzystaniem Elektrochemicznej Mikrowagi Kwarcowej

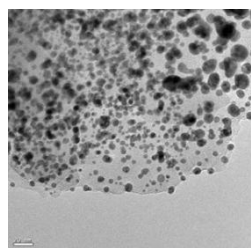
Agata Fedorczyk^a, Magdalena Skompska

^a Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, Warszawa

Celem przeprowadzonych badań było wytworzenie układów hybrydowych polimer przewodzący/nanocząstki złota do zastosowań katalitycznych. Polimerem przewodzącym wykorzystywanym w badaniach był poli(1,8-diaminokarbazol), jako prekursor złota wykorzystany został kwas tetrachlorozłotowy, HAuCl_4 , zaś rolę reduktora pełnił wodny roztwór borowodorku sodu, NaBH_4 . Proces wytworzenia układów hybrydowych polegał na elektrochemicznej syntezie polimeru przewodzącego w postaci cienkiego filmu osadzonego na elektrodzie pracującej metodą potencjodynamiczną (woltamperometria cykliczna), następnie adsorpcji jonów złota zarówno na powierzchni jak i wewnątrz warstwy i ostatecznie redukcji zaadsorbowanych jonów. Przebieg tych procesów został zbadany z wykorzystaniem elektrochemicznej mikrowagi kwarcowej (EQCM), dzięki czemu możliwa była ich ilościowa analiza. Zbadano również wpływ czasu trwania procesu adsorpcji na ilość i rozmiar wytworzonych nanocząstek. Morfologia otrzymanych układów hybrydowych została zbadana z zastosowaniem takich technik jak skaningowa mikroskopia elektronowa (SEM) oraz transmisyjna mikroskopia elektronowa (TEM), dzięki czemu możliwe było porównanie powierzchni układów hybrydowych pod kątem rozmieszczenia i wielkości tworzących je nanocząstek złota. Do analizy składu próbek posłużyła sonda EDS przy mikroskopie skaningowym. Wytworzone układy hybrydowe zostały zbadane pod kątem aktywności katalitycznej na przykładzie reakcji redukcji 4-nitrofenolu do 4-aminofenolu za pomocą NaBH_4 , której może być monitorowany z zastosowaniem spektroskopii UV-Vis.



a



b

Schemat 1. Struktura poli(1,8-diaminokarbazolu) (a) oraz obraz TEM układu hybrydowego poli(1,8-diaminokarbazol)/nanocząstki Au (b)

Literatura:

- [1] M. Skompska, M. Chmielewski, A. Tarajko, *Electrochemistry Communications*, **2007**, 9, 540-544
- [2] M. Skompska, A. Tarajko-Wazny, *Electrochimica Acta*, **2011**, 56, 3494-3499

Chronopotencjometryczne badanie wpływu składu roztworu elektrolitu na parametry elektryczne dwuwarstwowych membran lipidowych

Anna Jastrząb^{a,b}, Monika Naumowicz^b

^a Koło Naukowe Chemików UWr „Pozyton”, Instytut Chemii, Uniwersytet w Białymstoku

^b Instytut Chemii, Uniwersytet w Białymstoku, Al. J. Piłsudskiego 11/4, 15-443 Białystok

Chronopotencjometria jest metodą woltamperometryczną przy stałym prądzie. W metodzie tej bada się zależność potencjału elektrody wskaźnikowej od czasu, $E = f(t)$, podczas przepływu przez nią prądu $I = \text{const.}$ Chronopotencjometrię zalicza się zatem do metod galwanostatycznych, a jej nazwa dobrze odzwierciedla pomiar potencjału w czasie (przy stałym prądzie).^[1]

Dwuwarstwowe membrany lipidowe są obiektem zainteresowania różnych dziedzin nauki: biologii, chemii czy medycyny. Zastosowanie dwuwarstw jako układów modelujących budowę i właściwości błon biologicznych pozwala na rozszerzenie wiedzy o naturalnych błonach. Membrany rozdzielające dwa roztwory wodne stały się popularne ze względu na możliwość umieszczenia elektrod w obu roztworach kontaktujących się z membraną. Pozwala to na proste badanie zjawisk elektrycznych w membranach - zjawisk będących podstawą funkcji życiowych komórek.

Rejestracja krzywych chronopotencjometrycznych dwuwarstw lipidowych umożliwia obserwację zmian przebiegu krzywych w zależności od narzuconego przed pomiarem natężenia prądu. Zarejestrować można trzy rodzaje krzywych. Jeśli narzucone jest małe natężenie prądu, to napięcie membrany wzrasta przez kilka sekund, po czym osiąga wartość stałą. Z krzywych tego rodzaju można wyznaczyć pojemność elektryczną membrany oraz jej opór elektryczny. Zwiększenie natężenia prądu prowadzi do wzrostu napięcia membrany do wartości maksymalnej, po czym następuje spadek potencjału do wartości charakterystycznej, wokół której wartość potencjału zaczyna oscylować (drugi rodzaj krzywych). Związane jest to z faktem tworzenia się w elektropora, którego średnica ulega nieznacznym zmianom (stąd oscylacje wartości potencjału). Mówi się wówczas, że membrana uległa *elektroporacji*. Narzucenie jeszcze wyższego natężenia prądu powoduje nieodwracalne przebicie membrany (trzeci typ krzywych).

Wpływ na kształt krzywych ma nie tylko natężenie przepływającego prądu, ale również skład i stężenie roztworu elektrolitu oraz rodzaj badanego lipidu bądź mieszaniny lipidów. W swoim wystąpieniu przedstawię, jaki wpływ na parametry elektryczne dwuwarstwowych membran lipidowych ma elektrolit zawierający jony Mg^{2+} lub/ oraz K^{+} oraz wpływ zmiany stężenia elektrolitu na pojemność elektryczną i opór elektryczny dwuwarstw. Magnez ma właściwości stabilizujące i ochronne w stosunku do membran, które mogą mieć wpływ na ich parametry elektryczne.^[2]

Literatura:

[1] a) J. Garaj, *Fizyczne i fizykochemiczne metody analizy*; WNT, Warszawa, 1981; b) A. Kisza, *Elektrochemia. Elektrodyka*; WNP, Warszawa, 2001, 219.

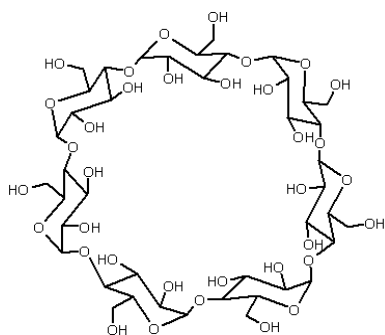
[2] N.-E.L. Saris, E. Mervaala, H. Karppanen, J.A.Khawaja, A. Lewenstam, *Clinica Chimica Acta*, 2000, 294, 2-3.

Wolumetryczne badania wodnych roztworów β -cyklodekstryny, oktanianu sodu i ich równomolowych mieszanin

Ilona Trzcińska, Adam Bald

Zakład Fizykochemii Roztworów, Wydział Chemii, Uniwersytet Łódzki, Pomorska 163,
90-236 Łódź

Cyklodekstryny stanowią niezwykle interesującą grupę związków organicznych tworzących łatwo kompleksy inkluzyjne z wieloma cząsteczkami i jonami, szczególnie tymi, które posiadają fragmenty hydrofobowe. Wynika to ze specyficznej budowy cyklodekstryn, przypominającej ścięty stożek o otwartych obu końcach, którego wewnątrz ma charakter hydrofobowy a zewnętrzna powierzchnia stożka jest w zasadzie hydrofilowa co wpływa na rozpuszczalność cyklodekstryn w wodzie. Z tych własności cyklodekstryn wynikają już istniejące i wciąż intensywnie opracowywane zastosowania ich w medycynie, farmacji, przemyśle kosmetycznym i spożywczym, rolnictwie, analityce i katalizie chemicznej itd.



Rozpuszczalność β -cyklodekstryny (rysunek obok) w wodzie, w stosunku do innych cyklodekstryn, jest jednak bardzo mała i wynosi tylko $0.018 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$. Utrudnia to znacznie badania, szczególnie wolumetryczne, jej roztworów i kompleksów inkluzyjnych, które tworzy z różnymi substancjami. Metody densymetryczne pozwalające na wyznaczenie pozornych objętości molowych w zakresie stężeń mniejszych od rozpuszczalności β -cyklodekstryny wymagają stosowania densymetrów o najwyższych

parametrach i stosowania ściśle określonych, nierutynowych procedur pomiarowych. Również analiza uzyskanych zależności wartości pozornych objętości molowych (V_Φ) od stężenia wymaga odpowiednich procedur. W przypadku mieszanin β -cyklodekstryny i substancji tworzącej z nią kompleks inkluzyjny, którego cząstkową objętość molową chcemy wyznaczyć, należy wykorzystać wartości cząstkowych objętości molowych (V_Φ^0): cyklodekstryny (host), substancji (guest) tworzącej z nią kompleks inkluzyjny oraz wartości stałych tworzenia kompleksu. W pracy przedstawiono wyniki precyzyjnych badań gęstości wodnych roztworów β -cyklodekstryny, oktanianu sodu i równomolowych mieszanin tych roztworów w zakresie temperatur 288.15 K - 318.15 K. Dotychczasowe bardzo nieliczne badania wolumetryczne tego typu obiektów dotyczyły wyłącznie temperatury 298.15 K.^[1]

Literatura:

- [1] a) L. Wilson, R. E. Verrall, J. Phys. Chem. B, **1997**, 101, 9270 – 9279; b) L. Wilson, R. E. Verrall, J. Phys. Chem. B, **1998**, 102, 480 – 488.

Badania eksperymentalne nad preferencjami konformacyjnymi i stabilizacją struktury peptydów na przykładzie białka FBP28 i jego pochodnych

Dorota Uber, Joanna Makowska, Lech Chmurzyński

Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii Ogólnej i Nieorganicznej

Badania konformacyjne wykazały, że zwrot typu β może być pierwotnym elementem strukturalnym, który prowadzi do utworzenia trójwymiarowej struktury białka.^[1] Temperatura, w której rozpoczyna się proces *foldingu* oraz zachowanie się struktury w danej temperaturze, okazuje się być cenną informacją w poznawaniu całego procesu zwijania. Opublikowane wyniki badań dotyczące oryginalnych fragmentów peptydów pochodzących z białka FBP28 (*Formin Binding Protein* – kod PDB: 1E0L)^[2] pozwalają przypuszczać, że oddziaływania występujące pomiędzy naładowanymi resztami Lys w znacznym stopniu przyczyniają się do utrzymania zagiętej struktury związku. Prezentowane wyniki badań dla dwóch pochodnych peptydowych wywodzących się z białka FBP28 (D7-M oraz D9-M), są kontynuacją naszych poprzednich rozważań. Wnioskujemy, że kształt β -zwrotu zależy ściśle od ilości i rozmieszczenia naładowanych reszt aminokwasowych w łańcuchu polipeptydowym. W stosunku do poprzednich badań^[2], pomiary przy zastosowaniu dichroizmu kołowego (CD) oraz pomiary mikrokalorymetryczne (DSC) wykazały, że zastąpienie Asp neutralną Asn powoduje zmniejszenie stabilności termodynamicznej peptydów i zachowanie równowagi konformacyjnej ściśle zależnej od temperatury. Wyznaczone stałe pK_a metodą miareczkowania potencjometrycznego wskazały na zmianę dominujących konformacji w sekwencjach zmodyfikowanych. Struktury zmodyfikowane okazały się związkami bardzo dynamicznymi.

Praca finansowana z grantu NCN nr UMO-2011/01/D/ST4/04497.

Literatura:

- [1] M. S. Searle, D.H. Williams, L.C. Packman, *Nature Structural & Molecular Biology*, **1995**, 2, 999-1006
- [2] J. Makowska, D. Uber, L. Chmurzyński, „Thermodynamics of the protonation equilibria of two fragments of N-terminal β -hairpin of FBP28 WW domain”, *The Journal of Physical Chemistry B*, **2012**, 116, 653–659.

Komunikaty Ustne

**Chemia Organiczna
i Supramolekularna**

Tlenek trifenylfosfiny jako prekursor tlenków diaryloalkilofosfin

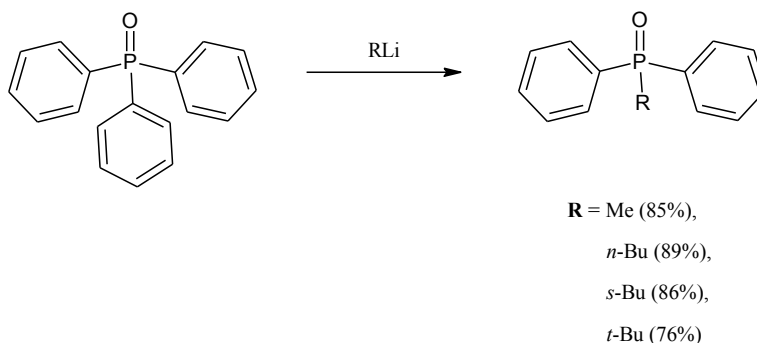
Jolanta Bazań, Marek Stankevič

Zakład Chemii Organicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej,
Gliniana 33, 20-614 Lublin

Chiralne trzeciorzędowe fosfiny oraz tlenki fosfin są szeroko rozpowszechnione w chemii związków fosforoorganicznych gdzie znalazły liczne zastosowania m.in. jako ligandy metali przejściowych w katalizie asymetrycznej,^[1] w koordynowaniu polimerów,^[2] jako prekursory czwartorzędowych soli fosfoniowych,^[3] a także jako reagenty w reakcji Wittiga.^[4] Tak duże zainteresowanie fosfinami można upatrywać w łatwości ich syntezy wychodząc głównie ze związków fosforu(V), będących prekursorami fosfin.

Wiadomym jest, że związki litoorganiczne reagują z tlenkami arylofosfin powodując deprotonowanie pierścienia aromatycznego (zazwyczaj reakcja zachodzi w pozycji *orto* do grupy fosforylowej ze względu na oddziaływanie Li---O).^[5]

Ciekawa wydaje się być możliwość syntezy różnych trzeciorzędowych tlenków fosfin na drodze substytucji jednego z pierścieni aromatycznych w tlenku trifenylfosfiny za pomocą odczynników organometalicznych. Niewątpliwą zaletą tego podejścia byłby recykling tlenku trifenylfosfiny, który powstaje w dużych ilościach jako produkt uboczny reakcji Wittiga czy Mitsunobu.



Schemat 1

Literatura:

- [1] a) Tang W.; Zang X. *Chem. Rev.* **2003**, 103, 3029. b) Shimidzu H.; Nagasaki I.; Saito T. *Tetrahedron*, **2005**, 61, 5405.
- [2] Salomon C.; Fortin D.; Khiri N.; Juge S.; Harvey P. D. *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2011**, 16, 2597.
- [3] a) Horner L.; Winkler H.; Rapp A.; Mentrup A.; Hoffmann H.; Beck P. *Tetrahedron Lett.*, **1961**, 2, 161. b) Leglaye P.; Donadieu B.; Brunet J.-J.; Chauvin R. *Tetrahedron Lett.*, **1998**, 39, 9179. c) Remond E.; Tessier A.; Leroux F. R.; Bayardon J.; Juge S. *Org. Lett.*, **2010**, 12, 1568.
- [4] Rein T.; Pedersen T. M. *Synthesis*, **2002**, 5, 579.
- [5] Farrer N. J.; McDonald R.; Piga T.; McIndoe J. S. *Polyhedron*, **2010**, 29, 254.

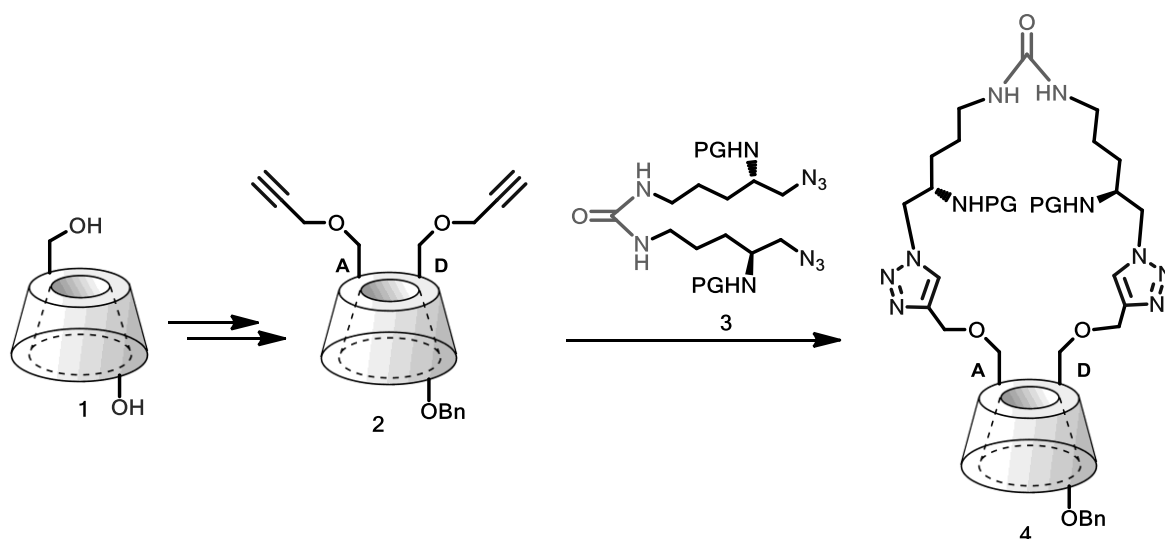
Makrocyclizacja dipodstawionych cyklodekstryn – studium przypadku

Anna Bujalska, Paweł Stępnia

Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, ul. Pasteura 1, 02-089 Warszawa

Cyklodekstryny to związki makrocykliczne, składające się wielu jednostek glukopiranozowych połączonych wiązaniami acetalowymi. Toroidalne ułożenie monomerów glukozowych w dużej mierze odpowiada za nietypowe własności cyklodekstryn.^[1] Związki te znajdują zastosowanie choćby w przemyśle kosmetycznym, farmaceutycznym i spożywczym, gdzie głównie są używane jako substancje zapachowe w perfumach, odświeżaczach powietrza, proszkach do prania. Cyklodekstryny tworzą kompleksy, interkalując do swojego hydrofobowego wnętrza różne związki chemiczne. Ta właściwość ma duże znaczenie przy transportowaniu cząsteczek przez błony biologiczne organizmów żywych. Kompleksowanie molekuly przez związek makrocykliczny zwiększa jej rozpuszczalność oraz stabilizuje ją, przeciwdziałając rozkładowi.

W wystąpieniu zostaną przedstawione wyniki przeprowadzonych badań: tworzenia propargilowanej- β -cyklodekstryny (**2**)^[2] oraz łącznika aminowego (**3**). Łącznik powstaje na skutek przekształceń wyjściowego aminokwasu – ornityny, aż do utworzenia odpowiedniego azydku, który następnie wraz propargilo- β -cyklodekstryną ulega reakcji typu ‘click chemistry’. Jest ona prowadzona z zastosowaniem techniki wielkich rozcieńczeń w obecności katalizatora w wysokim stężeniu, by uzyskać produkt makrocykliczny (**4**) w przewodzie, w stosunku do oligomeru liniowego.



Literatura:

[1] Szejdl, J. *Chem. Rev.*, **1998**, 98, 1743-1753.

[2] Pearce, A. J.; Sinaý, P. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2000**, 39, 3610-3612.

Tiomocznikowe pochodne 1,2-diaminocykloheksanu jako efektywne organokatalizatory enancjoselektywnej reakcji Michaela

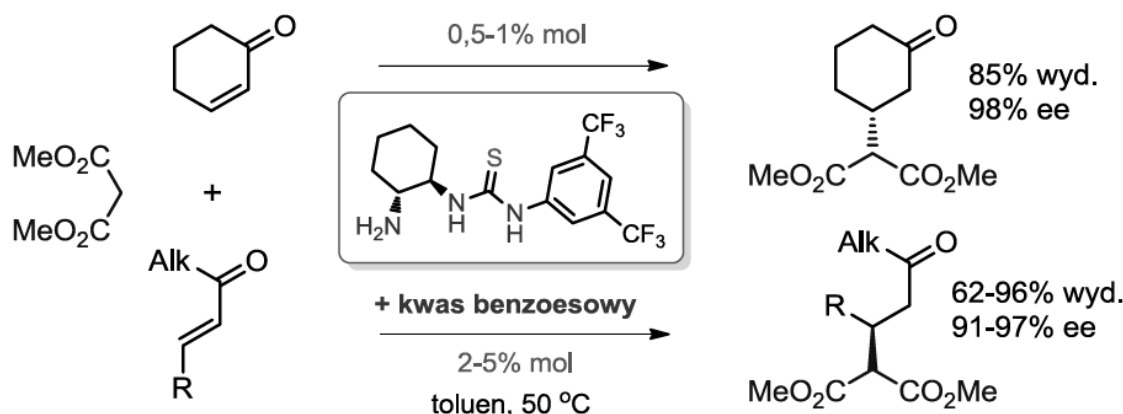
Krzysztof Dudziński, Anna M. Pakulska, Piotr Kwiatkowski

Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, Pasteura 1, 02-093 Warszawa

kdudzinski@chem.uw.edu.pl, pkwiat@chem.uw.edu.pl

Asymetryczna organokataliza z udziałem chiralnych amin pierwszorzędowych, w ostatnich latach odgrywa coraz większe znaczenie w syntezie związków nieracemicznych.¹ W porównaniu do katalizy aminami drugorzędowymi, często stanowi podejście komplementarne oraz może być efektywniejsza w pewnych typach reakcji z bardziej wymagającymi substratami.

Naszą uwagę skoncentrowaliśmy na organokatalitycznych reakcjach Michaela² z udziałem α,β -nienasyconych ketonów w obecności niewielkich ilości ($\leq 5\%$ mol) łatwo dostępnych pierwszorzędowych amin jako katalizatorów.³ Zaobserwowaliśmy, iż proste monotiomocznikowe pochodne 1,2-diaminocykloheksanu są bardzo skutecznymi katalizatorami addycji malonianów do enonów.⁴ Nasze badania wykazały, że obecność dodatkowego centrum zasadowego (np. trzeciorzędowej aminy) w strukturze katalizatora, nie jest konieczna do wydajnego przebiegu tej reakcji.⁵



W komunikacie zostanie przedstawiona praktyczna i wysoce enancjoselektywna reakcja addycji związków 1,3-dikarbonylowych do enonów, katalizowana przez bifunkcyjne organokatalizatory, zawierające w swej strukturze pierwszorzędową aminę oraz ugrupowanie tiomocznikowe. Dodatek słabego kwasu oraz podwyższenie temperatury (ok. 50 °C) istotnie zwiększa wydajność badanej reakcji, z zachowaniem wysokiej enancjoselektywności. Opracowana metodologia umożliwia wydajną syntezę 1,5-ketoestrów z wysokimi nadmiarami enancjomerycznymi oraz niską zawartością (0,5-5% mol) łatwo dostępnego katalizatora.⁴

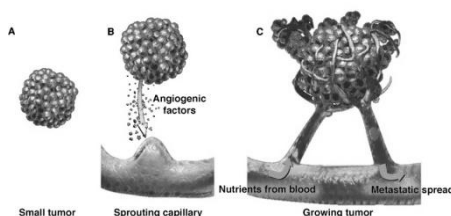
Literatura:

- [1] Jiang, L.; Chen, Y.-C. *Catal. Sci. Technol.* **2011**, *1*, 354.
- [2] Zhang, Y.; Wang, W. *Catal. Sci. Technol.* **2012**, *2*, 42.
- [3] Giacalone, F.; Gruttadauria, M.; Agrigento, P.; Noto, R. *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 2406.
- [4] Dudzinski, K.; Pakulska, A. M.; Kwiatkowski, P. *Org. Lett.* **2012**, *14*, 4222.
- [5] Li, P.; Wen, S.; Yu, F.; Liu, Q.; Li, W.; Wang, Y.; Liang, X.; Ye, J. *Org. Lett.* **2009**, *11*, 753.

Synteza peptydów i ich mimetyków o właściwościach antyangiogennych

Bartłomiej Fedorczyk, Anna Puszko, Aleksandra Misicka
Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, Pracownia Peptydów

Angiogeneza to proces wytwarzania potomnych naczyń krwionośnych z istniejącej sieci naczyń rodzicielskich. Fizjologiczny proces jest sterowany wzajemną relacją między aktywatorami i inhibitorami angiogenezy. Lokalne przesunięcie równowagi na korzyść aktywatorów odbywa się podczas np. gojenia się ran czy menstruacji. Guzy nowotworowe, które zwiększają swoją objętość, intensywnie wydzielają do otaczających tkanek czynniki aktywujące, patologicznie zaburzając istniejącą równowagę. Głównym przedstawicielem tych czynników jest VEGF₁₆₅ (*Vascular Endothelial Growth Factor*) – naczyniowo śródbłonkowy czynnik wzrostu.^[1]



Schemat 1. Fazy rozwoju guza nowotworowego: A – niewielki guz nowotworowy, B – guz bez tlenu i substancji odżywczych nie może się rozrastać. Wydziela czynniki proangiogenne, C – guz unaczyniony, możliwość wzrostu i tworzenia przerzutów.

VEGF jest cząsteczką sygnałową, która selektywnie oddziałuje z receptorami neuropilinowymi NRP-1 zlokalizowanymi w dużej mierze na powierzchni komórek śródbłonka naczyń krwionośnych. Przyłączenie VEGF skutkuje przesłaniem sygnału chemicznego do środka komórki indukując intensywne podziały i tworzenie nowego naczynia krwionośnego. Rolą związków o właściwościach antyangiogennych jest kompetencyjna konkurencja z VEGF o miejsce w centrum aktywnym

receptora NRP-1 co w konsekwencji blokuje zajście procesu angiogenezy.

Celem moich badań jest zaprojektowanie i otrzymanie związków będących mimetykami tetrapeptydu H-Lys-Pro-Pro-Arg-OH – analogu antyangiogennego peptydu A7R,^[2] a następnie przebadanie ich pod kątem zdolności inhibicji wiązania VEGF/NRP-1. Badania biologiczne są prowadzone na Université Paris 13. W wystąpieniu przedstawione zostaną przykłady mimetyków z pierścieniami triazolowymi. Tego typu związki można otrzymać wykorzystując reakcję typu *click* polegającą na 1,3-dipolarnej cykloaddycji Huisgena, pomiędzy grupą azydkową (1,3-dipol), a terminalnym alkilem (dipolarofil), katalizowaną przez jony miedzi (I).^[3]

Literatura:

- [1] Folkman J. *The New England Journal of Medicine*, **1971**, 285(21), 1182-1186.
- [2] Starzec A. *Life Sciences*, **2006**, 79, 2370-2381.
- [3] Sharpless B. *Angewandte Chemie*, **2002**, 114(14), 2708-2711.

Rodnikowe reakcje dekarboksylacji w produktach żywnościowych a zagrożenie toksykologiczne

Jakub Gromadzki

Uniwersytet Przyrodniczo Humanistyczny w Siedlcach

kubagrom@tlen.pl

Na początku lat 90. zwrócono uwagę na samorzutne przemiany, zachodzące w produktach żywnościowych, prowadzące do powstawania wolnych rodników zmieniających ich skład w sposób trudny do przewidzenia. Jedną z takich reakcji jest dekarboksylacja kwasu benzoesowego, będącego jednym z najpowszechniejszych stosowanych konserwantów, prowadząca do powstania rakotwórczego benzenu. Prezentacja omawia warunki i przebieg tej reakcji, oraz możliwe środki zaradcze.

Literatura:

- [1] Lalita K. Gardner , Glen D. Lawrence, *J. Agric. Food Chem.*, **1993**, 41 (5), 693–695.
- [2] Francisco Javier Casado , Antonio Higinio Sanchez , Antonio De Castro , Luis Rejano , Victor Manuel Beato , and Alfredo Montano, *J. Agric. Food Chem.*, **2011**, 59 (6), 2403–2409.
- [3] Małgorzata Jędra, Andrzej Starski, Halina Gawarska, Dorota Sawilska-Rautenstrauch, *Bromat. Chem. Toksykol.* – XLI, **2008**, 3, 382–388.
- [4] Christof Van Poucke , Christ'l Detavernier, Jan F. Van Bocxlaer , Rudi Vermeylen and Carlos Van Peteghem, *J. Agric. Food Chem.* , **2008** , 56 (12), 4504–4510.

Addycja Michaela pochodnych typu >P(O)H do produktów redukcji Bircha - problemy syntetyczne

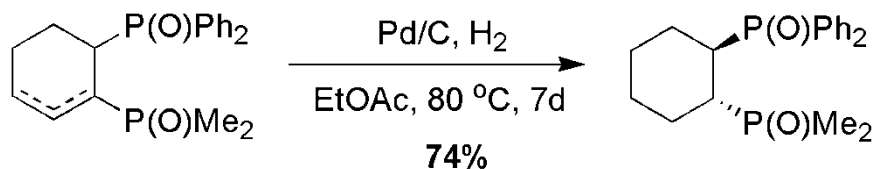
Magdalena Jaklińska, Marek Stankevič

Wydział Chemii Organicznej, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie
Gliniana 33, 20-614 Lublin, (+48) 81 524 22 51

Na chwilę obecną znanych jest z literatury zaledwie kilka przykładów syntezy i aplikacji difosfin zawierających cykliczne łączniki.^[1] Okazały się one jednak efektywnymi ligandami tworzącymi z metalami przejściowymi chiralne kompleksy, które działają jako doskonałe katalizatory w syntezie asymetrycznej. W tym kontekście szczególną rolę wydają się odgrywać ligandy posiadające centrum chiralności na atomie fosforu, gdyż w tym przypadku chiralne otoczenie znajduje się w najbliższym otoczeniu metalu.

W trakcie prowadzonych przez nas badań dotyczących wykorzystania redukcji Bircha w chemii fosforoorganicznej^[2] okazało się, że produkty redukcji Bircha ulegają reakcji Michaela z tlenkami drugorzędowych fosfin prowadząc do powstawania 1,2-bis(fosfinylo)cykloheksenów.^[3] Głównym problemem zdaje się jednak być uwodornienie obecnego wiązania podwójnego w pierścieniu cykloheksenylowym.

Prezentujemy poniżej nasze starania dotyczące uwodornienia podwójnego wiązania w produktach addycji Michaela.



Literatura:

- [1] S. Demay, F. Volant, P. Knochel, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2001**, 40, 1235.
 - [2] a) Stankevič M., Włodarczyk A., Jaklińska M., Parcheta R., Pietrusiewicz K. M., *Tetrahedron*, **2011**, 67, 8761; b) Stankevič M., Wójcik K., Jaklińska M., Pietrusiewicz K. M., *Eur. J. Org. Chem.*, **2012**, 2521; c) Stankevič M., Bazan J., *J. Org. Chem.*, **2012**, 77, 8244.
 - [3] Stankevič M., Jaklińska M., Pietrusiewicz K. M., *J. Org. Chem.*, **2012**, 77, 1991.
- Badania sfinansowane z funduszy Narodowego Centrum Nauki w ramach grantu badawczego Nr 2012/05/N/ST5/01154.

Optycznie czyste azirydynyloalkohole jako katalizatory w syntezie asymetrycznej

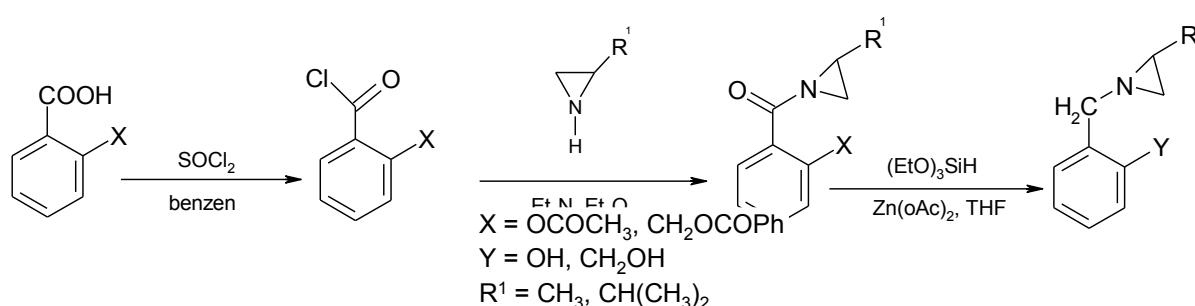
Szymon Jarzyński, Michał Rachwalski, Stanisław Leśniak

Katedra Chemii Organicznej i Stosowanej, Uniwersytet Łódzki, Tamka 12, 91-403 Łódź

Synteza związków optycznie czynnych ciągle znajduje się w jednym z centralnych miejsc we współczesnej syntezie organicznej. Niezwykle istotną rolę odgrywa w niej właściwy dobór odpowiednich chiralnych katalizatorów, od których zależą wartości wydajności chemicznych oraz nadmiarów enancjomerycznych, bądź diastereomerycznych produktów reakcji asymetrycznych.

Wcześniejsze badania dowiodły, że chiralne ligandy zawierające fragment azirydyny są niezwykle efektywnymi i wydajnymi katalizatorami reakcji asymetrycznej addycji dietylocynku do aldehydów i enonów oraz fenyloetynylocynku do aldehydów^{[1][2]}. Otrzymane wyniki tłumaczone są zjawiskiem szczególnie efektywnego kompleksowania jonów cynkowych przez azirydyny^{[3][4]}.

Celem przeprowadzonych badań było zsyntezowanie serii chiralnych ligandów, posiadających w swojej strukturze jedno centrum stereogeniczne (zlokalizowane na atomie węgla pierścienia azirydynowego w tzw. części aminowej). Otrzymane ligandy zostały przetestowane pod względem ich aktywności w reakcjach asymetrycznej addycji dietylocynku i fenyloetynylocynku do aldehydów. Uzyskano produkty z dobrymi wydajnościami i bardzo wysokimi nadmiarami enancjomerycznymi.



Literatura:

- [1] S. Leśniak, M. Rachwalski, E. Sznajder, P. Kielbasiński, *Tetrahedron Asymmetry*, **2009**, 20, 2311.
- [2] M. Rachwalski, S. Leśniak, P. Kielbasiński, *Tetrahedron Asymmetry*, **2010**, 21, 2687.
- [3] R. Bartnik, S. Leśniak, A. Laurent, *Tetrahedron Lett.* **1981**, 4811.
- [4] R. Bartnik, S. Leśniak, A. Laurent, *J. Chem. Res.* **1982**, 287, 2701.

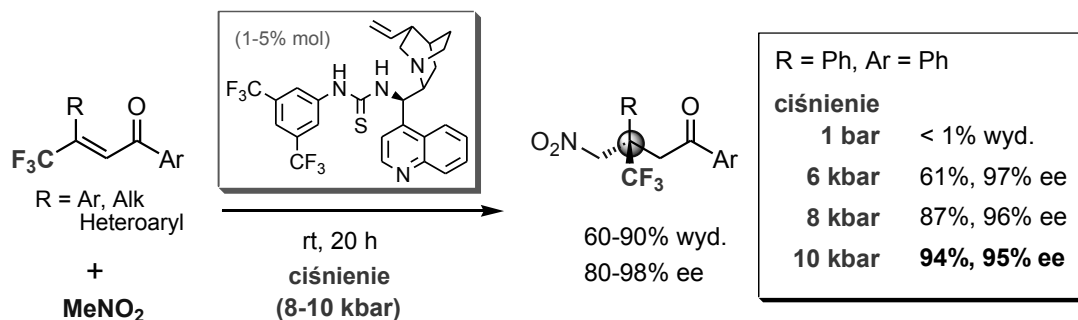
Organokataliza w syntezie chiralnych związków trifluorometylowych z czwartorzędowym centrum stereogenicznym

Adrian Kasztelan, Agnieszka Cholewiak, Piotr Kwiatkowski

Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa

Organokataliza w ostatnich latach odgrywa coraz większą rolę w asymetrycznej syntezie organicznej i w wielu typach reakcji poważnie konkuruje z katalizą kompleksami metali. Pomimo rosnącego zainteresowania tym kierunkiem katalizy, nadal występują ograniczenia w jej stosowalności związane z koniecznością użycia dużych ilości katalizatora, długim czasem reakcji, a jej skuteczność również często istotnie zależy od budowy substratów.

Przedmiotem naszych badań są organokatalityczne reakcje typu Michaela (schemat) oraz Friedla-Craftsa, w których generowane jest czwartorzędowe centrum stereogeniczne^[1] zawierające grupę trifluorometylową.^[2] Reakcje te, powszechnie uważane za trudne do zrealizowania z uwagi na ograniczenia steryczne, udało się przeprowadzić z wysoką wydajnością dzięki zastosowaniu techniki wysokociśnieniowej. Jak dotąd znanych jest niewiele przykładów użycia tej techniki w połączeniu z katalizą asymetryczną, szczególnie organokatalizą.



W naszej pracy skoncentrowaliśmy się na reakcji pomiędzy α,β -nienasyconymi ketonami, z grupą trifluorometylową w pozycji β , a nitrometanem, katalizowanej tiomocznikowymi pochodnymi alkaloidów chinowca. Wyniki prac pokazują, że zastosowanie wysokiego ciśnienia było kluczowym elementem wpływającym na poprawę wydajności oraz znaczne skrócenie czasu reakcji. Jednocześnie przy użyciu niewielkiej ilości (1-5% mol) katalizatora udało się otrzymać nadmiary enancjomeryczne sięgające 98%.

Chiralne produkty reakcji trifluorometylowanych chalkonów z nitrometanem mogą w kilku etapach zostać przekształcone w trifluorometylowe analogi, komercyjnie dostępnych, inhibitorów GABA, takie jak Baclofen, czy Rolipram. Mają one szerokie zastosowania medyczne, a ich trifluorometylowane pochodne mogą wykazywać interesujące właściwości wpływające na biodostępność, czy podaność leku na biotransformację.

Literatura:

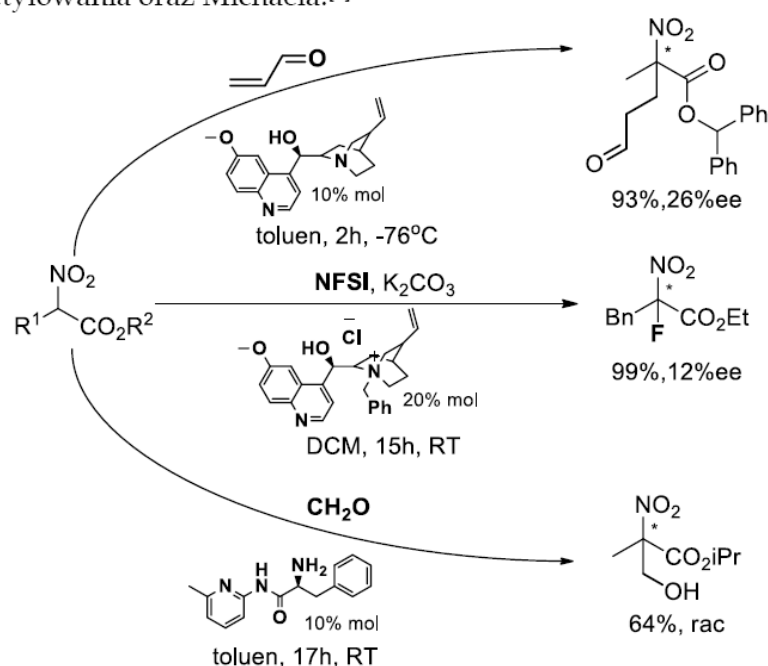
- [1] M. Bella, T. Gasperi, *Synthesis* **2009**, 1583–1614.
 [2] J. Nie, H.-C. Guo, D. Cahard, J.-A. Ma, *Chem. Rev.* **2011**, 111, 455–529.

α -Nitroestry jako substraty w reakcjach fluorowania, hydroksymetylowania i w reakcji Michaela

Paulina Krzemińska, Dawid Łyżwa

Uniwersytet Warszawski
Wydział Chemii

Głównym celem było opracowanie organokatalitycznych reakcji z udziałem łatwo dostępnych monopodstawionych α -nitroestrów, prowadzących do chiralnych α,α -dipodstawionych nitroestrów^[1], które z kolei można łatwo przekształcić w odpowiednie modyfikowane α -aminokwasy. W naszych badaniach skupiliśmy się na trzech typach reakcji z udziałem α -nitroestrów: r. fluorowania, hydroksymetylowania oraz Michaela.^[2]



Schemat 1. Schemat reakcji Michaela, fluorowania i hydroksymetylowania.

Jako katalizatorów używaliśmy pochodnych alkaloidów oraz amin pierwszorzędowych. Uzyskaliśmy dobre wydajności, lecz wartości nadmiarów enancjomerycznych nie były zadowalające. Trwają prace nad optymalizacją warunków prezentowanych reakcji.

Literatura:

- [1] *Quaternary Stereocenters: Challenges and Solutions for Organic Synthesis*, J. Christoffers, A. Baro, Eds. 2005, WILEY-VCH
 [2] a) G. Valero, X. Company, R. Rios *Chem. Eur. J.* **2011**, *17*, 2018 b) C.-B. Ji, Y.-L. Liu, Z.-Y. Cao, Y.-Y. Zhang, J. Zhou *Tetrahedron Letters* **2011**, *52*, 6118.



Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka 2007-2013

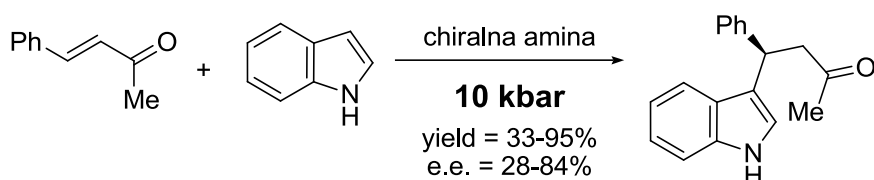
α,β -Nienasycone ketony jako substraty w wysokociśnieniowej organokatalitycznej reakcji Friedela-Craftsa

Dawid Łyżwa, Piotr Kwiatkowski

Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, Pasteura 1, 02-093 Warszawa,

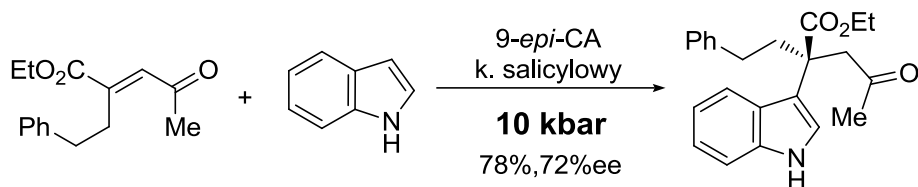
Opracowanie asymetrycznej organokatalitycznej metody syntezy pochodnych indolu jest ważnym zagadnieniem w obrębie chemii i przemysłu farmaceutycznego.^[1]

W naszych badaniach pokazujemy wpływ zastosowanie wysokiego ciśnienia (rzędu 8-10 kbar) na reakcje alkilowania Friedla-Craftsa w wariacie asymetrycznym. Jako substraty stosujemy α,β -nienasycone ketony oraz indol.^[2] Katalizatorami wspomnianych reakcji są chiralne pierwszorzędowe aminy, będące pochodnymi alkaloidów.^[3] **[Schemat 1]**



Schemat 1. Wysokociśnieniowa reakcja Friedela-Craftsa z udziałem benzyldienoacetonu oraz indolu

Zastosowanie techniki wysokociśnieniowej umożliwia również syntezę związków zawierających czwartorzędowe centrum stereogeniczne. Ich otrzymanie jest bardzo trudne na drodze klasycznej syntezy. **[Schemat 2]**



Schemat 2. Wysokociśnieniowa synteza układu zawierająca czwartorzędowe centrum stereogeniczne

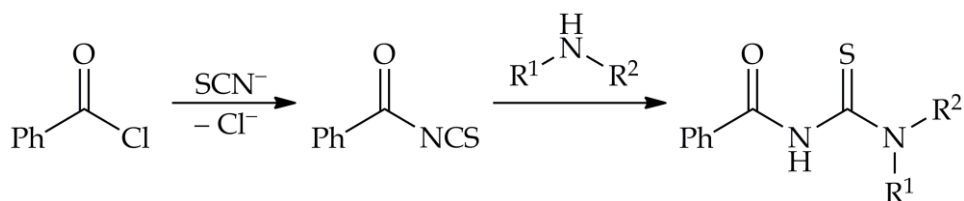
Literatura:

- [1] Nicolaou, K. C.; *Classics in Total Synthesis II*; Wiley- VCH: Weinheim, **2003**.
- [2] Melchiorre, P.; Bartoli, G.; *Org. Lett.*, **2007**, 9, 7.
- [3] Łyżwa, D., Dudziński, K., Kwiatkowski, P. *Org. Lett.*, **2012**, 14, 1540.

N-benzoilotiomocznik i jego pochodne

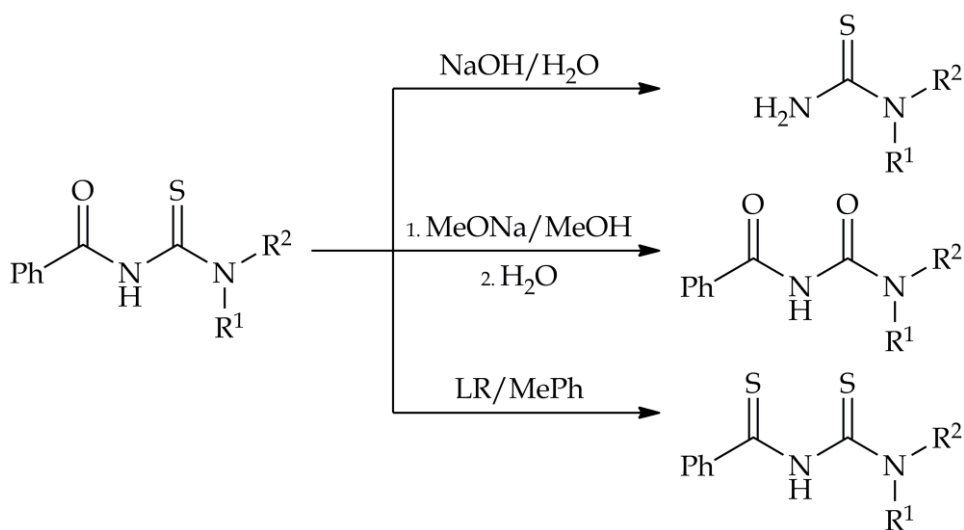
Andrzej Okuniewski, Jarosław Chojnacki, Barbara Becker
Katedra Chemii Nieorganicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska
ul. G. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk

N-benzoilotiomoczniki są ważną klasą związków ze względu na ich trwałość, łatwość syntezy, możliwość modyfikacji oraz zdolność do kompleksowania jonów metali będących miękkimi kwasami Lewisa (w myśl teorii HSAB Pearsona^[1]). Otrzymuje się je w wyniku addycji pierwszo- i drugorzędowych amin do izotiocyanianu benzoilu^[2] (Schemat 1).



Schemat 1. Synteza N-benzoilotiomoczników z chloru benzoilu, rodanków i amin.

Produkt można łatwo przekształcić poprzez hydrolizę do odpowiednich tiomoczników,^[3] N-benzoilomoczników^[4] oraz w wyniku reakcji z odczynnikiem Lawessona^[5] (LR) do N-tiobenzoilotiomoczników (Schemat 2).



Schemat 2. Związki, które można łatwo otrzymać z N-benzoilotiomoczników.

W prezentacji przedstawiony zostanie szereg N-benzoilotiomoczników, ich struktury i wybrane właściwości oraz związki kompleksowe, w których służą jako ligandy.

Literatura:

- [1] R. G. Pearson, *J. Am. Chem. Soc.*, **1963**, 22, 3533-3539.
- [2] I. B. Douglass, F. B. Dains, *J. Am. Chem. Soc.*, **1934**, 56, 719-721.
- [3] R. L. Frank, P. V. Smith, *Org. Synth.*, **1948**, 28, 89-91.
- [4] A. Okuniewski, J. Chojnacki, B. Becker, *Acta Cryst. E*, **2010**, 66, o414.
- [5] H. Z. Lecher, R. A. Greenwood, K. C. Whitehouse, T. H. Chao, *J. Am. Chem. Soc.*, **1956**, 78, 5018-5022.

Asymetryczna organokataliza w wodzie – czy jest to możliwe?

Anna M. Pakulska, Krzysztof Dudziński

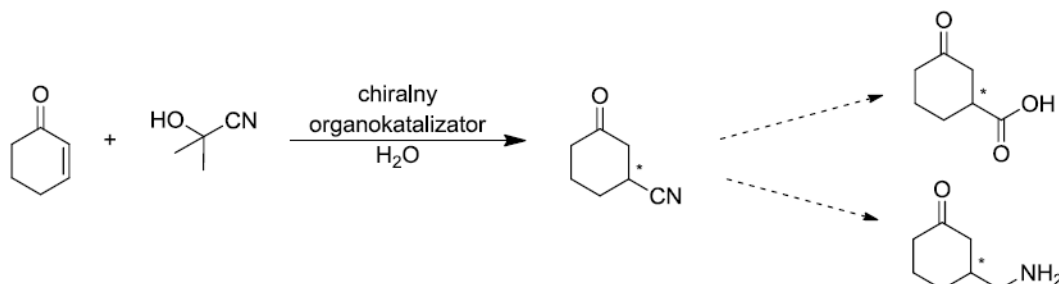
Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa

apakulska@student.uw.edu.pl

Woda jest najpowszechniej występującą w przyrodzie cieczą, dzięki czemu jest tania oraz łatwo dostępna. Nieszkodliwość dla środowiska oraz brak toksyczności sprawiają, że spełnia kryteria zielonej chemii,¹ co odróżnia ją od większości popularnych rozpuszczalników organicznych. Z tych względów woda wydaje się być rozpuszczalnikiem idealnym.

Tym bardziej interesującym może być prowadzenie asymetrycznych reakcji organokatalitycznych w wodzie.² Takie warunki minimalizują powstawanie zanieczyszczeń podczas syntezy oraz eliminują zagrożenia zatruciem metalami, co umożliwia wykorzystanie procesu w przemyśle farmaceutycznym.

Nasze badania skoncentrowaliśmy na addycji jonów cyjankowych do cyklicznych α,β -nienasyconych ketonów. Bardzo atrakcyjnym, tanim i bezpiecznym źródłem anionów cyjankowych są cyjanohydryny, w szczególności cyjanohydryna acetonu.³ Otrzymane produkty, pochodne nitryli, można poddawać dalszym przekształceniom, prowadzącym do chiralnych pochodnych kwasów, ketonów, amin czy aminokwasów.



W trakcie prezentacji przedstawione zostaną wstępne wyniki badań nad asymetryczną reakcją Michaela prowadzoną w środowisku wodnym, katalizowaną małymi cząsteczkami organicznymi.



Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka 2007-2013

Literatura:

- [1] R.A. Sheldon, *Chem.Soc.Rev.*, **2012**, 1437.
- [2] a) M. Raj, V.K. Singh, *Chem. Commun.*, **2009**, 6687. b) C. Palomo et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2007**, 8431.
- [3] a) S.A.Haroutounian, *Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis*, John Wiley & Sons, **2001**. b) R.J.H.Gregory, *Chem. Rev.* **1999**, 99, 3649.

Asymetrycznie i symetrycznie N-podstawione triaryloaminowe pochodne naftalenobisimidu – porównanie właściwości spektroskopowych, strukturalnych, transportowych i elektrochemicznych

Renata Rybakiewicz^{*a}, Joanna Zapalab, David Djurado^b, Robert Nowakowski^b, Jean-Marie Verilhac^c, Malgorzata Zagorska^a, Adam Proń^a

^aWydział Chemiczny, Politechnika Warszawska, ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa

^bICbF, PAN, Kasprzaka 44/52, 01224 Warszawa

^cINAC/SPrAM (UMR 5819, CEA-CNRS-Univ. J. Fourier-Grenoble 1) LEMOH, CEA Grenoble, Francja

^dCEA/LITEN/LCI, Grenoble, Francja

^{*e-mail:} rrybakiewicz@ch.pw.edu.pl

Celem niniejszej pracy była synteza oraz porównanie właściwości chemicznych i fizycznych przetwarzalnych z roztworu półprzewodników organicznych z rodziny arylenobisimidów.

Otrzymane bisimidy naftalenowe mono- i di-podstawione grupą triaryloaminową przy atomie azotu wykazywały podobne właściwości elektrochemiczne. W ich woltamogramach występowała jedna para redoksowa związana z odwracalnym ultenieniem podstawnika triarylowego do karbokationu i dwie pary redoksove przypisane dwuetapowej redukcji rdzenia bisimidu do karboanionu i dianionu. Wyznaczone z badań elektrochemicznych wartości potencjału jonizacji (IP) i powinowactwa do elektronu (EA) wynosiły: IP = 5.21 eV i EA = -3.80 eV dla pochodnej niesymetrycznej oraz IP = 5.19 eV i EA = -3.83 eV dla pochodnej symetrycznej, pozostając w zgodzie z wynikami obliczeń kwantowo-chemicznych metodą DFT. Biorąc pod uwagę wartości IP i EA należało się spodziewać, że półprzewodniki te będą mogły być zastosowane jako warstwy aktywne w ambipolarnych tranzystorach polowych. Badania tranzystorów testowych wykazały że pochodna niesymetryczna jest ambipolarna.^[1] Pochodna niesymetryczna nie wykazywała natomiast ambipolarności dając efekt polowy tylko w konfiguracji z kanałem typu p.^[2,3] Badania cienkich warstw aktywnych tych półprzewodników metodami dyfrakcji rentgenowskiej oraz badania monowarstw metodą skaningowej mikroskopii tunelowej (STM) pozwoliły przypisać tę różnicę w zachowaniu się obu związków ich różnej strukturze nadcząsteczkowej.

Niniejsza praca jest współfinansowana przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego, projekt „Program Rozwojowy Politechniki Warszawskiej” realizowany przez Centrum Studiów Zaawansowanych.

Praca współfinansowana przez 7 PR UE, FlexNet, „Sieć Doskonałości dla Wielkopowierzchniowej Elastycznej Elektroniki Organicznej”, Nr kontraktu: 247745.

Literatura:

- [1] R. Rybakiewicz, J. Zapala, D. Djurado, R. Nowakowski, P. Toman, J. Pflieger, J.-M. Verilhac, M. Zagorska, A. Pron, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2013**, 15, 1578-1587.
- [2] R. Rybakiewicz, D. Djurado, H. Cybulski, E. Dobrzynska, I. Kulszewicz-Bajer, D. Boudinet, J.-M. Verilhac, M. Zagorska, A. Pron, *Synth. Met.*, **2011**, 161 1600–1610.
- [3] A. Pron, R. R. Reghu, R. Rybakiewicz, H. Cybulski, D. Djurado, J. V. Grazulevicius, M. Zagorska, I. Kulszewicz-Bajer, J.-M. Verilhac, *J. Phys. Chem. C*, **2011**, 115, 15008–15017.

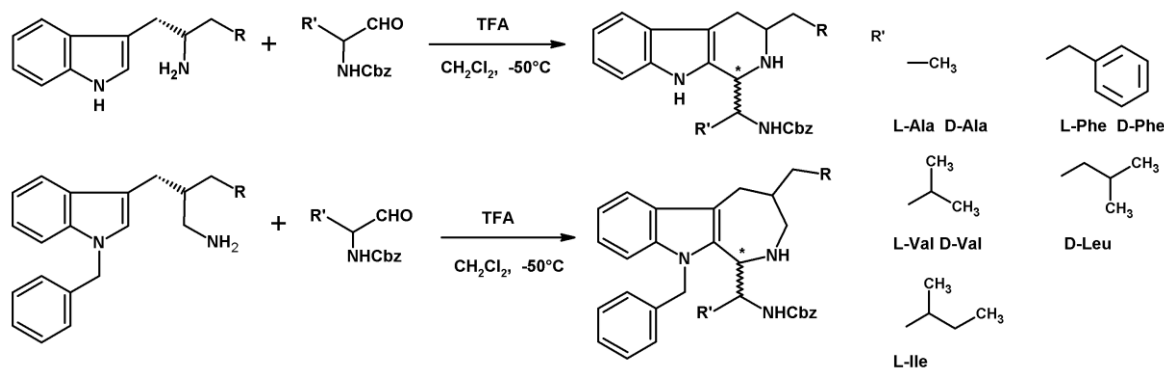
Reakcja Picteta-Spenglera - otrzymywanie peptydomimetyków tryptofanu

Marta Słupska, Karolina Pułka, Edyta Deluga, Aleksandra Misicka

Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, Warszawa, Polska

Reakcja Picteta-Spenglera (P-S) [1] polegająca na cyklokondensacji β -aryloetyloaminy z aldehydami lub ketonami jest od lat z powodzeniem stosowana do syntezy cyklicznych pochodnych aminokwasów aromatycznych. Aminokwasy te odgrywają zasadniczą rolę w wykazywaniu aktywności biologicznej wielu naturalnych peptydów. W aromatycznych aminokwasach białkowych pierścienie aromatyczne mają dużą swobodę rotacji, dlatego też w celu lepszego zdefiniowania położenia tych pierścieni w konformacjach bioaktywnych syntetyzuje się ich pochodne, w których pierścień aromatyczny ma ograniczoną swobodę rotacji. Pierścień indolowy znajdujący się w łańcuchu bocznym tryptofanu bardzo często wchodzi w obszar farmakoforu biologicznego wielu peptydów biologicznie czynnych. Jedną z możliwości otrzymania cyklicznych pochodnych tryptofanu o ograniczonej rotacji jest przeprowadzenie go w wyniku reakcji P-S w pochodną tetrahydro- β -karbolinową lub heksahydroazepinową.

Wykonano szereg reakcji P-S stosując jako komponenty karbonylowe α -aminoaldehydy otrzymywane z L- i D- α -aminokwasów, a jako komponenty aminowe estry metylowe β^2 - oraz β^3 -homo -tryptofanu oraz dipeptydy z β^3 -homo-tryptofanem na N-końcu. (Schemat 1).



Schemat 1. Reakcja P-S pochodnych a) β^3h Trp b) β^2h Trp z chiralnymi Cbz-zabezpieczonymi aminoaldehydami

W wyniku reakcji P-S tworzy się nowy 6- lub 7-członowy pierścień oraz generowane jest centrum stereogeniczne (*), co powoduje, że w jednej reakcji mogą powstawać dwa diastereomeryczne produkty (*cis/trans*), których stosunki ilościowe oraz ich budowę określono przy pomocy widm 1H i 2D NMR.

Zastosowanie do reakcji P-S β -homologów tryptofanu, umożliwia otrzymanie oraz zbadanie struktur przestrzennych β -peptydów, które mogą być wykorzystywane jako mimetyki biologicznie aktywnych α -peptydów.

Literatura:

- [1] Pictet A., Spengler T., *Ber. Dtsch. Chem. Ges.*, **1911**, 44, 2030-2036

Wykorzystanie drukarki chemicznej CHIP-1000 oraz spektrometru mas MALDI-TOF do obrazowania tkanek

Piotr Sosnowski, Beata Wileńska, Aleksandra Misicka

Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, Warszawa, Polska

Klasyczne oznaczanie związków chemicznych występujących w tkankach, polegające na ekstrakcji substancji z materiału biologicznego, jest zazwyczaj długotrwałym i skomplikowanym procesem. Znaczne skrócenie czasu i uproszczenie analizy uzyskuje się wykorzystując do tego typu oznaczeń odpowiednio zaadoptowaną technikę spektrometrii mas - MALDI (*Matrix Assisted Laser Desorption Ionization*).^[1] Umożliwia ona prowadzenie analizy związków naturalnych *in vitro* bezpośrednio z powierzchni skrawka tkanki. W ostatniej dekadzie nastąpił bardzo dynamiczny rozwój badań MSI (*Mass Spectrometry Imaging*). dzięki czemu możliwe jest obecnie oznaczanie i analiza dystrybucji licznych biomolekuł obecnych w tkankach, a także wykrywanie markerów nowotworowych oraz analiza dystrybucji leków.^[2] Uzyskanie optymalnych wyników wciąż jednak wymaga dopracowania metod analizy i przygotowania próbki.

W technice MALDI do jonizacji analitów wykorzystywana jest matryca, która nanoszona w sposób mało precyzyjny (np. pipetą) powoduje nierównomierny jej rozkład oraz migrację badanych związków na powierzchni tkanki. Wpływa to negatywnie na powtarzalność wyników pomiarowych. Poprzez punktowe naniesienie matrycy za pomocą drukarki chemicznej CHIP-1000 (*Chemical Inkjet Printer*) na powierzchni tkanki uzyskuje się jednorodne kryształy matrycy, optymalizujące proces desorpcji analitów. Jednocześnie pozostawienie minimalnej odległości między punktami pomaga zachować czystość oraz zapobiega migracji związków na obszarze tkanki.



Schemat 1. Graficzne przedstawienie procesu przygotowania próbki tkanki.

Celem moich badań jest zobrazowanie dystrybucji oraz identyfikacja białek i peptydów występujących w mózgu oraz sercu szczura. W komunikacie zostaną przedstawione dotychczasowe wyniki badań, uzyskane z m.in. obrazowania przysadki szczura.

Literatura:

- [1] R.M. Caprioli, T.B. Farmer, J. Gile, *Anal. Chem.*, **1997**, 69, 4751-4760.
- [2] P. Chaurand, *J. Prot.*, **2012**, 75, 4883-4892.

Zastosowanie mikroorganizmów do przekształceń związków chmielu oraz ich pochodnych

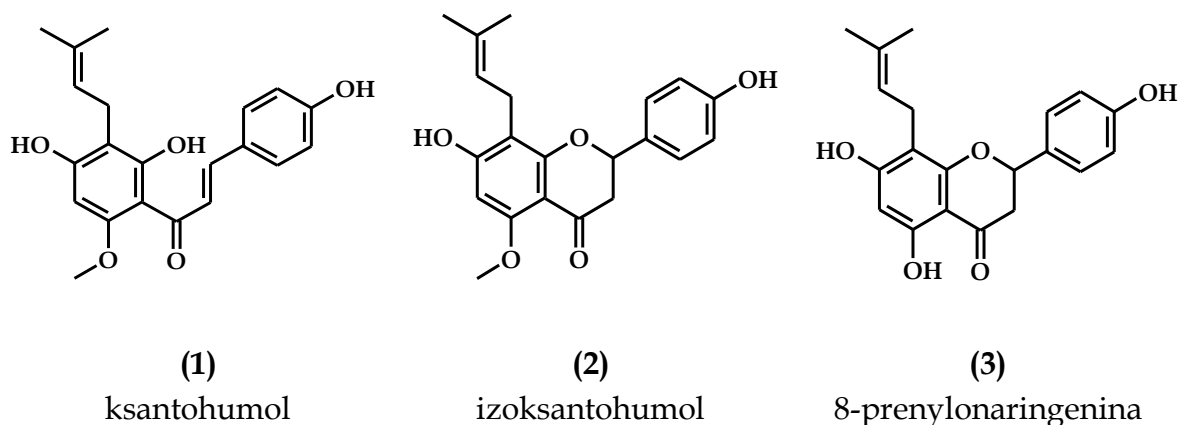
Monika Stompor, Mirosław Anioł

*Katedra Chemii, Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu,
ul. Norwida 25, 50-375 Wrocław*

Mikroenzymatyczne przekształcenia naturalnych egzogennych flawonoidów są coraz częściej stosowaną metodą badań nad poszukiwaniem nowych, tanich i łatwo dostępnych katalizatorów reakcji chemicznych, prowadzących do otrzymania ich użytecznych pochodnych. Przydatność mikroorganizmów w biotechnologii jest oceniana według kilku parametrów m.in. wydajności i szybkości tworzenia się produktu spełniającego określone kryteria czystości, szybkości wzrostu drożdżów, warunków wzrostu oraz wymagań pokarmowych i środowiskowych.

Celem prezentowanych badań było otrzymanie głównych flawonoidów występujących w chmielu¹ (Schemat. 1) oraz ich wybranych pochodnych² a następnie poddanie ich badaniom skringowym z udziałem żywych kultur drożdży, grzybów strzępkowych oraz bakterii.

Powyższe doświadczenia są elementem cyklu badań nad zagospodarowaniem wychmielin, które wciąż stanowią trudny do utylizacji produkt odpadowy.³ W pracy zaprezentowane zostaną metody pozyskiwania pochodnych ksantohumolu (1) na drodze klasycznej syntezy chemicznej oraz biotransformacji.



Schemat 1. Struktura chemiczna głównych flawonoidów chmielu (*Humulus lupulus*).

Literatura:

- [1] M. Anioł, K. Szymańska, A. Żołnierczyk, *Tetrahedron*, **2008**, 64, 9544 - 9547.
- [2] E. V. Stoyanov, Y. Champavier, S. Alain, Basly, J-P, *Bioorg Med Chem Lett.*, **2002**, 12, 2685 - 2688
- [3] K. Hoffmann, M. Huculak-Maczka, J. Hoffmann, *Przem. Chem.*, **2012**, 91, 754 - 757.

Reakcje multikomponentowe – atrakcyjne narzędzie w syntezie złożonych połączeń organicznych

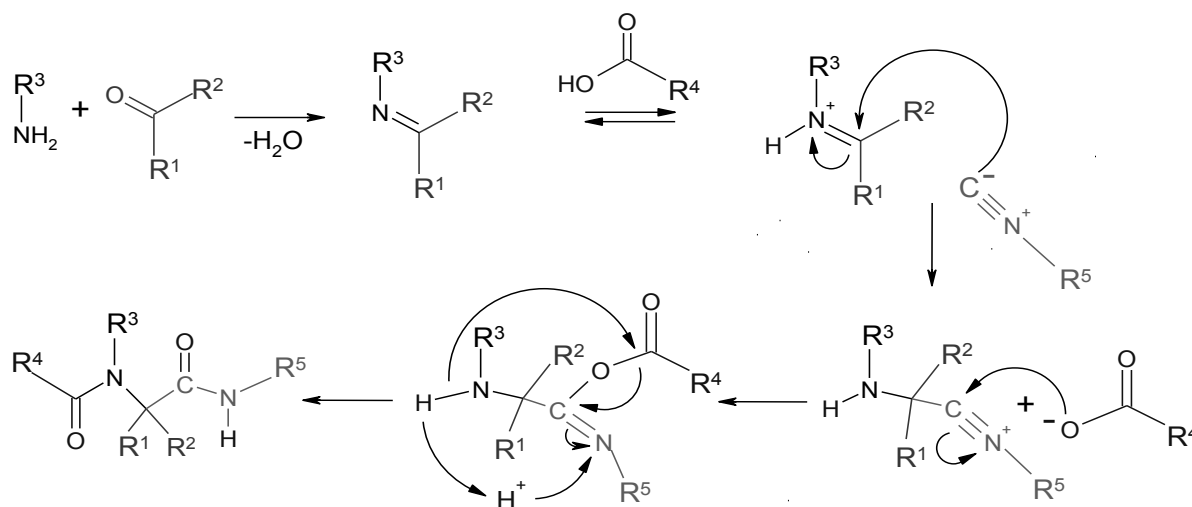
Monika Zając

Uniwersytet Przyrodniczo-Humanistyczny w Siedlcach, Instytut Chemii

W ostatnich latach coraz większą rolę w syntezie organicznej zaczęły odgrywać reakcje multikomponentowe. Są to przekształcenia, w których bierze udział więcej niż dwa reagenty równocześnie, a większość atomów znajdujących się w cząsteczkach substratów, znajduje się także w produkcie.^[1,2] Substraty reagują ze sobą w ściśle określonej kolejności, dając selektywnie produkty końcowe.

Do bardziej znanych reakcji multikomponentowych należą: (1) reakcja Ugi, (2) reakcja Biginelli, (3) reakcja Passerini, (4) synteza Streckera, (5) reakcja Bucherera-Bergsa, (6) synteza Hantzcha pochodnych pirydyny, (7) reakcja Mannicha, (8) reakcja Gewalda. Dzięki nim otrzymuje się: związki polipeptydo-podobne, związki β -aminokarbonylowe, pochodne pirymidyny, pochodne pirydyny, pochodne α -aminokwasów, całkowicie podstawione pochodne tiofenu, itd.

W trakcie wystąpienia zostaną zaprezentowane poszczególne reakcje multikomponentowe i ich możliwości wykorzystania. Przykład jednej z bardziej znanych reakcji multikomponentowych przedstawia Schemat 1.



Schemat 1. Reakcja Ugi

Literatura:

[1] A. Dömling, I. Ugi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2000**, 39, 3168.

[2] A. Dömling, *Org. Chem. Highlights*, **2005**; <http://www.organic-chemistry.org/Highlights/2005/05April.shtm>.

Komunikaty Ustne

Chemia Polimerów
Biopolimerów i Przemysłowa

Głony i perspektywy ich energetycznego wykorzystania

Magdalena Gos

Uniwersytet Marii Curie - Skłodowskiej w Lublinie

Zapewnienie możliwości funkcjonowania kilkumiliardowej populacji ludzi wymusza coraz intensywniejszy rozwój produkcji przemysłowych, rolnictwa, transportu itp. Wszystkie te dziedziny życia wymagają coraz większych nakładów energii. Po II Wojnie Światowej nastąpił szybki wzrost światowego zużycia energii. Szczególnie szybko wzrastało zużycie tradycyjnych źródeł energii, czyli ropy naftowej i gazu ziemnego. Można zatem stwierdzić, że w światowej gospodarce ukształtował się model funkcjonowania uzależnionego od dostępności ropy naftowej i gazu ziemnego, z jednoczesnym odchodzeniem od węgla kamiennego, który był wcześniej jednym z głównych czynników rozwoju gospodarki. Intensywne wykorzystywanie konwencjonalnych źródeł energii pociągnęło za sobą wiele negatywnych skutków dla środowiska nie tylko lokalnego, ale i globalnego.

Z racji nierównomiernego rozlokowania w skorupie ziemskiej tradycyjnych surowców energetycznych tylko nieliczne państwa mogły rozwijać się osiągając przy tym szybki wzrost gospodarczy. Z biegiem lat rosło zapotrzebowanie i wydobywanie surowców kopalnych, a co za tym idzie zmniejszają się zasoby tradycyjnych źródeł energii na Ziemi.^[1]

W odpowiedzi na to "zjawisko" niemal każde z państw o rozwiniętej gospodarce zajęło się poszukiwaniami alternatywnych źródeł energii. Jednym z takich źródeł jest biomasa i otrzymywane z niej biopaliwa. Daje to wielkie nadzieje państwom, które nie posiadają żadnego zaplecza energetycznego i do tej pory były całkowicie uzależnione od kupna konwencjonalnych źródeł energii.

Z ekonomicznego punktu widzenia nigdy nie staniemy w obliczu problemu wyczerpania surowców, ponieważ zawsze impuls cenowy spowoduje znalezienie odpowiedniej alternatywy, np. biopaliw.^[2] Jednym ze źródeł biopaliw mogą być glony (algi). Dzięki procesom technologicznym mogą być surowcem do pozyskiwania energii tworząc nowy kierunek rozwoju energetyki odnawialnej, która wykorzystuje roślinność wodną. Wyprodukowana w ten sposób biomasa poddawana jest procesowi wytwarzania biopaliwa płynnego.

Literatura:

- [1] a) C. Bocheński, A. Bocheńska, *Motrol*, **2008**, 10, 23-30; b) K. Chojnacka, *Przemysł Chemiczny*, **2009**, 88, 414-418; c) B. Igliński, R. Buczkowski, G. Piechota, *Przemysł Chemiczny*, **2011**, 90/6, 1186-1190; d) W. Kotowski, E. Konopka, *Energia Gigawat*, **2009**, 2-3, 1-5.
- [2] M. Krzemieniewski, M. Dębowski, M. Zieliński, *Czysta Energia, Glony jako alternatywa dla lądowych roślin energetycznych*, Wyd. UWM, Olsztyn, **2009**, str. 3-11.

Synteza i właściwości kopoliestrów blokowych zawierających segmenty poli(kwasu mlekowego)

Anna Kundys, Andrzej Plichta, Anita Józwiak, Zbigniew Florjańczyk,
Maciej Dębowski, Paulina Lisowska, Agnieszka Zychewicz
Wydział Chemiczny Politechniki Warszawskiej, Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa
e-mail: akundys@ch.pw.edu.pl

Celem pracy było otrzymanie kopolimerów triblokowych zawierających segmenty poli(kwasu mlekowego) z wykorzystaniem dihydroksylowych poliestrów kondensacyjnych, zarówno alifatycznych jak i alifatyczno-aromatycznych, a następnie użycie ich jako plastyfikatorów lub modyfikatorów udarności polilaktydu (PLA).

Poliestry zsyntetyzowano na drodze dwustopniowej polikondensacji pomiędzy diestrem (adypinian dimetylu, tereftalan dimetylu), węglanem (węglan dimetylu) oraz diolami (1,3-propanodiol, 1,4-butanodiol) w odpowiednim stosunku. Kopoliestry, o ciężarze cząsteczkowym w zakresie 1000-15000, zostały użyte jako inicjatory polimeryzacji z otwarciem pierścienia laktydu. Reakcje prowadzone były w masie, w temperaturze 190°C przez 3h. Katalizatorem reakcji był 2-etyloheksanian cyny (II). Analizy ^1H NMR oraz MALDI ToF pokazały, że otrzymane produkty są mieszaniną kopolimeru blokowego, liniowego PLA oraz produktów cyklicznych. Zostało również udowodnione, że proces transestryfikacji, w warunkach prowadzenia reakcji, nie zachodzi. Ze względu na brak sygnałów pochodzących od grup końcowych inicjatora w produkcie, można stwierdzić, że wszystkie grupy hydroksylowe makroinicjatorów wzięły udział w inicjacji. Analiza termiczna potwierdziła, że układy w których środkowy segment stanowił poliester alifatyczny są mieszalne z PLA i na termogramie obserwowano jedną temperaturę zeszklenia. Polimery triblokowe zawierające w swojej strukturze poliestry alifatyczno-aromatyczne charakteryzowały się dwoma temperaturami zeszklenia i są tylko częściowo mieszalne z PLA. Podczas prezentacji zostaną również przedstawione wyniki badań mechanicznych przeprowadzone za pomocą maszyny wytrzymałościowej Instron.

Niniejsza praca jest współfinansowana przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego, projekt „Program Rozwojowy Politechniki Warszawskiej” realizowany przez Centrum Studiów Zaawansowanych.

Modyfikacja powierzchni polieteroeteroketonu (PEEK) plazmą

Diana Rymuszka

Katedra Chemii Fizycznej – Zakład Zjawisk Międzyfazowych, Wydział Chemii,

Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, pl. Marii Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin

Właściwości powierzchniowe ciał stałych odgrywają istotną rolę w wielu procesach zachodzących w naturze, życiu codziennym, rolnictwie i przemyśle. Często jednak konieczna jest zmiana właściwości hydrofilowo-hydrofobowych powierzchni. Coraz większą popularnością cieszy się modyfikacja powierzchni przy użyciu plazmy.^[1] Materiałami będącymi obiektem tego typu badań są często polimery, których powierzchnie aktywuje się przy zastosowaniu plazmy Ar, He, O₂, N₂, powietrzem lub rzadziej CO₂.^[2,3]

Celem modyfikacji polimerów plazmą jest między innymi: wytworzenie specjalnych grup funkcyjnych mogących oddziaływać specyficznie z innymi grupami, zmiana charakteru i morfologii powierzchni, eliminacja zanieczyszczeń, wytworzenie usieciowania^[4]. Z medycznego punktu widzenia bardzo ważnym polimerem jest polieteroeteroketon (PEEK), który stosuje się jako implanty – protezy przeznaczone dla odcinka szyjnego, piersiowego i lędźwiowego. Niestety posiadają one stosunkowo niską wytrzymałość mechaniczną w porównaniu do materiałów metalicznych, co często ogranicza ich zastosowanie. W związku z tym dąży się do odpowiedniej modyfikacji PEEK przez naniesienie warstewki tytanu oraz zmianę charakteru oddziaływań powierzchniowych, np. plazmą w celu polepszenia jego biokompatybilności.

Celem badań było określenie zwilżalności i właściwości energetycznych powierzchni PEEK przed i po aktywacji plazmą powietrzną. Wykonano pomiary wstępujących i cofających kątów zwilżania wody, formamidu i diiodometanu. Na ich podstawie obliczono całkowitą swobodną energię powierzchniową z histerezy kątów zwilżania cieczy próbnych (CAH) oraz składowe swobodnej energii powierzchniowej z podejścia kwasowo-zasadowego (LWAB)^[5-7]. Wyznaczone wartości oddziaływań dyspersyjnych i polarnych kwasowo-zasadowych pozwoliły na oszacowanie hydrofilowo-hydrofobowych zmian powierzchni PEEK przed i po aktywacji plazmą. Z przeprowadzonych badań wynika, że po działaniu plazmy występują zmiany zwilżalności, swobodnej energii powierzchniowej oraz topografii, co wynika ze wzrostu polarnego, bardziej hydrofilowego charakteru powierzchni. Jednak efekt działania plazmy nie jest trwały i zanika w czasie.

Literatura:

- [1] H.Jung, B. Gweon, D.B. Kim, W. Choe, *Plasma Process. Polym.* **2011**, 8, 535–541.
- [2] M.D. Barankin, E.Gonzalez II, S.B. Habib, L. Gao, P.C. Guschl, R.F. Hicks, *Langmuir* **2009**, 25, 2495–2500.
- [3] F. Luthon, F. Clément, *Conference Proceeding: Int. Conf. on Automation, Quality & Testing, Robotics, AQTR'06, Cluj-Napoca Romania*, **2006**, 1–6.
- [4] M. Bryjak, T. Janecki, I. Gancarz, K. Smolińska, *Wykłady Monograficzne i Specjalistyczne*, Toruń, **2009**, 64–79.
- [5] E. Chibowski, R. Perea-Carpio, A. Ontiveros-Ortega, *J. Adhesion Sci Technol.* **2002**, 16, 1367–1404.
- [6] E. Chibowski, *Adv. Colloid Interface Sci.* **2003**, 113, 121–131.
- [7] C. J. van Oss, R. J. Good, M. K. Chaudhury, *Langmuir* **1988**, 4, 884–891.

Otrzymywanie nanosfer polilaktydowych zawierających substancje aktywne

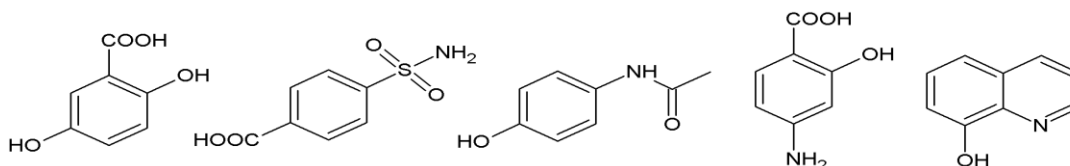
Ilona Warych, Agnieszka Gadomska, Paweł Ruśkowski, Ludwik Synoradzki
Politechnika Warszawska, Wydział Chemiczny, Laboratorium Procesów Technologicznych, ul. Noakowskiego 3, 00 – 664 Warszawa

Odnotowany na przełomie ostatnich dziesięcioleci wzrost zachorowalności na tzw. „choroby cywilizacyjne” wpłynął na poszukiwanie nowych systemów leków o kontrolowanym czasie uwalniania substancji aktywnej – Drug Delivery System (DDS). Opracowano wiele postaci takich leków, m.in. mikrosfery i kapsułki, które są dostępne komercyjnie.^[1] Inną formą DDS, nad którą trwają intensywne badania, są nanosfery.

Polilaktyd jest alifatycznym poliestrem, otrzymywanym z surowców odnawialnych, całkowicie biodegradowalnym oraz biogodnym.^[2] Właściwości te sprawiają, że jest materiałem powszechnie wykorzystywanym do zastosowań biomedycznych, m.in. w chirurgii, ortopedii czy farmacji.

Zbadano proces enkapsulacji substancji aktywnych metodą emulsyjną typu olej/woda (o/w). Przeprowadzono enkapsulację pięciu substancji aktywnych: 4-acetamidofenolu, kwasu 4-aminosalicylowego, 8-hydroksychinoliny, kwasu 4-aminobenzenosulfonowego, kwasu 2,5-dihydroksybenzoowego.

W badaniach określano wpływ temperatury (0 – 50°C), ciężaru cząsteczkowego polilaktydu (13 000 – 40 000), rodzaju użytego stabilizatora (PVA 4_88 i PVA 18_88) oraz szybkości mieszania (600 i 1200 min⁻¹) na rozmiar otrzymanych sfer polilaktydowych. Wielkości otrzymanych cząstek oznaczono metodą DLS (Dynamic Light Scattering).



Rysunek 1. Wzory strukturalne wykorzystanych substancji aktywnych (kolejno): kwas 2,5-dihydroksybenzoowy, kwas 4-aminobenzenosulfonowy, 4-acetamidofenol, kwas 4-aminosalicylowy, 8-hydroksychinolina.

Literatura:

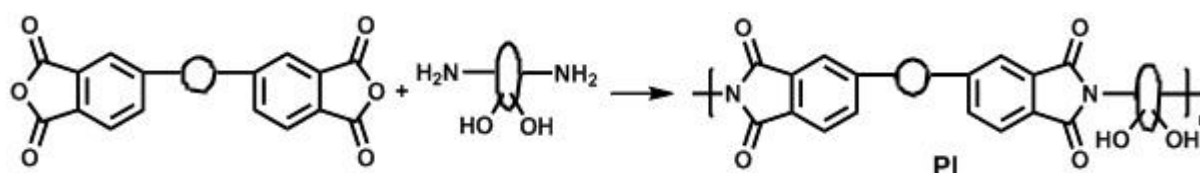
- [1] A. C. Albertsson, I. K. Varma, *Biomacromolecules*, Vol.4, **2003**, No. 6, 1466 – 1486.
- [2] Y. Zhao, Z. Wang, J. Wang, H. Mai, B. Yan, F. Yang, *J. of Appl. Polym. Sci.*, Vol.91, **2004**, No. 4, 2143 –2150

Modyfikacja poliimidów stosowanych jako materiały membranowe do wydzielania CO₂ z mieszanin gazowych

Magdalena Wójtowicz, Eugenia Grabiec, Aleksandra Wolińska-Grabczyk

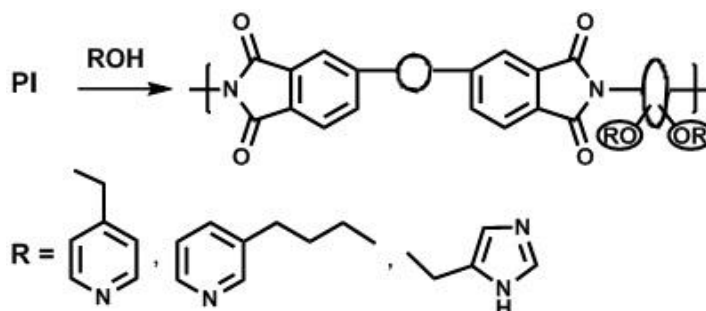
Centrum Materiałów Polimerowych i Węglowych Polskiej Akademii Nauk, Zabrze,
Polska

Prowadzone badania mają na celu uzyskanie nowych poliimidów przeznaczonych do otrzymywania membran o korzystnych parametrach transportowych w procesach separacji gazów. Poliimidy syntetyzowane są w reakcji aromatycznych diamin z grupami OH z różnymi dibezwodnikami. Pierwsze wyniki uzyskano dla poliimidu otrzymanego w wyniku reakcji 3,3'-dihydroksybenzydyny i dibezwodnika 4,4'-bisfenylowego A.



Schemat 1. Synteza poliimidów (PI)

Polimer ten poddawano następnie modyfikacji na drodze reakcji Mitsunobu^[1] wprowadzając do łańcucha poliimidu odpowiednie grupy funkcyjne.



Schemat 2. Post-modyfikacja poliimidów

Stopień podstawienia grup OH określano na podstawie danych ze spektroskopii NMR. Strukturę molekularną zsyntetyzowanego poliimidu oraz produktów reakcji Mitsunobu potwierdzono za pomocą spektroskopii ¹H NMR i FTIR. Właściwości termiczne otrzymanych polimerów charakteryzowano stosując techniki DSC i TGA. Badania permeacji CO₂ i N₂ prowadzono wykorzystując posiadane stanowisko membranowe. Stwierdzono, że rodzaj użytego do modyfikacji alkoholu ma istotny wpływ na właściwości fizyczne i permeacyjne otrzymanych poliimidów. Największy wpływ zaobserwowano w przypadku wprowadzenia 4-pirydynometanolu do łańcucha poliimidu. Zarejestrowano siedmiokrotny wzrost przepuszczalności CO₂ przy jednoczesnym dwukrotnym wzroście selektywności CO₂/N₂.

Literatura:

[1] K.C. Kumara Swamy, N.N. Bhuvan Kumar, E. Balaraman, K.V.P. Pavan Kumar, *Chem. Rev.*, **2009**, 109, 2551–2651.

Kommunikaty Ustne

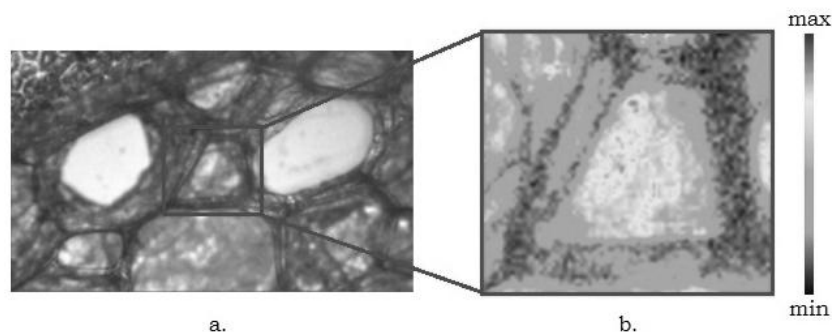
Sekcja Interdyscyplinarna

Mikroskop Ramana jako narzędzie do badania struktury roślinnych ścian komórkowych owoców i warzyw

Monika Chylińska, Monika Szymańska-Chargot, Artur Zdunek
Instytut Agrofizyki im. Bohdana Dobrzańskiego Polskiej Akademii Nauk,
ul. Doświadczalna 4, 20-290 Lublin
m.chylinska@iapan.lublin.pl

Roślinne ściany komórkowe zbudowane są z różnego rodzaju polisacharydów: celulozy, hemiceluloz oraz pektyn. Pozostałe komponenty ścian komórkowych to białka strukturalne, związki mineralne oraz fenolowe.^[1] Ich skład procentowy oraz rozłokowanie poszczególnych składników zależy od rodzaju badanej tkanki, jej stopnia dojrzałości, czy też okresu przechowywania. Parametry te mają wpływ na mechanikę i właściwości tkanki roślinnej, co z kolei bezpośrednio wpływa na jakość owoców i warzyw w kontekście ich użyteczności konsumenckiej oraz przemysłowej.^[2]

Mikroskop Ramana jest jednym z narzędzi za pomocą, którego możliwe jest badanie przestrzennego rozłokowania poszczególnych biopolimerów składających się na ścianę komórkową. Mikrospektroskopia Ramana pozwala na uzyskiwanie „chemicznego” obrazu tkanki i porównanie go z obrazem mikroskopowym, bez czasochłonnej i skomplikowanej preparatyki próbek (np. ekstrakcji poszczególnych substancji, barwienia tkanki)^[3].



Schemat 1. a.) Obraz mikroskopowy tkanki pomidora, wym. 200x225µm, b.) Obraz Ramana rozłokowania polisacharydów w ścianie komórkowej pomidora, przy 2414 cm⁻¹

W pracy chcę przedstawić metodykę pomiarów przy użyciu mikroskopu Ramana oraz omówić wybrane obrazy Ramana otrzymane dla tkanki roślinnej.

Literatura:

- [1] L. Taiz, E. Zeiger, *Plant Physiology, Third Edition* ; Publisher: Sinauer Associate, **2002**, 317-319.
- [2] G. Agoda-Tandjawa, S. Durand, C. Gaillard, C. Gernier, J.L. Doublier, *Carbohydrate Polymers*, **2012**, 90, 1081-1091.
- [3] N. Gierlinger , M. Schwanninger , *Plant Physiology*, **2006**, 4, 1246-1254.

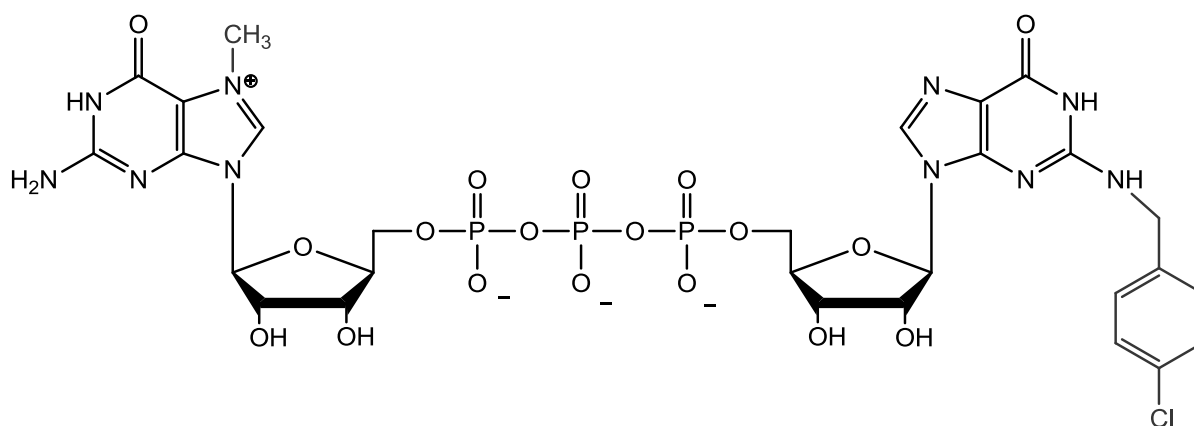
Synteza 5',5'-trifosforanu P¹-N²-(p-chlorobenzyl)-7-metylo-P³-ganozyny – dinukleotydowego analogu 5' końca mRNA

Adrian Fabisiak, Karolina Piecyk, Marzena Jankowska-Anyszka

*Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, Pasteura 1, 02-089 Warszawa,
Zakład Chemii Organicznej, Pracownia Chemii Biomolekuł*

Wszystkie organizmy eukariotyczne oraz większość wirusów posiada na końcu 5' każdej cząsteczki swojego mRNA (informacyjny RNA) specyficzną strukturę znaną powszechnie jako kap. Składa się on z 7-metyloguanozyny połączonej nietypowym dla kwasów nukleinowych mostkiem 5'5'-trifosforanowym z kolejnym nukleotydem. Wyjątkowe funkcje pełnione przez kap powodują, że stanowi on niezwykle ciekawy obiekt badań biochemicznych. Dominującą rolę monometyloguanozyno kapu (MMG-kap) jest jego udział w procesie inicjacji translacji, gdzie oddziałując z białkiem eIF4E limituje cały proces biosyntezy białka. W trakcie wieloletnich badań nad kapem syntetyzowano jego pochodne zawierające modyfikacje zarówno w obrębie zasad, cukru, jak i wiązań fosforanowych. Badania te wniosły nieoceniony wkład do poznania mechanizmu inicjacji translacji oraz wykazały, że modyfikacje kapu mogą mieć znaczący wpływ na przebieg i kierunek tego procesu co stwarza ogromne możliwości kontrolowania przebiegu biosyntezy białek.

W trakcie wystąpienia zostaną przedstawione wyniki badań nad uzyskaniem przykładowego, zmodyfikowanego analogu monometyloguanozyno kapu. Opisana zostanie droga syntezy tytułowego związku oraz konsekwencje i możliwości jakie niosą za sobą modyfikacje 5'końca łańcucha mRNA.



Rysunek 1. 5'5'-trifosforan P¹-N²-(p-chlorobenzyl)-7-metylo-P³-ganozyny

Wpływ nanocząstek srebra na efekt rezonansu ramanowskiego w wodzie

Paulina Filipczak^{a,b}, Marcin Kozanecki^a

^aKatedra Fizyki Molekularnej Politechniki Łódzkiej, Żeromskiego 16, 95-924 Łódź;

^bStudenckie Koło Naukowe Nanotechnologów NANO, Wydział Chemiczny Politechniki Łódzkiej; paulina.filipczak.nano@gmail.com

Efekt rezonansu ramanowskiego jest zjawiskiem silnego wzmocnienia sygnału ramanowskiego danej próbki i ściśle zależy od długości fali wiązki wzbudzającej. Zjawisko to pojawia się kiedy przypadkowa fala elektromagnetyczna oddziałuje nie tylko z wibracyjnym ale także elektronowym stanem molekuly. Zjawisko to zostało zaobserwowane dla wielu związków organicznych oraz nieorganicznych.

Efekt rezonansu ramanowskiego w wodzie został przedstawiony przez Pastorczaka *et al.*^[1] Polaryzacyjne widma Ramana pokazują, że stosunek intensywności dwóch głównych pasm przy 3200 i 3400 cm⁻¹ (przypisanych odpowiednio: silnym i luźnym wiązaniom wodorowym) jest zależny od długości fali wiązki wzbudzającej. Pokazano również, że efekt rezonansu ramanowskiego w wodzie wynika z supramolekularnej struktury wody.

Nanocząstki metali (srebro, złoto) znalazły zastosowanie w powierzchniowo wzmocnionej spektroskopii Ramana (SERS). Znaczący wzrost sygnału zaobserwowano dla wielu organicznych cząsteczek zaadsorbowanych na rozwiniętej powierzchni metalu zwrócił uwagę na SERS, jako bardzo czułą technikę analityczną pozwalającą na analizę pojedynczej molekuly. Z tego powodu technika SERS jest chętnie używana w interesujących badaniach z dziedziny medycyny, biologii, biochemii i krystalografii.^[2]

W prezentacji zostaną zaprezentowane badania nad efektem rezonansu ramanowskiego wodnych roztworów nanocząstek srebra (AgNPs) zsyntetyzowanych na podstawie pracy Frank *et al.*^[3] Badania obejmują wpływ roztworów AgNPs na wibracyjne widmo wody. Dodatkowo, zostanie omówiony wpływ rozmiaru AgNPs oraz temperatury na zjawisko rezonansu.

Literatura:

[1] M. Pastorczak, M. Kozanecki, J. Ulański *J. Phys. Chem. A*, 112,43, **2008**, 10705-10707.

[2] E. C. Le Ru, E. Blackie, M. Meyer, and P. G. Etchegoin, *J. Phys. Chem. C*, 111, **2007**, 13794 - 13803.

[3] A. J. Frank, N. Cathcart, K. E. Maly, V. Kitaev, *Journal of Chemical Education* 87, **2010**, 1098 - 1101.

Muchomor w tabletkach? Czyli o leczniczym zastosowaniu układu izooksazol-3-olowego

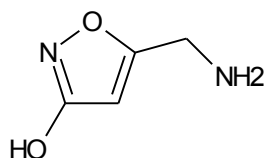
Tomasz Klucznik

*Politechnika Gdańska, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Organicznej
SSOGPTChem Hybryda*

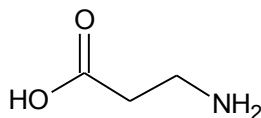
Muchomor czerwony w powszechnej świadomości funkcjonuje jako symbol trucizny. Jest to szczególnie błędny stereotyp, który pojawił się dopiero w XIX w.

W skład muchomora czerwonego (*Amanita muscaria*) wchodzi szereg alkaloidów i barwników, zawierających układ izooksazol-3-olowy. Poznanie mechanizmu ich działania psychoaktywnego, pozwoliło zaprojektować leki przeciwko takim schorzeniom jak np. epilepsja.

W niniejszej prezentacji zaprezentuję mechanizm psychoaktywnego działania muchomora czerwonego, oraz wykorzystanie tego mechanizmu w sterowaniu neuroreceptorami GABAergicznymi.



Schemat 1. a) muscimol



b) GABA

Literatura:

- [1] D. Michelot, L. M. Melendez-Howel, *Mycol. Res.*, **2003**, 107 (2): 131–146.
- [2] M. Jansen, H. Rabe, A. Strehle, S. Dieler, F. Debus, G. Dannhardt, M. H. Akabas, H. Lüddens, *J. Med. Chem.*, **2008**, 51, 4430–4448.

Antybiotyki kontra bakterie przez pryzmat dynamiki molekularnej

Katarzyna Kulczycka-Mierzejewska

*Międzywydziałowe Indywidualne Studia Doktoranckie w zakresie nauk
Matematyczno-Przyrodniczych*

Antybiotyki to grupa leków głównie antybakteryjnych, z którą każdy spotkał się przynajmniej raz, choć nie wszystkie takie spotkania były w pełni świadome. Ciągłe rosnąca oporność bakterii na współcześnie znane leki jest wynikiem ich nierozważnego stosowania zarówno przez medyków, jak i weterynarzy, ale również niestosowania się do lekarskich zaleceń przez rzeszę pacjentów. Bakteria MRSA, nazywana często superbakterią, zabija w Stanach Zjednoczonych co roku więcej osób, niż HIV i AIDS. Wobec powyższego, wspomniana rosnąca oporność stała się głównym czynnikiem spędzającym sen z powiek naukowcom pracującym nad nowymi lekami.

Linkozamidy to antybiotyki wiążące się do dużej jednostki rybosomu (50S) i blokujące syntezę białek bakteryjnych. Mutacja miejsca wiązania antybiotyku jest jednym z częściej wykorzystywanych przez bakterie sposobów obrony przed antybiotykami. Obecnie w Protein Data Bank dostępne są trzy struktury klindamycyny (jednego z linkozamidów) związanej z rybosomem.^{a,b,c} Celem moich badań jest porównanie dynamicznych właściwości miejsca wiązania klindamycyny ze zmutowanym (A2058G) oraz natywnym rybosomem. Pozwoli to zrozumieć, dlaczego ta zmiana uniemożliwia wiązanie się antybiotyku.

Aby osiągnąć swój cel, wykonałam symulacje pełnoatomowej dynamiki molekularnej używając programu NAMD.^d Symulowany układ zbudowałam wycinając otaczający klindamycynę fragment rybosomu ze struktury 3OFZ. Następnie układ został zneutralizowany poprzez dodanie 228 jonów potasu oraz otoczony wodą.

Literatura:

[1] a) F. Schlunzen, R. Zarivach, J. Harms, A. Bashan, A. Tocilj, R. Albrecht, A. Yonath, F. Franceschi, *Nature*, **2001**, 413, 814–821; b) D. Tu, G. Blaha, P.B. Moore, and T.A. Steitz, *Cell*, **2005**, 121(2), 257–270; c) Jack A. Dunklea, Liqun Xiongb, Alexander S. Mankinb, and Jamie H.D. Catea, *PNAS*, **2010**, 107(40), 17152–17157; d) James C. Phillips, Rosemary Braun, Wei Wang, James Gumbart, Emad Tajkhorshid, Elizabeth Villa, Christophe Chipot, Robert D. Skeel, Laxmikant Kale, and Klaus Schulten, *J. Comp. Chem.*, **2005**, 26, 1781–1802.

Efekt polaryzacji elektrody bramki w organicznych tranzystorach z efektem polowym

Adam Łuczak^{a,b,c}, Jarosław Jung^a

^a Katedra Fizyki Molekularnej, Wydział Chemiczny PŁ

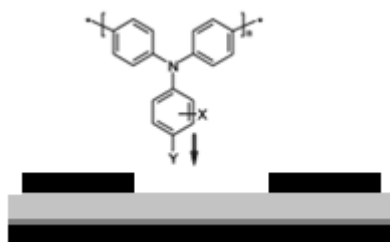
^b Studenckie Koło Naukowe Nanotechnologów "Nano"

^c Koło Naukowe Chemików Wydziału Chemicznego "Trotyl"

adamlucz@gmail.com

W ostatnich latach notowany jest dynamiczny rozwój elastycznej elektroniki wielko-powierzchniowej (z j. ang. Flexible Organic Large Area Electronic – FOLAE). Kluczowymi elementami składowymi większości urządzeń FOLAE są organiczne tranzystory z efektem polowym (z j. ang. Organic Field Effect Transistor - OFET).

Celem pracy jest przedstawienie wpływu długotrwałej polaryzacji elektrod tranzystora OFET na jego charakterystyki prądowo-napięciowe. W badanych tranzystorach, aktywną warstwę półprzewodnika organicznego stanowiła cienka warstwa politriaryloaminy (PTAA),^[1] która charakteryzuje się przewodnictwem dziurowym (półprzewodnik typu *p*). Warstwa ta została naniesiona metodą wylewania na wirujące podłoże, którym był krzem z cienką, wierzchnią warstwą ditlenku krzemu. Podłoże krzemowe stanowiło elektrodę bramki, a metalowe elektrody źródła i drenu naparowano próżniowo na powierzchnię PTAA.



Rysunek 1. Wzór strukturalny meru politriaryloaminy, wraz ze schematem tranzystora.

W tak przygotowanych tranzystorach zmierzono wyjściowe i przejściowe charakterystyki prądowo-napięciowe. Następnie elektrody drenu i źródła zostały ze sobą połączone, a pomiędzy elektrodę bramki i źródła-drenu przyłożono stałe napięcie o wartości -20 V. Co 15 minut mierzono charakterystyki przejściowe, z których wyliczono napięcie progowe tranzystora. Zaobserwowano zmniejszanie się tego napięcia od wartości większych od zera do wartości ujemnych. Efekt ten jest zgodny z doniesieniami literaturowymi,^[1] według których powolne pułapkowanie nośników ładunku w warstwie przy powierzchni pomiędzy półprzewodnikiem PTAA a izolatorem SiO₂ powoduje trwałą polaryzację dielektryka wpływającą na wielkość napięcia progowego.

Literatura:

[1] G. J. Mathijssen, Martijn Kemerink, Abhinav Sharma, Michael Cölle, Peter A. Bobbert, René A. J. Janssen, and Dago M. de Leeuw, *Adv. Mater.* **2008**, 20, 975-979.

Nowe sole superkwasu HSO_3F – synteza i charakteryzacja

Tomasz Michałowski^a, Wojciech Grochala^{a,b}, Zoran Mazej^c

^a Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, Pasteura 1, 02-093 Warszawa, Poland

^b CeNT, Uniwersytet Warszawski, Żwirki i Wigury 93, 02-089 Warszawa, Poland

^c Institute "Jozef Stefan", Jamova 39, 1000 Ljubljana, Slovenia

Superkwasy i ich pochodne mają zastosowań w przemyśle i praktykach akademickich. Mimo to, po ponad 50 latach badań wciąż spora część ich chemii jest niepoznana [1]. Ze względu na wysoką reaktywność odczynników konieczne jest stosowanie specjalnej aparatury przy pracy z tymi związkami, co może stanowić jeden z czynników limitujących postęp w tej dziedzinie.

Superacids and their derivatives have many applications in industry and academic science.

W naszych badaniach skoncentrowaliśmy się na solach kwasu fluorosiarkowego – HSO_3F . Staraliśmy się rozszerzyć bazę znanych związków tego kwasu o sole mieszanokationowe i mieszanoanionowe, odpowiednio przede wszystkim sole $\text{M(I)}/\text{Ag(II)}$ i na przykład mieszany siarczan-fluorosiarczan srebra [2]. Wszystkie syntezy były prowadzone w środowisku o kontrolowanej atmosferze dzięki zastosowaniu komór rękawicowych i profesjonalnej linii fluorowej. Dodatkowo, wcześniej niezbadane proste sole kwasu fluorosiarkowego zostały wytworzone, po czym ich struktury krystaliczne zostały określone [3], [4].

NaSO_3F krystalizuje w komórce heksagonalnej ($\text{P6}_3/\text{mmc}$), co jest sytuacją niespotykaną wśród fluorosiarczanów. Komórka RbSO_3F jest rombową i izostrukturną z KSO_3F (Pnma), podczas gdy TlSO_3F również krystalizuje w układzie rombowym (Pnma) ale jego komórka przypomina tetragonalny CsSO_3F . Powiązany AgSO_3F przybiera jednoskośny układ komórki ($\text{P2}_1/\text{m}$). Co ważne, fluorosiarczany srebra(II) i srebra na mieszanym stopniu utlenienia (I/II) – odpowiednio $\text{Ag}(\text{SO}_3\text{F})_2$ [5] i $\text{Ag(I)}_2\text{Ag(II)}(\text{SO}_3\text{F})_4$ [6], Wykazują ciekawe właściwości magnetyczne

Literatura:

[1] G. Olah, "Crossing Conventional Boundaries in Half a Century of Research", *J. Org. Chem.*, 70 (7): 2413-2429, 2005

[2] T. Michałowski, Z. Mazej and W. Grochala, unpublished results 2012

[3] W. Grochala, M. Ksawery Cyrański, M. Derzsi, T. Michałowski, P. J. Malinowski, Z. Mazej, D. Kurzydłowski, W. Koźmiński, A. Budzianowski, P. J. Leszczyński „Crystal and electronic structure, lattice dynamics and thermal properties of $\text{Ag(I)}(\text{SO}_3)\text{R}$ ($\text{R} = \text{F}, \text{CF}_3$) Lewis acids in the solid state”, *Dalton Trans.*, (41):, 2034-2047, 2012

[4] Michałowski T, Leszczyński PJ, Cyrański M, Dobrzycki Ł, Budzianowski A, Grochala W "The missing crystal structures of fluorosulfates of monovalent cations: $\text{M(I)}\text{SO}_3\text{F}$, $\text{M}=\text{Na}, \text{Rb}$ and Tl ", *J FLUOR CHEM* 40(8): 116-120 2012

[5] P. J. Malinowski, M. Derzsi, Z. Mazej, Z. Jaglicic, P. J. Leszczyński, T. Michałowski, W. Grochala "Silver(II) Fluorosulfate: A Thermally Fragile Ferromagnetic Derivative of Divalent Silver in an Oxa-Ligand Environment", *Eur. J. Inorg. Chem.*, (16): 2499-2507, 2011

[6] T. Michałowski, P. Malinowski, M. Derzsi, Z. Mazej, Z. Jaglicic, P. Leszczyński, W. Grochala " $\text{Ag}_3(\text{SO}_3\text{F})_4$: A Rare Example of a Mixed-Valent $\text{Ag}^{\text{II}}/\text{Ag}^{\text{I}}$ Compound Showing 1D Antiferromagnetism", *Eur. J. Inorg. Chem.*, (16): 2508-2516, 2011

Zastosowanie techniki UPLC/MS do identyfikacji soli pirydyniowych w termolizacie trygoneliny

Marzena Szymańska^{a,b}, Łukasz Piotrowski^a, Bartosz Michałowski^a,

Małgorzata Jakubowska^a, Jan Adamus^a, Andrzej Marcinek^a

^a Międzyresortowy Instytut Techniki Radiacyjnej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka,

ul. Żeromskiego 116, 90-924 Łódź

^b Koło Naukowe „Trotyl”, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka,
ul. Żeromskiego 116, 90-924 Łódź

Zainteresowanie pochodnymi pirydyny, a w szczególności solami pirydyniowymi, związane jest z ich dużym potencjałem terapeutycznym. Kwas nikotynowy wykazuje zdolność regulacji metabolizmu lipidów i lipoprotein, zmniejszając stężenie tzw. „złego cholesterolu”, LDL.^[1] Metabolit amidu kwasu nikotynowego,

1-metylonikotynamid, wykazuje działanie przeciwzapalne^[2] oraz trombolityczne,^[3]

a niedawno pojawiły się doniesienia o działaniu gastroprotekcijnym.^[4]

Bogatym źródłem soli pirydyniowych jest kawa. Trygonelina występująca w ziarnach kawy w warunkach ich wypalania ulega rozkładowi termicznemu.^[5] W miarę rozwoju badań nad mechanizmem dekompozycji termicznej trygoneliny stwierdzono, że produktami jej rozpadu są takie pochodne jak: kwas nikotynowy,

1-metylopirydyna, 1,2-, 1,3-, 1,4-dimetylopirydyna, 1-etylopirydyna oraz ester metylowy trygoneliny.

W celu identyfikacji produktów dekompozycji termicznej trygoneliny wykorzystano technikę ultrasprawną chromatografię cieczową sprzężoną ze spektrometrem mas.

Praca stanowi część projektu „Śródbłonek naczyniowy w chorobach cywilizacyjnych: od badań podstawowych do oferty innowacyjnego leku o działaniu śródbłonkowym” realizowanego w Międzyresortowym Instytucie Techniki Radiacyjnej Politechniki Łódzkiej i sfinansowanego ze środków Unii Europejskiej

z grantu koordynowanego przez JCET, No POIG.01.01.02-00-069/09.

Literatura:

[1] J. McKenney, *Arch .Intern. Med.*, **2004**, 164(7), 697-705.

[2] J. Gębicki, A. Sysa-Jędrzejowska, J. Adamus, A. Woźniacka, M. Rybak, J. Zielonka, *Pol. J.Pharmacol.*, **2003**, 55(1), 109-112.

[3] S. Chłopicki, J. Swies, A. Mogielnicki, W. Buczko, M. Bartus, M. Łomnicka, J. Adamus, J. Gębicki, *Br. J. Pharmacol.*, **2007**, 52(2), 230-239.

[4] T. Brzozowski, P.C. Konturek, S. Chłopicki, Z. Śliwowski, M. Pawlik, A. Ptak-Belowska, S. Kwiecień, D. Drozdowicz, R. Pajdo, E. Słonimska, S.J. Konturek, W.W. Pawlik, *J. Pharmacol. Exp. Ther.*, **2008**, 326(1), 105-116.

[5] S. Casal, M. Oliveira Beatriz, M.A. Ferreira, *Food Chem.*, **2000**, 68(4), 481-485.

Kapsułkowanie diod elektroluminescencyjnych opartych na kopolimerze *para*-fenylenowinylen

Ewelina Wileńska^{a,b,c}, Remigiusz Grykien^a, Ireneusz Głowacki^a

^a Katedra Fizyki Molekularnej, Wydział Chemiczny PŁ

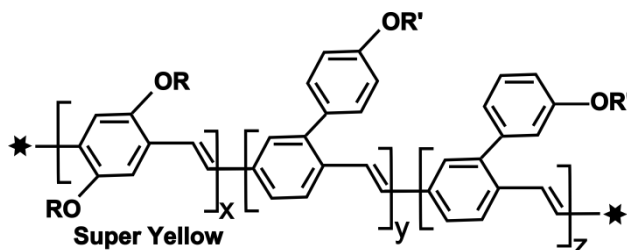
^b Studenckie Koło Naukowe Nanotechnologów NANO

^c ewilenska@gmail.com

Polimerowe diody elektroluminescencyjne (PLED) są atrakcyjne ze względu na możliwość wytwarzania elastycznych, dużych powierzchni emisyjnych, przy użyciu energooszczędnych technik „mokrych”.^[1] PLEDy wytworzone w warunkach normalnych charakteryzują się, przede wszystkim, krótkim czasem życia i niskimi parametrami użytkowymi.^[2] Z tego względu niezbędne jest zabezpieczenie urządzeń przed wpływem czynników zewnętrznych.

Celem pracy było opracowanie skutecznej metody hermetyzacji, czyli zabezpieczenia, wytworzonych urządzeń. Zakres pracy obejmował dobór warunków otoczenia, rozwiązań konstrukcyjnych oraz metody hermetyzacji w celu uzyskania wydajnych i stabilnych diod. Do wytworzenia warstw emisyjnych zastosowano kopolimer *para*-fenylenowinylen o nazwie handlowej „Super Yellow”.

Rysunek 1. Wzór kopolimeru *para*-fenylenowinylen o nazwie handlowej „Super Yellow”



W ramach charakteryzacji wytworzonych urządzeń wyznaczono: charakterystyki prądowo-napięciowe, rozkłady spektralne elektroluminescencji oraz wielkości fotometryczne, takie jak luminancja i współrzędne barwy. Powyższe wyniki pozwoliły dokonać oceny czasu stabilnej pracy diod. Zakres pracy związany z hermetyzacją obejmował zastosowanie różnych metod zabezpieczenia urządzeń z użyciem komercyjnie dostępnych materiałów. Analiza uzyskanych wyników miała na celu wskazanie efektywnej metody zabezpieczenia polimerowych diod elektroluminescencyjnych przed wpływem czynników zewnętrznych.

Literatura:

[1] Ed. M. Jakubowska i J. Sitek, *Drukowana Elektronika w Polsce* Instytut Tele- i Radiotechniczny Warszawa, **2010**, rozdział w monografii: I. Głowacki, *Organiczne diody elektroluminescencyjne: postęp, problemy i perspektywy*, 144-155.

[2] R. Grykien, I. Głowacki, *Inżynieria Materiałowa*, **2011**, 5, 873-878.

Chromatografia jako narzędzie do badań związków kompleksowych

Agnieszka Wronka, Irena Malinowska
Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie

Kompleksy metali z ligandami organicznymi znajdują coraz to szersze zastosowanie zarówno w przemyśle, jak i w medycynie. W swojej naturalnej postaci występują one w stanie stałym, często w formie krystalicznej i to właśnie ta ich postać poddawana jest różnego rodzaju badaniom, na podstawie których można określić skład, strukturę, czy trwałość związku koordynacyjnego. Jednakże w praktyce związki kompleksowe, bardzo często stosowane są w formie roztworów, a także wymagają kontaktu z powierzchniami o różnym charakterze. Ponadto ich zastosowanie w farmacji i medycynie wiąże się z pokonywaniem różnych barier.

Badanie właściwości związków kompleksowych w roztworze jest niezwykle ważne, ale i bardzo trudne. Niewiele ośrodków na świecie zajmuje się tym problemem. Stosując różnego rodzaju odmiany technik chromatograficznych można znaleźć odpowiedzi na wiele pytań dotyczących związków koordynacyjnych:

Czy rodzaj jonu centralnego ma wpływ na właściwości związku koordynacyjnego?

Czy właściwości jonu centralnego są ekranowane przez otaczające go ligandy?

Jak warunki zewnętrzne wpływają na oddziaływania kompleksów z różnymi powierzchniami?

Jak określić deskryptory aktywności biologicznej badanych związków?

Analizie poddano grupę związków koordynacyjnych metali d i f - elektronowych z ligandami organicznymi. Przy pomocy metod chromatograficznych zbadano oddziaływania z różnymi powierzchniami, określono wpływ zewnętrznego pola magnetycznego na odpowiedź chromatograficzną związków, jak również wyznaczono deskryptory aktywności biologicznej porównując je z danymi wyznaczonymi teoretycznie.

Chromatografia okazuje się być idealną metodą dla wszystkich, którzy szukają ekonomicznych metod kontroli jakości, oceny określonej właściwości użytkowej, jak również ewentualnego określenia stopnia i sposobu sfalszowania produktu zawierającego w swym składzie związek koordynacyjny.

Indeks Prezentacji Posterowych

Indeks prezentacji posterowych

- P1 Magda Aniołowska**
Chloropropanole
- P2 Magda Aniołowska**
Metody oznaczania estrów glicydylowych kwasów tłuszczowych w olejach rafinowanych
- P3 Kinga Bar**
Modelowanie rozrzutu mas cząsteczkowych polimerów kondensacyjnych
- P4 Jolanta Bazan**
Próby syntezy 1,2-bis(fosfinoilo-podstawionych)arenów
- P5 Ilona Bęczkowska**
„Inteligentna kartka” a mikrosfery polimerowe
- P6 Magdalena Bielawska**
Zmiany napięcia powierzchniowego wybranych polimerów pod wpływem wodnych roztworów mieszaniny dwóch klasycznych surfaktantów z etanolem
- P7 Katarzyna Bijak**
Synteza i charakterystyka nowych związków luminescencyjnych o potencjalnych zastosowaniach w optoelektronice
- P8 Aleksandra Borkowska**
Analiza pierwiastkowa włosów
- P9 Małgorzata Brodacka**
Badania równowag tautomerycznych 3-amino-4-fenylopirazolonów wykazujących aktywność przeciwbakteryjną
- P10 Brzozowski Marcin**
Dezaktywacja katalizatorów
- P11 Michał Dąbrowski**
Okiem chemika: Złota kaczka, czyli o homeopatii słów kilka
- P12 Anna Maria Dąbrowska**
The effect of tertiary amines on the structure and selectivity of dialkylgallium alkoxides in the polymerization of rac-LA
- P13 Joanna Hynek, Anna Doroz**
Rola technetu w medycynie nuklearnej
- P14 Klaudia Drab, Michał Daszykowski**
Określenie wpływu różnorodnych czynników na zdolność antyoksydacyjną naparów herbaty Rooibos
- P15 Krzysztof Dul**
Zatrucie katalizatora
- P16 Joanna Dziedzic**
Krytyczne stężenie micelizacji wodnych roztworów mieszanin surfaktantów
- P17 Paulina Gacka**
Struktury dwóch p-nitrobenzoiłowych pochodnych kwasu 4-nitro-[1,3]-2-ditiolanoylidenohydrazydowych o potencjalnym działaniu tuberkulostatycznym

Indeks prezentacji posterowych

- P18 Jakub Grynda**
Biologiczne właściwości kadmu
- P19 Kinga Kaczmarska, Sylwia Smarzewska**
Elektroda diamentowa domieszkowana borem
- P20 Anna Kaczoch**
Chemia w miłości
- P21 Monika Kaja**
Zastosowanie modelu hantli do badania właściwości termodynamicznych i strukturalnych cieczy jonowych metodą Monte Carlo
- P22 Anna Karmanowicz**
Wyznaczanie lipofilowości kompleksów metalokarbonylowych stosowanych w badaniach biochemicznych metodą TLC
- P23 Rafał Kluza**
Próbki środowiskowe – jak je ugryźć, czyli ich pobieranie oraz przygotowanie do analizy
- P24 Karina Kocot**
Mikroekstrakcja w oznaczaniu śladowych ilości pierwiastków techniką rentgenowskiej spektrometrii fluorescencyjnej
- P25 Ilona Koćmik**
Synteza analogów 5'-difosforanu posiadających w pozycji N⁷ podstawnik butylowy oraz izobutylowy
- P26 Aneta Kołaczek**
Chemia w lustrze, czyli o zastosowaniach peptydów w kosmetykach
- P27 Jolanta Konieczkowska**
Poliimidy fotochromowe – wpływ sposobu przyłączenia chromoforu na wybrane właściwości fizykochemiczne
- P28 Anna Kopacz**
Indukowana światłem UV synteza nanożeli polimerowych w micelach odwrrotnych
- P29 Ewa Kozłowska**
Gdzie najlepiej pić kawę? Porównanie zawartości kofeiny w kawach dostępnych w popularnych kawiarniach
- P30 B. Krakowska**
Eksploracja danych chromatograficznych opisujących próbki oleju napędowego
- P31 Adam Krzyżak**
Acyłowe pochodne flawonoidów i ich aktywność przeciwutleniająca
- P32 Włodzimierz Kucharek**
Inteligentne materiały elastomerowe - magnetyczne i magnetoreologiczne
- P33 Anna Kundys**
Optymalizacja procesu syntezy liniowych kopoliestrów zawierających bloki polilaktydu
- P34 Marlena Madej**
Nowe (poli)azometyny zawierające grupy tiofenowe
- P35 Wojciech Majchrzak**
Mikrobiologiczna hydroksylacja (+)-β-tujonu w kulturze Absidia coerulea AM 93

Indeks prezentacji posterowych

- P36 Diana Mańko**
Biosurfaktanty drobnoustrojowe jako alternatywa dla klasycznych surfaktantów
- P37 Mateusz Marchel**
AC driven light emitting devices fabricated on interdigitated ITO substrate
- P38 Mariusz Materna**
Pochodne indantronu jako nowe związki półprzewodnikowe dla elektroniki organicznej
- P39 A. Mróz**
Adsorpcja palladu(II) na modyfikowanym SBA-15
- P40 Dawid Myśliwiec**
Zmiany struktury powierzchni komercyjnego tlenku glinu pod wpływem działania wysokiej temperatury
- P41 Beata Nagórniewicz**
Odwrócona mikroemulsja jako "reaktor" do syntezy nanocząstek polimerowych
- P42 Tomasz Olejnik**
Spektroskopia FT-IR/PAS i FT-IR/ATR w badaniach właściwości modyfikowanych aminami mezoporowatych materiałów krzemionkowych
- P43 Marcin Oleszek**
Wodór - Czy jest paliwem przyszłości?
- P44 Marta Orłowska**
Zastosowanie różnych metod detekcji do porównywania fingerprintów ekstraktów roślinnych uzyskanych różnymi metodami
- P45 Joanna Orzeł**
Wyznaczanie zdolności antyoksydacyjnej nalewek alkoholowych
- P46 Justyna Pawlonka**
Synteza i badanie właściwości miedziowych katalizatorów reformingu parowego metanolu
- P47 Bartłomiej Potaniec**
Analiza porównawcza metod oznaczania całkowitej zdolności antyoksydacyjnej związków
- P48 Marta Pytlarczyk**
Badanie procesu diastereoselektywnego deprotonowania pozycji benzyłowej w boranach (2-fosforylo)benzylodifenylfosfin
- P49 Klaudia Rakocz**
Produkty uboczne procesu dezynfekcji wody
- P50 Damian Rosiak**
Związki kompleksowe halogenków rtęci(II) z N-benzoilo-N'-fenylotiomocznikiem
- P51 Monika Roszkowska**
Herosem być - czyli co drzemie w sportowcach?
- P52 Żaneta Rucińska**
Badanie lepkości podczas polimeryzacji L-laktydu
- P53 Michał Sawczyk**
Badanie zawartości toksycznych alkaloidów w muchomorach w zależności od sposobu przyrządzenia
- P54 Małgorzata Sęczkowska, Mateusz Gortat**
Wykorzystanie kwasów organicznych w żywieniu zwierząt monogastycznych

Indeks prezentacji posterowych

- P55 Małgorzata Sęczkowska**
Synteza mezoporowatych materiałów węglowych w obecności polimerów blokowych
- P56 Ewa Sikorska**
Oznaczanie wybranych betain techniką izotachoforezy
- P57 Justyna Stachniuk**
Optymalizacja parametrów separacji elektroforetycznej kwasu foliowego i jego głównych pochodnych
- P58 Aleksandra Stasiak**
Cienkie warstwy PEDOT:PSS do zastosowań w elektronice organicznej
- P59 Monika Stompor, Bartłomiej Potaniec**
Synteza oraz ocena aktywności antyoksydacyjnej wybranych chalkonów
- P60 Szymon Suchodolski**
Nanocząstki magnetyczne w terapii medycznej
- P61 Katarzyna Szewczuk-Karpisz**
Adsorpcja owoalbuminy na powierzchni cząstek tlenku chromu (III) w funkcji pH roztworu
- P62 Agnieszka Szyszkowska, Angelika Kamizela, Dagmara Galas**
Mikotoksyny jako metabolity grzybów pleśniowych
- P63 Dagmara Galas, Angelika Kamizela, Agnieszka Szyszkowska**
Toksyczna rola jonów manganu a organizmy żywe
- P64 Przemysław Urbaniak, Karolina Strąg, Katarzyna**
Owoc Adsorpcja oranżu metylowego na węglu aktywnym
- P65 Greta Utecht, Emilia Obijalska**
Bromki amoniowe pochodne alkaloidów Cinchona jako katalizatory addycji odczynnika Rupperta do α -iminoketonów
- P66 Paulina Walczak**
Enzymatyczny oraz mikrobiologiczny rozdział mieszaniny racemicznej 2-azabicyklo[2.2.1]hept-5-en-3-on
- P67 Marek K. Węclawski**
Novel fused porphyrin with aromatics moiety obtained by intermolecular oxidation - synthesis and optical properties
- P68 Małgorzata Wiącek**
Modyfikacja chemiczna polistyrenu związkami zawierającymi atomy fluoru
- P69 Edyta Wojtczak**
Wpływ stopnia wypalenia kawy na jej całkowitą zdolność antyoksydacyjną
- P70 Paweł Wolski**
Podwójna baza funkcyjna w obliczeniach elektrycznych i magnetycznych właściwości molekularnych
- P71 Agata Worobiec**
Wpływ różnych fotosensybilizatorów na przebieg fotochemicznej addycji alkoholi do ksantohumolu
- P72 Agnieszka Wronka**
Wykorzystanie technik chromatograficznych do badań nad aktywnością biologiczną pochodnych 1,2,4-triazoli

Indeks prezentacji posterowych

P73 Łukasz Wysoczański

Enzymatyczny i mikrobiologiczny rozdział mieszany racemicznej epoksytrycyclicznego- γ -laktonu

P74 Paweł Zieliński

Korzenie włośnikowate jako biokatalizator do transformacji egzogennych związków z grupy flawonoidów i ich pochodnych

P75 Wioletta Ziemnicka

Modelowanie wpływu efektów rozpuszczalnikowych na magnetyczne stałe ekranowania jąder azotu w cząsteczkach azoli

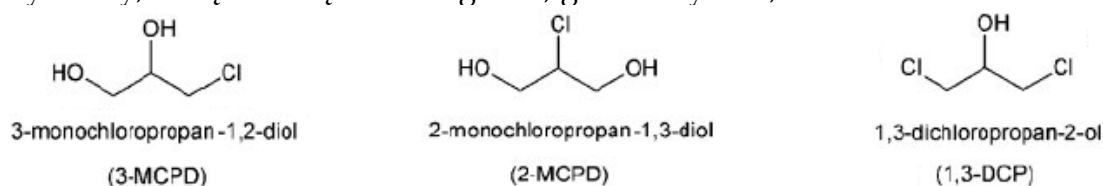
Prezentacje Posterowe

Chloropropanole

Magda Aniołowska, Agnieszka Kita

Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Katedra Technologii Rolnej i Przechowalnictwa

Chloropropanole to grupa chlorowcopochodnych alkoholi alifatycznych uważanych za chemiczne zanieczyszczenia żywności. Do najpopularniejszych należą: 3-monochloropropan-1,2-diol (3-MCPD), 2-MCPD i 1,3-dichlor-2-propanol (1,3-DCP) [Schemat 1]. Doświadczenia na zwierzętach i badania *in vitro* wykazały, że są to związki mutagenne, genotoksyczne, rakotwórcze.^[1]



Schemat 1. Wzory strukturalne najpopularniejszych chloropropanoli.^[1]

Większość procesów technologicznych (np. hydroliza kwasem solnym białek roślinnych) i kulinarnych (pieczenie, grillowanie, obróbka mikrofalowa etc.) stosowanych w przemyśle spożywczym i w gospodarstwach domowych stwarza dogodne warunki tworzenia się tych szkodliwych substancji. W odniesieniu do żywności, za prekursory 3-MCPD uważane są związki lipidowe i chlorowódor. Wyniki badań modelowych sugerują, że 3-MCPD może się tworzyć m.in. z glicerolu i innych alkoholi wielowodorotlenowych (po rozpadzie lipidów), z alkoholu allilowego, chloru (także z NaCl) i podchlorynów zawartych w wodzie wodociągowej, lipidów i fosfolipidów, węglowodanów a także z epichlorohydrin migrujących z torebek do herbaty, filtrów do kawy, osłonek do wędlin, serów i różnych opakowań papierowych.^[2]

Ze względu na potencjalne szkodliwe działanie 3-MCPD na organizm ludzki w 2001 r. Komitet Naukowy ds. Żywności Wspólnoty Europejskiej ustalił dla 3-MCPD Tolerowane Dienne Pobranie (TDI) wynoszące 2 µg/kg masy ciała/dzień.^[3] W krajach Wspólnoty Europejskiej ustalono również maksymalne dopuszczalne poziomy 3-MCPD w żywności.^[4] Natomiast dla 1,3-DCP, uznawanego za związek potencjalnie kancerogeny i genotoksyczny (*in vitro*), a ponadto hepatotoksyczny i wywołujący guzy u szczurów, nie określono dotychczas parametrów bezpieczeństwa

Literatura:

- [1] A. K. K. Rahn, V. A. Yaylayan, *European Journal of Lipid Science and Technology*, **2011**, 113, 323–329.
- [2] M. Habermeyer, S. Guth, G. Eisenbrand, *European Journal of Lipid Science and Technology*, **2011**, 113, 314–318.
- [3] Opinia Komitetu Naukowego ds. Żywności na temat 3-monochloro-propano-1,2-diolu (3-MCPD), będąca uaktualnieniem opinii z 1994 r. (przyjęta w dniu 30 maja 2001 r.).
- [4] Rozporządzenie Komisji (WE) NR 1881/2006 z dnia 19 grudnia 2006 r. ustalające najwyższe dopuszczalne poziomy niektórych zanieczyszczeń w środkach spożywczych.

Metody oznaczania estrów glicydylowych kwasów tłuszczowych w olejach rafinowanych

Magda Aniołowska, Agnieszka Kita

Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Katedra Technologii Rolnej i Przechowalnictwa

Glicydylowe estry kwasów tłuszczowych (GE) powstają m.in. w olejach jadalnych podczas ich rafinacji na etapie dezodoryzacji. Pomimo, że GE nie wykazują udowodnionego niekorzystnego wpływu na zwierzęta i ludzi, zakłada się, że w przewodzie pokarmowym mogą ulegać hydrolizie do wolnego glicydolu – zaliczanego przez IARC do grupy 2A (potencjalnie rakotwórczych dla ludzi).

Innym znanym zanieczyszczeniem żywności, którego prekursorem może być glicydol, jest 3-monochloropropan-1,2-diol (3-MCPD) zaliczany do grupy związków o właściwościach kancerogennych i genotoksycznych [1]. Wykrycie znacznych ilości estrów 3-MCPD w rafinowanych olejach jadalnych spowodowało kilka lat temu wzrost zainteresowania tą grupą niepożądanych substancji w żywności.

Pierwszą metodę oznaczania 3-MCPD z wykorzystaniem GC-MS zaproponowało DGF (Deutsche Gesellschaft für Fettwissenschaft) w 2009 roku. Podczas etapu derywatyzacji, jony chlorkowe obecne w mieszaninie reagowały z wolnym glicydołem, przekształcając go w 3-MCPD [2]. Zjawisko to komplikowało interpretację wyników, ale dostarczyło informacji odnośnie przemian glicydolu i zagrożenia płynącego z obecności GE. Metoda ta została zastąpiona w 2011 r. nowszą procedurą opracowaną przez Kuhlmann, w której zastosowano alkaliczną transestryfikację w dokładnie kontrolowanej niskiej temperaturze [3]. Jednocześnie przystąpiono do prac nad sposobami oznaczania GE.

Analizę GE w olejach rafinowanych z wykorzystaniem LC-MS opracował Masukawa i wsp. [4]. Wykorzystano w niej tryb jonów dodatnich oraz jonizację chemiczną pod ciśnieniem atmosferycznym (APCI). LC-MS pracował w trybie monitoringu wybranych jonów (SIM). W innej metodzie analizę GE prowadzono z zastosowaniem LC-TOF-MS z użyciem elektrorozpylania (ESI) [5].

Becalski i wsp. [6] opracowali metodę opartą na użyciu LC-MS/MS. W metodzie tej wykorzystano technikę analizy stabilnego rozcieńczenia izotopowego (SIDA) do ilościowego oznaczenia pięciu GE: kwasu palmitynowego, stearynowego, oleinowego, linolowego i linolenowego. W metodzie opracowanej przez Dubois dodatkowo oznaczono dwa inne estry kwasu mirystynowego oraz laurynowego [7].

Literatura:

- [1] R. Weisshaar, R. Perz, *Eur J Lipid Sci Technol*, **2010**, 112, 158–165.
- [2] N. Kaze, H. Sato, H. Yamamoto, Y. Watanabe, *J Am Oil Chem Soc*, **2011**, 88, 1143–1151.
- [3] J. Kuhlmann, *Eur J Lipid Sci Technol*, **2011**, 113, 335–344.
- [4] Y. Masukawa, H. Shiro, N. Kondo, N. Kudo, *J Am Oil Chem Soc*, **2011**, 88, 15–21.
- [5] T.D. Haines, K.J. Adlaf, R.M. Pierceall, I. Lee, P. Venkitasubramanian, M.W. Collison, *J Am Oil Chem Soc*, **2011**, 88, 1–14.
- [6] A. Becalski, S. Y. Feng, B. P.-Y. Lau, T. Zhao, *Anal Bioanal Chem*, **2012**, 403, 2933–2942.
- [7] M. Dubois, A. Tarres, T. Goldmann, G. Loeffelmann, A. Donaubauer, W. Seefelder, *J Agric Food Chem*, **2011**, 59, 12291–12301.

Modelowanie rozrzutu mas cząsteczkowych polimerów kondensacyjnych

Kinga Bar, Henryk Galina

Politechnika Rzeszowska im. I. Łukasiewicza, Wydział Chemiczny

Przeprowadzono analizę kinetycznego modelu kopolimeryzacji stopniowej układu dwóch monomerów dwufunkcyjnych. Podstawą modelu są cząstkowe różniczkowe równania kinetyczne określające zmiany w czasie rozkładów stopni polimeryzacji poszczególnych typów cząsteczek: z łańcuchami zakończonymi różnymi lub jednakowymi typami grup funkcyjnych. Równania te są następnie przekształcane w układ równań różniczkowych zwyczajnych, pierwszego rzędu, które po rozwiązaniu numerycznym pozwalają na wyliczenie momentów rozkładu stopni polimeryzacji cząsteczek polimeru w funkcji czasu.

W modelowanej reakcji monomery wprowadzono do wirtualnego reaktora okresowego w kilku dozowaniach, po osiągnięciu przez układ zadanego stopnia przereagowania. Analizowano molekularne parametry rozrzutu mas cząsteczkowych polimeru.

Literatura:

- [1] Lechowicz J, Krawczyk M., Galina H., *Macromolecules*, 2011, 44 (20), 8169–8176.
- [2] Flory P.J., *J. Am. Chem. Soc.*, 1936, 58 (10), 1877–1885.
- [3] Carothers, *Chem. Rev.*, 1931, 8, 359-08.
- [4] Kuchanov S.I., *Metody kinetycznych obliczeń w chemii polimerów (ros.)*, wyd. Chemia, Moskwa 1978.
- [5] Dušek K., *Polym. Bull.*, 1979, 1, 523.
- [6] Galina H., *Europhys. Lett.*, 1987, 3(11), 1155.
- [7] Galina H., *Fizykochemia polimerów*, Oficyna Wydawnicza PRz, Rzeszów 1998
- [8] Galina, H., *Macromol. Theory Simul.* 1995, 4, 801.

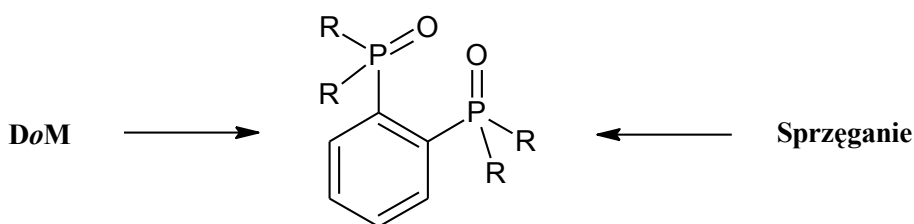
Próby syntezy 1,2-bis(fosfinoilo-podstawionych)arenów

Iolanta Bazan, Marek Stankevič

*Zakład Chemii Organicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej,
Gliniana 33, 20-614 Lublin*

Optycznie czynne fosfiny posiadające centrum chiralności na atomie fosforu znalazły duże zastosowanie jako ligandy w katalizie asymetrycznej. Wiele ligandów tej klasy zostało szczegółowo opisane w literaturze.^[1] Wydaje się, iż chiralne 1,2-bis(fosfinylo)areny powinny wykazywać wysoką aktywność w reakcjach asymetrycznych, zwłaszcza że 1,2-bis(difenylofosfinylo)benzen (DPPBz) jest bardzo często używanym ligandem w katalizie. Pomimo dużego potencjału i spodziewanej różnorodności, synteza takich ligandów stale pozostaje wyzwaniem ze względu na brak wygodnej i ogólnej metody syntezy tych związków.

Prezentowane tutaj wyniki dotyczą syntezy 1,2-bis(fosfinoilo-podstawionych)arenów za pomocą kilku różnych dróg reakcyjnych (Schemat 1).



Schemat 1

Literatura:

[1] Pietrusiewicz K. M.; Zabłocka M. *Chem. Rev.* **1994**, 94, 1375.

„Inteligentna kartka” a mikrosfery polimerowe

Ilona Bęczkowska

Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie – Skłodowskiej w Lublinie

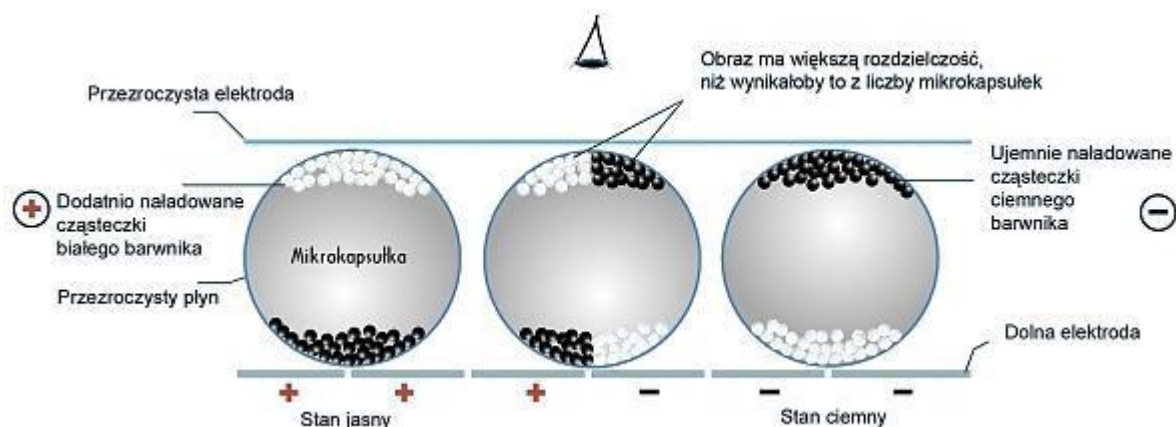
Elektroniczny papier to najnowocześniejsza i obecnie najlepsza technologia w dziedzinie wyświetlaczy elektronicznych. W dobie komputerów tego typu wyświetlacze są coraz popularniejsze i odnoszą znaczące sukcesy na rynku. Czytniki, w których stosuje się e-papier to nie tylko modne gadżety, ale i także ekologiczne, wygodne oraz praktyczne narzędzia przydatne w życiu codziennym.

Celem twórców technologii elektronicznego papieru było stworzenie „inteligentnej kartki” mogącej zastąpić wielotomowe zbiory książek, wyświetlającej dowolną informację na życzenie użytkownika.

Pierwszy model e-kartki został zaproponowany już w 1970 roku przez Nicholasa Sheridona. Jednak znaczący przełom nastąpił w latach 90. XX wieku, kiedy to Joseph Jacobson opracował technologię e-papieru opartą na zastosowaniu mikrosfer polimerowych. Do dziś wykorzystuje ją firma E Ink. Technologia Jacobsona oparta jest na zjawisku elektroforezy, czyli ruchu cząstek obdarzonych ładunkiem w polu elektrycznym. Cząstkami naładowanymi są cząsteczki barwnika zamknięte w mikrosferach polimerowych.

Praca prezentuje opis wyżej wspomnianych technologii elektronicznego papieru oraz jego charakterystykę.

Rysunek 1. Poprzeczny przekrój przez wyświetlacz wykonany w technologii E Ink oraz zasada jego działania.



Zmiany napięcia powierzchniowego wybranych polimerów pod wpływem wodnych roztworów mieszaniny dwóch klasycznych surfaktantów z etanolem

Magdalena Bielawska, Bronisław Jańczuk, Anna Zdziennicka
Zakład Zjawisk Międzyfazowych, Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemii UMCS,
Pl. Marii Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin

Zgodnie z równaniem Younga^[1], proces rozpylania się cieczy po powierzchni ciała stałego, którego miarą jest kąt zwilżania, zależy od napięcia powierzchniowego ciała stałego i cieczy zwilżającej oraz napięcia międzyfazowego między nimi. Niestety tylko napięcie powierzchniowe cieczy oraz kąt zwilżania mogą być zmierzone w sposób bezpośredni, pozostałe wielkości trzeba wyznaczyć przy wykorzystaniu odpowiednich modeli i równań. Znajomość napięcia powierzchniowego ciała stałego (γ_{sv}) jest niezwykle istotna z praktycznego punktu widzenia; okazuje się jednak, że niekoniecznie musi być ono wartością stałą i charakterystyczną dla danego ciała stałego, ale może się zmieniać pod wpływem adsorpcji substancji powierzchniowo czynnych na jego powierzchni.

Do badań wybrano trzy polimery o bardzo szerokim zastosowaniu w życiu codziennym oraz przemyśle: hydrofobowy, niepolarny politerafluoroetylen (PTFE) oraz monopolarne polimetakrylan metylu (PMMA) i nylon-6. Aby wyznaczyć zmiany ich napięcia powierzchniowego w funkcji stężenia etanolu wykorzystano równanie Neumanna^[2]. Otrzymane wyniki porównano z wartościami napięcia powierzchniowego tych polimerów dostępnymi w literaturze. Jako cieczy zwilżające zostały użyte wodne roztwory mieszaniny dwóch popularnych, klasycznych surfaktantów: kationowego bromku heksadecylotrimetyloamoniowego (CTAB) i niejonowego Tritonu X-100 (TX-100) z etanolem. Badania prowadzono w pełnym zakresie stężenia alkoholu oraz zakresie stężeń surfaktantów, w którym mogą one występować w roztworze w postaci monomerów lub micel.

Literatura:

- [1] A.W. Adamson, A.P. Gast, *Physical Chemistry of Surfaces*; 6th ed; Wiley-Interscience, New York, 1997, 353.
- [2] A.W. Neumann, R.J. Good, C.J. Hope, M. Sejpal, *J. Colloid Interface Sci.*, **1974**, 49, 291-304.

Synteza i charakterystyka nowych związków luminescencyjnych o potencjalnych zastosowaniach w optoelektronice

Katarzyna Bijak, Ewa Schab-Balcerzak

Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski, ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice

W ostatnich latach obserwuje się wzrost zainteresowania nowymi materiałami dla zastosowań w optoelektronice organicznej; w organicznych ogniwach fotowoltaicznych (PV), diodach elektroluminescencyjnych (OLED), tranzystorach polowych (FET), materiałach elektrochromowych (EC). Obecnie stosowane są głównie związki nieorganiczne, dąży się jednak do zastąpienia ich związkami organicznymi, ze względu na możliwość zastosowania tańszych metod przetwórczych, elastyczność utworzonych warstw, a także możliwość modyfikacji budowy chemicznej związku w celu osiągnięcia oczekiwanych właściwości.

Przedmiotem pracy była synteza oraz badanie wybranych właściwości związków zawierających łańcuchy polieterowe o strukturze modyfikowanej barwnikami (rodaminą B oraz fluoresceiną) jako potencjalnych materiałów dla optoelektroniki. Badane związki otrzymano w reakcji barwników z dwoma aminami (aminą zawierającą diimid naftalenowy^[1] i łańcuchy alkoksylowe oraz Jeffaminą ED-2003). Wprowadzenie długich hydrofilowych łańcuchów polieterowych miało na celu uzyskanie związków dobrze rozpuszczalnych w rozpuszczalnikach organicznych, co powinno korzystnie wpłynąć na przetwarzalność otrzymanych materiałów. Strukturę syntezowanych związków potwierdzono za pomocą spektroskopii FTIR oraz ¹HNMR. Badano wpływ budowy na właściwości optyczne, tj. absorpcję w zakresie UV-Vis oraz fotoluminescencję, w rozpuszczalnikach o różnej polarności (chloroform, N-metylopirolidon) i w stanie stałym w postaci blend z poli(metakrylanem metylu) o różnej zawartości związku w blendzie. Określono również wpływ długości fali wzbudzenia na maksimum oraz intensywność fotoluminescencji.

Literatura:

- [1] E. Schab-Balcerzak, A. Iwan, M. Grucela-Zajac, M. Krompiec, M. Podgórna, M. Domański, M. Siwy, H. Janeczek, *Synthetic Metals*, **2011**, 161, 1660-1670.

Analiza pierwiastkowa włosa

Aleksandra Borkowska, Mariusz Kluska

Zakład Chemii Środowiska, Uniwersytet Przyrodniczo-Humanistyczny w Siedlcach

Celem pracy jest przybliżenie analizy pierwiastkowej włosa jako źródła informacji o człowieku i jego stanie zdrowia. Badanie to jest stosunkowo nową metodą, pozwalającą na wykrycie problemów w funkcjonowaniu i zaburzeń homeostazy organizmu. Ostatnimi czasy zdobywa ono coraz więcej zwolenników, gdyż bardzo często jest ona lepszą formą zdobycia wiedzy o pacjencie, niż standardowe badanie toksykologiczne krwi. Ponadto staje się coraz bardziej popularną metodą analizy stosowanej w badaniach kryminologicznych. Podstawową różnicą pomiędzy pierwiastkową analizą włosa a krwi jest fakt, że krew jest filtrowana przez organy takie jak: wątroba czy też nerki, natomiast mikroelementy do włosa są wbudowywane na stałe. Dzięki temu zjawisku stosując badanie włosów możemy zarejestrować nie tylko chwilową sytuację panującą w organizmie, ale i zmiany zachodzące w nim od tygodni. Umożliwia to między innymi stwierdzenie faktu zażywania narkotyków pomimo teraźniejszego ich braku w ciele, czy też chroniczną ekspozycję na czynnik toksyczny, która pomimo nie przekroczenia jednorazowo dawek szkodliwych, po dłuższym czasie może znacząco wpłynąć na zdrowie człowieka.^[1]

Pobieranie próbki do badania jest proste, nieinwazyjne, nie wymaga ono specjalnych umiejętności czy też szkoleń. Sama próbka charakteryzuje się znaczną trwałością, dzięki czemu nie ma potrzeby stosowania specjalistycznego transportu i środków utrwalających. Trwałość ta pozwala nawet na przesyłanie analiz do specjalistycznych ośrodków pocztą w zwykłych kopertach.

Do celów medycznych wykorzystuje się włosy pobrane do 4 centymetrów mierzonych od skóry głowy. Odrzucenie dalszych elementów włosa jest spowodowane faktem zbyt jego długiej ekspozycji na czynniki środowiskowe mogące znacząco zniekształcić skład mikroelementowy. Skutkiem tego byłby zniekształcony wynik badań nie mogący być odzwierciedleniem stanu zdrowia człowieka.^[1]

Równocześnie to właśnie różnice w kontakcie z substancjami chemicznymi podczas naszego życia i ich wpływ na strukturę włosa powodują, że włosy mogą być bardzo dobrym źródłem informacji dla kryminologów. Dodatkowe ilości pewnych pierwiastków, bądź niedobór innych mogą sugerować miejsce zamieszkania, czy też pracy. Świadczą także o chorobach przebytych i trwających, a także o trybie życia. Informacje te mogą znacznie ułatwić prowadzone dochodzenia śledcze.^[2]

Literatura:

[1] R. Włodarczyk, *Kryminalistyczne badania włosów ludzkich przy użyciu skaningowego mikroskopu elektronowego (SEM)*; Wyd. Wyższej Szkoły Policji, Szczytno, 2006, 14-37.

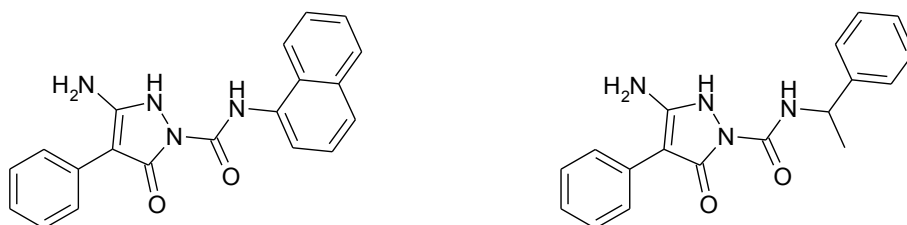
[2] M. Molski, *Chemia piękna*, PWN, Warszawa, 2009, 54-77.

Badania równowag tautomerycznych 3-amino-4-fenylopirazolonów wykazujących aktywność przeciwbakteryjną

Małgorzata Brodacka

Uniwersytet Przyrodniczo- Humanistyczny w Siedlcach, Instytut Chemii

Zastosowanie metod dyfrakcyjnych do badania struktury kryształu, a w konsekwencji cząsteczek chemicznych jest głównym źródłem informacji strukturalnej chemii, biochemii i nauk pokrewnych. Analiza struktury za pomocą promieniowania rentgena ma na celu rozwiązanie struktury kryształu czyli wyznaczenie parametrów geometrycznych komórki elementarnej kryształu oraz współrzędnych atomów znajdujących się w tej komórce. Analiza ta jest możliwa dzięki dyfrakcji promieniowania na kryształach badanych związków.



Badania nad **3-amino-4-fenylopirazolonami** wykazały ich działanie przeciwbakteryjne. Prawdopodobnie związki te działają jako inhibitory w biosyntezie białek, które są głównymi składnikami ścian komórkowych bakterii. Do wywołania pożądanego efektu, powyższe związki muszą wykazywać powinowactwo do centrum aktywnego enzymu. Innymi słowy, struktura cząsteczki leku czyli jej konfiguracja absolutna, konformacja, odległości między atomowe, formy tautomeryczne i kąty między wiązaniami, ma istotne znaczenie. Najlepszą drogą do uzyskania wartości powyższych parametrów jest analiza rentgenostrukturalna.

Literatura:

- [1] Z. Li, D. Francisco, W. Hu, P. Labthavikul, *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, 2003, 15, 2591-2594.
- [2] L. Silver, *Current Opinion in Microbiology*, **2003**, 5, 431-438.
- [3] M. Pitucha, U. Kosikowska, I. Mazur, A. Malm, *Medicinal Chemistry*, **2011**, 7, 697-703.
- [4] J. B. Foresman, *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*, Gaussian, Inc., USA, **1996**.
- [6] P. Lauger, *Rentgenografia Strukturalna Monokryształów*, PWN, Warszawa, **1989**.
- [7] Z. Bojarski, M. Gila, *Krystalografia, podrecznik wspierany komputerowo*, PWN, Warszawa, **2001**.
- [8] M. Van Meersse, J. Feneau- Dupont, *Krystalografia i Chemia Strukturalna*, PWN, Warszawa, **1989**.
- [10] G.M. Sheldrick, *Programs for Crystal Structure Analysis Release*, University of Gottingen, Germany.
- [11] L. J. Farrugia, *WINGX*, *J. Appl. Crystallogr.*, **1999**, 32, 837.

Dezaktywacja katalizatorów

Brzozowski Marcin

Uniwersytet Marii Curie - Skłodowskiej w Lublinie

W katalizie bardzo ważnym zjawiskiem jest dezaktywacja katalizatora. Dezaktywacja polega na częściowym lub całkowitym obniżeniu aktywności katalizatora w wyniku zmian zachodzących na jego powierzchni (zmiany fizyczne, chemiczne, zatrucie katalizatora).

1. Fizyczne zmiany katalizatora mogą być następstwem:

- ścierania czynnika aktywnego, zwłaszcza w kontaktach nośnikowych impregnowanych powierzchniowo;
- rozkruszania katalizatora w wyniku zbyt małej wytrzymałości mechanicznej, co powoduje dodatkowo zwiększenie oporów hydraulicznych złoza;
- spiekania się katalizatora w wyniku nadmiernego przegrzania prowadzącego do zmian struktury powierzchni – najczęściej do znacznego zmniejszenia całkowitej powierzchni aktywnej, w następstwie zaś – spadku aktywności;
- adsorpcji osadów lub związków wielkocząsteczkowych – produktów niepełnego spalania.

2. Chemiczne zmiany katalizatora powoduje zwykle reakcja niektórych związków znajdujących się w oczyszczanym gazie, bądź produktów pośrednich reakcji z materiałem, z którego sporządzono katalizator, zwykle z czynnikiem aktywnym w odniesieniu do katalizatorów tlenkowych, bądź z materiałem nośnika.

3. Zjawisko zatrucia katalizatora polega na selektywnej chemisorpcji określonych substancji stanowiących trucizny katalizatora na miejscach aktywnych kontaktów w wyniku czego jego aktywność wyraźnie i gwałtownie maleje.

- może mieć charakter odwracalny, nieodwracalny, kumulujący i sprzyjający;
- wskazuje na niezwykle duże ciepło adsorpcji;
- zawsze prowadzi do zmniejszenia jego aktywności i czasu użytkowania, a więc do podniesienia kosztów eksploatacji instalacji oczyszczającej^[1].

Literatura:

[1] a) J. Petryk, *Przemysł Chemiczny*, **1996**, 11,15-18; b) J. Góralski, J. Grams, I. Ludomirska, T. Paryczak, I. Rzeźnicka, *Przemysł Chemiczny*, **1999**, 5; c) A. Gołębiowski, Z. Kobiński, Z. Kobiński, Z. Śpiewak, K. Stolecki, *Przemysł Chemiczny*, **1998**, 10.

Okiem chemika: Złota kaczką, czyli o homeopatii słów kilka

Michał Dąbrowski

*Koło Naukowe Chemików UwB „Pozyton”
Uniwersytet w Białymstoku, Instytut Chemii
Hurtowa 1, 15-399 Białystok*

Pomimo ciągłego poszerzania granic wiedzy naukowej, ludzkość w dalszym ciągu sięga do medycyny alternatywnej. Część jej metod, po badaniach, wchodzi do kanonu medycyny klasycznej. Inne, mimo braku naukowego potwierdzenia, cieszą się niesłabnącą popularnością. Przykładem drugiej kategorii jest homeopatia.

Homeopatia jest to metoda leczenia holistycznego, opierająca się na leczniczych właściwościach informacji zawartej w roztworze. Opiera się ona na trzech filarach:

1. substancja wywołująca szereg objawów analogicznych do objawów choroby leczą daną przypadłość;
2. zmniejszenie stężenia powoduje wzrost mocy właściwości leczniczych substancji;
3. cząsteczki wody posiadają „pamięć” o właściwościach substancji, z którymi miały styczność oraz potrafią przekazywać sobie te informacje.

Filary te są sprzeczne z obecnym stanem wiedzy i nie znajdują potwierdzenia w badaniach klinicznych przeprowadzanych zgodnie z podstawowymi zasadami badawczymi (podwójna ślepa próba, reprezentatywna próba badana, istotny statystycznie wynik).

Jakie absurdy niosą ze sobą filary homeopatii? Czy ma ona sens naukowy? W jaki sposób prawo polskie odnosi się do kwestii skuteczności preparatów homeopatycznych? Odpowiedzi na te pytania można będzie uzyskać podczas sesji plakatowej.

Literatura:

- [1] *Służba Zdrowia*, **2006**, 55-58, 16-27.
- [2] a) E. Ernst, *British Journal of Clinical Pharmacology*, **2008**, 65 (2), 163-164; b) E. Ernst, *British Journal of Clinical Pharmacology*, **2002**, 54 (6), 577-582.
- [3] D. Shaw, *Focus on Alternative and Complementary Therapies*, **2011**, 16 (1), 17-21.
- [4] S. Sehon, D. Stanley, *Journal of Evaluation in Clinical Practice*, **2010**, 16 (2), 276-281.
- [5] a) J. Randi, *Wystąpienie w Princeton*, **2001**, (<http://youtu.be/BWE1tH93G9U>); b) J. Randi, *Wystąpienie w Caltech*, **1992**, (http://youtu.be/0jqP_1beVXQ).

The effect of tertiary amines on the structure and selectivity of dialkylgallium alkoxides in the polymerization of *rac*-LA

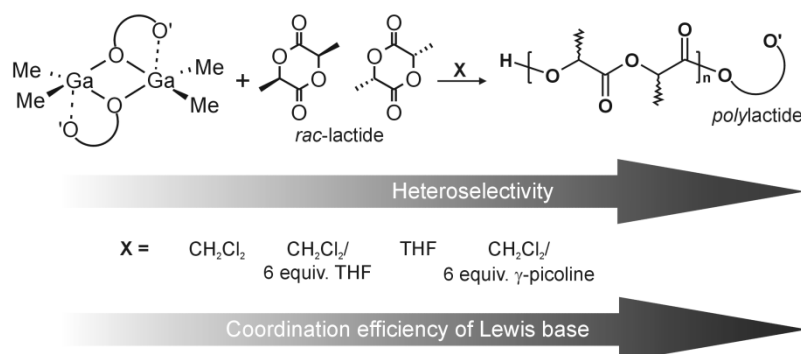
Anna Maria Dąbrowska^a, Anna Litwińska^a, Paweł Horeglad^a

^a Faculty of Chemistry, University of Warsaw, ul. Żwirki i Wigury 101, 02-089 Warsaw, Poland

Poly(lactide) (PLA), called a "nature's polyethylene",^[1] is well known for its good mechanical properties, biodegradability, and biocompatibility. Moreover, it can be synthesized from renewable resources. These make PLA environmentally friendly polymer of many potential applications. The latter results from the properties of poly(lactide) (PLA), which depend significantly on its tacticity. Therefore it is essential to synthesize PLA in the controlled and stereoselective way. One of the most promising methods for the synthesis of PLA is the ring-opening polymerization (ROP) of racemic lactide (*rac*-LA) using metal alkoxides as initiators.

Dialkylgallium alkoxides are very interesting catalysts as they can polymerize *rac*-LA in controlled and stereoselective manner.^[2] We showed that heterotactically enriched poly(lactide) can be obtained in the presence of dialkylgallium alkoxides modified with Lewis bases, while the heteroselectivity was found to be strongly related to the coordination efficiency of a Lewis base to Ga center (Scheme 1).^[2] Noteworthy is the fact that dialkylgallium enabled for the first time the facile switch of stereoselectivity during the process of polymerization as the use of strong Lewis bases, such as N-heterocyclic carbenes, for the complexation of dialkylgallium alkoxides led to isoselective gallium catalysts.^[3]

It is therefore important to examine in details the effect of various Lewis bases on the activity and stereoselectivity of obtained dialkylgallium catalysts. I am going to present the results of our studies on the effect of tertiary amines on the structure and selectivity of dialkylgallium alkoxides, and the structure of obtained poly(lactide).



Scheme 1.

Literature:

[1] D.J. Cole-Hamilton, *Angewandte Chemie*, **2010**, 49, 8564–8566.

[2] P. Horeglad, P. Kruk, J. Pecaut, *Organometallics*, **2010**, 29, 3729–3734.

[3] P. Horeglad, G. Szczepaniak, M. Dranka, J. Zachara, *Chemical Communications*, **2012**, 48, 1171–1173.

Rola technetu w medycynie nuklearnej

Joanna Hynek, Anna Doroz

Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Instytut Chemii,
ul. Świętokrzyska 15G, 25-406 Kielce

Technet- pierwiastek odkryty w 1937 roku przez Segrè i Perriera. Jest pierwszym w historii otrzymanym sztucznie pierwiastkiem. Nie posiada żadnego stabilnego izotopu. Otrzymywany jest sztucznie w procesie rozbijania neutronami jąder uranu bądź bombardowania lekkimi jądrami izotopów niobu ewentualnie molibdenu. Radioizotop technetu ^{99m}Tc cechuje się doskonałymi właściwościami jądrowymi, dzięki czemu znalazł zastosowanie w technice diagnostycznej obrazowania w medycynie nuklearnej. Okres półtrwania technetu, który wynosi 6h a także emisja promieniowania γ , którego energia wynosi 141 keV sprawiły, że technet ^{99m}Tc , został prestiżowym radioizotopem w diagnostyce. [1] Innym izotopem technetu, który znalazł zastosowanie w medycynie nuklearnej jest ^{94}Tc . Radioizotop ten charakteryzuje się krótkim czasem połowicznego rozpadu. Emituje on cząstki β^+ . ^{94}Tc otrzymuje się w cyklotronach, napromieniowując ^{94}Mo . [2] Wyróżniamy trzy grupy radiofarmaceutyków technetowych:

- Makrocząsteczki znakowane ^{99m}Tc . Do tej grupy zaliczamy czerwone i białe ciała krwi, koloidy, mikrosfery.
- Kompleksy ^{99m}Tc . Do tej grupy zaliczamy związki koordynacyjne technetu.
- Kompleksy ^{99m}Tc z dwufunkcyjnymi ligandami. [3,4]

Literatura:

- [1] J. R. Dilworth, S. J. Parrott, *chem. Soc. (1998), Rev.*, 27, 43,.
- [2] F. Rosch, A. F. Novgorodov, S. M. Qaim, *Radiochim. Acta*, (1994), 64, 113.
- [3] E. Mikiciuk-Olasik, K. Błaszczak-Świątkiewicz, *Wiad. Chem.*, (2000), 54, 705.
- [4] M. J. Welch, J. B. Downer, J. A. Katzenellenbogen, [w:] *Current Directions in Radiopharmaceuticals Research and Development*, S. J. Mather (red.) Kluwer Acad. Press, Netherlands, (1996), 137.

Określenie wpływu różnorodnych czynników na zdolność antyoksydacyjną naparów herbaty Rooibos

Klaudia Drab, Michał Daszykowski

Uniwersytet Śląski, Zakład Chemii Analitycznej, Pracownia Chemometrii, ul Szkolna 9, 40-006 Katowice

Zmiany środowiskowe oraz nieodpowiedni styl życia, tj. niewłaściwa dieta oraz brak ruchu i nadmierny stres, są głównymi czynnikami wywołującymi stany chorobowe człowieka. Wymienić tutaj należy przede wszystkim takie jednostki chorobowe jak otyłość, cukrzyca, czy nadciśnienie, które ogólnie przyjęto nazywać chorobami cywilizacyjnymi. Okazuje się jednak, iż w patogenezie chorób cywilizacyjnych znaczna rolę odgrywają również wolne rodniki. Informacja o ich szkodliwości na zdrowie człowieka przyczyniła się do poszukiwania naturalnych obrońców organizmu, tj. antyoksydantów [1]. Dlatego sporo uwagi poświęca się określaniu zdolności antyoksydacyjnych produktów spożywczych, takich jak wino czerwone, warzywa, owoce oraz napary herbat. Ostatnie badania ujawniły, że herbata rooibos wykazuje duże zdolności antyoksydacyjne ze względu na zawarte w niej komponenty [2]. Jak dowodzą badania jest to jedyne znane dotychczas źródło aspalathinu, antyoksydantu o właściwościach przeciwcukrzycowych. Zdolności antyoksydacyjne badanych produktów uzależnione są od wielu czynników, wśród których warto wymienić rok produkcji, proces pasteryzacji, czy gatunek.

W niniejszej pracy, podjęto próbę określenia wpływu wymienionych czynników na zdolności antyoksydacyjne herbat rooibos. W badaniach wykorzystano 114 próbek naparów herbaty rooibos, które analizowano za pomocą metody HPLC-DAD. Zdolności antyoksydacyjne wyznaczono metodami ORAC i DPPH [2]. Następnie próbki zostały poddane pasteryzacji i ponownie oceniono ich zdolności antyoksydacyjne. Aby zbadać znaczenie parametrów mających wpływ na różnorodność herbat, próbki zostały pobrane od różnych producentów w 2009, 2010 oraz 2011 roku [2]. Dane analizowano za pomocą dwukierunkowego grupowania hierarchicznego wzbogaconego reprezentacją graficzną [3]. Wykonana eksploracja umożliwiła wykluczenie wpływu pasteryzacji na zdolności antyoksydacyjne oraz ujawniła zależności pomiędzy próbkami herbat oraz zmierzonymi związkami fenolowymi. Udało się również wyróżnić grupę związków fenolowych, które potencjalnie odgrywają kluczową rolę w obronie organizmu przed wolnymi rodnikami.

Literatura:

- [1] M. H. Carlsen, B. L. Halvorsen, K. Holte, S. K. Bohn, et.al., *Nutrition Journal*, 2010, **9**, 1-11
- [2] E. Joubert, T. Beelders, D. de Beer, C. J. Malherbe, A. J. de Villiers, G. O. Sigge, *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, **2012**, 60, 9171-9179
- [3] A. Smolinski, B. Walczak, J.W. Einax, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2002, **64**, 45-54

Zatrucie katalizatora

Krzysztof Dul

Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, pl. Marii Curie-Skłodowskiej 2, 20-031 Lublin.

Proces katalizy heterogenicznej jest bardzo ważnym procesem chemicznym stosowanym w wielu dziedzinach przemysłu chemicznego. Pomimo swej wielkiej przydatności częstym problem tej katalizy jest zatrucie katalizatora, czyli częściowe bądź całkowite obniżenie aktywności wskutek działania niewielkich ilości substancji zwanych truciznami kontaktu. Trucizny zwykle są wprowadzane wraz z surowcami wejściowymi. Zatrutowanie katalizatora występuje na wskutek trwałej i selektywnej adsorpcji chemicznej (chemisorpcji) lub reakcji trucizny z katalizatorem. W ten sposób powstaje związek katalitycznie nieaktywny. Zjawisko zatrucia może mieć charakter:

- odwracalny;
- nieodwracalny;
- kumulujący;
- sprzyjający.

Ponadto jako proces chemisorpcyjny wykazuje stosunkowo duże ciepło adsorpcji oraz prowadzi do zmniejszenia aktywności tego procesu i czasu jego użytkowania. Na zjawisko zatrutowania katalizatora mogą mieć wpływ następujące czynniki, tj:

- warunki, w których prowadzi się reakcję katalityczną (temperatura, ciśnienie, stężenie trucizny w mieszaninie gazowej),
- wielkości, które charakteryzują katalizatory (całkowita powierzchnia kontaktu, liczba miejsc aktywnych, liczba i rozmiar porów, dyspersja czynnika aktywnego)^[1];

W przypadku temperatury 700-1000°C praktycznie nie można zaobserwować zatrucia katalizatorów.

Za przykładowe trucizny katalizatorów uznaje się: siarkowodór, siarczki organiczne i nieorganiczne, związki arsenu, fosforowodór, amoniak.

Literatura:

- [1] a) M. Szukiewicz, K. Kaczmarek, K. Stolecki, S. Szarlik, *Przemysł Chemiczny*, **2008**, 4;
b) M. Szukiewicz, K. Kaczmarek, K. Stolecki, A. Gołębiowski, T. Borowiecki, R. Sylwestrowicz, **2009**, 12; c) E. Szukalska, *Przemysł Chemiczny*, **2000**, 10; d) A. Gołębiowski, Z. Kobiński, Z. Śpiewak, K. Stolecki, *Przemysł Chemiczny*, **1998**, 10.

Krytyczne stężenie micelizacji wodnych roztworów mieszanin surfaktantów

Joanna Dziedzic

Uniwersytet Marii Curie Skłodowskiej, Wydział Chemii

Plac Marii Curie Skłodowskiej 5

20-031 Lublin

W zależności od budowy surfaktantu w roztworach tworzone są różnego rodzaju agregaty. Najlepiej poznanym typem struktur zagregowanych w roztworach wodnych są micelle. Jako układy dynamiczne zbudowane są one ze zorganizowanych cząsteczek amfifilowych (monomerów), w których hydrofobowe łańcuchy skierowane są do środka miceli, tworząc lipofilowy rdzeń agregatu. Natomiast grupy hydrofilowe skierowane są na zewnątrz w kierunku otaczającej je fazy wodnej.

Podstawowym pojęciem opisującym proces micelizacji jest *krytyczne stężenie micelarne* (ang. *Critical Micelle Concentration*, **CMC**). Określa ono wartość stężenia surfaktantu w roztworze, powyżej którego znajduje się on w formie zagregowanej, poniżej zaś w postaci monomerów. Ogólnie istnieje tendencja, że wraz ze wzrostem temperatury wartość **CMC** rośnie.

W celu wyznaczenia **CMC** stosuje się różne techniki eksperymentalne. Wiadomo bowiem, że własności fizyczne (np. napięcie powierzchniowe, zdolność piorąca) układu w punkcie **CMC** ulegają znaczącej zmianie. Te i wiele innych aspektów jest niezwykle ważnych w codziennym życiu. Przykładowo w procesie prania wykorzystuje się zjawisko solubilizacji, czyli zwiększania rozpuszczalności substancji za pomocą tzw. pośredników rozpuszczania. Polega na tworzeniu układów micelarnych, złożonych z substancji rozpuszczanej i solubilizatorów, które są w tym przypadku cząsteczkami powierzchniowo czynnymi.

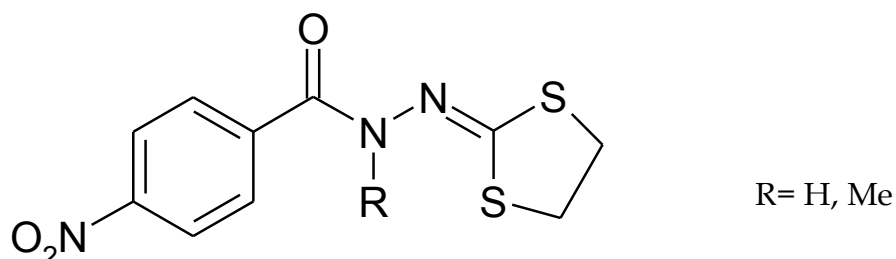
Struktury dwóch *p*-nitrobenzoiłowych pochodnych kwasu 4-nitro-[1,3]-2-ditiolanoylidenohydrazydowych o potencjalnym działaniu tuberkulostatycznym

Paulina Gacka^{a,b}, Małgorzata Szczesio^b, Marek L. Główka^b

^a Koło Naukowe „TROTYL”, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka,
ul. Żeromskiego 116, 90-924 Łódź

^b Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka,
ul. Żeromskiego 116, 90-924 Łódź

Poszukiwanie nowych związków o działaniu tuberkulostatycznym stają się koniecznością wobec rosnącej lekooporności szczepów *Mycobacterium tuberculosis* na obecnie stosowane leki, o czym świadczy wzrost zachorowań na gruźlicę również w krajach wysoko rozwiniętych. Poznanie struktury i jej analiza umożliwi w porównaniu ze znaną aktywnością proponować nowe związki.



W zespole profesora Henryka Foksa z Gdańskiego Uniwersytetu Medycznego otrzymano wiele pochodnych kwasu 4-nitro-[1,3]-2-ditiolanoylidenohydrazydowego wśród których kilkanaście wykazuje wyjątkowo dużą aktywność tuberkulostatyczną.^[1,2] Badania ich struktury molekularnej metodą dyfrakcji promieni X pozwoliło zaobserwować kilka prawidłowości ukierunkowujących projektowanie związków o potencjalnie dużej aktywności. Jednymi z ostatnio otrzymanych związków kwasu pochodnych kwasu 4-nitro-[1,3]-2-dithiolanoylidenohydrazydowego, były pochodne *p*-nitrobenzoiłowe (Schemat).

Porównamy wyniki badań ich struktury ze strukturami istniejącymi w bazie CSD.^[3] Istotnym elementem wpływającym na konformację cząsteczek jest podstawnik R przy atomie azotu.

Literatura:

- [1] M. Szczesio, A. Olczak, K. Gobis, H. Foks, M. L. Główka, *Acta Cryst.* C68, **2012**, o99-o103.
- [2] M. Szczesio, A. Olczak, J. Golka, K. Gobis, H. Foks, M. L. Główka, *Acta Cryst.* C67, **2011**, o235-o240.
- [3] F. H. Allen, *Acta Cryst.* B58, **2002**, 380-388.

Biologiczne właściwości kadmu

Jakub Grynda

*Sekcja Studencka Oddziału Gdańskiego
Polskiego Towarzystwa Chemicznego „Hybryda”
Wydział Chemiczny Politechniki Gdańskiej
ul. G. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk*

Kadm, pierwiastek należący do 12 grupy układu okresowego, znajduje się w interesującym miejscu. Leży on pomiędzy najłżejszym pierwiastkiem z tej grupy, czyli cynkiem – pierwiastkiem niezbędnym do życia, a rtęcią – pierwiastkiem, toksycznym. W związku z tym warto zastanowić się, jaki wpływ na organizm człowieka może mieć kadm.^[1]

Kadm jest pierwiastkiem znanym ze swojej toksyczności. Odpowiedzialny jest on na przykład za chorobę itai-itai. Jako, że należy do grupy cynkowców, może zastępować cynk w miejscach aktywnych enzymów, ale wówczas ich aktywność zmniejsza się, lub całkowicie zanika.^[2]

Dowodzono jednak, że istnieją organizmy, które żyjąc w środowisku ubogim w cynk i bogatym w kadm wytworzyły analogi enzymów z kadmem w centrum aktywnym zamiast cynku. Warto zauważyć, że ich aktywność nie jest drastycznie niższa od analogów cynkowych.^[3]

Literatura:

[1] P. Martin, P. Pognonec, *FEBS J.*, **277** (2010), 39 – 46.

[2] H. Starsdeit, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **4** (2001) 707 – 709.

[3] H. Park, B. Song, F. M. M. Morel, *Environ. Microbiol.*, **9** (2007) 403 – 413.

Elektroda diamentowa domieszkowana borem

Kinga Kaczmarska^a, Sylwia Smarzewska^b

^a *Studenckie Koło Naukowe Chemików Uniwersytetu Łódzkiego,
Wydział Chemii, Uniwersytet Łódzki, ul. Tamka 12, 91-403 Łódź*

^b *Zakład Analizy Instrumentalnej
Wydział Chemii, Uniwersytet Łódzki, ul. Pomorska 163, 90-236 Łódź*

Diament, najszlachetniejszy i najtrwalszy z minerałów, od wieków zachwyca kobiety stanowiąc istotny element biżuterii. Nie jest to jednak jego jedyne zastosowanie. Obecnie chemia związków węgla rozwija się w zawrotnym tempie, czego przykładem jest wzrost zainteresowania cienkimi, domieszkowanymi warstwami diamentowymi jako emiterami elektronów. Zastosowanie diamentu w elektrochemii ma swój początek w pracach zespołu naukowców nad metodą wytworzenia półprzewodnikowego nanokrystalicznego diamentu domieszkowanego borem. Późniejsze badania nad tak wytworzonym materiałem wykazały, że jego parametry elektryczne oraz właściwości fizykochemiczne umożliwiają opracowanie nowoczesnych elektrod.

Szczególnymi korzyściami wynikającymi z właściwości chemicznych domieszkowanego borem diamentu są m.in.: twardość mechaniczna, niższe pojemnościowe prądy upływu, a także szeroki zakres potencjałów. Dzięki tym zaletom domieszkowany borem diament stosowany jest obecnie jako materiał do wytwarzania elektrod pracujących stosowanych m.in. w woltamperometrii do oznaczania substancji biologicznie czynnych takich jak leki, barwniki, pestycydy czy hormony.

Celem tego wystąpienia jest przedstawienie budowy, rodzajów oraz najciekawszych zastosowań elektrody diamentowej domieszkowanej borem w analityce chemicznej.

Literatura:

[1] a) A.F. Azevedon, M.R. Baldan, N.G. Ferreir, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 74 (2013) 599-604; b) Takeshi Kondoa, Hironori Sakamotoa, Takayoshi Katoa, Masaru Horitania, Isao Shitandaa, Masayuki Itagakia, Makoto Yuasaa, *Electrochemistry Communications* 13 (2011) 1546-1549; c) John H. T. Luong, Keith B. Male, Jeremy D. Glennona, *Analyst*, (2009), 134, 1965-1979 | 1979; d) Katy J. McKenzie, Frank Marken, *Electrochemical and Solid-State Letters*, 5 (9) E47-E50 (2002); e) Źródła polskie - NetPR *Gazeta.pl* (2011) .

Chemia w miłości

Anna Kaczoch

Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, Wydział Chemii

Pl. M. Curie-Skłodowskiej 5, 20-031 Lublin

anna.kaczoch@gmail.com

Związki chemiczne mające istotny wpływ na organizm człowieka w miłości. Można podzielić na dwie grupy. W skład pierwszej grupy wchodzi te, które biorą udział w takich stanach fizjologicznych człowieka jak zakochanie czy pożądanie i są to fenyloetyloalanina, dopamina, norephetamina czy testosteron. Do drugiej grupy odpowiedzialnej za przywiązanie i stabilizację związku należą: endorfina oraz oksytocyna u kobiet i wazopresyna u mężczyzn. Fenyloetyloalanina nazywana potocznie „narkotykiem” miłości jest chemiczną przyczyną powstawania zauroczenia u człowieka. Syntetyzowana jest z egzogenego aminokwasu fenyloalaniny poprzez enzymatyczną dekarboksylację w komórkach hipotalamusa będącego częścią międzymózgowia. Jej działanie składa się z blokowania presynaptycznego wychwytu noradrenaliny i zwiększeniu ilości noradrenaliny w mózgu co powoduje pobudzenie ośrodka przyjemności. Noradrenalina z kolei stymuluje wydzielanie dopaminy, cząsteczki odpowiedzialnej za uczucie szczęścia, która powoduje również zwiększenie tolerancji na ból głód czy zimno. W organizmie ludzkim wydzielanie fenyloetyloalaniny powoduje eksplozję neuroprzekazników objawiającą się zwiększonym biciem serca, szybszym oddechem, uczuciem szczęścia, pobudzeniem, euforią. Ludzki organizm po dłuższym okresie (do dwóch lat) uodparnia się na działanie fenyloetyloalaniny i zmniejsza się jej wydzielanie. Wraz z malejącym stężeniem fenyloetyloalaniny zaczyna wzrastać stężenie endorfiny, która również jest hormonem szczęścia lecz działa relaksująco i uspokajająco. Dodatkowo wydzielane są dwa hormony. U kobiet jest to oksytocyna, a u mężczyzn wazopresyna. Oba te hormony odpowiadają za bliskość i przywiązanie u ludzi.

Zastosowanie modelu hantli do badania właściwości termodynamicznych i strukturalnych cieczy jonowych metodą Monte Carlo

Monika Kaja, Stanisław Lamperski

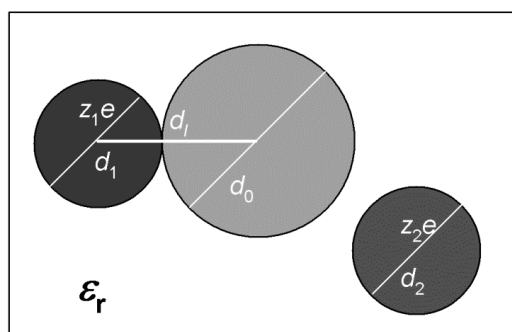
*Zakład Chemii Fizycznej, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza,
ul. Umultowska 89b, 61-614 Poznań*

Ciecze jonowe, będące organicznymi substancjami ciekłymi, składającymi się wyłącznie z jonów, ze względu na różnorodność w budowie i właściwościach, stały się przedmiotem zainteresowania wielu dziedzin przemysłu chemicznego.^[1]

Symulacje komputerowe, umożliwiające przybliżenie struktury układu na poziomie molekularnym, stanowią doskonałe narzędzie do zgłębiania wiedzy na temat właściwości fizykochemicznych związków.

Celem pracy było opracowanie programów symulacyjnych obrazujących oddziaływanie w cieczach jonowych i ukazujących strukturę badanego układu.

Jako model cieczy jonowej przyjęłam strukturę, w której do kuli z punktowym ładunkiem elektrycznym dołączona jest kula neutralna. Struktura ta nazywana jest hantlami.^[2]



z_1e, z_2e - ładunki jonów d_0, d_1, d_2 - średnice sztywnych kul
 d_1 - odległość między środkami sztywnych kul
 ϵ_r - względna przenikalność elektryczna

Rys. 1. Ogólne przedstawienie modelu hantli

Średnia energia potencjalna $\langle u \rangle$, pojemność cieplna C_v , oraz funkcje rozkładu radialnego $g(r)$ obliczane zostały programem opartym na metodzie Monte Carlo w zespole kanonicznym. Do obliczenia współczynników aktywności wykorzystano odwróconą metodą Monte Carlo w wielkim zespole kanonicznym IGC MC.^[3]

Literatura:

- [1] A. A. Kornyshev, *J. Phys. Chem. B*, **2007**, 111, 5545–557.
- [2] M. V. Fedorov, N. Georgi, A. A. Kornyshev, *Electrochem. Comm.*, **2010**, 12, 296–299.
- [3] S. Lamperski, *Mol. Simul.* 33, **2007**, 15, 1193–1198.

Wyznaczanie lipofilowości kompleksów metalokarbonylowych stosowanych w badaniach biochemicznych metodą TLC

Anna Karmanowicz^a, Robert Zakrzewski^a, Bogna Rudolf^b

^a *Katedra Chemii Analitycznej i Nieorganicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Łódzki ul. Tamka12, Łódź 91-403*

^b *Katedra Chemii Organicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Łódzki ul. Tamka12, Łódź 91-403*

Lipofilowość to powinowactwo cząsteczki do fazy organicznej, a jej miarą jest podział substancji w układzie dwufazowym ciecz-ciecz. [1]

Lipofilowość wykorzystuje się do określania aktywności biologicznej preparatów farmaceutycznych, w szczególności tych, które planuje się wprowadzić na rynek. Zmiany tego parametru można przewidzieć na podstawie wyników otrzymanych metodą chromatografii cienkowarstwowej. [2]

Celem pracy było określenie lipofilowości dla pięciu metalokarbonylowych kompleksów $(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\text{Fe}(\text{CO})_2(\eta^1\text{-N-imidato})$ techniką RP-TLC. Współczynniki R_M , wyliczone na podstawie współczynników opóźnienia w czterech układach rozpuszczalników, pozwoliły przewidzieć biodostępność tych związków [3].

Literatura:

- [1] H. Van de Waterbeemd, Pure Appl. Chem. 69, **1997**, 1137.
- [2] K. Józwiak, H. Szumiło, E. Soczewiński, Wiadomości Chemiczne, 55, **2001**, 11.
- [3] E. C Bate -Smith, R. G. Westall, Biochim. Biophys. Acta, 4, **1952**, 427.

Próbki środowiskowe – jak je ugryźć, czyli ich pobieranie oraz przygotowanie do analizy

Rafał Kluza

Studenckie Koło Naukowe Chemików UŁ

Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii

ul. Tamka 12, 91-403 Łódź

rafal.kluza@gmail.com

Otrzymanie rzetelnych wyników analiz środowiskowych wymaga przygotowania w odpowiedni sposób odczynników chemicznych oraz przestrzegania metodyki specyficznych oznaczeń. Na pewność otrzymanych wyników istotny wpływ ma sposób pobierania, utrwalania i przechowywania próbek.

Istotnym elementem jest wybór odpowiedniego miejsca, z którego zostanie pobrane próbki do dalszej analizy „Miejsce pobierania próbek powinno być reprezentatywne”

Pobranie próbki reprezentacyjnej stanowi w decydujący sposób o wyniku analizy. Popęlnienie na tym etapie spowoduje, że otrzymane wyniki nie będą oddawały stanu rzeczywistego.

Częstym źródłem błędów jest również etap odpowiedniego przygotowania próbki do analizy. Może on powodować około 50% popęlnianych błędów. Nie można go jednak pominąć w procesie analizy, ponieważ większość ze stosowanych technik analitycznych nie pozwala na bezpośrednie wykorzystanie próbki pierwotnej.

Literatura:

- [1] K. Lipowska – Grabowska, E. Faron-Lewandowska, *Pracownia chemiczna, analiza wody i ścieków*, WSiP, Warszawa, **1998**.
- [2] J. minczewski, Z. Marzenko, *Chemia analityczna 2 chemiczne metody analizy ilościowej*; PWN, Warszawa, **2007**.
- [3] Polska Norma (właściwa dla poszczególnych procedur).

Mikroekstrakcja w oznaczaniu śladowych ilości pierwiastków techniką rentgenowskiej spektrometrii fluorescencyjnej

Karina Kocot, Rafał Sitko

Zakład Chemii Analitycznej, Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski w Katowicach

W ostatnich latach obserwuje się duże zainteresowanie technikami mikroekstrakcyjnymi, zmniejszającymi w radykalny sposób zużycie rozpuszczalników organicznych. Popularne techniki mikroekstrakcyjne stosowane w analizie nieorganicznej to dyspersyjna mikroekstrakcja typu ciecz-ciecz (ang. dispersive liquid-liquid microextraction, DLLME) [1] oraz dyspersyjna mikroekstrakcja do fazy stałej (ang. dispersive micro-solid phase extraction, DMSPE) [2].

Celem prowadzonych badań było zastosowanie rentgenowskiej spektrometrii fluorescencyjnej (ang. X-ray fluorescence spectrometry, XRF) do jednoczesnego oznaczania śladowych ilości metali ciężkich w próbkach ciekłych. Przebadano dotychczas połączenia:

- DLLME z rentgenowską spektrometrią fluorescencyjną z dyspersją energii (ang. energy-dispersive X-ray fluorescence spectrometry, EDXRF),
- DMSPE z metodą całkowitego odbicia promieniowania rentgenowskiego (ang. total reflection X-ray fluorescence spectrometry, TXRF),
- DMSPE oraz EDXRF.

Opracowane procedury pozwoliły na obniżenie granic wykrywalności, w bardzo prosty, szybki i precyzyjny sposób. W badaniach sprawdzono możliwość zastosowania w charakterze sorbentów nanomateriałów takich jak wielościenne nanorurki węglowe (MWCNTs) oraz grafen. Warto zaznaczyć, że w przypadku DLLME i DMSPE, proces ekstrakcji lub sorpcji oznaczanych pierwiastków jest praktycznie niezależny od czasu. Jest to spowodowane dużą powierzchnią kontaktu pomiędzy analizowanym roztworem a ekstrahentem w przypadku DLLME lub sorbentem w przypadku DMSPE. Celem prowadzonych badań było także opracowanie efektywnych i powtarzalnych metod nanoszenia niewielkich objętości wzbogaconej fazy organicznej na nośnik, tak by otrzymane próbki charakteryzowały się odpowiednimi parametrami.

Zaproponowane rozwiązania zmniejszą zużycie stosowanych odczynników, co w dużym stopniu skraca czas, obniża koszty prowadzenia analizy i sprawia, że opracowane procedury są zgodne z zasadami „zielonej chemii”.

Literatura:

- [1] M. Rezaee, Y. Assadi, M.R.M. Hosseini, E. Aghaee, F. Ahmadi, S. Berijani, *J. Chromatogr. A*, **2006**, 1116, 1-9.
- [2] M. Anastassiades, S.J. Lehotay, D. Stajnbaher, F.J. Schenck, *J. AOAC Int.*, **2003**, 86, 412.

Synteza analogów 5' - difosforanu posiadających w pozycji N⁷ podstawnik butylowy oraz izobutyłowy.

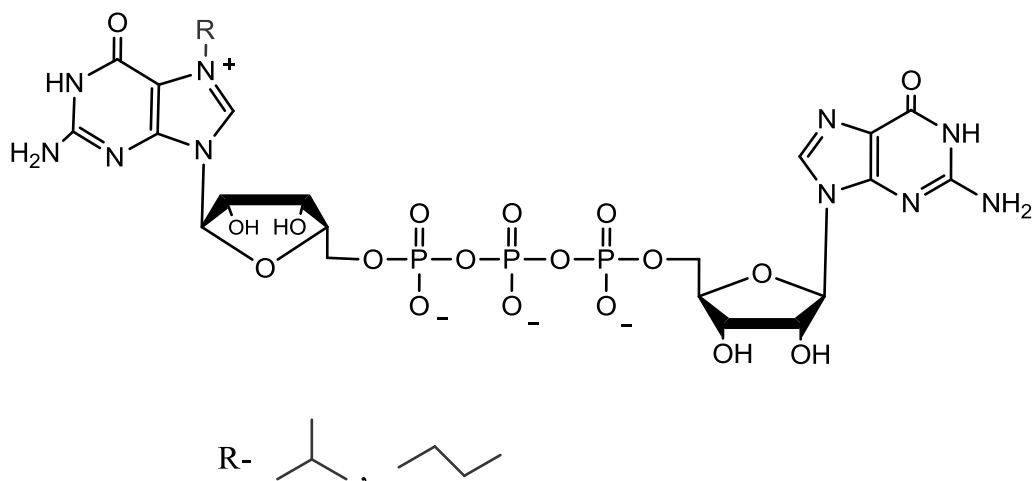
Ilona Koćmik, Karolina Piecyk, Marzena Jankowska-Anyszka

Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, Pasteura 1, 02-089 Warszawa,
Zakład Chemii Organicznej, Pracownia Chemii Biomolekuł

Pierwotne transkrypty powstające w komórce eukariotycznej podlegają dalszej obróbce. Syntetyzowany przez polimerazę RNA II pre-mRNA otrzymuje na 5' końcu strukturę zwaną kapem (ang. cap). Struktura ta składa się z 7-metyloguanozyny połączonej wiązaniem 5',5'-trifosforanowym z kolejnym nukleotydem. Kap pełni bardzo istotną rolę w prawidłowym funkcjonowaniu komórki. Jedną z pełnionych przez niego funkcji jest ochrona mRNA przed degradacją.

W komórce eukariotycznej obecne są enzymy nazywane enzymami dekapującymi (ang. *decapping enzymes*). Enzymy te (m.in. Dcp1/Dcp2, DcpS, Nudt16), różnią się specyficznością substratową i stereochemiczną. Na przestrzeni ostatnich lat zainteresowanie kapem w kontekście degradacji mRNA zaowocowało badaniami z wykorzystaniem ich syntetycznych odpowiedników. Głównym celem tych badań jest poszukiwanie analogów struktury 5' końca mRNA wykazujących zwiększoną odporność na degradację.

W swojej pracy przedstawię obecny stan wiedzy na temat enzymów dekapujących oraz metodę syntezy mononukleotydowych analogów kapu zmodyfikowanych w pozycji N⁷ pierwszej zasady azotowej.



Rysunek 1. Analogi kapu modyfikowane w pozycji N⁷ guanozyny.

Chemia w lustrze, czyli o zastosowaniach peptydów w kosmetykach

Aneta Kołaczek^a

^a Uniwersytet Przyrodniczo – Humanistyczny w Siedlcach, ul. 3 Maja 54, 08-110 Siedlce

Kult młodości i piękna, jaki zapanował w społeczeństwie w ostatnich latach skłania chemików i kosmetologów do poszukiwania nowego remedium na zmarszczki. Dużym zainteresowaniem wśród poszukiwaczy „eliksiru młodości” cieszą się peptydy.

Polimery aminokwasów, pełniące liczne funkcje w organizmach żywych, znalazły zastosowanie w kosmetykach *anti-wrinkle* ze względu na łatwość wnikania w głąb skóry i pobudzania jej do produkcji kolagenu, i elastyny, a co za tym idzie opóźniania procesów starzenia.. Biorąc pod uwagę mechanizm działania peptydy dzieli się na trzy grupy: sygnałowe, rozkurczające, transportujące. Wymienione trzy kategorie są niekiedy łącznie określane mianem peptydów biomimetycznych.

Peptydy sygnałowe to fragmenty kolagenu, które po wprowadzeniu do tkanki skórnej wspomagają jego syntezę i prowadzą do wzrostu fibroblastów, a w konsekwencji poprawy jędrności i napięcia skóry.

Kariera najlepiej poznanego przedstawiciela tej klasy związków chemicznych - botoksu ma się ku schyłkowi, bowiem udało się opracować substancję wielokrotnie mniej toksyczną od toksyny botulinowej. Substancją tą jest acetyloheksapeptyd-3, o nazwie handlowej Argireline. Neuropeptyd hamuje wydzielanie acetylocholino, odpowiedzialnej za przekazywanie impulsów od nerwu do mięśnia, redukując tym samym zmarszczki mimiczne.

Peptydy transportujące współdziałają z jonami miedzi, która to wykazuje działanie przeciwstarzeniowe, antyoksydacyjne, przyspiesza gojenie się ran.

Inne zalety peptydów to m. in.: silne działanie biologiczne, a przy tym niska toksyczność, szybka biodegradowalność, do wad należy zaliczyć wysokie koszty otrzymywania tegoż surowca.

Literatura:

[1] a) M. Kukowska, K. Dzierzbicka, *Wiadomości Chemiczne*, **2010**, vol. 64 nr. 7-8, 631-643; b) Z. Szewczuk, M. Biernat, *Postępy kosmetologii*, **2012**, 1, 25-29 c) W. Kamysz, *Laborant*, **2010**, 1, 22-25 d) W. Kamysz, *Laborant*, **2011**, 2, 38-40 e) A. Gruchlik, E. Chodurek, M. Nowak, Z. Dzierżewicz, *Dermatologia Kliniczna*, **2009**, 11(3), 175-178 f) P. Antończak, M. Jurzak, K. Adamczyk, *Dermatologia Kliniczna*, **2012**, 14(2), 93-96 g) M. Stepulak, *Rynek Kosmetyków i Farmaceutyków*, **2007**, 1 h) W. Kamysz, *Przemysł Kosmetyczny*, **2011**, 2.

[2] J. McMurry, *Chemia organiczna*, PWN, Warszawa, **2003**, 1060-1103.

Poliimidy fotochromowe – wpływ sposobu przyłączenia chromoforu na wybrane właściwości fizykochemiczne

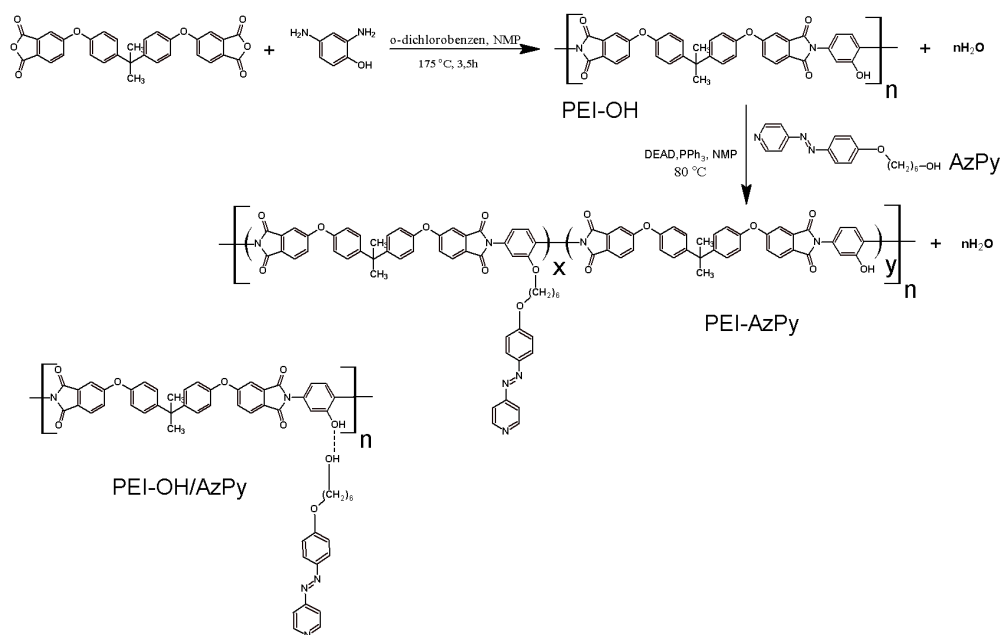
Iolanta Konieczkowska^a, Ewa Schab-Balcerzak^a, Mariola Siwy^b

^a Instytut Chemii Uniwersytetu Śląskiego, ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice

^b Centrum Materiałów Polimerowych i Węglowych PAN, ul. M. Skłodowskiej-Curie 34, 41-819 Zabrze

Intensywny rozwój w dziedzinie fotoniki i optoelektroniki przyczynił się do poszukiwań nowych materiałów o określonych właściwościach, mogących sprostać wciąż rosnącym wymaganiom. W centrum zainteresowań znalazły się poliimidy fotochromowe, będące pochodnymi azobenzenu.^[1]

Celem pracy było otrzymanie polieteroimidu fotochromowego (PEI-AzPy) zawierającego pochodne azobenzenu, połączone kowalencyjnie z łańcuchem polimeru oraz porównanie wybranych właściwości fizykochemicznych z układem domieszkowanym ([PEI-OH/AzPy]).^[2] Na pierwszym etapie syntezowano polieteroimid z grupami hydroksylowymi (PEI-OH) w wyniku wysokotemperaturowej polikondensacji dibezwodnika (4,4'-(4,4-isopropylidenodifenoksy)bisftalowego z dichlorowodorkiem 2,4-diaminofenolu. Otrzymany polimer podstawiono syntezowanym chromoforem 4-(4-(6-hydroksyheksyloksyfenyloazo)pirydyną (AzPy) w wyniku reakcji Mitsunobu. Budowę chemiczną polimerów jak i chromoforu potwierdzono metodami spektroskopowymi ¹HNMR oraz FTIR. Przeprowadzono badania właściwości optycznych (UV-Vis), termicznych (DSC) oraz budowy nadcząsteczkowej (X-Ray) otrzymanych polimerów. Analizowano wpływ sposobu przyłączenia chromoforu jak i jego zawartości na właściwości absorpcyjne w zakresie UV-vis, temperaturę zeszklenia oraz na fotoindukowaną anizotropię optyczną.



Schemat 1. Budowa chemiczna otrzymanych polimerów.

Literatura:

[1] E. Schab-Balcerzak, *Polimery*, **2006**, *7*, 524– 533.

[2] E. Schab-Balcerzak, A. Sobolewska, J. Stupme, Ł. Hamryszak, P. Bujak, *Opt. Mater.*, **2012**, *35*, 155–167.

Indukowana światłem UV synteza nanożeli polimerowych w micelach odwrotnych

Andrzej Kopacz^{a,b}, Sławomir Kadłubowski^a, Piotr Ulański^a,
Janusz M. Rosiak^a

^a Politechnika Łódzka, Międzyresortowy Instytut Techniki Radiacyjnej,
Wróblewskiego 15, 90-924 Łódź

^b Studenckie Koło Naukowe Nanotechnologów „Nano”

Polimerowy żel zbudowany jest, z co najmniej dwuskładnikowego układu: trójwymiarowej sieci łańcuchów polimerowych i cząsteczek rozpuszczalnika, który wypełnia pory tej sieci. Hydrożele (żeły w których rozpuszczalnik stanowi woda) przybierające kształt kłębków o rozmiarach pojedynczych polimerów lub ich agregatów (mikro- bądź nanometrowych) nazywa się mikro- lub nanożelami.

Największym problemem w trakcie syntezy nanożeli jest uniknięcie makroskopowego sieciowania łańcuchów. W tym celu można zastosować micelle odwrotne, czyli sferyczne agregaty utworzone z cząsteczek surfaktantów, których hydrofilowe części otaczają hydrofilowy polimer w środowisku hydrofobowego rozpuszczalnika. Dzięki samoorganizacji środków powierzchniowo czynnych wytwarza się wolna przestawa – „nanoreaktor” w którym można przeprowadzić proces sieciowania i polimeryzacji.

Głównym celem pracy było opracowanie metody syntezy nanożeli diakrylanu poli(glikolu etylowego) z wykorzystaniem micel odwrotnych, jako nanoreaktorów oraz światła ultrafioletowego, jako inicjatora procesów polimeryzacji i sieciowania. W celu sprawdzenia efektywności metody zastosowano pomiary metodą dynamicznego rozpraszania światła.

Literatura:

- [1] G.J.M. Fechine, J.A.G. Barros, L.H. Catalani, *Polymer*, **2004**, 45, 4705-4709
- [2] Y. Hamzah, N. M. Isa, W. M. Z. W. Yunus, *Pertanika J. Science & Technology*, **2012**, 20, 401-407
- [3] E. Witek, A. Kochanowski, M. Pazdro, E. Bortel, *Polimery*, **2006**, 51, 507-516

Gdzie najlepiej pić kawę? Porównanie zawartości kofeiny w kawach dostępnych w popularnych kawiarniach

Ewa Kozłowska^a, Andrzej Draus^b

^a SKN „OrgChem”, Katedra Chemii, Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu

^b Katedra Chemii, Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu

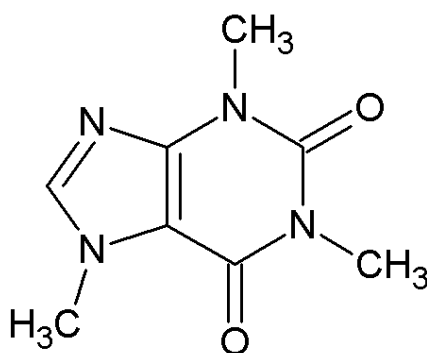
Kofeina jest alkaloidem purynowym o działaniu psychostymulującym. Hamuje ona działanie receptorów adenozynowych w mózgu czego skutkiem jest polepszenie ukrwienia mózgu oraz odczuwalne pobudzenie i polepszenie koncentracji.^[1]

Kofeina naturalnie występuje w liściach, ziarnach i owocach kilkudziesięciu gatunków roślin z czego najbardziej popularne są liście herbaty i ostrokrzewu (yerba mate), ziarna kawy i kakaowca oraz owoce guarany.

Stale rosnące tempo życia i konieczność sprostania wielu wymaganiom powoduje wzrost spożycia napojów zawierających kofeinę takich jak: kawa, herbata czy napoje energetyzujące. Mimo szybko rosnącego rynku napojów energetycznych, kawa pozostaje głównym źródłem kofeiny dla przeciętnego konsumenta.

Zawartość kofeiny w kawie zależy od gatunku i odmiany kawy, warunków w jakich rosła, sposobu palenia ziaren oraz samego sposobu przyrządzania naparu. Ilość kofeiny może wahać się od 27 do 153 mg na porcję.^[2]

Materiałem badawczym były próbki kaw dostępnych w popularnych kawiarniach na terenie Wrocławia. Zawartość kofeiny analizowano za pomocą wysokosprawnej chromatografii cieczowej (HPLC) z detektorem UV-VIS. Wyniki porównano między sobą.



Schemat 1. Wzór strukturalny kofeiny.

Literatura:

[1] E. Mutschler, G. Geisslinger, H.K. Kroemer, P. Ruth, M. Schafer-Kortig, *Kompendium farmakologii i toksykologii Mutschlera*, MedPharm Polska, Wrocław, 2008.

[2] M. Jarosz, R. Wierzejska, H. Mojska, K. Świdorska M. Siuba, *Bromatologia i Chemia Toksykologiczna*, 2009, 3, 776-781.

Eksploracja danych chromatograficznych opisujących próbki oleju napędowego

B. Krakowska^a, M. Daszykowski^a, I. Grabowski^b, G. Zaleszczyk^b, M. Sznajder^b

^a*Zakład Chemii Analitycznej, Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski
ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice*

^b*Laboratorium Celne Izby Celnej w Białej Podlaskiej,
ul. Celników Polskich 21, 21-500 Biała Podlaska*

W dobie rozwiniętego przemysłu paliwowego wytwarzającego różnego rodzaju produkty ważne jest stałe monitorowanie składu chemicznego paliw stosowanych na terenie naszego kraju. Olej napędowy jest paliwem składającym się głównie z węglowodorów alifatycznych i aromatycznych pozyskiwanych w trakcie procesów przeróbki ropy naftowej jak również od 2011 roku dopuszcza się w oleju napędowym obecność estrów metylowych kwasów tłuszczowych (ang. Fatty Acid Methyl Esters, FAME) w ilości mniejszej niż 7% [1]. Poza głównymi składnikami paliwo to zawiera także różnego rodzaju dodatki odpowiadające za określone właściwości m.in. uszlachetniające np. zapewniające dobrą pracę silnika, poprawiające własności zimowe. Metodą wiodącą stosowaną w celu charakteryzacji paliw w przemyśle petrochemicznym jest chromatografia gazowa (ang. Gas Chromatography, GC), która charakteryzuje się relatywnie dużą rozdzielczością. Złożony skład chemiczny olejów napędowych powoduje, że każdy chromatogram uzyskany na podstawie ich analizy traktowany jest jako chromatograficzny odcisk palca. Do analizy tego typu danych chromatograficznych niezbędne jest zastosowanie zaawansowanych technik modelowania danych.

W prezentowanej pracy chromatograficzne odciski palca olejów napędowych uzyskiwano za pomocą chromatografii gazowej z detekcją płomieniowo-jonizacyjną (ang. Gas Chromatography - Flame Ionization Detector, GC-FID). Przeprowadzona analiza miała na celu porównanie próbek oleju napędowego m.in. ze względu na skład komponentów i pochodzenie geograficzne. W tym celu wykonano analizę eksploracyjną stosując analizę czynników głównych (ang. Principal Component Analysis, PCA) [2]. Surowe chromatogramy przed zastosowaniem metody PCA poddano wstępnemu przygotowaniu danych (usunięto linię bazową i nałożono na siebie przesunięte piki). Przeprowadzona analiza eksploracyjna umożliwiła zaobserwowanie dwóch grup próbek, które różniły się zawartością FAME.

Literatura:

- [1] Ustawa z dnia 27 maja 2011r. o zmianie ustawy o systemie monitorowania i kontrolowania jakości paliw oraz innych ustaw (Dz.U. 2011 nr 153 poz. 902)
- [2] S. Wold, K. Esbensen, P. Geladi, Chemom. Intell. Lab. Syst., 1987, 2, 37-52.

Acyłowe pochodne flawonoidów i ich aktywność przeciwutleniająca

inż. Adam Krzyżak, dr hab. inż. Mirosław Anioł, dr inż. Anna Żołnierczyk
Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu

Flawonoidy to związki zaliczane do polifenoli, zawierające charakterystyczny szkielet 2-fenylochromanu. Przedstawicielami tej grupy związków są obecne w szyszkach chmielowych pochodne chalkonów, np. ksantohumol oraz prenyłowe pochodne 2-fenylochromanu, np. 8-prenylnaryngenina. Oba te związki wykazują szereg prozdrowotnych właściwości. Ksantohumol wykazuje silne właściwości antyoksydacyjne,^[1] przeciwwirusowe^[2] oraz antybakteryjne i przeciwgrzybiczne.

Acyłacja polega na wprowadzaniu do struktury cząsteczki grupy acylowej, w wyniku czego otrzymuje się m.in. estrowe pochodne danego związku. Można w ten sposób wpływać na charakter modyfikowanego związku, np. zmieniać jego właściwości lipofilowe.

Acyłacja ksantohumolu i naryngeniny to jedna z dróg otrzymywania pochodnych tych związków. Można w ten sposób zwiększać hydrofilowość cząsteczek flawonoidów, w zależności od charakteru dodawanej grupy acylowej. Uzyskane pochodne mogą stanowić interesujące związki o charakterze proleków.

Celem badania było określenie efektywności acylacji ksantohumolu i naryngeniny oraz określenie aktywności przeciwutleniającej powstałych pochodnych.

Literatura:

- [1] Stevens J.F., Page J.E.: 2004. Xanthohumol and related prenylflavonoids from hops and beer to your good health. *Phytochemistry*, 65, 1317–1330.
- [2] Buckwold V.E., Wilson R.J.H., Nalca A., Beer B.B., Voss T.G., Turpin J.A., Buckheit III R.W., Wei J., Wenzel-Mathers M., Walton E.M., Smith R.J., Pallansch M., Ward P., Wells J., Chuvala L., Sloane S., Paulman R., Russell J., Hartman T., Ptak R.: 2004. Antiviral activity of hop constituents against a series of DNA and RNA viruses. *Antivir. Res.*, 61, 576–62

Inteligentne materiały elastomerowe - magnetyczne i magnetoreologiczne

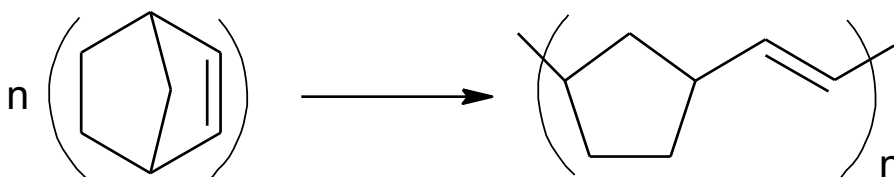
Włodzimierz Kucharek^{a,b}, Marcin Masłowski^a, Marian Zaborski^a

^a Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny, Instytut Technologii Polimerów i Barwników, ul. Stefanowskiego 12/16, 90-924 Łódź

^b Koło Naukowe „TROTYL”, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka, ul. Żeromskiego 116, 90-924 Łódź

Materiały inteligentne są materiałami zmieniającymi swoje właściwości w odpowiedzi na zmiany warunków otaczającego środowiska (bodźce zewnętrzne). Zaliczamy do nich elastomery magnetoreologiczne, których właściwości ulegają zmianie pod wpływem przyłożonego pola magnetycznego. W wyniku tego oddziaływania następuje wzrost sztywności i modułu elastyczności. MRE składają się z ośrodka elastomerowego ze zdyspergowanymi w nim cząstkami ferromagnetycznymi. Najczęściej stosuje się elastomery silikonowe, a jako napełniacz związki żelaza. MRE charakteryzują się dużą zdolnością do tłumienia drgań oraz wibracji. Ze względu na swoje unikalne właściwości możliwości zastosowań elastomerów magnetoreologicznych są bardzo szerokie.

Celem moich badań było uzyskanie wulkanizatów charakteryzujących się dobrymi właściwościami magnetycznymi i magnetoreologicznymi, a także polepszonymi właściwościami mechanicznymi. Wykorzystałem elastomer specjalnego przeznaczenia - polinorbornen (nazwa handlowa - Norsorex 150 HNA), otrzymywany w wyniku metatycznej polimeryzacji z otwarciem pierścienia węglowego norbornenu. Zastosowałem jako napełniacz magnetoaktywny tlenek żelaza Fe_3O_4 o różnych rozmiarach cząstek: mikrometryczny i nanometryczny oraz zbadałem ich wpływ na właściwości polimeru.



Schemat 1. Równanie reakcji otrzymywania polinorbornenu.

Literatura:

- [1] Schodek D.L., Encyclopedia of Materials - Science and Technology, Tom 1, Elsevier Science, Oxford, **2001**, 331-332.
- [2] Boczkowska A., Awietjan S., Polimery, **2009**, 54, 26-30.
- [3] Kauffman G.B., Journal of Chemical Education, **1990**, 67, 198-199.

Optymalizacja procesu syntezy liniowych kopoliestrów zawierających bloki polilaktydu

Anna Kundys, Ewelina Cendrowska, Anita Józwiak,
Andrzej Plichta, Zbigniew Florjańczyk

*Wydział Chemiczny Politechniki Warszawskiej, Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa
e-mail:akundys@ch.pw.edu.pl*

Celem badań prowadzonych w ramach pracy dyplomowej było znalezienie optymalnych warunków procesu syntezy liniowych kopoliestrów zawierających bloki polilaktydu. Przeprowadzono szereg reakcji polimeryzacji z otwarciem pierścienia laktydu, w których otrzymano kopolimery PLA. W procesie wykorzystywano dwa makroinicjatory: kopolimer alifatyczno-aromatyczny poli(adypinian-co-tereftalan-butyleny) (PBAT) oraz kopolimer alifatyczny poli(adypinian butyleny) (PBA). Zadaniem makroinicjatorów było uelastycznienie łańcuchów otrzymanych kopolimerów blokowych. Optymalizacja polegała na otrzymaniu kopolimerów, o jak największym ciężarze cząsteczkowym i maksymalnej konwersji monomeru.

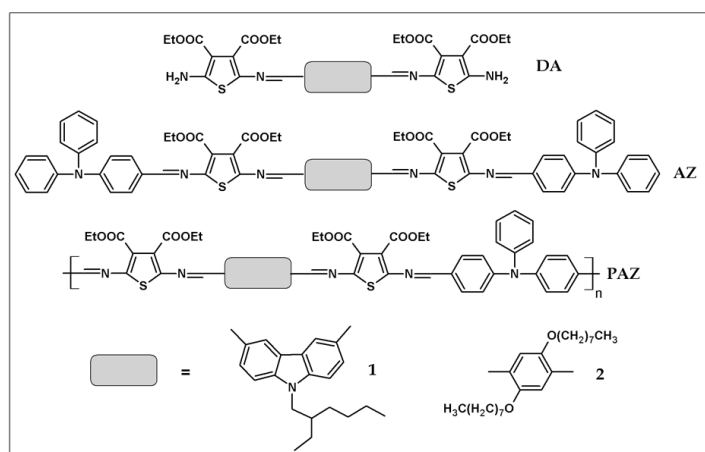
Każda reakcja prowadzona była w stałej temperaturze, 190°C, przy założonym stosunku molowym laktydu do makroinicjatora oraz przez ustalony czas. Otrzymane produkty poddawane były analizie GPC oraz ¹HNMR, na podstawie, których możliwe było scharakteryzowanie uzyskanego kopolimeru.

Badania zostały wykonane w ramach projektu POIG.01.01.02-10-025/09 BIOPOL pt. „Technologia otrzymywania biodegradowalnych poliestrów z wykorzystaniem surowców odnawialnych” współfinansowanego przez Unię Europejską – Europejski Fundusz Rozwoju Regionalnego.

Nowe (poli)azometyny zawierające grupy tiofenowe

Marlena Madej, Marzena Grucela-Zajac, Ewa Schab-Balcerzak
Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski, ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice

Azometyny (AZ) i poliazometyny (PAZ), to interesująca grupa związków organicznych zawierających w strukturze wiązanie iminowe ($-\text{HC}=\text{N}-$). Związki te wykazują wiele cennych właściwości fizykochemicznych predestynujących je do zastosowań w różnych dziedzinach. Charakteryzują się wysoką stabilnością termiczną, właściwościami ciekłokrystalicznymi, włóknotwórczymi oraz optycznie nieliniowymi (NLO), posiadają również zdolności chelatujące [3]. Ze względu na delokalizację chmur π -elektronowych mogą być stosowane jako materiały elektroniczne, optoelektroniczne lub fotoniczne [1,3]



Schemat 1. Struktury chemiczne otrzymanych związków

W niniejszej pracy przedstawiono nowe związki modelowe zawierające w swojej strukturze grupy tiofenowe oraz odpowiadające im poliazometyny. Do syntezy zastosowano nowe diaminy (DA) oraz (di)aldehid zawierający trójfenyloaminę. Badania właściwości termicznych otrzymanych związków obejmowały wyznaczenie temperatury zeszklenia (T_g) lub/i topnienia (T_t) za pomocą różnicowej kalorymetrii skaningowej (DSC) oraz określenie ich stabilności termicznej metodą termogravimetryczną (TGA). Badania właściwości optycznych obejmowały pomiary absorpcji w zakresie UV-Vis jak i fotoluminescencji (PL) w rozpuszczalnikach o różnej polarności (chloroform ($\epsilon=4,81$), N-metylopirolidon ($\epsilon=33,00$)), jak i w ciele stałym w postaci blend z poli(metakrylanem metylu). Dla wybranych związków przeprowadzono badania właściwości elektrochemicznych metodą cyklowoltamperometrii (CV) oraz różnicowej woltamperometrii pulsowej (DPV).

Literatura:

- [1] S.A.P.Guarin, M. Bourgeaux, S. Dufresne, W.G. Skene, *J. Org. Chem.*, **2007**, 72, 2631-2643.
- [2] A. Bolduc, L. Rivier, S. Dufresne, W.G. Skene, *Mater. Chem. Phys.*, **2012**, 132, 722- 728.
- [3] A. Iwan, D. Sek, *Prog. Polym. Sci.*, **2008**, 33, 289-345.

Mikrobiologiczna hydroksylacja (+)- β -tujonu w kulturze *Absidia coerulea* AM 93

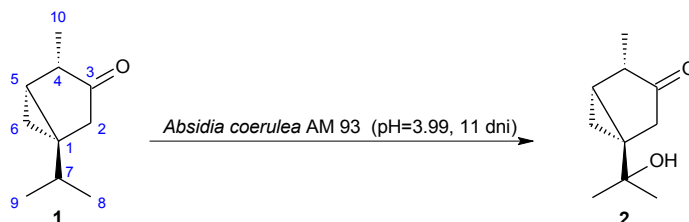
Wojciech Majchrzak^a, Radosław Gniłka^b

^a Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Wydział Biologii i Hodowli Zwierząt

^b Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Katedra Chemii

Tujon to monoterpenowy, bicykliczny keton, naturalnie występujący pod postacią dwóch diastereoizomerów (-)- α - i (+)- β -tujonu. Jest również składnikiem wielu olejków eterycznych m.in. z piołunu (*Artemisia absinthium*), wrotyczu (*Tanacetum vulgare*), szalwi lekarskiej (*Salvia officinalis*) oraz żywotnika zachodniego (*Thuja occidentalis*). Izomery tujonu posiadają wiele cennych właściwości biologicznych: owadobójczą,^[1] przeciwdrobnoustrojową,^[2] immunostymulującą,^[3] przeciwnowotworową^[4] oraz przeciwcukrzycową.^[5] Ponadto tujon wykazuje inhibicyjny wpływ na receptory GABA_A^[6] oraz jest antagonistą receptorów 5-HT₃.^[7]

W tej pracy przedstawiono wyniki biotransformacji (+)- β -tujonu (1) w kulturze *Absidia coerulea* AM 93 (Schemat). (+)- β -Tujon (1) pozyskano z olejku eterycznego z żywotnika zachodniego (*Thuja occidentalis*) według procedury opracowanej przez Gniłkę i in. [8]. Produktem biotransformacji okazał się 7-hydroksy- β -tujon (2), który tworzył się w wyniku mikrobiologicznej hydroksylacji.



Literatura:

- [1] R. Pavela, *Fitoterapia*, 2005, 76, 691-696;
- [2] D. Tsiri, K. Graikou, L. Pobłocka-Olech, M. Krauze-Baranowska, C. Spyropoulos, I. Chinou, *Molecules*, 2009, 14, 4707-4715;
- [3] K.S. Siven, G. Kuttan, *Int. Immunopharmacol.*, 2011, 11, 1967-1975;
- [4] K.S. Siven, G. Kuttan, *Can. J. Physiol. Pharmacol.*, 2011, 89, 691-703;
- [5] H. Alkhateeb, A. Bonen, *Am. J. Physiol. Regul. Integr. Comp. Physiol.*, 2010, 299, 804-812;
- [6] A. Hall, C. Turcotte, B. Betts, W.-Y. Yeung, A. Agyeman, L. Burk, *Eur. J. Pharmacol.*, 2004, 506, 9-16;
- [7] T. Deiml, R. Hasender, W. Zieglgansberger, G. Rammes, B. Eisensamer, R. Rupprecht, G. Hapfelmeier, *Neuropharmacology*, 2004, 46, 192-201;
- [8] R. Gniłka, A. Szumny, A. Białońska, C. Wawrzeńczyk, *Phytochem. Lett.*, 2012, 5, 340-345.

Badania finansowane z projektu "Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym" POIG.01.03.01-00-158/09 współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

Biosurfaktanty drobnoustrojowe jako alternatywa dla klasycznych surfaktantów

Diana Mańko, Anna Zdziennicka, Bronisław Jańczuk

*Zakład Zjawisk Międzyfazowych, Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemii UMCS,
Pl. Marii Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin*

Związki powierzchniowo czynne charakteryzują się amfifilową budową cząsteczki dzięki czemu wykazują zdolność do adsorpcji na różnego typu granicach faz i zmiany napięcia międzyfazowego oraz tworzenia, po przekroczeniu tzw. krytycznego stężenia micelizacji (CMC), agregatów koloidalnych rozmiarów zwanych micelami.^[1] Takie zachowanie się związków powierzchniowo czynnych jest powodem ich szerokiego zastosowania w różnych gałęziach przemysłowych, rolnictwie i w życiu codziennym. Zużycie surfaktantów systematycznie wzrasta co powoduje, że związki te mają bardzo duży wpływ na nasze środowisko naturalne, niestety często niekorzystny. Dlatego też trwają liczne badania nad opracowaniem nowej grupy surfaktantów, które oprócz właściwości typowych dla klasycznych surfaktantów odznaczałyby się dobrą biodegradowalnością, niską toksycznością i byłyby otrzymywane w oparciu o surowce odnawialne.

Taką grupą są biosurfaktanty drobnoustrojowe, które należą do związków pochodzenia naturalnego i są biosyntezowane przez mikroorganizmy takie jak np. pleśnie, bakterie, grzyby. W porównaniu do klasycznych surfaktantów odznaczają się one mniejszą toksycznością, większą biodegradowalnością, a przy tym są odporne na zmiany pH, temperatury i zasolenie środowiska. Dodatkowo mają stosunkowo niskie wartości krytycznego stężenia micelizacji, wykazują różnorodną aktywność biologiczną i cechuje je niski koszt wytwarzania przy masowej produkcji. Takie cechy biosurfaktantów są przyczyną licznych badań dotyczących możliwości zastosowania ich w celach zarówno przemysłowych, jak i kosmetycznych.^[2]

Jednym z biosurfaktantów wykorzystywanych w kosmetyce, farmacji, przy oczyszczaniu środowiska naturalnego, a także w roli pestycydu jest rhamnolipid, glikolipid wytwarzany przez bakterie z gatunku *Pseudomonas aeruginosa*.^[2]

Wykorzystywanie biosurfaktantów wymaga nie tylko znajomości ich właściwości biologicznych, ale również poznania ich efektywności jako substancji obniżających napięcie powierzchniowe wody czy też poprawiających zwilżalność ciał stałych.

Literatura:

- [1] Milton J. Rosen, *Surfactants and interfacial phenomena*; Published by John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, **2004**, 1-3, 34-35, 105-106.
- [2] J. Krzyczkowska, E. Białecka-Florjańczyk, *Żywność. Nauka. Technologia. Jakość*, **2012**, 4 (83), 5-23.

AC driven light emitting devices fabricated on interdigitated ITO substrate

Mateusz Marchel^{a,b}, Lieven Pennick^{c,d}, Kristiaan Neyts^{c,d}

^a Lodz University of Technology

^b SKN "Nano"

^c Department of Electronics and Information Systems, Ghent University

^d Center for Nano-and Biophotonics (NB-Photonics), Ghent University

Organic light emitting devices are considered as a very promising modern light sources. They have many advantages towards conventional ones, like common inorganic diodes. That is why OLEDs gain more and more attention from companies. Still, a lot of work has to be done to acquire optimised device that can be used as efficient light source.

In this approach we used interdigitated glass substrate with pre-coated layer (~30 nm) of ITO. Different solutions of Tris(8-hydroxyquinolato)aluminium (Alq_3) and Carbon Nanotubes (CNTs) in chloroform. Then organic layer was spin coated on clean substrate. After ultrasonic soldering of electrodes IV characteristics was measured and AC voltage was applied.

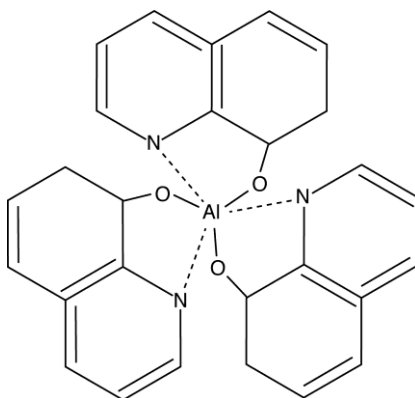


Figure 1. Alq_3 structure.

Literatura:

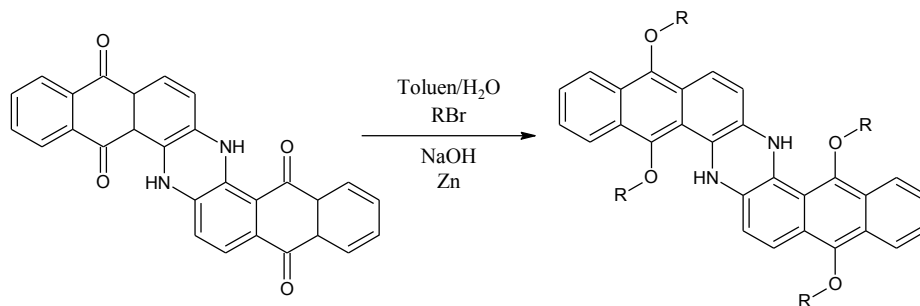
[1] a) Michael Flämmich, Jörg Frischeisen, Daniel S. Setz, Dirk Michaelis, Benjamin C. Krummacher, Tobias D. Schmidt, Wolfgang Brütting, Norbert Danz, *Organic Electronics* **2011**, 12, 1663-1668; b) Philipp Liehm, Caroline Murawski, Mauro Furno, Björn Lüssem, Karl Leo, Malte C. Gather, *Applied Physics Letters*, **2012**, 101, 253304; c) Jörg Frischeisen, Daisuke Yokoyama, Chihaya Adachi, Wolfgang Brütting, *Applied Physics Letters*, **2010**, 96, 073302; d) L. Penninck, F. Steinbacher, R. Krause, K. Neyts, *Organic Electronics*, 2012, 13, 3079-3084; e) Markus Fröbel, Ajay Perumal, Tobias Schwab, Malte C. Gather, Björn Lüssem, Karl Leo, *Organic Electronics*, **2013**, 14, 809-813

Pochodne indantronu jako nowe związki półprzewodnikowe dla elektroniki organicznej

M. Materna, K. Kotwica, P. Bujak
*Politechnika Warszawska Wydział Chemiczny
 ul. Noakowskiego 3 00-664 Warszawa*

W ostatnich dwóch dekadach obserwuje się intensywny rozwój badań dotyczących syntezy i zastosowań nowych półprzewodników organicznych. Najistotniejszymi z punktu widzenia zastosowań technologicznych cechami tych nowych związków są: i) możliwość kontrolowanej zmiany ich właściwości elektronicznych i opto-elektronicznych przez odpowiednią funkcjonalizację oraz ii) ich przetwarzalność z roztworu. Ta druga cecha pozwala na łatwe nanoszenie warstw aktywnych diod elektroluminescencyjnych (ang. LEDs) na dużych powierzchniach lub na drukowanie obwodów scalonych, których elementami są organiczne tranzystory polowe.^[1]

Przedstawiona praca wpisuje się w ten nurt badawczy. W poszukiwaniu nowych półprzewodników do zastosowań w elektronice organicznej często powraca się do istniejących już barwników syntetycznych, których struktura chemiczna pozwala na ich obiecującą funkcjonalizację. Jednym z takich związków jest 6,15-dihydrodinafto [2,3-a:2,3-h]fenazyjno-5,9,14,18-tetron czyli indantron. Przedstawiamy tutaj syntezę oraz wstępne badania elektrochemiczne i spektroskopowe jego pochodnych 5,9,14,18-tetraalkoksy-6,15-dihydrodinafto[2,3-a:2,3-h]fenazyjno-5,9,14,18-tetronów.



R = n-oktan lub 2-etyloheksan

Schemat 1. Schemat otrzymywania pochodnej indantronu.

Literatura:

[1] A. Proń, P. Gawryś, M. Zagórska, D. Djurado and R. Demadrille, *Chemical Society Reviews*, 2010, 39, 2577-263

Praca wykonana w ramach projektu TEAM/2011-8/6 "New solution processable organic and hybrid (organic/inorganic) functional materials for electronics, optoelectronics and spintronics"

Adsorpcja palladu(II) na modyfikowanym SBA-15

A. Mróz, J. Dobrzyńska, M. Otto, R. Dobrowolski

*Uniwersytet Marii Curie Skłodowskiej, Wydział Chemii, Zakład Chemii Analitycznej
i Analizy Instrumentalnej, Pl. M.C. Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin*

Ze względu na rosnące użycie palladu w katalizatorach, stomatologii oraz przemyśle telekomunikacyjnym, konieczna staje się kontrola jego zawartości w żywności, wodach, glebach, a także w ludzkich tkankach. Znaczna ilość związków palladu emitowanych do środowiska jest rozpuszczalna w wodzie, a co za tym idzie mobilna i dostępna dla organizmów żywych.^[1] Istotnym wyzwaniem jest zatem pozyskanie palladu i innych metali szlachetnych ze ścieków przemysłowych. Bardzo efektywnym sposobem wydzielania i odzyskiwania palladu jest jego adsorpcja na sorbentach stałych wykazujących znaczne powinowactwo do tego pierwiastka. Idealnie do tego celu są krzemoorganiczne materiały oparte o heksagonalną strukturę SBA-15.

Stwierdzono, że mezoporowate materiały typu SBA-15 zawierające w swojej strukturze odpowiednie grupy organiczne wykazują silne powinowactwo do jonów metali szlachetnych.^[2] Jednakże, właściwości adsorpcyjne w dużym stopniu zależą od ilości i rodzaju powierzchniowych grup funkcyjnych wprowadzonych do struktury materiału, warunków syntezy oraz związanej z nimi porowatości. SBA-15 charakteryzują się bardzo dużą powierzchnią właściwą, niekiedy przekraczającą 1000 m²/g.

W niniejszej pracy zbadano możliwość zastosowania modyfikowanego SBA-15 do adsorpcji jonów Pd(II). Materiały wykorzystane do badań otrzymano stosując jednoetapową metodę syntezy zol-żel. Kondensacji poddano tetraetoksylan (TEOS) oraz monomery zawierające atomy azotu N-[3-(trimetoksylilo)propyl]-etylenodiaminę (TMPD) oraz 3-aminopropylotrietoksylan (APTS). W celu wyznaczenia optymalnych warunków adsorpcji określono wpływ pH na adsorpcję jonów Pd(II) oraz zbadano kinetykę adsorpcji. Określono przebieg izoterm adsorpcji jonów Pd(II) na modyfikowanych SBA-15. Zbadano efektywność desorpcji palladu z SBA-15 przy użyciu roztworów kwasu azotowego(V), chlorowodorowego oraz kwaśnego roztworu tiomocznika o różnych stężeniach. Na podstawie przeprowadzonych badań wykazano, że pojemności adsorpcyjne badanych materiałów względem jonów Pd(II) są bardzo duże, co stwarza możliwość ich praktycznego zastosowania do oczyszczania ścieków zawierających pallad.

Literatura:

- [1] K.H. Ek, G.M. Morrison, S. Rauch, *Science of the Total Environment*, **2004**, 334, 21.
- [2] T. Kang, Y. Park, J. Yi, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **2004**, 43, 1478.

Zmiany struktury powierzchni komercyjnego tlenku glinu pod wpływem działania wysokiej temperatury

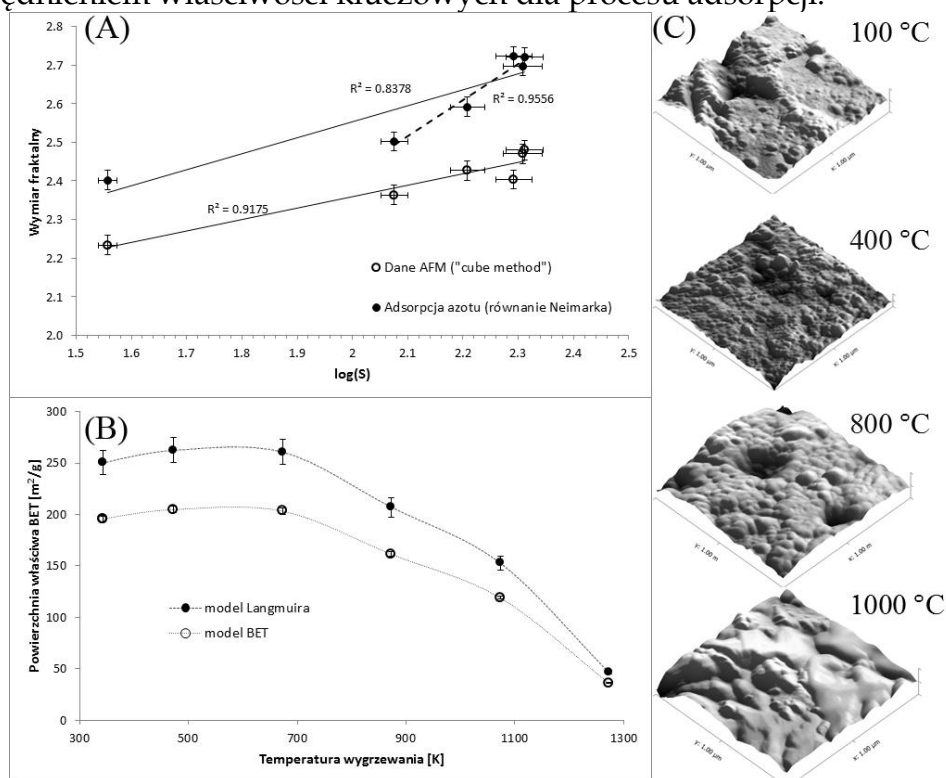
Dawid Myśliwiec^a

^aZakład Radiochemii i Chemii Koloidów, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej

Pl. M. Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin

Tlenek glinu jest jednym z najlepiej przebadanych i najczęściej stosowanych w przemyśle adsorbentów. Dzieje się tak dlatego, że jest on stosunkowo tani i łatwo podatny na modyfikacje, np. po dodatku soli kadmu można przy jego pomocy skutecznie rozdzielić węglowodory krótkołańcuchowe (oraz ich izomery).^[1] Dużym problemem jest jednak utrzymanie aktywności adsorpcyjnej tego związku na stałym poziomie. Jest to konsekwencja skłonności powierzchni do adsorbowania pary wodnej i dwutlenku węgla z powietrza.^[2] Dlatego producenci zalecają aktywację tlenku glinu w temperaturach z zakresu 200-600°C.

Celem prezentowanych badań jest sprawdzenie jak zmienia się struktura adsorbentu w zależności od temperatury wygrzewania, ze szczególnym uwzględnieniem właściwości kluczowych dla procesu adsorpcji.



Rysunek 1. Zależność: (A) wymiaru fraktalnego powierzchni od logarytmu powierzchni właściwej tlenku glinu, (B) powierzchni właściwej wyznaczonej metodą niskotemperaturowej adsorpcji azotu od temperatury wygrzewania tlenku glinu, (C) topografii powierzchni tlenku glinu (obrazy AFM) w zależności od temperatury wygrzewania.

Literatura:

- [1] Z. Witkiewicz, *Podstawy chromatografii*, WNT, Warszawa, 2005.
- [2] A. Bielański, *Podstawy chemii nieorganicznej*, PWN, Warszawa 2007.

Odwrócona mikroemulsja jako "reaktor" do syntezy nanocząstek polimerowych

Beata Nagórniewicz^{a,b}, Sławomir Kadłubowski^a, Piotr Ulański^a, Janusz M. Rosiak^a

^aPolitechnika Łódzka, Międzyresortowy Instytut Techniki Radiacyjnej,

^bStudenckie Koło Naukowe Nanotechnologów 'Nano'

email: bnagorniewicz@gmail.com

Hydrożele, trójwymiarowe sieci polimerowe z wodą wypełniającą jej wolne przestrzenie, odgrywają coraz większą rolę. Wraz z rozwojem nowych technologii, rozwijają się też metody ich syntezy i rodzaje otrzymywanych produktów. Wśród różnych rodzajów hydrożeli wyodrębnić można tzw. nanożele, które w przeciwieństwie do klasycznych hydrożeli o ciągłej budowie „od ścianki do ścianki”, są pojedynczymi usieciowanymi makromolekułami o nanometrycznych wymiarach.

Największym wyzwaniem w trakcie syntezy struktur o tak małych wymiarach jest uniknięcie makroskopowego sieciowania łańcuchów. Jedną z metod syntezy rozwiązuje ten problem przy pomocy micel odwrrotnych - sferycznych agregatów utworzonych z cząsteczek amfifilowych, otaczających hydrofilowe cząsteczki polimerów w środowisku hydrofobowego rozpuszczalnika. Dzięki zjawisku samoorganizacji cząsteczek surfaktanta, powstaje wolna przestrzeń, swoisty „nanoreaktor”, w którym można zamknąć pewną ilość polimeru rozpuszczonego w wodzie i uchronić go w ten sposób przed usieciowaniem w struktury o niepożądanym dużym rozmiarze. Dodatkowo sterowanie rozmiarem miceli pozwala na sterowanie średnicą powstającej nanocząstki. [1,2,3]

Celem prowadzonych badań była radiacyjna synteza i scharakteryzowanie nanożeli polimerowych. Substratem do syntezy był poli(eter winylowo-metylowy) (PVME) - polimer czuły na zmiany temperatury, o LCST ok. 37°C. Źródłem promieniowania jonizującego był liniowy akcelerator przyspieszonych elektronów. Otrzymane nanocząstki zostały zbadane pod kątem rozmiarów, struktury i stabilności tych parametrów w czasie. Dodatkowo zbadane zostały zachowania i parametry nanożelu PVME powyżej i powyżej dolnej krytycznej temperatury mieszalności.

Praca była współfinansowana ze środków Narodowego Centrum Badań i Rozwoju

N R05 007306/2009 oraz Międzynarodową Agencję Energii Atomowej CRP No. 15473.

Literatura:

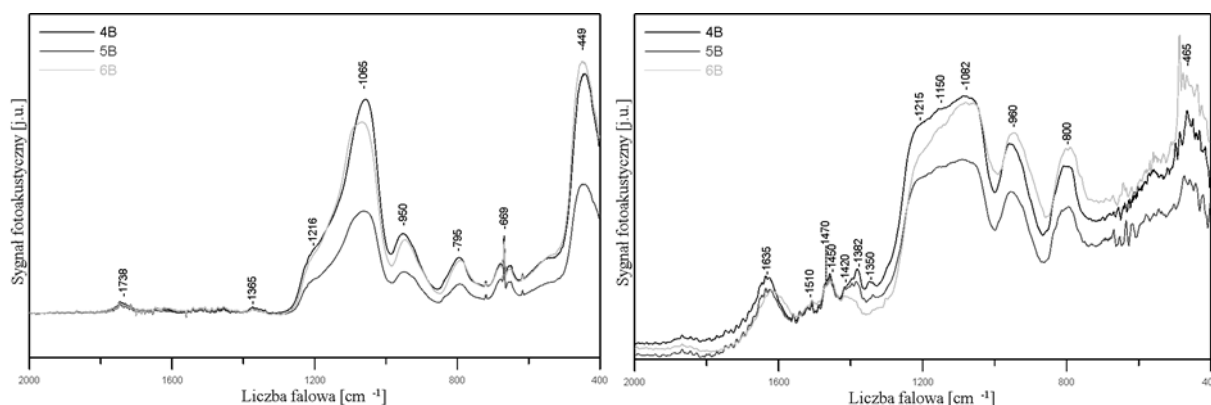
- [1] De Buruaga A. S., De La Cal J. C., Asua J. M., *J. Polym. Sci. Part. A Polym. Chem.*, **1999**, Vol. 37, 13: 2167-2178.
- [2] Ganguli A. K., Ahmad T., Vaidya S., *Pure Appl. Chem.*, **2008**, Vol. 80, No. 11, pp. 2451-2477.
- [3] Note C., Rufin J., Tiersch B., Koetz J., *J. Dispersion Sci. Technol.*, **2007**, 28:155-164.

Spektroskopia FT-IR/PAS i FT-IR/ATR w badaniach właściwości modyfikowanych aminami mezoporowatych materiałów krzemionkowych

Tomasz Olejnik

Zakład Technologii Chemicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, Pl. Marii Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin

W celu określenia charakteru chemicznego powierzchni materiałów krzemionkowych konieczne jest omówienie grup silanolowych obecnych na powierzchni krzemionki. Bardzo przydatną metodą w tego typu badaniach jest spektroskopia w podczerwieni z transformacją Fouriera. Za pomocą dwóch technik spektroskopowych FT-IR/ATR i FT-IR/PAS zanalizowano skład otrzymanych materiałów krzemionkowych modyfikowanych grupami aminowymi.



Rys. 1. Widma FT-IR/ATR (po lewej) i FT-IR/PAS (po prawej) próbek materiałów mezoporowatych modyfikowanych aminami w zakresie 2000-400 cm^{-1} .

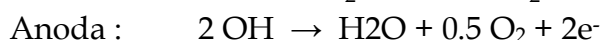
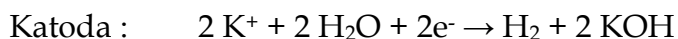
Na podstawie otrzymanych wyników badań powierzchni spreparowanych materiałów metodami FT-IR/ATR, FT-IR/PAS można wnioskować, że spektroskopia ATR nie jest techniką odpowiednią do obserwacji procesów zachodzących podczas syntezy i adsorpcji jonów metali na powierzchni materiałów krzemionkowych SBA-15. Spektroskopia FT-IR/PAS jest natomiast znakomitym narzędziem do obserwacji grup aminowych wprowadzanych w trakcie syntezy (im więcej modyfikatora tym pasma drgań grup aminowych są intensywniejsze), łączenia się jonów metalu z grupami funkcyjnymi modyfikatora (zanik na widmach pasm pochodzących od grup aminowych oraz izolowanych grup -OH), skuteczności usuwania templat i modyfikatora przez kalcynację (zmniejszenie bądź zanik pasm pochodzących od drgań grup -CH).

Wodór - Czy jest paliwem przyszłości?

Marcin Oleszek

*Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii,
91-403 Łódź ul. Tamka 12*

Wodór został odkryty w 1781 roku przez H. Cavendisha, natomiast po raz pierwszy wydzielony został przez Nicholsona i Gralishę'a w 1800 roku na drodze elektrolizy roztworu wodnego wodorotlenku potasu[1] :



Aktualnie wodór stanowi źródło energii elektrycznej oraz ciepła, która mogłaby być stosowana przez ludzi w użytku domowym, a także w transporcie. Do głównych sposobów pozyskiwania wodoru należy reforming węglowodorów z parą wodną oraz elektroliza wody.^[1,2,3] Wodór magazynowany może być w zbiornikach ciśnieniowych, w postaci skroplonej lub w postaci wodorków[1,3]. Jednak biorąc pod uwagę łączną cenę wytwarzania wodoru jak i koszty związane z jego przechowywaniem, taki sposób pozyskiwania energii jest w chwili obecnej ograniczony, chociaż auta zasilane wodorem już istnieją (np. BMW Hydrogen 7).^[4]

Literatura:

- [1] G. Jarzębska, *Odnawialne źródła energii i pojazdy proekologiczne*; Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa, **2007**, 142-148.
- [2] A. Feldzensztajn, L. Pacuła, J. Pusz, *Wodór „Paliwem” Przyszłości*; Instytut Wdrożeń Technicznych „INTECH”, Gdańsk, **2003**.
- [3]http://www.greenweal.eu/index.php?option=com_content&view=category&layout=blog&id=34&Itemid=54, 6 marca **2013**.
- [4]http://www.greenweal.eu/index.php?option=com_content&view=category&layout=blog&id=41&Itemid=59, 6 marca **2013**.

Zastosowanie różnych metod detekcji do porównywania fingerprintów ekstraktów roślinnych uzyskanych różnymi metodami

Marta Orłowska, Dorota Staszek, Mieczysław Sajewicz, Teresa Kowalska
*Zakład Chemii Ogólnej i Chromatografii, Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski
w Katowicach*

Ziołolecznictwo ludowe to domowy sposób stosowania mieszanki ziół lub pojedynczego zioła jako środka przeciwko różnym dolegliwościom i chorobom ludzkim, a nawet chorobom zwierząt. Informacje o sposobie przyrządzania i stosowania ziół były przekazywane ustnie od najdawniejszych czasów i dzięki temu przetrwały wśród ludzi do dnia dzisiejszego. Należy też dodać, że wciąż powstają nowe metody wyodrębniania poszczególnych substancji aktywnych z materiału roślinnego.^[1] Tymianek pospolity (*Thymus vulgaris* L.) to roślina należąca do rodziny jasnotowatych (Lamiaceae), która rośnie dziko na wybrzeżach Morza Śródziemnego oraz w Ameryce Południowej. W lecznictwie stosujemy ziele tymianku (Herba Thmyi). Zawiera ono znaczne ilości olejku eterycznego, flawonoidy, garbniki, związki goryczowe, kwasy fenolowe, związki triterpenowe, liczne cukry oraz sole mineralne zasobne w glin. Ziele to posiada działanie bakteriobójcze, przeciwzapalne, przeciwbiegunkowe, przeciwskurczowe oraz przeciwgrzybiczne.^[2-4] W przedstawionej pracy porównano fingerprinty (chromatograficzne odciski palca) dla gatunku tymianek pospolity w odniesieniu do zawartości grupy kwasów fenolowych w badanym materiale roślinnym wykorzystując technikę chromatografii cienkowarstwowej (Thin Layer Chromatography, TLC). Wykorzystano ekstrakty otrzymane techniką przyspieszonej ekstrakcji za pomocą rozpuszczalnika (Accelerated Solvent Extraction, ASE) w różnych warunkach temperatury i stężania rozpuszczalnika oraz ekstrakty otrzymane w aparacie Soxhleta.

Jako fazę ruchomą użyto mieszaninę: octan etylu + kwas octowy + kwas mrówkowy + woda w stosunku objętościowym 100:11:11:13 (v/v), która jest modyfikacją fazy literaturowej.^[5] Poszczególne ekstrakty rozwijano w komorach poziomych na odległość 15 cm. Użyto dwóch odczynników wywołujących: 10% metanolowego roztworu kwasu siarkowego (VI) oraz metanolowego roztworu boranu 2-aminoetylodifenylowego. W ten sposób uzyskano dwa rodzaje fingerprintów dla każdego z badanych ekstraktów. W przypadku zastosowania metanolowego roztworu boranu 2-aminoetylodifenylowego użyto następnie utrwalacza, którym był 1% metanolowy roztwór glikolu polietylenowego. Chromatogramy fotografowano przed i po użyciu substancji wywołującej przy dwóch długościach fali świetlnej (λ) równych 254 i 366 nm. Na podstawie uzyskanych wyników sformułowano odpowiednie wnioski.

Literatura:

- [1] C. Bańkowski, E. Kuźniewski, *Ziołolecznictwo ludowe*; PWN, Warszawa, **1976**, 2-10.
- [2] T. Lewkowicz-Mosiej, *Leksykon Roślin Leczniczych*; Świat Książki, Warszawa, **2003**, 286.
- [3] A. Sarwa, *Wielki leksykon roślin leczniczych*; Książka i Wiedza, Warszawa, **2001**, 378-379.
- [4] E. Pisulewska, Z. Janeczko, *Krajowe rośliny olejkowe*; Know-How, Kraków, **2008**, 82-85.
- [5] Ł. Cieśla, D. Staszek, M. Hajnos, T. Kowalska, M. Waskmudzka-Hajnos, *Phytochemical Analysis*, **2011**, 22, 59-65.

Wyznaczanie zdolności antyoksydacyjnej nalewek alkoholowych

Joanna Orzel, Michał Daszykowski, Mariola Bartoszek, Justyna Polak,
Anita Pędziwiatr, Joanna Spaltenstein

*Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski,
ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice*

Nalewki to napoje alkoholowe często stosowane jako „lek” na przeziębienie oraz wzmacniający „suplement diety”. Produkuje się je głównie na bazie owoców, ziół czy przypraw korzennych oraz spirytusu. Stowarzyszenie Winiarzy i Miodystników Polskich definiuje nalewkę jako: *zakonserwowany alkoholem koncentrat określonych składników pochodzenia roślinnego, takich jak: witaminy, sole mineralne, kwasy organiczne, cukry, garbniki i pektyny, a także barwniki i olejki eteryczne* [1]. Maceracja owoców alkoholem ułatwia ekstrakcję cennych składników zawartych w używanych do produkcji nalewek owocach i przyprawach. Jedną z grup ekstrahowanych substancji są antyoksydanty, między innymi odpowiadające za lecznicze właściwości nalewek.

Zawartość antyoksydantów w nalewkach można zbadać wykorzystując techniki chromatograficzne lub obserwując reakcję chemiczną zachodzącą pomiędzy wolnymi rodnikami (wprowadzanymi do próbki w znanym stężeniu) i oznaczanymi substancjami (obserwacji takiej dokonuje się z pomocą wybranej instrumentalnej techniki analitycznej). Innym sposobem umożliwiającym oznaczenie antyoksydantów jest użycie odpowiedniego modelu kalibracyjnego. Modele tego typu konstruuje się na bazie informacji o fizycznych właściwościach próbek oraz wyznaczonej metodą referencyjną zawartości antyoksydantów.

W prezentowanej pracy skonstruowano model kalibrujący zdolność antyoksydacyjną nalewek na podstawie ich właściwości spektralnych (zarejestrowanych w postaci fluorescencyjnych widm synchronicznych) oraz całkowitej zdolności antyoksydacyjnej oznaczonej na podstawie obserwacji obniżenia stężenia rodnika DPPH prowadzonej za pomocą spektroskopii EPR [2]. Ze względu na wysoki stopień złożoności sygnałów opisujących nalewki, do ich modelowania wykorzystano narzędzia chemometryczne. Używając metody regresji częściowych najmniejszych kwadratów (z ang. partial least squares regression, PLS) [3] zbudowano wieloparametrowe modele kalibracyjne. Model o optymalnych właściwościach umożliwia oszacowanie całkowitej zdolności antyoksydacyjnej badanych alkoholi z zadowalającą dokładnością. Proponowana metoda ułatwia oznaczenie modelowanego parametru w sposób szybki i tani (niewymagający stosowania czasochłonnych procedur analitycznych oraz dodatkowych odczynników chemicznych).

Literatura:

- [1] <http://wino.org.pl/content/view/223/134/>
- [2] M. Bartoszek, J. Polak, *Food Chemistry*, **2012**, 132, 2089-2093.
- [3] D.L. Massart, B.G.M. Vandeginste, L.M. Budgens, S. de Jong, P.J. Lewi, J. Smeyers-Verbeke, *Handbook of chemometrics and qualimetrics part A*, Elsevier, London, **1992**.



NARODOWE CENTRUM NAUKI

Synteza i badanie właściwości miedziowych katalizatorów reformingu parowego metanolu

Justyna Pawlonka^a

^a*Zakład Technologii Chemicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej*

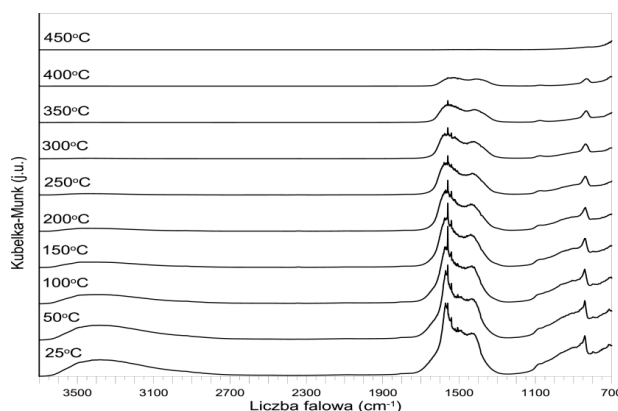
Pl. M. Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin

Niskotemperaturowe ogniwa paliwowe zasilane wodorem mogą w najbliższej przyszłości znaleźć szerokie zastosowanie do produkcji energii elektrycznej, wykorzystywanej np. do zasilania pojazdów elektrycznych. Jedną z istotnych barier jest brak odpowiednich technologii magazynowania wodoru. Rozwiązaniem tego problemu może być produkcja wodoru w niewielkich instalacjach lub na pokładzie pojazdów („on board”) przy wykorzystaniu reformingu parowego metanolu:



W produktach reakcji obok CO_2 może występować CO , który powoduje utratę aktywności ogniw. W badaniach duży nacisk kładzie się na poszukiwanie wysoce-selektywnych katalizatorów, cechujących się jednocześnie dużą aktywnością i stabilnością pracy. Stwierdzono, iż właściwości katalizatorów miedziowych reformingu parowego metanolu zależą od wielkości skupisk miedzi oraz właściwości strukturalnych i powierzchniowych nośnika^[1].

Celem prowadzonych badań było określenie wpływu warunków syntezy katalizatorów typu Cu/ZnO przy zastosowaniu metody mikroemulsyjnej na ich właściwości fizykochemiczne oraz katalityczne. Prezentowane wyniki badań obejmują analizę zjawisk zachodzących podczas rozkładu prekursorów i formowania się aktywnej postaci katalizatorów przy zastosowaniu m.in. techniki spektroskopii odbicia rozproszonego w podczerwieni (DRIFT) oraz badań temperaturowo-programowanych.



Rysunek 1. Widma DRIFT rozkładu prekursorów katalizatora Cu/ZnO otrzymanego metodą mikroemulsyjną w zakresie temperatur 25-450°C.

Literatura:

[1]. S. Sá, H. Silva, L. Brandão, H.M. Sousa, A. Mendes, Appl. Catal. B: Environmental **2010** 99 43-57.

Analiza porównawcza metod oznaczania całkowitej zdolności antyoksydacyjnej związków

Bartłomiej Potaniec, Monika Stompor, Paweł Zieliński, Mirosław Anioł
*Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Wydział Nauk o Żywności, Katedra Chemii,
ul. C.K. Norwida 25/27, 50-375 Wrocław*

Antyoksydanty zawarte w owocach i warzywach pomagają w ochronie komórek przed szkodami wywołanymi przez wolne rodniki. Obecnie rośnie zainteresowanie związkami przeciwutleniającymi ze względu na ich korzystny wpływ na nasze zdrowie i samopoczucie. Preferowane są antyoksydanty pochodzące z naturalnych, a nie z syntetycznych źródeł.

Współczesna nauka dysponuje szeregiem metod analitycznych prowadzących do oznaczenia potencjału lub pojemności przeciwutleniających związków chemicznych i ich mieszanin. Należą do nich metoda wychwytywania rodnika nadtlenkowego ($O_2^{\bullet-}$), nadtlenku wodoru (H_2O_2), kwasu podchlorawego ($HOCl$), rodnika hydroksylowego ($OH^{\bullet}$) oraz rodnika nadtlenkowego ($ROO^{\bullet}$). W najpowszechniejszym użyciu są jednak metody wykorzystujące związki azowe zdolne do generowania wolnych rodników, takie jak metoda oznaczania właściwości przeciwutleniających fenoli wykorzystująca odczynnik Folin-Ciocalteu (FCR) oraz metody: FRAP (Ferric Ion Reducing Antioxidant Power), TRAP (Total Radical-Trapping Antioxidant Parameter), ORAC (Oxygen-Radical Absorbance Capacity), TEAC (Trolox Equivalent Antioxidant Capacity), DMPH wykorzystująca kationowy rodnik *N,N*-dimetylo-*p*-fenylodiaminy i metoda DPPH, w której używany jest stabilny rodnik 2,2-difenylo-1-pikrylohydrazylowy.

Jako substancje wzorcowe w oznaczaniu wykorzystuje się witaminę C, Trolox lub kwas gallusowy. Trolox jest rozpuszczalnym w wodzie analogiem α -tokoferolu, stosowanym często jako standard antyoksydantu w różnych metodach oznaczeniach całkowitej zdolności antyoksydacyjnej. α -tokoferol jest naturalnym antyoksydantem, chroniącym lipidy błon plazmatycznych przed peroksydacją. Natomiast kwas gallusowy z grupy polifenoli występuje naturalnie w roślinach, zwłaszcza w dużych ilościach w herbacie. Oprócz właściwości antyoksydacyjnych polifenole zmniejszają ryzyko chorób naczyniowych, cukrzycy typu 2, choroby Alzheimera, mają też właściwości antybakteryjne i przeciwzapalne.

W pracy przedstawiono badania literaturowe dotyczące wyboru najodpowiedniejszej metody oznaczania właściwości antyoksydacyjnych flawonoidów oraz pomiary mające na celu ustalić wpływ podstawników w pochodnych chroman-4-onu na właściwości przeciwutleniające.

*Praca powstała dzięki finansowaniu Narodowego Centrum Nauki. Grant
Nr 2011/01/B/N29/028909.*

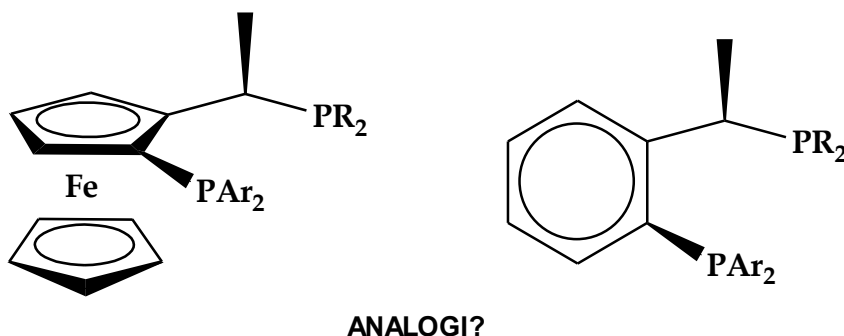
Badanie procesu diastereoselektywnego deprotonowania pozycji benzyłowej w boranach (2-fosforylo)benzylodifenylfosfin

Marta Pytlarczyk, Marek Stankevič, Jolanta Bazan

Zakład Chemii Organicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii-Curie Skłodowskiej w Lublinie, ul. Gliniana 33, 20-614 Lublin

Ligandy posiadające wbudowany fragment metalocenowy są efektywnymi ligandami w katalizowanych metalami przejściowymi transformacjach. Wynika to prawdopodobnie z faktu, iż fragment metalocenowy usztywnia całą strukturę ligandu, jak również wytwarza bardzo zdefiniowane otoczenie chiralne wokół centrum metalicznego.

Wydaje się, że obecność fragmentu metalocenowego odgrywa kluczową rolę w selektywności ligandu,^[1] jednak odpowiedź na to pytanie wymaga porównania z ligandem o podobnej strukturze, lecz nieposiadającym łącznika metalocenowego tylko łącznik benzenowy.



W niniejszej prezentacji przedstawione będą wstępne badania dotyczące syntezy analogów benzenowych ligandów difosfinowych, a konkretnie badania nad diastereoselektywnością procesu deprotonowania-alkilowania boranów (2-fosforylo)benzylodifenylfosfin.

Literatura:

[1] R. G. Arrayás, J. Adrio, J. C. Carretero, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2006**, 45, 7674-7715.

Produkty uboczne procesu dezynfekcji wody.

Klaudia Rakocz

Politechnika Częstochowska, Wydział Inżynierii Środowiska i Biotechnologii

ul. J.H. Dąbrowskiego 69, 42-201 Częstochowa

klaudiarakocz@o2.pl

Uboczne produkty dezynfekcji wody są grupą niepożądanych substancji, tworzących się na skutek reakcji środków dezynfekcyjnych z domieszkami i zanieczyszczeniami wody. Pod nazwą produkty uboczne kryją się setki (a być może tysiące) związków powstających pod wpływem środków użytych do dezynfekcji z substancji obecnych w wodzie surowej. Związki te powstają w niewielkich ilościach ale mogą mieć charakter: toksyczny, mutageny czy kancerogeny muszą być brane pod uwagę w końcowej ocenie jakości wody uzdatnionej. Znaczna większość tych produktów stanowią związki organiczne, lecz także niektóre związki nieorganiczne, np. takie jak bromiany, chloryny i chlorany. Najczęściej stosowaną metodą usuwania niepożądanych substancji z wody jest proces biofiltracji poprzedzony najczęściej ozonowaniem wody a zakończony zastosowaniem chloru i/lub dwutlenku chloru. Produkty uboczne procesu dezynfekcji wody mogą występować w wodzie na każdym etapie tego procesu. Jest to spowodowane specyfiką różnych reakcji zachodzących podczas tego procesu. Dlatego ważne jest aby tak dobrać parametry dezynfekcji wody aby wyeliminować maksymalnie możliwą ilość produktów ubocznych tego procesu. Woda po powyższych procesach jednostkowych musi spełniać wymagania norm prawnych. Obecnie regulowane są dopuszczalne poziomy stężeń ok. 70 parametrów wody a także wyróżnia się i normuje dopuszczalne poziomy stężeń ubocznych produktów dezynfekcji wody a to oznacza, że woda jest najlepiej kontrolowanym produktem spożywczym .

Związki kompleksowe halogenków rtęci(II) z *N*-benzoilo-*N'*-fenylotiomocznikiem

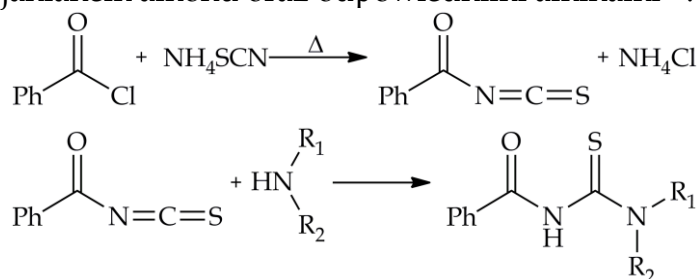
Damian Rosiak^a, Andrzej Okuniewski^b, Barbara Becker^b

^a Sekcja Studencka Oddziału Gdańskiego Polskiego Towarzystwa Chemicznego
„Hybryda”

^b Katedra Chemii Nieorganicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska
ul. G. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk

Tiomoczniki są miękkimi zasadami w myśl teorii *twardych i miękkich kwasów i zasad* Pearsona^[1] i łatwo tworzą połączenia kompleksowe z kationami takich metali jak miedź, złoto, czy rtęć^[2], w których pełnią funkcję ligandów *S*-donorowych.

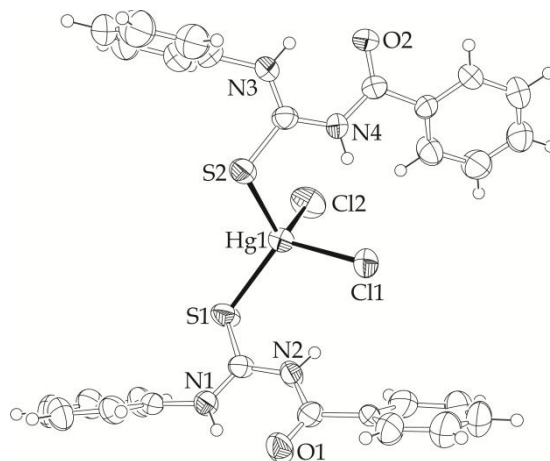
Ze względu na jednoczesną obecność grup tiokarbonylowej i karbonylowej na uwagę zasługują *N*-benzoylotiomoczniki otrzymywane w reakcji chlorku benzoilu z tiocyjanianem amonu oraz odpowiednimi aminami^[3]:



Zastosowanie aniliny prowadzi do *N*-benzoilo-*N'*-fenylotiomocznika (bptu)^[4], który z powodzeniem użyliśmy do syntezy szeregu związków kompleksowych rtęci(II), w tym niżej przedstawionego $[\text{HgCl}_2(\text{bptu})_2]$ otrzymanego w postaci solwatowanej metanolem.

Struktura tego związku oraz jego homologów zawierających ligandy bromkowe i jodkowe (rentgenowska analiza strukturalna) jest inna w każdym z przypadków. Obserwowane w obrębie grupy zmienności zostaną omówione na posterze.

Rysunek 1. Struktura rentgenowska dichloro-bis(*N*-benzoilo-*N'*-fenylotiomocznik-κ*S*)-rtęci(II). Elipsoidy drgań termicznych wyrysowano na poziomie 50%, cząsteczkę metanolu pominięto dla przejrzystości.



Literatura:

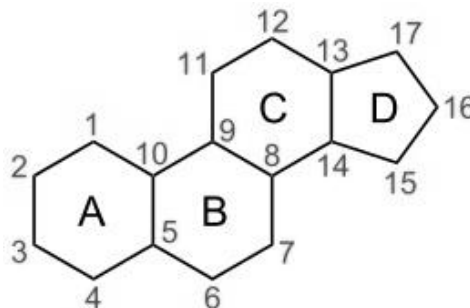
- [1] R. G. Pearson, *J. Am. Chem. Soc.* **1963**, 22, 3533-3539.
- [2] M. Mirzaei, H. Eshtiagh-Hosseini, M. Mohammadi Abadeh, M. Chahkandi, A. Frontera, A. Hassanpoor, *CrystEngComm*, **2013**, 15, 1404-1413.
- [3] I. B. Douglass, F. B. Dains, *J. Am. Chem. Soc.* **1934**, 56, 719-721.
- [4] B. M. Yamin, M. S. M. Yusof, *Acta Cryst. E*, **2003**, 59, o151-o152.

Herosem być - czyli co drzemie w sportowcach?

Monika Roszkowska

Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, 91-403 Łódź ul. Tamka 12

Czym są sterydy? W każdej encyklopedii można znaleźć to pojęcie opisane jako grupę związków o układzie cyklopentanoperhydrofenantrenu (gonanu) i w zależności od podstawników przy węglach C-10, C-13 oraz C-17 związki te traktuje się jako pochodne odpowiednich węglowodorów [1]. W niektórych źródłach steroidy zawierają takie grupy związków jak tłuszcze, fosfolipidy i terpenoidy, a także ekstrakty lipidowe z roślin i tkanek zwierzęcych



[2]. Nie każdy jednak zastanawia się za co odpowiadają te związki, a mają one swoje zarówno dobre jak i złe strony. W związku z dzisiejszą sytuacją każdy kto usłyszy słowo sterydy ma na myśli od razu sterydy anaboliczne dość obszernie opisane w książce prof. Heinricha Schmitt'a i dr Olafa Kiesbauer'a *Sterydy anaboliczne „Czarna Księga” Cała prawda*. Nie można jednak zapomnieć o tym, że u człowieka większość sterydów spełnia funkcje hormonów sterydowych takich jak hormony kory nadnerczy (glukokortykoidy i mineralkortykoidy) czy też żeńskie hormony seksulane (estrogeny i gestageny) jak również męskie hormony seksualne (androgeny) [3]. Temat ostatniego z wymienionych powyżej hormonów jest dość obszerny oraz chętnie podejmowany. Zainteresowanie specyfikami nadającymi atrakcyjniejszy wygląd mięśni jest nadal aktualny, a dyskusja na temat związków jakie są zawarte w tzw. „odżywkach” nadal otwarta. Lista skutków niepożądanych jest niewymiernie długa w stosunku do korzyści jakie niosą ze sobą spożywanie tych związków. Wieloletnie ich przyjmowanie może prowadzić do inwalidztwa, przerostu prostaty, nowotworu prostaty, spustoszenie w układzie odpornościowym, a nawet mogą powodować choroby dziaśel. Co jest dość interesujące chcąc być siłaczem Panowie narażają się na częstsze kontuzje poprzez zażywanie sterydów [4].

Literatura:

- [1] Praca zbiorowa pod redakcją prof. dr hab. T. M. Krygowskiego, *Encyklopedia szkolna Chemia*, WSiP, Warszawa, **2001**, 575 - 576
- [2] J. McMurry, *Chemia organiczna*, PWN, Warszawa, **2007**, 1045
- [3] H. Schmitt, O. Kiesbauer *Sterydy anaboliczne „Czarna Księga” Cała prawda*, **2009**,
- [4]http://www.poradnikzdrowie.pl/zdrowie/zdrowie-rodziny/sterydy-anaboliczne-co-to-jest-jak-dziala-dlaczego-szkodzi-zdrowiu_35556.html?page=1, 08.03.2013r.

Badanie lepkości podczas polimeryzacji L-laktydu

Żaneta Rucińska, Paweł Ruśkowski, Agnieszka Gadomska, Ludwik Synoradzki
*Laboratorium Procesów Technologicznych, Wydział Chemiczny, Politechnika
Warszawska,
ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa*

W ostatnich latach duży nacisk kładzie się na ekologię, częściej słyszymy o polimerach biodegradowalnych, a w szczególności o polilaktydzie. Posiada on właściwości mechaniczne podobne do polimerów obecnie wykorzystywanych, takich jak polistyren czy poli(tereftalan etylenu). Ze względu na swoje właściwości znalazł zastosowanie w dwóch głównych obszarach: medycynie oraz w produkcji materiałów opakowaniowych.

Polilaktyd jest liniowym polimerem termoplastycznym należącym do grupy poliestrów alifatycznych. Często nazywany jest „podwójnie zielonym”, ponieważ jest biodegradowalny jak i otrzymywany z surowców odnawialnych.^[1] W skali przemysłowej PLA można otrzymywać za pomocą polikondensacji kwasu mlekowego w rozpuszczalniku organicznym z azeotropowym usuwaniem wody i dodatkowym osuszaniem zawracanego rozpuszczalnika. Natomiast najczęściej wykorzystywaną metodą otrzymywania polilaktydu jest polimeryzacja z otwarciem pierścienia laktydu w obecności katalizatora, 2-etyloheksanianu cyny(II) (oktanianu cyny(II)), w wyniku czego można otrzymać polilaktyd o wysokiej masie cząsteczkowej.^[2]

Jednym z głównych problemów, z jakim borykają się projektanci instalacji technologicznych jest gwałtownie wzrastająca lepkość polimeru w czasie syntezy. Na podstawie obserwacji zmian lepkości w trakcie polimeryzacji można np. odpowiednio dobrać moc napędu mieszadła czy odpowiedni typ wytłaczarki. Dodatkowo lepkość może być parametrem potwierdzającym otrzymanie polimeru o założonych właściwościach.

W ramach badań przeprowadzono polimeryzację z otwarciem pierścienia L-laktydu w wiskozymetrze rotacyjnym. Zbadano lepkość mieszaniny reakcyjnej w czasie procesu. Polimeryzację prowadzono wobec katalizatora 2-etyloheksanianu cyny(II) (0,01 do 0,05% mol w stosunku do substratu) w temperaturach od 180 do 200°C. Ciężar cząsteczkowy otrzymanych polimerów zbadano metodą chromatografii żelowej (GPC).

Literatura:

- [1] Z. Florjańczyk, M. Dębowski, E. Chwojnowska, K. Łokaj, J. Ostrowska, *Polimery*, **2009**, 10, 614-617.
- [2] J. Gołębiwski, E. Gibas, R. Malinowski, *Polimery*, **2008**, 11-12, 802-804.

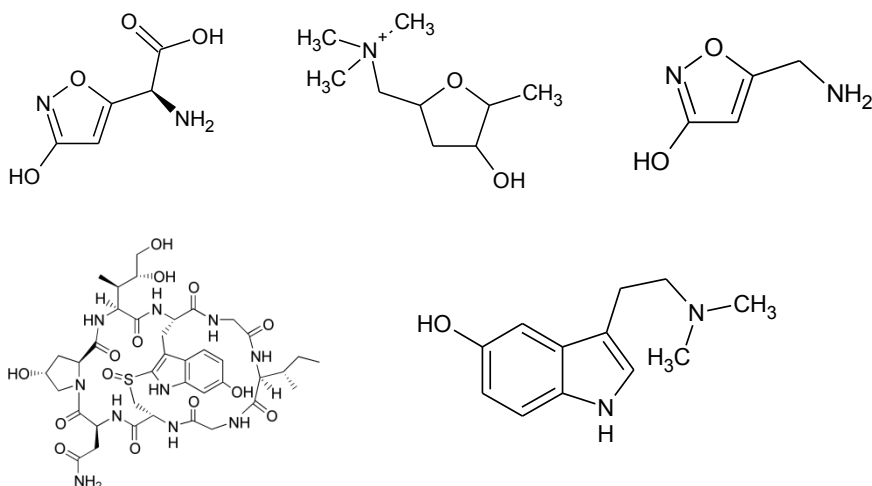
Badanie zawartości toksycznych alkaloidów w muchomorach w zależności od sposobu przyrządzenia

Michał Sawczyk

Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii

Zatrucia grzybami gatunków *Amanita* należą do najczęściej notowanych przypadków śmiertelnych. Toksyczność występujących gatunków zależy od stężenia i rodzaju występujących w owocnikach alkaloidów. Część z nich, między innymi kwas ibotenowy, jest termicznie nietrwała i w środowisku grzyba rozkłada się, tworząc znacznie mniej szkodliwe produkty.

W pracy badano zawartość alkaloidów w surowych owocnikach *Amanita muscaria* i *Amanita citrina* oraz w okazach marynowanych i smażonych, przy pomocy ich ilościowego strącania kwasem krzemowolframowym i odczynnikiem Dragendorffa w postaci kompleksów z bizmitem(III). Udało się wykazać, że zawartość toksyn maleje w grzybach obrabianych termicznie od 18% do 52%. Znacznie bardziej nietrwałe okazały się alkaloidy występujące w muchomorze czerwonym, natomiast rozpad toksycznych peptydów muchomora cytrynowego zachodził w mniejszym stopniu i wynosił najwyżej 23%.



Rys. 1. Główne toksyny występujące w owocnikach *Amanita muscaria* i *Amanita citrina*, od lewej: kwas ibotenowy, muskaryna, muscymol, amanityna, bufotenina.

Wykorzystanie kwasów organicznych w żywieniu zwierząt monogastrycznych

Małgorzata Sęczkowska^a, Mateusz Gortat^b

^a Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie

^b Wydział Ogrodnictwa i Architektury Krajobrazu, Uniwersytet Przyrodniczy w Lublinie

Z dniem 1 stycznia 2006 roku w życie weszła dyrektywa UE zakazująca stosowania antybiotykowych stymulatorów wzrostu[1]. Decyzję tę podjęto w obawie przed możliwością wystąpienia zjawiska "lekoodporności" bakterii występujących w przewodach pokarmowych zwierząt a w konsekwencji możliwości zmniejszenia efektywności leków stosowanych w medycynie ludzkiej[2]. Wycofanie antybiotyków z żywienia zwierząt spowodowało obniżenie wyników hodowlanych oraz zwiększenie użycia antybiotyków takich jak sulfonamidy, tetracykliny i aminoglikozydy[3,4]. Antybiotyki dodawane do paszy ograniczały rozwój bakterii z rodzaju: *Salmonella*, *Campylobacter*, *Escherichia* czy *Enterococcus*[5].

Dotychczas przeprowadzone badania wskazują, że alternatywą dla antybiotyków mogą być kwasy organiczne. Działanie ich polega na niszczeniu komórek bakteryjnych przez zmianę pH cytoplazmy. Kwasy organiczne posiadają właściwości antibakteryjne przy czym nie wywołują oporności u bakterii.

Celem pracy jest przegląd aktualnej literatury dotyczącej korzyści z zastosowania kwasów organicznych (m.in. mlekowego, cytrynowego, fumarowego) w żywieniu zwierząt monogastrycznych.

Literatura:

- [1] H. Różański, W. Drymel, Polskie Drobiarstwo, 2009, 11, 54-57.
- [2] F.M. Aarestrup, APMIS, 2000, 108(Suppl. 1), 1-48.
- [3] A.A. Delsol, L. Randall, S. Cooles, M.J. Woodward, J. Sunderland, J.M. Roe, J. Appl. Microbiol. 2005, 98, 564-571.
- [4] E.R. Grela, V. Semeniuk, Medycyna Weterynaryjna, 2006, 62(5), 502-507.
- [5] M. Przeniosło-Siwczyńska, K. Kwiatek, Życie Weterynaryjne, 2013, 88(2), 104-108.

Synteza mezoporowatych materiałów węglowych w obecności polimerów blokowych

Małgorzata Sęczkowska, Adam Wojciech Marczewski

Wydział Chemii Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, pl. Marii

Curie-Skłodowskiej 2, 20-031 Lublin

m_seczkowska@o2.pl

Z uwagi na to, że mezoporowate materiały węglowe charakteryzują się unikalnymi właściwościami elektrycznymi, mechanicznymi i chemicznymi, znajdują swoje liczne zastosowania w różnych dziedzinach życia. Wykorzystywane są między innymi do magazynowania i przetwarzania energii. Mezoporowate węgle używane są również w zastosowaniach adsorpcyjnych, do separacji mieszanin oraz jako nośniki katalizatorów^[1].

Wśród wielu metod otrzymywania mezoporowatych materiałów węglowych na szczególną uwagę zasługuje synteza w obecności polimerów blokowych pełniących rolę matrycy. Metoda ta polega na tworzeniu termicznie usieciowanego polimeru będącego prekursorem węglowym w obecności samoorganizującego się polimeru blokowego, który w wyższej temperaturze ulega rozpadowi. Na skutek tego procesu dochodzi do utworzenia uporządkowanego nanokompozytu dwóch polimerów. Jeden z nich bez trudności rozkłada się pod wpływem temperatury, natomiast drugi łatwo ulega karbonizacji w neutralnej atmosferze, co w efekcie końcowym skutkuje powstawaniem uporządkowanego mezoporowatego materiału węglowego^[2,3].

Celem niniejszej pracy jest prezentacja metody otrzymywania mezoporowatego węgla na przykładzie polimeryzacji floroglucyny i formaldehydu w obecności trójblokowego kopolimeru Pluronic P127^[3].

Literatura:

- [1] C. Liang, K. Hong, G.A. Guiochon, J.W. Mays, S. Dai, *Synthesis of a Large-Scale Highly Ordered Porous Carbon Film by Self-Assembly of Block Copolymers*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2004**, 43, 5785-5789.
- [2] C. Liang, S. Dai, *Synthesis of Mesoporous Carbon Materials via Enhanced Hydrogen-Bonding Interaction*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2006**, 128, 5316-5317.
- [3] J. Choma, M. Kloske, A. Zawiślak, M. Jaroniec, *Synteza i właściwości mezoporowatych węgli otrzymanych z żywic fenolowych w obecności polimerów blokowych*, *Ochrona Środowiska*, **2007**, 29, 3-9.

Oznaczanie wybranych betain techniką izotachoforezy

Ewa Sikorska, Mariusz Kluska

Zakład Chemii Środowiska, Uniwersytet Przyrodniczo-Humanistyczny w Siedlcach

Betainy są bipolarnymi związkami chemicznymi, zwane również jonami amfoterycznymi.^[1] Są to związki w których ładunek dodatni może znajdować się na atomach azotu, fosforu lub siarki w różnych otoczeniach, natomiast ładunek ujemny może być zlokalizowany na grupie fenolanowej, fosfinowej, fosforanowej, karboksylanowej, siarczanowej lub sulfonowej.^[2]

Betainy ze względu na właściwości powierzchniowo czynne znalazły liczne zastosowanie m.in. jako dodatki do perfum, dezodorantów, szamponów oraz detergentów. Związki te są również stosowane w przemyśle papierniczym, ponieważ ułatwiają proces drukowania i nadają połysk m.in. papierom fotograficznym. W przemyśle tekstylnym, obniżają elektryzowanie ułatwiając przędzenie włókien. Betainy są także dodawane do środków antyseptycznych, czystościowych, zapachowych i opakowań do żywności. Znalazły również zastosowanie w biologii, medycynie, farmacji i wielu innych dziedzinach nauki.^[1]

W niniejszej pracy przedstawiono warunki optymalnego oznaczania dwóch izomerów betain techniką izotachoforezy kapilarnej. Procesowi optymalizacji poddano: (E)-2-(2-(1-(2-etoksy-2-oksoetylo)pirydynio-4-yl)winylo)fenolan oraz (E)-4-(2-(1-(2-etoksy-2-oksoetylo)pirydynio-4-yl)winylo)fenolan. Optymalizując warunki procesu oznaczania betain zmieniano liczbę kroków analizy, czas analizy, wartość natężenia i napięcia prądu elektrycznego. Analizowane betainy wykazywały bardzo podobną ruchliwość elektroforetyczną, ponieważ różniły się tylko pozycją podstawnika w pierścieniu. Najlepsze wyniki oznaczania uzyskano w pięciu krokach analizy, przy ograniczeniu napięcia do 12 kV.

Literatura:

- [1] I. Kowalczyk, Z. Dega-Szafran, M. Szafran, *Postępy kosmetologii*, **2010**, 1, 86-90.
- [2] M. Szafran, Z. Dega-Szafran, I. Kowalczyk, P. Barczyński, *Przemysł Chemiczny*, **2010**, 89/11, 1533-1537.

Optimalizacja parametrów separacji elektroforetycznej kwasu foliowego i jego głównych pochodnych

Justyna Stachniuk, Radosław Dałkowski, Barbara Krawczyk,

Dominik Szczukocki, Robert Zakrzewski

Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej

Wydział Chemii, Uniwersytet Łódzki

Tamka 12, 91 – 403 Łódź

Kwas foliowy (FA) należy do witamin z grupy B. Naturalnie występuje w postaci folianów, przy czym za biologiczne funkcje odpowiada jego zredukowana forma – kwas tetrahydrofoliowy (FH₄), powstający na szlaku przemian metabolicznych z udziałem enzymu - reduktazy tetrahydrofolianowej (DHFR). FH₄ stanowi przenośnik grup metylowych, dzięki czemu w organizmie zachodzi konwersja homocysteiny w metioninę czy seryny w glicynę, a tym samym możliwa jest synteza składników budulcowych DNA i RNA. Ponadto, FH₄ odgrywa ważną rolę w procesie tworzenia erytrocytów oraz zapobiegania uszkodzeniom cewy nerwowej płodu czy rozszczepowi kręgosłupa, dlatego też przyjmowanie preparatów zawierających FA jest szczególnie zalecane w okresie ciąży.

Najpowszechniej stosowanym lekiem z grupy analogów strukturalnych FA jest metotreksat (MTX), wykazujący właściwości antyproliferacyjne. Skuteczność jego działania, w leczeniu nowotworów, wynika ze znacznie większego powinowactwa do DHFR w porównaniu z samym kwasem, co prowadzi do zahamowania aktywności tego enzymu, a tym samym zakłócenia biosyntezy DNA i RNA oraz innych ważnych przemian biochemicznych. W konsekwencji dochodzi do zaburzeń wzrostu i śmierci komórki. Niestety działanie MTX nie jest selektywne, a jego stosowanie w dużych dawkach prowadzi do szeregu skutków ubocznych tj. wymiotów, mielosupresji, hepato-, nefro- i neurotoksyczności. Toksyczne działanie MTX może być częściowo zniesione poprzez zastosowanie leukoworyny (soli wapniowej kwasu folinowego) w terapii oszczędzającej, której zadaniem jest odnawianie wewnątrzkomórkowej puli kofaktorów tetrahydrofolianowych.

W związku z powyższym, szczególnie ważne staje się regularne monitorowanie stężenia kwasu foliowego, metotreksatu oraz kwasu folinowego m.in. w preparatach farmaceutycznych czy płynach ustrojowych (mocz, krew, płyn rdzeniowo – mózgowy). W prezentowanej pracy, przedstawiono walidację metody oznaczania kwasu foliowego i jego głównych pochodnych, przy wykorzystaniu elektroforezy kapilarnej z detektorem z matrycą diodową (DAD). Metoda została zoptymalizowana przy uwzględnieniu takich parametrów jak: pH oraz stężenie stosowanego buforu, temperatura, przyłożone napięcie, czas wprowadzania próbki do kapilary oraz efektywność procesu deproteinizacji w zależności od użytego odczynnika.

Cienkie warstwy PEDOT:PSS do zastosowań w elektronice organicznej

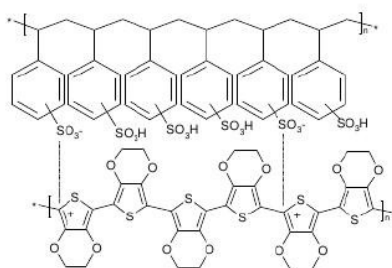
Aleksandra Stasiak^{a,b}, Ireneusz Głowacki^a

^a Katedra Fizyki Molekularnej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka

^b Studenckie Koło Naukowe Nanotechnologów NANO, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka

Obecnie coraz większym zainteresowaniem cieszą się polimery skoniungowane, a także możliwości ich zastosowania w elektronice organicznej. Zainteresowania tego nie osłabia nawet to, iż obecnie wydajność, organicznych diod elektroluminescencyjnych (OLED) czy organicznych ogniw fotowoltaicznych (OPV) jest zdecydowanie niższa niż analogicznych urządzeń tradycyjnych. Rekompensują to dużo niższe koszty wytworzenia urządzeń polimerowych.

Mieszanina poli(3,4-etyleno-1,4-dioksytiofenu) z polistyrenem sulfonowanym jest jednym z częściej stosowanych kopolimerów w elektronice organicznej. Wysoka stabilność, transparentność w zakresie Vis oraz przewodnictwo elektryczne spowodowały, iż kompozyt PEDOT:PSS znalazł zastosowanie jako warstwy antystatyczne na filmach fotograficznych. Później zaczęto je stosować, także w elektronicznych urządzeniach organicznych w celu poprawienia dopasowania potencjałów anody i warstwy aktywnej oraz wygładzenia powierzchni elektrody. Obecnie pracuje się nad możliwością stosowania mieszaniny PEDOT:PSS zamiast anody w elektronice drukowanej.



Rysunek 1. Wzór kopolimeru poli(3,4-etyleno-1,4-dioksytiofenu) z polistyrenem sulfonowanym (PEDOT:PSS)

Celem pracy było wytworzenie cienkich warstw PEDOT:PSS za pomocą wylewania roztworu na wirujące podłoże (ang. spin-coating) oraz wyznaczenie ich parametrów użytkowych takich jak: transmisja światła widzialnego, przewodnictwo, grubość i chropowatość powierzchni.

Literatura:

- [1] A. M. Nardes, *On the conductivity of PEDOT:PSS thin films*; Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, **2007**
- [2] B. Ballarin, A. Fraleoni-Morgera, D. Frascaro, S. Marazzita, C. Piana, L. Setti, *Synthetic Metals*, **2004**, 146, 201-205

Porównanie fotogeneracji nośników ładunku w układach PVK i PVK/PBD domieszkowanych tris(2-fenylopirydyną) irydu

Anna Stefaniuk^{1,2,3}, Jarosław Jung¹, Ireneusz Głowacki¹

¹Katedra Fizyki Molekularnej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka

²Studenckie Koło Naukowe Chemików TROTYL

³e-mail: anna.stefaniuk@hotmail.com

Jednym z najlepszych fotoprzewodników organicznych jest poli(N-winylokarbazol) (PVK)^[1]. Ze względu na swoje właściwości fotoprzewodzące związek ten jest powszechnie stosowany w urządzeniach emitujących światło, np. diodach elektro-luminescencyjnych^[2]. Stanowi on matrycę dla związków niskocząsteczkowych wykazujących fotoluminescencję, w tym kompleksów irydu, takich jak: tris(2-fenylopirydyna) irydu (Ir(ppy)_3) emitująca światło zielone oraz $\text{di}[2\text{-(2'-benzotio)pirydino-N,C3'}](\text{acetylo-acetonian})$ irydu(III) $\text{Btp}_2\text{Ir(acac)}$ emitująca światło czerwone. Domieszki tego rodzaju stanowią pułapki energetyczne dla nośników ładunku, a w rekombinacji promienistej uczestniczą zarówno ich stany trypletowe, jak i singletowe^[3].

Celem pracy było przeprowadzenie pomiarów oraz analiza zaników potencjałów powierzchniowych w układach: poli(N-winylokarbazol) (PVK) oraz poli(N-winylokarbazol)/2-(4-difenylo)-5-(4-tetr-butylfenylo)-1,3,4-oksadiazol (PVK/PBD) domieszkowanych tris(2-fenylopirydyną) irydu (Ir(ppy)_3), a także porównanie wpływu domieszki na fotoprzewodnictwo badanych układów. Wydajność kwantową fotogeneracji nośników ładunku w badanych układach wyznaczano metodą rozładowania kserograficznego^[4].

Uzyskane wyniki wykazały, iż wprowadzenie 2% wag. domieszki Ir(ppy)_3 znacząco obniża fotoprzewodnictwo układów PVK i PVK/PBD, co związane jest z efektywnym wychwytem dziur przez cząsteczki Ir(ppy)_3 ^[5].

Literatura:

- [1] J. F. Morin, M. Leclerc, D. Ade's, A. Siove, Polycarbazoles: 25 years of progress, *Macromol. Rapid Commun.*, Vol. 26, p. 761-778, 2005
- [2] S. Mulani, M. Xiao, S. Wang, Y. Chen, J. Peng, Y. Meng, Structure properties of a highly luminescent yellow emitting material for OLED and its application, *RSC Advances*, vol. 3, p. 215-220, 2013;
- [3] Y. Kawamura, 100% phosphorescence quantum efficiency of Ir(III) complexes in organic semiconductor films, *Appl. Phys. Lett.* Vol. 86, p. 71104, 2005;
- [4] I. Glowacki, J. Jung, J. Ulański, A. Rybak, Conductivity Measurements – rozdział w *Polymer Science: A comprehensive reference* (str. 847 - 877), Elsevier, Amsterdam 2012;
- [5] Z. Szamel, Pułapkowanie i rekombinacja nośników ładunku w polimerowych układach elektrofosforescencyjnych, Praca doktorska, Politechnika Łódzka, 2007.

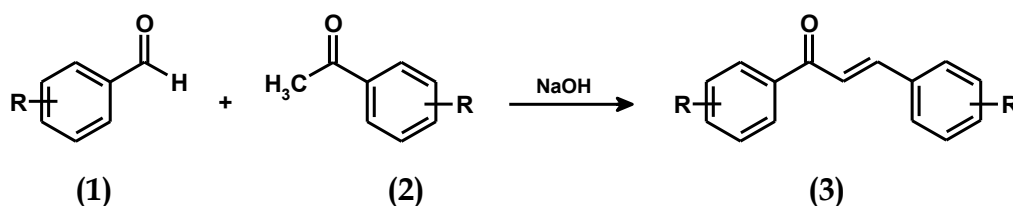
Synteza oraz ocena aktywności antyoksydacyjnej wybranych chalkonów

Monika Stompor, Bartłomiej Potaniec,
Marta Minkiewicz, Paweł Zieliński, Mirosław Anioł
Katedra Chemii, Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu,
ul. Norwida 25, 50-375 Wrocław

Chalkony, (*E*)-1,3-difenylopropan-1-ony, reprezentują liczną grupę aromatycznych związków naturalnych, pochodzących z roślin. Stanowią związki pośrednie w syntezie flawonoidów z zamkniętym pierścieniem C, m.in. flawonów

i flawanonów. Według piśmiennictwa, chalkony wykazują wielokierunkową aktywność biologiczną m.in. antybakteryjną, antynowotworową oraz przeciwzapalną.¹⁻³ Powszechnie stosowaną metodą otrzymywania chalkonów na drodze chemicznej jest reakcja Claisena-Schmidta, która polega na kondensacji odpowiedniej pochodnej acetofenonu (2) z benzaldehydem (1) w środowisku zasadowym (Schemat 1.)

Celem niniejszych badań było otrzymanie serii połączeń zawierających szkielet *trans*-chalkonu oraz przeprowadzenie oceny ich właściwości antyoksydacyjnej z zastosowaniem metody DPPH.



Schemat 1. Otrzymywanie pochodnych chalkonu (3) w środowisku zasadowym.

Literatura:

- [1] V.R. Yadav, S. Prasad, B. Sung, B. B. Aggarwal, *Int. Immunopharmacol.*, **2011**, 11, 295-309.
- [2] B. Orlikova, D. Tasdemir, F. Golais, M. Dicato, M. Diederich, *Genes Nutr.*, **2011**, 6, 125-147.
- [3] S. Vogel, M. Barbic, G. Jürgenliemk, J. Heilmann, *Eur. J. Med. Chem.*, **2010**, 45, 2206-2213.

Nanocząstki magnetyczne w terapii medycznej

Szymon Suchodolski

Koło Naukowe Chemików UwB „Pozyton”

Uniwersytet w Białymstoku, Instytut Chemii

ul. Hurtowa 1, 15-399 Białystok

Zastosowanie nanocząstek magnetycznych w medycynie niesie nadzieję na opracowanie leków, bądź technik, które umożliwią całkowite wyleczenie chorób nowotworowych, AIDS, etc. Naukowcy zmagają się jednak z szeregiem problemów związanych przede wszystkim z: toksycznością nanocząstek i sposobami jej minimalizowania, funkcjonalizacją cząstek, polegającą głównie na tworzeniu polimerowych otoczek^[1], a także sterowaniem nanocząstkami magnetycznymi w określone miejsce w organizmie.

Rzeczywistość nanotechnologii i badania pod kątem wykorzystania jej w medycynie doprowadziły do utworzenia czterech głównych metod terapii antynowotworowej, stosujących nanocząstki o własnościach magnetycznych:

- Obrazowanie jądrowego rezonansu magnetycznego. Nanocząstki służą tu jako środki wzmacniające kontrast, w celu poprawy jakości obrazu badanych tkanek.^[2]
- Lokalna terapia magnetyczna – stosuje odpowiednio sfunkcjonalizowane magnetyczne nanocząstki do doprowadzania lekarstwa w pożądane miejsce przy pomocy zewnętrznego pola magnetycznego.^[1,4]
- Hipertermia magnetyczna – wykorzystuje nagrzewanie się superparamagnetycznych cząstek pod wpływem zmiennego zewnętrznego pola magnetycznego.^[3]
- Separacja immunomagnetyczna – pozwala na wyprowadzenie z organizmu toksyn, czy też komórek zmienionych nowotworowo przy użyciu pola magnetycznego i magnetycznych nanocząstek.^[4]

Czy nanotechnologia spowoduje przełom w medycynie? Czy walka z nowotworami złośliwymi nie będzie już tak uciążliwa dzięki nanocząstkom? Na te i inne pytania postaram się odpowiedzieć podczas sesji plakatowej.

Literatura:

- [1] A. Timoszyk, *Znaczenie odkryć w zakresie nanotechnologii dla rozwoju terapii przeciwnowotworowych*, **2010**, Projek „Siła wiedzy”, 8-12.
- [2] Forrest M. Kievit, Miqin Zhang, *Accounts of chemical research*, **2011**, 44 (10), 853-854.
- [3] F. Sonvico, S. Mornet, P. Couvreur, *Bioconjugate Chemistry*, **2005**, 16 (5), 1181-1188.
- [4] A. Ślawska-Waniewska, *Postępy Fizyki*, **2004**, 55 (4), 159-160.

Adsorpcja owoalbuminy na powierzchni cząstek tlenku chromu (III) w funkcji pH roztworu

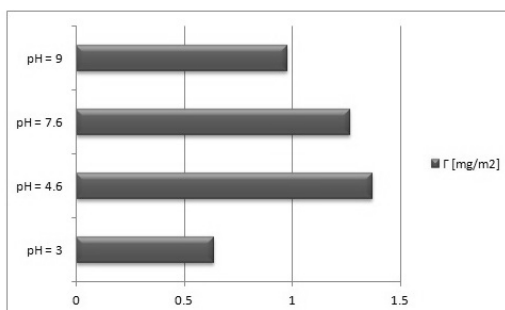
Katarzyna Szewczuk-Karpisz^a, Małgorzata Wiśniewska

^a Zakład Radiochemii i Chemii Koloidów, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, Pl. M. Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin, k.szewczuk-karpisz@wp.pl, tel.: (48)(81)537 56 22, fax: (48)(81)533 28 11

Badanie mechanizmu adsorpcji białek na powierzchni ciał stałych jest istotne ze względu na powszechne występowanie tego procesu. Znajomość wpływu czynników fizykochemicznych na ilość biopolimeru zaadsorbowanego na ciele stałym może być bardzo użyteczna w medycynie, biotechnologii, ochronie środowiska, a także przemyśle spożywczym [1]. W tej pracy podjęto próbę zbadania mechanizmu adsorpcji owoalbuminy (OVA) na powierzchni tlenku chromu (III)

w roztworach o różnym pH.

Na podstawie wyników przeprowadzonych doświadczeń stwierdzono, że największa ilość OVA adsorbuje się na powierzchni Cr_2O_3 w roztworze o takiej wartości pH, która jest bliska wartości punktu izoelektrycznego białka, tj. ok. 4.6. Jest to przede wszystkim związane z najbardziej zwartą konformacją białka w tych warunkach, co pozwala na upakowanie największej ilości makrocząsteczek OVA na powierzchni adsorbentu. W roztworach o $\text{pH} = 3, 7.6$ i 9 zaobserwowano odpowiednio niższe wielkości adsorpcji, co zostało przedstawione na schemacie 1.



Schemat 1. Ilość OVA zaadsorbowana na powierzchni cząstek Cr_2O_3 w roztworach o różnym pH (stężenie wyjściowe biopolimeru wynosiło 150 ppm).

Ze względu na obecność sił odpychania elektrostatycznego pomiędzy dodatnio naładowanymi cząstkami Cr_2O_3 oraz dodatnimi makrocząsteczkami OVA najniższy poziom adsorpcji zaobserwowano w roztworze o $\text{pH} = 3$. Dodatkowo w tych warunkach konformacja białka jest najbardziej rozciągnięta, przez co mniejsza ilość biopolimeru może być zaadsorbowana na powierzchni cząstek stałych.

Literatura:

[1] M. Rabe, D. Verdes, S. Seeger, *Advances in Colloid and Interface Science*, **2011**, 162, 87-106

Mikotoksyny jako metabolity grzybów pleśniowych

Agnieszka Szyszkowska, Angelika Kamizela, Dagmara Galas
*Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Instytut Chemii,
ul. Świętokrzyska 15G, 25-406 Kielce*

Mikotoksyny to wtórne produkty przemiany materii grzybów pleśniowych. Ich wytwarzanie zależy od kilku czynników, takich jak wilgotność, pH, skład podłoża

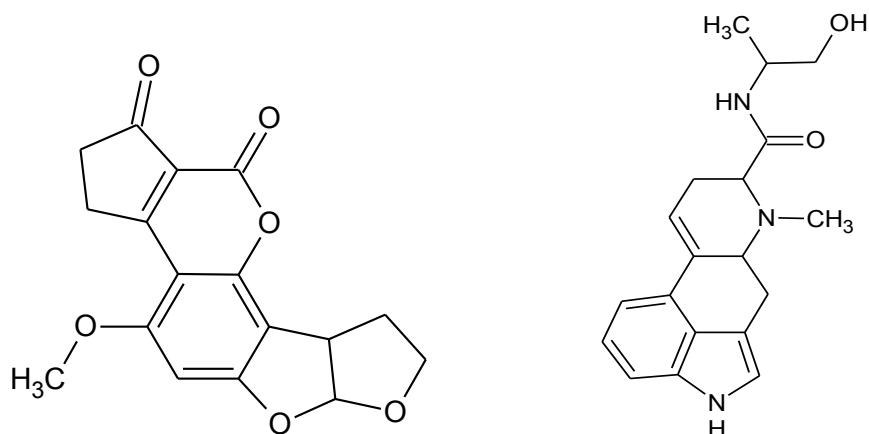
i temperatura inkubacji. Spożycie nawet niewielkich ilości mikotoksyn może prowadzić do poważnych stanów chorobowych. Mikotoksyny mogą powodować zaburzenia w nerkach, wątrobie, żołądku, układzie rozrodczym, a także centralnym układzie nerwowym. Szczególnie znane objawy kliniczne to wymioty, działanie kancerogenne, mutagenne i teratogenne. Mikotoksyny mogą niszczyć struktury komórkowe takie jak błony komórkowe lub zakłócają takie procesy biologiczne jak np. synteza białek DNA i RNA. [1]

Mikotoksyny występują na obszarze całego świata, szczególnie w strefie tropikalnej

i subtropikalnej. Ze względu na budowę chemiczną możemy wyróżnić kilka rodzajów mikotoksyn, np. aflatoksyna, ochratoksyna, alkaloidy sporyszu takie jak ergotamina i ergometryna. Spożycie mikotoksyn może prowadzić do chorób zwanych mikotoksozami. Stanowią one szczególne zagrożenie dla zwierząt, które często są konsumentami mikotoksyn w paszach. Toksyny mogą być przekształcane

i przenikać do różnych części organizmów zwierząt w procesie carry-over, np. do mleka, które może być spożyte przez człowieka. [2]

Mikotoksyny to substancje o rozbudowanych wzorach chemicznych. W ich nazewnictwie nie stosujemy nazw systematycznych, a zwyczajowe. [1]



Rysunek 1. Wzory strukturalne aflatoksyny B₁ i ergometryny

Literatura:

- [1] J. Chelkowski, *Mikotoksyny, wytwarzające je grzyby i mikotoksozy*, SGGW Warszawa 1985, str. 7-8
- [2] J. Grajewski, *Mikotoksyny i grzyby pleśniowe – zagrożenia dla człowieka i zwierząt*, Wydawnictwo Uniwersytetu Kazimierza Wielkiego 2006, str. 15, 35-36, 108, 110

Toksyczna rola jonów manganu a organizmy żywe

Dagmara Galas, Angelika Kamizela, Agnieszka Szyszkowska

Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Instytut Chemii,

ul. Świętokrzyska 15G, 25-406 Kielce

Mangan znajduje się praktycznie we wszystkich tkankach ludzkich i zwierzęcych, gdzie pełni istotne funkcje z biologicznego punktu widzenia. Wiadomo, że jest ważny w prawidłowym rozwoju i funkcjonowaniu mózgu^[1]. Aktualnie ciągle prowadzone są badania mające na celu ustalenie roli manganu w aktywności neuronalnej. Ponadto pierwiastek, ze względu na bardzo rozbudowaną działalność enzymatyczną jest konieczny dla większości organów. Jako najważniejsze enzymy, w których mangan zajmuje centrum katalityczne należy wymienić manganową dysmutazę ponadtlenkową (Mn-SOD), manganową katalazę (Mn-Kat), peroksydazę (Mn-P), arginazę i fotosystem II (COW). Wymienione biokatalizatory biorą udział w obronie komórek przed reaktywnymi formami tlenu, regulują szybkość cyklu mocznikowego lub są niezbędne do prawidłowego przebiegu fotosyntezy^[2]. Niedobór tego metalu jest bardzo niebezpieczny dla organizmów ludzkich, ponieważ powoduje szereg zmian patologicznych, które są przyczyną takich chorób jak schizofrenia, cukrzyca, stwardnienie rozsiane czy osteoporoza.

Nie należy jednak zapominać, że Mn w nadmiarze powoduje wiele zaburzeń w fizjologii organizmów żywych. Mangan jest pierwiastkiem o dwóch twarzach, z jednej strony stanowi „mini-lokomotywę” naszego organizmu, która napędza większość procesów fizjologicznych, a z drugiej przy nadmiarze stanowi element toksyczny, z którym należy walczyć. Toksyczność tego pierwiastka objawia się w większości układów. Najczęściej nadmiar manganu jest wiązany z chorobami neurodegeneracyjnymi. Może on wywoływać dezorientację, sztywnienie, zaburzenia połykania, utratę pamięci, częściowe zmiany w strukturze DNA, dysartrię, zmniejszenie płodności, oraz objawy przypominające chorobę Parkinsona^[3]. Niestety nadal zbyt mało wiadomo o jego metabolizmie w mózgu i innych organach. Jedną z metod leczenia objawów zatrucia manganem jest chelatacja czyli usuwanie nadmiaru jonów poprzez związanie ich w trwałe połączenia kompleksowe^[4].

Celem naszej pracy było pokazanie dwóch oblicz manganu i zwrócenie szczególnej uwagi na jego toksyczność.

Literatura:

[1] A. Takeda, *Brain Res. Rev.*, **41**, 2003, 79-87.

[2] R.J.P. Williams, J.J.R. Frausto da Silva, *Coord. Chem. Rev.*, **200-202**, 2000, 247-348.

[3] K.M. Erikson, M. Aschner, *Neurochem. Internat.*, **43**, 2003, 475-480.

[4] E. Herrero-Hernandez, G. Discalzi, P.Dassi, L.Jarre, E.Pira, *Neurotoxicol.*, **24**, 2003, 633-639.

Adsorpcja oranżu metylowego na węglu aktywnym

Przemysław Urbaniak, Karolina Strąk, Katarzyna Owoc

*Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Instytut Chemii,
ul. Świętokrzyska 15G, 25-406 Kielce*

Techniki separacyjne stanowią podstawę większości procesów izolacji i identyfikacji związków chemicznych. Zadaniem technik separacyjnych jest rozdzielenie składników skomplikowanych mieszanin w celu przygotowania próbek do dalszej analizy. Techniki separacyjne znajdują również zastosowanie preparatywne w celu wzbogacania mieszanin w pożądane składniki. Jednym ze zjawisk wykorzystywanych do rozdzielania, oczyszczania i wzbogacania mieszanin jest adsorpcja^[1]. Adsorpcja należy do grupy zjawisk powierzchniowych, które niejednokrotnie mają kluczowe znaczenie dla wyjaśnienia mechanizmu procesów elektrodowych, katalizy heterogenicznej, badania stanu koloidalnego, procesów krystalizacji oraz rozpuszczania^[2]. Badania procesu adsorpcji mogą prowadzić do określenia struktury wykorzystywanych materiałów porowatych, oraz oceny możliwości ich zastosowania w praktyce laboratoryjnej, przemyśle i ochronie środowiska. W ostatnich latach obserwuje się wzrost zainteresowania wytwarzaniem węgla aktywnych w procesie karbonizacji lignocelulozy. Wytwarzane w ten sposób materiały porowate charakteryzują się dużą atrakcyjnością ze względu na stosunkowo niską cenę produkcji, co może przyczynić się do zwiększenia ich wykorzystania np. do uzdatniania ścieków lub oczyszczania wody pitnej ze śladowych ilości zanieczyszczeń. Wykorzystanie materiałów odpadowych do produkcji węgla aktywnych może przyczynić się do rozwiązania problemu utylizacji zanieczyszczeń gospodarczych i przemysłowych^[3]. W naszej pracy badaliśmy proces adsorpcji oranżu metylowego z roztworu wodnego oraz stosowalność równań izotermy adsorpcji Freundlicha i Langmuira do opisu tego procesu. W badaniach jako adsorbent wykorzystano węgiel aktywny o nieznannej porowatości oraz podjęto próbę charakterystyki jego właściwości na podstawie otrzymanych wyników. Właściwości adsorpcyjne określono przez pomiar stężenia barwnika w roztworach przed i po adsorpcji. Badania prowadzono w układzie statycznym, a pomiar stężenia równowagowego oranżu metylowego wykonano z użyciem metody spektrofotometrycznej.

Literatura:

- [1] P. Stepnowski, E. Synak, B. Szafranek, Z. Kaczyński, *Techniki separacyjne*; Wydawnictwo Uniwersytetu Gdańskiego, Gdańsk, **2010**, 9-11.
- [2] J. Ościk, *Adsorpcja cz. 1 opis i teorie procesu*; UMCS w Lublinie wydział matematyki, fizyki i chemii, Lublin, **1969**, 7.
- [3] María del Rosario Moreno-Virgen, Rigoberto Tovar-Gómez, Didilia I. Mendoza-Castillo, Adrián Bonilla-Petriciolet i in., *Lignocellulosic Precursors used in the Synthesis of Activated Carbon. Characterization Techniques and Applications in the Wastewater Treatment*; InTech, Rijeka, **2012**, 2-7 57-59.

Bromki amoniowe pochodne alkaloidów Cinchona jako katalizatory addycji odczynnika Rupperta do α -iminoketonów

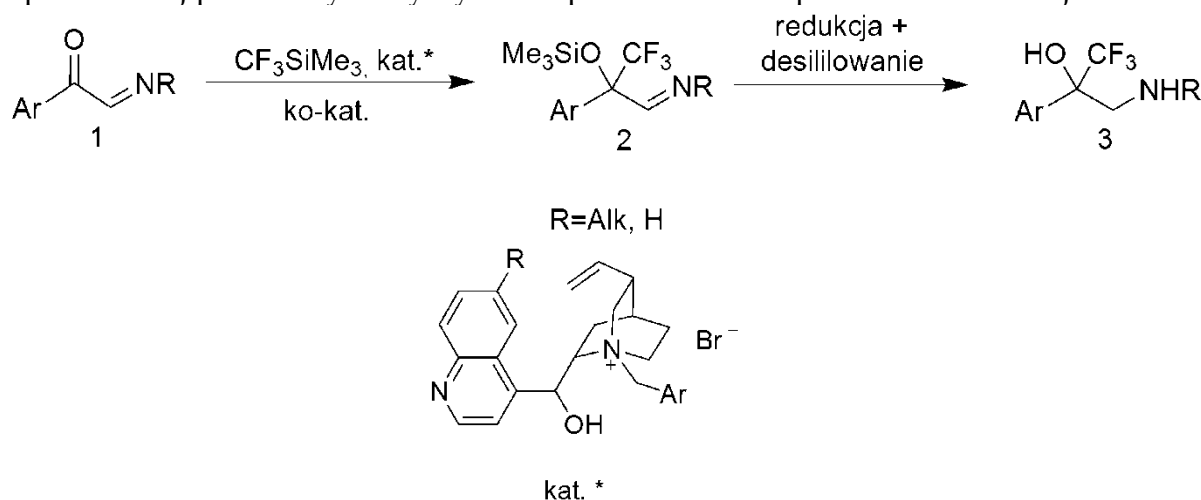
Greta Utecht, Emilia Obijalska*

Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Zakład Chemii Organicznej i Stosowanej,
91-403 Łódź ul. Tamka 12

gretautecht@gmail.com

Synteza związków fluoroorganicznych stanowi intensywnie rozwijany dział chemii organicznej. Wprowadzenie do cząsteczki związku grupy trifluorometylowej powoduje istotne zmiany właściwości chemicznych, fizycznych oraz biologicznych w porównaniu z niefluorowanymi analogami.^[1] Jednym z najbardziej popularnych odczynników służących do wprowadzenia grupy trifluorometylowej do cząsteczek jest (trifluorometylo)trimetylosilan tzw. odczynnik Rupperta-Prakasha.^[2]

Celem badań było opracowanie enancjoselektywnej metody syntezy β -amino- α -(trifluorometylo)alkoholi **3** zawierających I- i II-rzędową grupę aminową. Jako związki wyjściowe wybrano łatwo dostępne α -iminoketony **1** oraz CF_3SiMe_3 . Addycje odczynnika Rupperta prowadzono w obecności bromków amoniowych pochodnych alkaloidów *Cinchona* (kat.*) i K_2CO_3 lub KF jako katalizatorów. Otrzymane addukty **2** poddano redukcji i desililowaniu. Wartości nadmiarów enancjomerycznych wyznaczono dla produktów końcowych **3**. Zaproponowana metoda syntezy jest rozszerzeniem wcześniej opracowanej procedury otrzymywania produktów **3** w postaci racemicznej.



Literatura:

[1] P. Kirsh, *Modern Fluoroorganic Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, **2004**.

[2] G. A. Olah, G. K. S. Prakash, Q. Wang, X.-Y. Li, M. Sánchez-Roselló, C. del Pozo Losada, J. L. Aceña in: David Crich

(Ed.), *Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis*, Wiley & Sons, **2010**.

Badania zostały sfinansowane z Grantu 'SONATA' # DEC-2011/03/D/ST5/05231

Enzymatyczny oraz mikrobiologiczny rozdział mieszaniny racemicznej 2-azabicyklo[2.2.1]hept-5-en-3-on

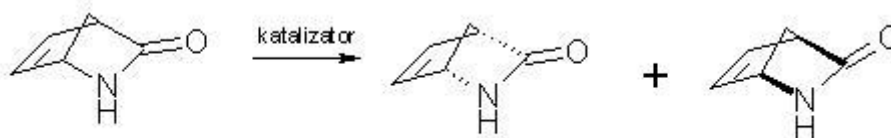
Paulina Walczak^a, Teresa Olejniczak^a

^a Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Katedra Chemii, ul. Norwida 25-27, 50-75 Wrocław

Enzymatyczny rozdział γ -laktamów przy użyciu lipaz jest jedną z metod otrzymywania optycznie czynnych laktamów.

2-azabicyklo[2.2.1]hept-5-en-3-on jest bicyklicznym laktamem, który wykazuje interesujące właściwości farmakologiczne, z tego powodu jego rozdział jest ważnym elementem w syntezie chiralnych leków.^[1] Enancjomery γ -laktamu są szeroko stosowane jako prekursorzy karbocyklicznych nukleozydów, jak również wykorzystywane są jako środki pomocnicze w asymetrycznej syntezie chiralnej.^[2]

Do biotransformacji wykorzystano dziesięć komercyjnie dostępnych lipaz oraz cztery mikroorganizmy jako biokatalizatory.



Schemat 1. Schemat reakcji rozdziału mieszaniny racemicznej 2-azabicyklo[2.2.1]hept-5-en-3-on.

Literatura:

- [1] Halt-tiffin K. E. (+)- and (-)-2-azabicyclo[2.2.1]hept-5-en-3-one on chiral stationary phase. Chemistry Today **2009**, 27/4, 23-25.
- [2] Zhang Y., Yang D., Yao S., Cao Y., Song H. HPLC determination of enantiomeric 2-azobicyclo[2.2.1]hept-5-en-3-one on chiral stationary phase. Journal of Chromatographic science **2011**, 49, 67-71.

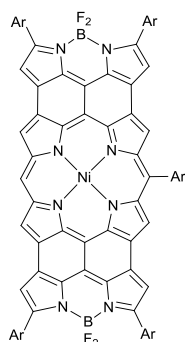
Novel fused porphyrin with aromatics moiety obtained by intermolecular oxidation - synthesis and optical properties

Marek K. Węclawski^{a,b}, Mariusz Tasior^a, Daniel T. Gryko^{a,c}

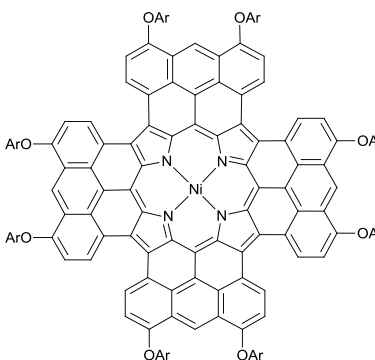
^a Warsaw University

^b Institute of Organic Chemistry PAS

^c Warsaw University of Technology



67



To obtain fused porphyrins are many different synthetic ways[1]. In my review I focused on example of fused porphyrin by oxidative ring closure reaction using oxidative agent like FeCl_3 or $\text{Sc}(\text{OTf})_3/\text{DDQ}$ [2]. This methodology easily lead to elongation of porphyrins system. Causes significant changes in optical and electronic properties which makes them promising candidates for functional materials. These compounds are interesting for applications in the fields of organic semiconductors, photosensitizers, photovoltaic's and nonlinear optics.

Literatura:

[1] Karl M. Kadish, Kevin M. Smith, Roger Guilard, Handbook of Porphyrin Handbook; World Scientific, 2010.

[2] Jan P. Lewtak and Daniel T. Gryko *Chem. Commun.*, **2012**, 48, 10069-10086

Modyfikacja chemiczna polistyrenu związkami zawierającymi atomy fluoru

Małgorzata Wiącek, Ewa Schab-Balcerzak

*Instytut Chemii, Wydział Matematyki, Fizyki i Chemii, Uniwersytet Śląski,
ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice*

Polistyren (PS) jak większość polimerów charakteryzuje się dużą palnością. W celu uniepalnienia materiałów polimerowych stosuje się odpowiednie związki zmniejszające palność, tzw. antypireny. Mogą to być antypireny addytywne, czyli związki niezwiązane kowalencyjnie z łańcuchem makrocząsteczki,^[1] lub antypireny reaktywne stanowiące integralną część łańcucha polimerowego. Do najczęściej wykorzystywanych antypirenów należą związki zawierające w swojej strukturze atomy pierwiastków redukujące palność tak jak: atomy halogenowców, fosforu, krzemu, boru i azotu.^[2,3] Modyfikacje fizyczne z zastosowaniem antypirenów addytywnych obecnie są najczęściej wykorzystywaną metodą zmniejszania palności. Obiecującą metodą może być natomiast modyfikacja chemiczna za pomocą uniepalniaczy reaktywnych. Wśród antypirenów reaktywnych stosowanych do uniepalniania PS znalazły się związki zawierające ugrupowania bezpośrednio połączone z pierścieniem aromatycznym styrenu, będące jednocześnie reaktywnymi uniepalniaczami wykorzystanymi do polimeryzacji.^[4]

W niniejszej pracy przedstawiono i porównano właściwości otrzymanych kopolimerów styrenowych uzyskanych na drodze polimeryzacji rodnikowej z zastosowaniem pochodnych styrenu zawierających atomy halogenowców. Budowę chemiczną syntezowanych polimerów potwierdzono metodą spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego (¹H, ¹³C), a także wyznaczono ich masy molowe za pomocą chromatografii żelowej (GPC). Właściwości termiczne określono na podstawie wyników z różnicowej kalorymetrii skaningowej (DSC) oraz analizy termogravimetrycznej (TGA). Dla badanych kopolimerów wyznaczono współczynniki reaktywności stosownych monomerów, w celu określenia przybliżonej budowy kopolimerów.

Literatura:

- [1] M. Wiącek, E. Schab-Balcerzak, *Polimery*, **2013**, 3, 181.
- [2] P. Armitage, J.R. Ebdon, B.J. Hunt, M.S. Jones, *Polym. Degrad. Stab.*, **1996**, 54, 387-393.
- [3] J.R. Ebdon, L. Guisti, B.J. Hunt, M.S. Jones, *Polym. Degrad. Stab.*, **1998**, 60, 401-407.
- [4] A. Dumitrascu, B.A. Howell, *Polym. Degrad. Stab.*, **2011**, 96, 342-349.

Wpływ stopnia wypalenia kawy na jej całkowitą zdolność antyoksydacyjną

Edyta Wojtczak^{a,b}, Bartosz Michałowski^a, Andrzej Marcinek^a

^a Międzyresortowy Instytut Techniki Radiacyjnej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka, ul. Żeromskiego 116, 90-924 Łódź

^b Koło Naukowe „Trotyl”, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka, ul. Żeromskiego 116, 90-924 Łódź

Tlen jest pierwiastkiem niezbędnym do przeżycia, występuje on również w postaci reaktywnych form, które są przyczyną starzenia się organizmu oraz wielu chorób. Aby przeżyć w środowisku tlenowym organizmy aerobowe rozwinęły szereg mechanizmów chroniących je przed szkodliwym działaniem reaktywnych form tlenu. Jednym z takich mechanizmów jest ochronne działanie antyoksydantów.^[1]

Antyoksydanty są swego rodzaju „tarczą ochronną” organizmu i wychwytyują reaktywne indywidua, zarówno rodnikowe jak i nierodnikowe, zanim te zaatakują biologicznie ważne komponenty komórek naszego organizmu. Badania nad produktami żywnościowymi, wykazały pozytywny wpływ antyoksydantów w walce z nadmierną ilością reaktywnych form tlenu.^[2]

W mojej pracy wykorzystałam metodę spektrofluorymetryczną z użyciem fluoresceiny jako próbnika fluorescencyjnego do oznaczenia całkowitej zdolności antyoksydacyjnej wzorców, którymi były: glutation, askorbinian i kwas moczowy.^[3] Wykorzystanie czytnika mikropłytek pozwoliło na znaczne skrócenie czasu pomiarów. Wyniki podane zostały jako wartości IC₅₀ i oznaczają one stężenie antyoksydantu potrzebne do zahamowania utleniania 50% zawartej w roztworze fluoresceiny.

Przygotowałam również cztery ekstrakty z kawy o różnym stopniu wypalenia: kawy zielonej, kawy wypalanej przez 14,5, 19 i 23 minuty, i analogicznie przeprowadziłam pomiary całkowitej zdolności antyoksydacyjnej. Wyniki ujednoliciłam dokonując ich przeliczenia na ekwiwalenty askorbinianu (AC). Pomiary wykazały zmianę całkowitej zdolności antyoksydacyjnej wraz ze stopniem wypalenia kawy.

Literatura

[1] O. Augusto, S. Miyamoto, *Principles of Free radical Biomedicine.*, Nova Science Publishers, NY, 2011.

[2] G. Bartosz, *Druga twarz tlenu*, PWN, Warszawa, 2009.

[3] A. Robaszkiewicz, G. Bartosz, *Talanta*, 2010, 80, 2196.

Podwójna baza funkcyjna w obliczeniach elektrycznych i magnetycznych właściwości molekularnych

Paweł Wolski^a, Agnieszka Brzyska^b, Krzysztof Woliński^a

^a Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, Pl. Marii Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin

^b Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN, ul. Niezapominajek 8, 30-239 Kraków

Redukcja czasu obliczeniowego pozostaje wciąż istotnym problemem metod współczesnej chemii kwantowej. Jest to spowodowane chociażby faktem, że w centrum zainteresowania teoretycznych i eksperymentalnych badań pojawiają się coraz większe układy molekularne. Proponowana technika podwójnej bazy funkcyjnej (DBS –ang. Dual Basis Set)^[1] pozwala na znaczną redukcję czasu obliczeń gwarantując zadowalającą dokładność. Podstawą metody DBS jest uzyskanie zbieżnych rozwiązań równań Hartree-Focka w małej bazie funkcyjnej, a następnie poprawienie uzyskanych wyników poprzez doliczenie odpowiednich poprawek uwzględniających rozszerzenie bazy funkcyjnej.

Obiecujące wyniki obliczeń energii, parametrów geometrycznych i częstości drgań harmoniczných^[2] uzasadniają dalsze testowanie techniki podwójnej bazy funkcyjnej w wyznaczaniu innych właściwości molekularnych.

W niniejszej pracy zostanie zaprezentowane zastosowanie różnych wariantów metody DBS w obliczeniach polaryzowalności i magnetycznych stałych ekranowania dla testowej molekuly (kwas mlekowy).

Literatura:

[1] K. Woliński and P. Pulay J. Chem. Phys., **2003**, vol. 118, p. 9497.

[2] A. Książek and K. Woliński Mol. Phys., **2008** vol. 106, p. 769

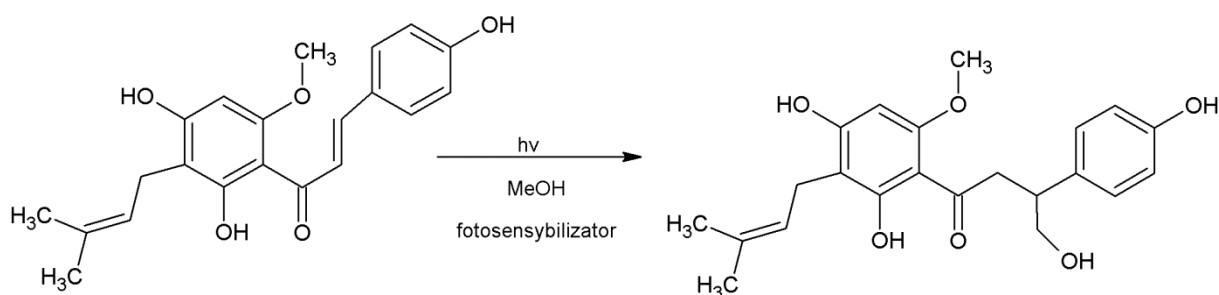
Wpływ różnych fotosensybilizatorów na przebieg fotochemicznej addycji alkoholi do ksantohumolu.

Agata Worobiec^a, Jarosław Popłoński^b

^a Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Katedra Chemii, SKN OrgChem

^b Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Katedra Chemii

Fotochemiczna addycja alkoholi do α - β nienasyconych ketonów jest znaną od dawna reakcją, mało jest jednak doniesień na temat wykorzystania jej w transformacji chalconów. Proponowany mechanizm reakcji zakłada wzbudzenie fotosensybilizatora, który następnie reagując z cząsteczką alkoholu powoduje homolityczny rozpad wiązania węgiel-wodór alkoholu. Powstający rodnik alkoholu i fotosensybilizator reaguje z węglem β substratu, tworząc produkt pośredni, który reagując z kolejną cząsteczką alkoholu tworzy produkt finalny oraz kolejny rodnik alkoholu, powtarzający cykl^[1]. Dobór odpowiedniego fotosensybilizatora jest więc kluczowym elementem wpływającym na wydajność oraz umożliwiającym przebieg reakcji^[2]. Wykorzystywanymi fotosensybilizatorami są najczęściej aromatyczne symetryczne ketony.



W celu optymalizacji uzyskiwania hydroksymetylowych pochodnych ksantohumolu wykonano serię reakcji sprawdzających możliwość wykorzystania różnych fotosensybilizatorów. Reakcję przeprowadzono w fotoreaktorze wykonanym ze szkła Pyrex, wykorzystując 125W średniociśnieniową lampę rtęciową, przebieg reakcji analizowano w czasie, wykorzystując HPLC z detektorem DAD

Literatura:

- [1] O. Shvydkiv, A. Yavorsky, K. Nolan, A. Youssef, E. Giguët, N. Hoffmann, M. Oelgemöller, *Photochemical & Photobiological Sciences*, **2010**, 9(12), 1601-1603.
- [2] A. Yavorsky, O. Shvydkiv, N. Hoffmann, K. Nolan, M. Oelgemöller, *Organic Letters*, **2012**, 14(17), 4342-4345.

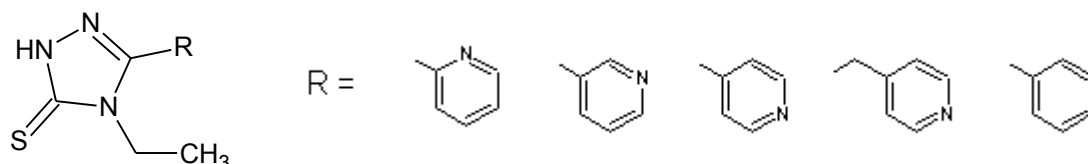
Wykorzystanie technik chromatograficznych do badań nad aktywnością biologiczną pochodnych 1,2,4-triazoli.

Agnieszka Wronka, Irena Malinowska
Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie

Wszystkie substancje przenikając lub wnikając w komórki organizmu natrafiają na bariery (błony komórkowe) o charakterze lipofilowym, które muszą pokonać. Tylko cząstki posiadające odpowiednie powinowactwo do błony będą absorbowane i rozprowadzane w obrębie organizmu. Dlatego też lipofilowość to jeden z podstawowych czynników determinujących działanie wszystkich substancji biologicznie aktywnych.

Tradycyjna metoda wyznaczania tego parametru (*shake-flask method*) jest pracochłonna i mało precyzyjna, dlatego opracowuje się różne pośrednie metody doświadczalne, w tym szereg możliwości wykorzystujących techniki chromatograficzne oraz teoretyczne algorytmy obliczeniowe.

Badaniu poddano grupę pochodnych 1,2,4-triazoli (*ryc. 1*), którym poświęca się w ostatnich dziesięcioleciach dużo uwagi ze względu na ich zróżnicowaną aktywność terapeutyczną. Wiele z nich znalazło już swoje zastosowanie jako składniki leków (Triazolam, Aprazolam, Etizolam, Furacylin), dlatego wciąż pojawiają się setki pochodnych tego typu związków o potencjalnej aktywności biologicznej. Dzięki zastosowaniu technik chromatograficznych można już we wstępnych etapach badań wyeliminować znaczną część substancji nieaktywnych oraz zanieczyszczonych, a wyselekcjonowane związki poddać dalszej analizie. Dzięki takiemu rozwiązaniu badania stają się bardziej efektywne.



Ryc. 1. Struktura badanych związków.

Lipofilowość wyznaczano metodami ekstrapolacyjnymi, korzystając z równania:

$$\log k = \log k_0 - S \cdot \varphi$$

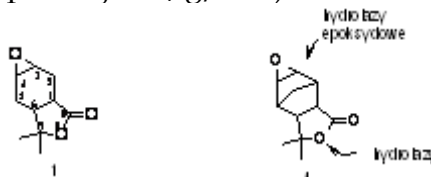
gdzie $\log k$ to współczynnik retencji analitu, S – nachylenie, φ – stężenie modyfikatora organicznego. Opierając się na powyższej zależności wyznaczono $\log k_0$, czyli teoretyczną wartość $\log k$ ekstrapolowaną do zerowej zawartości organicznego modyfikatora w fazie ruchomej, przyjmowaną za najbardziej dokładną miarę lipofilowości uzyskaną przy zastosowaniu chromatografii RP-TLC wykorzystywaną w badaniach QSAR. Otrzymane wartości parametru $\log k_0$ skorelowano z parametrami lipofilowości otrzymanymi metodami obliczeniowymi.

Enzymatyczny i mikrobiologiczny rozdział mieszany racemicznej epoksytrycyclicznego- γ -laktonu

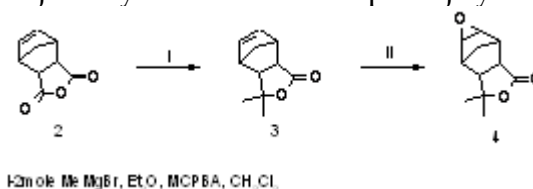
Łukasz Wysoczański, Agata Janik-Polanowicz, Teresa Olejniczak
Katedra Chemii, Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, ul. Norwida 25,
50-375 Wrocław

W klasycznej syntezie organicznej ze związków mających asymetryczne atomy węgla otrzymujemy mieszaniny racemiczne składające się z równomolowych ilości izomeru optycznego skręcającego światło spolaryzowane w prawo i izomeru o odwrotnej skręcalności. Każdy z tych izomerów (enancjomerów) ma inną aktywność biologiczną. Skąd konieczność uzyskania obu izomerów optycznych. Można je otrzymać metodami syntezy asymetrycznej lub biotransformacji z zastosowaniem enzymów, mikroorganizmów czy kultur tkankowych.

Celem podjętych badań jest otrzymanie w formie izomerów optycznych epoksy-laktonu (4) analogu strukturalnego przebadanego wcześniej 7,7-dimetylo-3,4-epoksy-8-oksabicyklo[4.3.0]nonan-9-onu (1). Lakton 1 hamuje wzrost grzybn *Fusarium oxysporum* (IC_{50} poniżej $100\mu\text{g}/\text{cm}^3$).



Substrat do biotransformacji otrzymano w dwuetapowej syntezie (schemat 1).



Schemat 1. Dwuetapowa synteza substratu.

Cząsteczka badanego racemicznego epoksy-laktonu (4) może ulegać enancjoselektywnej hydrolizie pierścienia laktonowego, oraz enancjoselektywnemu otwarciu pierścienia epoksydowego do diolu. Oba procesy mogą prowadzić do otrzymania enancjomeru epoksy-laktonu.

W procesie transformacji, jako biokatalizatorów użyto dziesięciu komercyjnie dostępnymi lipaz, oraz wcześniej wyselekcjonowanych mikroorganizmów. Reakcje transformacji monitorowano przy użyciu chromatografu gazowego wyposażonego w kolumny z chiralnym wypełnieniem.

Literatura:

- [1] K. Sakamoto, K. Honda, K. Wada, S. Kita, K. Tsuzaki, H. Nose, M. Kataoka, S. Shimizu, *Journal of Biotechnology*, **2005**, 99–106
- [2] T. Olejniczak, F. Boratyński, A. Białońska, *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, **2011**, 59, 6071–6081

Korzenie włośnikowate jako biokatalizator do transformacji egzogennych związków z grupy flawonoidów i ich pochodnych

Paweł Zieliński, Bartłomiej Potaniec, Monika Stompor, Mirosław Anioł
*Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Wydział Nauk o Żywności, Katedra Chemii,
ul. C.K. Norwida 25/27, 50-375 Wrocław*

Dzięki postępowi techniki, biotransformacja związków komórkami roślinnymi stała się ważnym narzędziem pozwalającym na modyfikację struktury substancji, w celu podniesienia ich wartości technologicznych i farmakologicznych. W ostatnich latach w dziedzinie zielonej chemii coraz większym zainteresowaniem cieszą się badania związane z wykorzystaniem hodowli korzeni włośnikowatych. Korzenie włośnikowate powstają w wyniku transformacji roślin bakterią *Agrobacterium rhizogenes*, która jest naturalnie występującym w przyrodzie patogenem. Powstające korzenie włośnikowate mają przyspieszony metabolizm, duże tempo wzrostu oraz są stabilne genetycznie. Powyższe cechy czynią z transformowanych roślin cenny materiał do prowadzenia biotransformacji.^[1]

Flawonoidy i ich pochodne są jedną z największych grup metabolitów wtórnych roślin. Ich budowa i funkcje w komórce roślinnej są bardzo zróżnicowane. Powstają na zbiegu dwóch szlaków metabolicznych- szlaku kwasu szikimowego i szlaku kwasu malonowego, które łączy enzym syntetaza chalkonowa.^[1,2]

Flawonoidy są produkowane i modyfikowane w roślinach, a szerokie rozpowszechnienie tych substancji w fitosferze sugeruje, że układ enzymatyczny roślin jest przystosowany do prowadzenia transformacji tych związków.^[3,4]

Obecnie w wynikach publikowanych badań nad biotransformacjami za pomocą korzeni włośnikowatych dominują reakcje glikozylacji (44%), glikozylacji (16%) i redukcji (20%). Pozostałe 20% to reakcje innego typu. Badaniom poddano szeroką gamę związków, od pochodnych stosowanych obecnie leków np. digitoksygenina przez związki terpenowe, takie jak tymol i mentol aż po związki będące przemysłowymi zanieczyszczeniami środowiska jak na przykład fenol i jego chloropochodne. Pośród ogromnej gamy badanych związków, wiele uwagi poświęca się związkom o charakterze polifenoli i ich pochodnych – kwas galusowy, kwas kawowy oraz kumarynie, która swoją strukturą przypomina fragment szkieletu flawonoidów.^[3,4]

Praca powstała dzięki finansowaniu Narodowego Centrum Nauki. Grant Nr 2011/01/B/N29/028909

Literatura:

- [1] Malepszy S., *Biotechnologia roślin*, PWN, Warszawa **2001**, 433-446.
- [2] Kopcewicz J., Lewak S., *Fizjologia roślin*, PWN Warszawa, **2007**, 375-379.
- [3] Giri A., Dhingra V., Giri C., Singh A., Ward O., Narasu M., *Biotechnol. Adv.*, **2001**, 19 I 3, 175-99
- [4] A. Giri, M. L. Narasu, *Biotechnol. Adv.*, **2000**, 18, 1-22

Modelowanie wpływu efektów rozpuszczalnikowych na magnetyczne stałe ekranowania jąder azotu w cząsteczkach azoli

Wioletta Ziemnicka^a, Agnieszka Brzyska^b, Krzysztof Woliński^a

^a Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, Pl. Marii Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin

^b Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN, ul. Niezapominajek 8, 30-239 Kraków

Obecność innych cząsteczek może w znaczny sposób wpłynąć na właściwości analizowanych struktur. Wpływ ten może mieć charakter niespecyficzny – wynikający z efektów polaryzacyjnych, bądź specyficzny – związany z tworzeniem się wiązań wodorowych. W spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego większość pomiarów wykonywanych jest w fazie ciekłej. Wymienione wyżej efekty mogą mieć znaczący wpływ na wartości parametrów widm NMR.

Niniejsza praca dotyczy teoretycznego oszacowania wpływu obecności rozpuszczalnika na magnetyczne stałe ekranowania azotu w cząsteczkach azoli. Wpływ rozpuszczalnikowych efektów polaryzacyjnych modelowano głównie w ramach metody COSMO (ang. *Conductor-like-Screening Model*) traktującej rozpuszczalnik jako ciągłe medium o określonej wartości stałej dielektrycznej. Efekty związane z tworzeniem wiązań wodorowych uwzględniono w ramach modelu ESM (ang. *Explicit Solvation Model*), co wymagało prowadzenia obliczeń dla układów zawierających badaną cząsteczkę otoczoną przez cząsteczki protycznego rozpuszczalnika. Przeprowadzono również próbę połączenia obu modeli.

Uzyskane wyniki teoretyczne zostały skonfrontowane z dostępnymi danymi eksperymentalnymi/ ^[1-4]

Literatura:

- [1] M. Witanowski, W. Sicinska, Z. Grabowski, G. A. Webb, *J. Magn. Reson. A*, **1993**, 104, 310-314.
- [2] M. Witanowski, W. Sicinska, Z. Biedrzycka, G. A. Webb, *J. Magn. Reson. A*, **1994**, 109, 177-180.
- [3] M. Witanowski, W. Sicinska, Z. Biedrzycka, Z. Grabowski, G. A. Webb, *J. Magn. Reson. A*, **1995**, 112, 66-71.
- [4] M. Witanowski, Z. Biedrzycka, W. Sicinska, Z. Grabowski, *J. Magn. Reson.*, **1998**, 131, 54-60