

RAPORT KOŃCOWY
Z REALIZACJI PROJEKTU BADAWCZEGO WŁASNEGO

A. DANE OGÓLNE

1. Nazwa i adres jednostki naukowej
Instytut Przemysłu Organicznego
03-236 Warszawa, ul. Annopol 6
2. Kierownik jednostki
mgr inż. Urszula Wyrzykowska
3. Numer telefonu, numer faksu, e-mail, WWW
tel. (22) 811 12 31, fax. (22) 811 07 99, ipo@ipo.waw.pl, www.ipo.waw.pl
4. NIP, REGON
525-00-08-577, 000042613

B. INFORMACJE O PROJEKCIE

1. Numer rejestracyjny projektu badawczego
N N209 044739
2. Numer umowy
0447/B/H03/2010/39
3. Tytuł projektu badawczego
Synteza nowych selenomoczników i selenokarbaminianów oraz ich potencjalna aktywność biologiczna
4. Kierownik projektu (tytuł naukowy lub stopień naukowy, tytuł zawodowy, imię i nazwisko, numer telefonu, numer faksu, e-mail)
dr inż. Jerzy Zakrzewski
tel. (22) 811 12 31 w. 316, fax (22) 811 07 99, e-mail: zakrzewski@ipo.waw.pl
5. Termin rozpoczęcia realizacji projektu: **26.10.2010 r.**
6. Termin zakończenia realizacji projektu: **25.02.2014 r.**
7. Słowa kluczowe
pochodne selenomocznika, pochodne selenokarbaminianów, aktywność pestycydowa, inhibitory ureazy, Helicobacter pylori

C. SYNTETYCZNY OPIS UZYSKANYCH WYNIKÓW, OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE I ZASTOSOWANIA PRAKTYCZNE

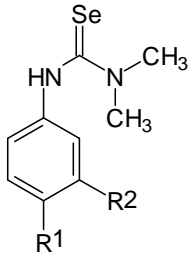
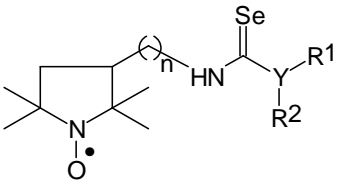
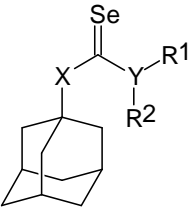
(maksimum 2 strony formatu A4, w nagłówku opisu należy podać numer projektu, tytuł projektu i nazwę jednostki naukowej; treść i formę opisu do ewentualnej publikacji przez ministra właściwego do spraw nauki)

Projekt nr N N209 044739 (nr umowy: 0447/B/H03/2010/39)

pt. „Synteza nowych selenomoczników i selenokarbaminianów oraz ich potencjalna aktywność biologiczna” – Instytut Przemysłu Organicznego, Warszawa

- Opracowano nowy, skuteczny sposób otrzymywania izoselenocyjanianów metodą PTC (50% NaOH, czwartorzędowa sól amoniowa jako katalizator). Jako związek wyjściowy w tej metodzie zastosowano zarówno odpowiedni izonitryl jak i bezpośrednio odpowiednią aminę. Izoselenocyjaniany otrzymywano także powszechnie stosowanymi metodami z izonitryli w reakcji z selenem w chloroformie, lub z selenem wobec trietyloaminy w THF. Metoda z zastosowaniem warunków PTC prowadziła do otrzymywania izoselenocyjanianów w sposób bardziej powtarzalny, niż np. metoda polegająca na selenizacji izonitryli w chloroformie. Niektóre izoselenocyjaniany udało się efektywnie otrzymać wyłącznie z izonitrylu stosując metodę PTC. W sumie otrzymano 12 izoselenocyjanianów.
- Z zsyntetyzowanych izoselenocyjanianów otrzymano 60 selenomoczników w reakcji z aminami pierwszo i drugorzędowymi oraz 28 selenokarbaminianów w reakcji z alkoholami.
- Budowę otrzymanych związków potwierdzono jednoznacznie metodami spektroskopowymi: EI MS, ESI MS, (niska i wysoka rozdzielczość), NMR (^1H , ^{13}C , ^{77}Se), IR.
- Wykorzystując 22 bioindykatory, otrzymane związki oceniono pod kątem działania owadobójczego, przedziorkobójczego, chwastobójczego, bakteriostatycznego oraz grzybobójczego. Wysoką aktywność fungicydową wykazało 49 badanych związków. Szczególnie aktywne wobec grzybów – fitopatogenów roślin okazały się związki zawierające pięcioczłonowe rodniki nitroksylowe, pochodne 2,2,5,5-tetrametylopirrolidyny (21 związków) oraz wszystkie izoselenocyjaniany. Działanie bakteriostatyczne wykazały 34 badane związki, w tym 6 izoselenocyjanianów i 11 pochodnych pięcioczłonowych rodników nitroksylowych. Działanie przedziorkobójcze stwierdzono dla 10 związków, a insektobójcze jedynie dla 2. Aktywność chwastobójczą wykazało 7 związków.
- Spodziewając się odmiennych właściwości biologicznych, spośród otrzymywanych związków selenoorganicznych (zarówno izoselenocyjanianów jak i selenomoczników) wyodrębniono grupę związków zawierających w strukturze fragmenty nitroksylowe. Związki zawierające pięcioczłonowe ugrupowanie nitroksylowe (PROXYL) wykazały silne działanie grzybobójcze, a także bakteriostatyczne.
- Otrzymane selenomoczniki i selenokarbaminiany oceniono pod kątem zdolności inhibicji ureazy wobec kwasu acetohydroksamowego jako inhibitora wzorcowego. Prawie wszystkie badane związki posiadają zdolność hamowania ureazy. Aktywność wyższą od wzorca stwierdzono dla 35 badanych związków. Szczególnie aktywne okazały się związki zawierające w swojej strukturze ugrupowanie adamantylowe.

- Ogólne struktury związków otrzymanych w projekcie wykazujących szczególną aktywność biologiczną.

Związki wykazujące szczególną aktywność herbicydową	Związki wykazujące szczególną aktywność fungicydową i/lub bakteriostatyczną	Związki wykazujące szczególną zdolność do inhibicji ureazy
 <p>$R^1=H, R^2=CH_3$ $R^1=CF_3, R^2=H$</p>	 <p>$n=0,1$ ogólnie: $Y=N,O$ $R^1,R^2=alkil, cykloalkil,$ piperydyna, morfolina, rodniki nitroksylowe</p>	 <p>ogólnie: $X,Y=N,O$ $R^1,R^2=alkil, cykloalkil,$ piperydyna, morfolina, rodniki nitroksylowe</p>

- Przewiduje się prezentację wyników projektu w:

- publikacji opisującej nową metodę otrzymywania izoselenocyjanianów
- publikacji opisujących właściwości pestycydowe otrzymanych związków
- publikacji opisującej właściwości hamowania ureazy.

Otrzymane związki oraz ich aktywność są przedmiotem dwóch zgłoszeń patentowych. Wyniki pracy zostały zaprezentowane na dwóch konferencjach.

D. SPRAWOZDANIE MERYTORYCZNE

(składane tylko w przypadku raportu końcowego, może stanowić odrębny załącznik, nie dotyczy projektu promotorskiego)

E. WYKONANE ZADANIA BADAWCZE WEDŁUG HARMONOGRAMU

Lp.	Nazwa zadania badawczego	Wykonawca zadania (jednostka naukowa)	Termin zakończenia (miesiąc, rok)	Koszty poniesione ze środków projektu (zł)	Koszty poniesione łącznie (zł)
1	2	3	4	5	6
1	Synteza arylowych pochodnych selenomocznika. Synteza izonitryli z wyjściowych amin. Otrzymywanie izoselenocyjanianów – selenizacja otrzymanych nitryli. Otrzymywanie pochodnych selenomocznika i selenokarbaminianów – reakcja izoselenocyjanianów z aminami i alkoholami. Opcjonalne otrzymywanie pochodnych selenomocznika innymi metodami. Zakup przewidzianej aparatury: wagi, drobny sprzęt laboratoryjny, zestaw komputerowy.	Instytut Przemysłu Organicznego	25-02-2014	180 000	180 000
2	Analiza spektroskopowa otrzymanych związków: MS, HR MS, IR, NMR. Interpretacja uzyskanych widm.	Instytut Przemysłu Organicznego	25-02-2014	35 000	35 000
3	Ocena aktywności biologicznej otrzymanych związków.	Instytut Przemysłu Organicznego	25-02-2014	75 000	75 000
4	Ocena aktywności otrzymanych związków jako inhibitorów ureazy	Instytut Przemysłu Organicznego	25-02-2014	75 000	75 000
5	Próby analizy korelacyjnej aktywności biologicznej otrzymanych związków z ich własnościami fizykochemicznymi oraz strukturalnymi	Instytut Przemysłu Organicznego	25-02-2014	15 000	15 000
6	Opracowanie raportu końcowego	Instytut Przemysłu Organicznego	25-02-2014	10 000	10 000
	RAZEM			390 000	390 000

(Suma kosztów poniesionych ze środków projektu nie może być wyższa niż przyznane środki według umowy)

F. WYKAZ PRAC PRZYJĘTYCH DO DRUKU LUB OPUBLIKOWANYCH W WYNIKU REALIZACJI PROJEKTU

(tytuł publikacji, autorzy, wydawnictwo - nazwa, tom, rok, strony²⁾)

Planowane publikacje omówiono w pkt C: „Syntetyczny opis uzyskanych wyników, osiągnięcia naukowe i zastosowania praktyczne niniejszego raportu”

G. INNE FORMY UPOWSZECHNIENIA WYNIKÓW

(informacje o upowszechnianiu wyników uzyskanych w wyniku realizacji projektu - konferencje, sympozja, wdrożenia, patenty, Internet, liczba i nazwa pozycji zamieszczonych w publicznych bazach danych z podaniem nazwy bazy)

- J. Zakrzewski, B. Huras, J. Hupko, M. Krawczyk, B. Wantusiak, B. Zdunek, A. Michalczyk, A. Cieniecka, K. Święch, B. Moryc, K. Kuzalski, B. Malka-Zakrzewska, S. Porębska, Nowe pochodne selenoorganiczne oraz ich zastosowanie, P. 406651, zgłoszenie 23.12.2013 r.
- J. Zakrzewski, B. Huras, J. Hupko, Nowe pochodne selenoorganiczne i ich zastosowanie, P. 406652, zgłoszenie 23.12.2013 r.
- J. Zakrzewski, B. Huras, J. Hupko, M. Krawczyk, Synthesis and biological activity of new selenoureas and selenocarbamates, *National Scientific-Technical Internet Conference with International Participation Actual problems of synthesis and creation of biologically active compounds and pharmaceutical drugs, Internet Conference is dedicated to 90-years of Departments of Technology of Biologically Active Compounds, Pharmacy and Biotechnology of Lviv Polytechnic National University, poster, Lwów, 23 – 25.04.2013 r.*
- J. Zakrzewski, B. Huras, J. Hupko, M. Krawczyk, A. Kiełczewska, Nowe izoselenocyjaniany, selenomoczniki i selenokarbaminiany; otrzymywanie i ich aktywność biologiczna, XXXVIII Międzynarodowe Seminarium Naukowo-Techniczne. Chemistry for Agriculture, poster, Karpacz, 01 – 04.12.2013 r.

Syntetyczny opis uzyskanych wyników z badań zostanie zamieszczony na stronie internetowej Instytutu Przemysłu Organicznego: www.pl.ipo.waw.pl/projekty-br

H. WYKAZ APARATURY NAUKOWO-BADAWCZEJ ZAKUPIONEJ LUB WYTWORZONEJ DO REALIZACJI PROJEKTU

1. Aparatura zakupiona.

Rok zakupu: 2010 r.

Nazwa aparatury: **Waga precyzyjna**

Koszty aparatury poniesione ze środków projektu: **2 440,00 zł**

Rok zakupu: 2011 r.

Nazwa aparatury: **Waga analityczna**

Koszty aparatury poniesione ze środków projektu: **16 359,00 zł**

Rok zakupu: 2011 r.

Nazwa aparatury: **Zestaw komputerowy**

Koszty aparatury poniesione ze środków projektu: **3 892,95 zł**

Koszty aparatury poniesione łącznie 22 691,95 zł

2. Aparatura wytworzona.
(rok wytworzenia, nazwa aparatury, koszty aparatury poniesione ze środków projektu - w zł, koszty aparatury poniesione łącznie - w zł)

I. OCENA REALIZACJI PROJEKTU PRZEZ JEDNOSTKĘ NAUKOWĄ

Czy projekt ~~jest realizowany~~ został wykonany zgodnie z harmonogramem i kosztorysem umowy oraz zgodnie z umową?

TAK/NIE³⁾

J. ZESTAWIENIE KOSZTÓW PLANOWANYCH I PONIESIONYCH (ZŁ)

Pozycja	Rok 2010		Rok 2011		Rok 2012		Rok 2013		Rok 2014		Razem	
	Planowane	Poniesione	Planowane	Poniesione	Planowane	Poniesione	Planowane	Poniesione	Planowane	Poniesione	Planowane	Poniesione
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Koszty bezpośrednie realizacji projektu, w tym:	36 430,00	31 069,90	129 735,00	135 095,10	113 570,00	92 554,10	30 265,00	50 139,72	0,00	1 141,18	310 000,00	310 000,00
- wynagrodzenia wraz z pochodnymi	21 430,00	21 430,00	74 110,00	74 110,00	78 570,00	78 570,00	25 890,00	24 748,82	0,00	1 141,18	200 000,00	200 000,00
- inne koszty bezpośrednie	15 000,00	9 639,90	55 625,00	60 985,10	35 000,00	13 984,10	4 375,00	25 390,90	0,00	0,00	110 000,00	110 000,00
Koszty pośrednie	8 570,00	8 570,00	29 640,00	29 640,00	31 430,00	31 430,00	10 360,00	9 760,00	0,00	600,00	80 000,00	80 000,00
Koszty realizacji projektu ogółem	45 000,00	39 639,90	159 375,00	164 735,10	145 000,00	123 984,10	40 625,00	59 899,72	0,00	1 741,18	390 000,00	390 000,00

K. OŚWIADCZENIA

1. Dokumentacja potwierdzająca realizację projektu znajduje się do wglądu w Instytucie Przemysłu Organicznego, ul. Annopol 6, 03-236 Warszawa, Dział MA - Barbara Truskowska tel. (22) 811 12 31 w. 371, truskowska@ipo.waw.pl
(adres, osoba upoważniona, numer telefonu, e-mail)
2. Dokumentacja dotycząca wyników realizacji projektu jest dostępna w jednostce naukowej.
3. Osoba odpowiedzialna za przygotowanie raportu: **Jerzy Zakrzewski** tel. (22) 811 12 31 w. 316, fax. (22) 811 07 99, e-mail: zakrzewski@ipo.waw.pl
(imię i nazwisko, numer telefonu, numer faksu, e-mail)

Raport sporządzono dnia *22.04.* 2014 r.

pieczęć jednostki

INSTYTUT PRZEMYSŁU ORGANICZNEGO
03-236 Warszawa, ul. Annopol 6
tel. 81-12-31, fax 81-07-99
Regon 000042613
(14)

Kierownik jednostki

DYREKTOR
INSTYTUTU PRZEMYSŁU ORGANICZNEGO
mgr inż. *Urszula Wyrzykowska*
podpis i pieczęć

Główny księgowy/Kwestor

GŁÓWNY KSIĘGOWY
PROKURENT
mgr inż. *Joanna Paszko*
podpis i pieczęć

Kierownik projektu

Zakrzewski
podpis

-
- 1) Niepotrzebne skreślić.
 - 2) W przypadku prac opublikowanych powinna być dołączona odbitka pracy lub kserokopia pierwszej i ostatniej strony. W przypadku prac złożonych - dokument (redakcji lub upoważnionego organu) potwierdzający przyjęcie do druku.
 - 3) Niepotrzebne skreślić. Jeżeli odpowiedź NIE, należy przedstawić informację o zmianach warunków realizacji projektu wraz z uzasadnieniem.