

Formulár ZK - Záverečná karta projektu

| | |
|--|--|
| Riešiteľ: Prof. RNDr. Milan Melnik, DrSc. | Evidenčné číslo projektu: APVT-20-005504 |
| Názov projektu: Príprava a štúdium nesteroidných antiflogistík na báze komplexov medi(II). | |

| | |
|---|--|
| Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený: | Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Bratislava |
| | Farmaceutická fakulta UK, Bratislava |
| | |
| | |
| Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát): | Univerzita Wroclaw, Poľsko |
| | University Helsinki, Fínsko |
| | York University, Kanada |

| | |
|---|---|
| Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu: | |
| Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uved'te i publikácie prijaté do tlače alebo pripravované): <i>Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.</i> | <ol style="list-style-type: none"> Melnik M, et al.: Crystallographic and structural analysis of iron heterometallic compounds. Part I. Heterobinuclear compounds. <i>REVIEWS IN INORGANIC CHEMISTRY</i> 26 (1-3): 1-365 JAN-JUN 2006 (1.0) Šima J., Optimizing the Photoreactivity of Chemical Compounds – Necessity, Challenges and Obstacles, in <i>Coordination Chemistry Research Progress</i> Nova Science Publishers, New York, 2007, (ISBN 978-1-60456-047-3) Stachova P. et al.: Synthesis, spectral and magnetical characterization of monomeric [Cu(2-NO(2)bz)(2)(nia)(2)(H₂O)(2)] and structural analysis of similar [Cu(RCOO)(2)(L-N)(2)(H₂O)(2)] complexes. <i>INORGANICA CHIMICA ACTA</i> 360 (5): 1517-1522 APR 1 Moncol J, et al.: Preparation, structure, spectral, and magnetic properties of copper(II) halogenicotinates: Crystal and molecular structure of tetrakis(mu-2-chloronicotinato-0,0')-diaquacopper(II). <i>ZEITSCHRIFT FUR ANORGANISCHE UND ALLGEMEINE</i> Szabo-Planka T. et al.: Complexation of 5-fluorosalicic acid with copper(II): pH-potentiometric, UV-vis spectroscopic, and electron spin resonance study by the two-dimensional simulation of spectra. |
| V čom vidíte uplatnenie výsledkov tohto projektu: | Rozvoj poznania v oblasti prípravy, zloženia, štruktúry, chemických, fyzikálnych a biologických vlastností komplexov s terapeuticky aktívnymi ligandmi využiteľného v humánnej medicíne. |

Podpisom záverečnej karty riešiteľ vyjadruje svoj súhlas ku zverejneniu údajov v nej uvedených.

Podpis riešiteľa:

Dátum: .30.1.2008.....

Charakteristika výsledkov

Evidenčné číslo: APVT-20-005504

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - slovensky:

V súlade s trojročným plánom výskumu sa v období 2005-2007 riešila problematika komplexov Cu(II), Fe(III) a iných centrálnych atómov s nesteroidnými ligandmi, ktoré samotné vykazujú protizápalové, protireumatické, protiplesňové a ďalšie terapeutické účinky. Objektami výskumu boli študované komplexné zlúčeniny s aniónovými ligandmi (acetáty, propionáty, benzoáty, pyridínkarboxyláty, salicyláty, chinolóny a kojáty) a molekulovými ligandmi (ronikol a ďalšie deriváty kyseliny nikotínovej, kofeín). Koncentrované štúdium zloženia, molekulovej a kryštálovej štruktúry, spektrálnych a magnetických vlastností novo pripravených zlúčenín viedlo k zovšeobecňujúcim záverom o koordinačnej schopnosti jednotlivých terapeuticky aktívnych ligandov a ich štruktúrnych modelov, získaniu poznatkov o vzťahu medzi typom naviazaných ligandov a tvarom koordinačného polyédra v komplexoch Cu(II), významnej účasti vodíkových väzieb pri formovaní kryštálovej štruktúry. Získané poznatky umožňujú cieľavedome modifikovať a optimalizovať zloženie a štruktúru nových zlúčenín.

Skúmala sa tiež biologická aktivita niektorých z pripravených zlúčenín z hľadiska ich možného použitia ako súčasti liečebných preparátov.

Nakoľko väčšina terapeuticky aktívnych látok pôsobí v bunkách organizmov, t. j. vo vodnom prostredí, venovala sa pozornosť aj roztokovým vlastnostiam niektorých komplexov. V rámci projektu sa vybuďovalo laboratórium roztokovej chémie. Metódou dvojrozmernej EPR sa zisťovalo zloženie, štruktúra a distribúcia komplexov v roztokoch Cu(II) a Fe(III) komplexov s derivátmi kyseliny kojovej a salicylovej. Získané poznatky umožňujú optimalizovať zloženie a distribúciu jednotlivých komplexov v roztokoch a pripravovať systémy s požadovaním zložením. Súčasťou roztokovej chémie bolo aj štúdium fotochemických a katalytických vlastností komplexov Cu(II), Ni(II) a Fe(III).

V rámci projektu vzniklo niekoľko monografických a prehľadných prác zovšeobecňujúcich skúsenosti riešiteľov projektu a umožňujúcich transfer poznatkov medzi oblasťami koordinačnej a bioanorganickej chémie.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - anglicky:

Stemming from the three-year project schedule for 2005-2007, the issues of complexes of Cu(II), Fe(III) and other central atoms with non-steroidal ligands exhibiting antiinflammation, antirheumatic, antifungal or other therapeutic effects were investigated. The complexes contain acido ligands (such as acetates, propionates, benzoates, pyridine carboxylates, salicylates, quinolones and kojates) and neutral ones (ronicol and other derivatives of nicotinic acid, caffeine). Concentrated study of the composition, molecular and crystal structures, spectral and magnetic behaviour of the originally prepared compounds led to general conclusions on the coordination ability of individual therapeutically active ligands and their structural analogues; data on relations between the type of a coordinated ligand and the shape of coordination polyhedron in the Cu(II) complexes, importance of hydrogen bonds at the crystal structure forming have been gathered. The obtained knowledge allows to purposefully modify and optimize the composition and structure of new compounds.

Biological performance of some complexes was determined and evaluated from the view point of their possible application as part of therapeutical agents.

Stimulated by the fact that most of therapeutical agent act in organism cells, i.e. in aqueous media, attention has been paid to solution chemistry of some complexes as well. Within the project, a laboratory of solution chemistry has been established. Applying the 2D EPR technique, the composition, structure and distribution of species in some solutions of Cu(II) and Fe(III) complexes with salicylic and kojic acid derivatives were followed. The obtained information allow to optimize the composition and distribution of the species and prepare thus solutions with required composition. Study of photochemical and catalytic properties of Cu(II), Fe(III) and Ni(II) complexes form part of solution chemistry too.

Within the project, some monographic and review papers, offering generally valid conclusions of the project members and allowing to transfer the knowledge between areas of coordination and bioinorganic chemistry have been published.

Podpis riešiteľa: