

## **Laboratorium Chemii Organicznej i Bioorganicznej**

### **Zakład Produktów Bioaktywnych**

#### **Grupa badawcza Anna Komasa**

Proponowana tematyka badawcza dotyczy soli i kokryształów farmaceutycznych.

Sole (lub kokryształy) farmaceutyczne są związkami, w których przynajmniej jeden ze składników jest aktywny farmaceutycznie (ang. API – Active Pharmaceutical Ingredient). Obecnie tworzenie tego typu układów jest jednym z podstawowych podejść wykorzystywanym do modyfikowania właściwości fizycznych substancji bioaktywnych i szacuje się, że ponad połowa leków na rynku występuje właśnie w postaci soli. Badanie soli i kokryształów farmaceutycznych jest istotne ze względu na różnice ich właściwości fizykochemicznych (np. rozpuszczalność, trwałość, przyswajalność, farmakokinetyka leku) w porównaniu z właściwościami składnika aktywnego farmaceutycznie.

Przykładem realizacji tej tematyki jest praca magisterska zatytułowana: „Badania spektroskopowe, strukturalne i teoretyczne kompleksów pirydoksyny z kwasami” [1], w której jako API została zastosowana pirydoksyna, będąca jedną z form witaminy B<sub>6</sub>. Pirydoksyna dzięki obecności wolnej pary elektronów na atomie azotu wykazuje właściwości zasadowe i może występować w roli protonoakceptora w kompleksach z kwasami. W ramach realizacji prac magisterskich [1,2] oraz prac licencjackich [3,4,5] otrzymano szereg soli i kokryształów pirydoksyny z kwasami o zróżnicowanej strukturze. Między innymi zastosowano kwasy fenolowe (fenolokwasy) powszechnie występujące w roślinach i wykazujące cenne właściwości farmakologiczne, takie jak np. przeciwgorączkowe, przeciwzapalne, przeciwgrzybiczne, przeciwdrobnoustrojowe czy neuroprotektoryjne.

Głównym celem realizowanych badań było wyznaczenie struktury związków (w kooperacji z Zakładem Krystalografii), badanie oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych oraz opis roli wiązań wodorowych w stabilizacji struktury krystalicznej. Otrzymane związki były charakteryzowane metodami spektroskopii FTIR, <sup>1</sup>H i <sup>13</sup>C NMR oraz UV-Vis.

Dodatkowe informacje o strukturze i oddziaływaniach występujących w badanych układach uzyskiwano na podstawie obliczeń kwantowo-mechanicznych. Dla wybranych związków we współpracy z Uniwersytetem Przyrodniczym przeprowadzono również badania właściwości biologicznych.

#### Literatura:

1. Karolina Babiczuk „Badania spektroskopowe, strukturalne i teoretyczne kompleksów pirydoksyny z kwasami” – Praca magisterska Wydział Chemii UAM 2021 r.
2. Wiktoria Kamińska „Badania strukturalne, spektroskopowe i fungistatyczne kompleksów pirydoksyny (formy witaminy B<sub>6</sub>) z kwasami.” - Praca magisterska Wydział Chemii UAM 2021 r.
3. Helena Kalinowska „Nowe "sole farmaceutyczne" zawierające tiaminę - synteza i badania spektroskopowe” – Praca licencjacka Wydział Chemii UAM 2020 r.
4. Roksana Gurlaga „Kwantowo-chemiczne badania kompleksu pirydoksyny (formy witaminy B<sub>6</sub>) z kwasem 3,5-dihydroksybenzoesowym” - Praca licencjacka Wydział Chemii UAM 2021 r.

Praca badawcza może zostać podjęta od drugiego roku studiów DL

#### Dane kontaktowe:

**Prof. UAM Anna Komasa**

Wydział Chemii UAM  
Zakład Produktów Bioaktywnych  
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań  
Tel: +48 61 829 1759  
e-mail: [aniak@amu.edu.pl](mailto:aniak@amu.edu.pl)