



Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

APVV-0202-10

Poznanie elektrónovej štruktúry látok ako cesta k predikcii potenciálnych liečiv

Zodpovedný riešiteľ **Prof.Ing. Stanislav Biskupič, DrSc.**

Príjemca **Prof.Ing. Ján Šajbidor, DrSc.**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU
2. Bratislavské iónové technológie
3. Farmaceutická fakulta UK
4. Fakulta prírodných vied UKF
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. IUCr - medzinárodná kryštalografická únia spolupracovala pri organizovaní medzinárodnej konferencie ECDM6, Štrbské Pleso, September, 2012 - 130 účastníkov z celého sveta
- 2.
- 3.

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

- 1.
- 2.
- 3.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. K. Jomova, M. Valko, Curr. Pharm. Design: Importance of Iron Chelation in Free Radical-Induced Oxidative Stress and Human Disease; 17, 31, 3460-3473 (2011) -38 cit.
2. K. Jomova, S. Baros, M. Valko, TRANSITION METAL CHEMISTRY : Redox active metal-induced oxidative stress in biological systems; 37, 2, 127-134 (2012) -15 cit.
3. L. BucinskyG. Buechel, R. Ponec, Robert; et al., Eur. J. Inorg.Chem., 14,2505 - 2519 (2013) - 6 cit.
4. V. Arion, S. Platzer, P. Rapta et al., Marked Stabilization of Redox States and Enhanced Catalytic Activity in Galactose Oxidase Models Based on Transition Metal S-Methylisothiosemicarbazones with -SR Group in Ortho Position to the Phenolic Oxygen,

Inorg. Chem., 52, 13, 7524 - 7540 (2013) - 6 cit.

5. M. Remko, P. Herich, F. Gregan, et al. ; Structure, acidity and basicity of a benzene disulfonamide inhibitor of carbonic anhydrase J. Mol. Structure, 1059, 124-131 (2014) - 1 cit.

Uplatnenie výsledkov projektu

Výsledky projektu sú využiteľné pre stratégiu prípravy nových liečiv pre potenciálne využitie v klinickej praxi. Nová syntéza 2-bróm-dimetoxy-benzaldehydu a 2-fluór-dimetoxybenzaldehydu v rámci prípravy 6-F-L-DOPA pre jednostupňovú syntézu 6-18F-L-FDOPA pre pozitronovú emisnú tomografiu môže byť v budúcnosti patentovaná. Zdokonalenie metodických prístupov k opisu elektrónovej štruktúry látok experimentálnymi aj teoretickými metódami urýchli rozvoj materiállovej vedy vo svete.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Prípravili, charakterizovali a otestovali sme sériu komplexov prechodných kovov, resp. aj ich ligandov potenciálne použiteľných pre terapeutické účely. Vo vybraných prípadoch sme pomocou rôznych experimentálnych techník a teoretických metód popísali ich elektrónovú štruktúru a korelovali jej charakteristiky s fyzikálno-chemickými a biologickými vlastnosťami zlúčenín. Získané výsledky poskytujú dobrú stratégiu pre prípravu nových látok s modifikovanou ligandovou sférou, resp. pre potenciálne využitie vlastností študovaných látok v klinickej praxi. V rámci hľadania nových efektívnych metód prípravy 6-F-L-DOPA pre jednostupňovú syntézu 6-18F-L-FDOPA pre pozitronovú emisnú tomografiu sme uskutočnili novú syntézu 2-bróm-dimetoxy-benzaldehydu a 2-fluór-dimetoxybenzaldehydu v dobrom výťažku. Navrhli a uskutočnili sme novú štvorstupňovú syntézu 6-Br-D,L-DOPA a 6-F-D,L-DOPA. V kooperácii s dvoma francúzskymi pracoviskami sme aktívne prispeli k zlepšeniu metodických prístupov k opisu elektrónovej štruktúry látok experimentálnymi aj teoretickými metódami na minimálne na európskej úrovni.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

We have prepared, characterised and tested a series of transition metal complexes, perhaps even their ligands, which are potentially usable for therapeutic purposes. In selected cases, using various experimental techniques and theoretical methods we have described their electron structure and correlated its characteristics with physico-chemical and biological properties of the compounds. Obtained results offer a good strategy for the preparation of new compound with a modified ligand sphere, eventually for potential use of the properties of studied compounds in a clinical praxis. Within searching for new effective methods of 6-F-L-DOPA preparation for the single step synthesis of 6-18F-L-FDOPA for positron emission tomography we have accomplished a new synthesis of 2-bromo-dimethoxy-benzaldehyde and 2-fluoro-dimethoxybenzaldehyde in good yields. We have proposed and accomplished a new four-step synthesis of 6-Br-D,L-DOPA a 6-F-D,L-DOPA. In cooperation with two French laboratories we have actively contributed to the improvement of methodology treatments to the description of the electronic structure of compounds by experimental and theoretical methods at least at a European level.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

Prof.Ing. Stanislav Biskupič, DrSc.

V Bratislave 27. 11. 2014

Štatutárny zástupca príjemcu

Prof.Ing. Ján Šajbidor, DrSc.

V Bratislave 27. 11. 201

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu