

Celem projektu jest przeprowadzenie kompleksowych badań spektroskopowych oraz zbadanie aktywności mikrobiologicznej i przeciwutleniającej wybranych związków o potwierdzonych właściwościach przeciwdrobnoustrojowych występujących w roślinie *Oregano vulgaris* (lebiodka pospolita) oraz ich kompleksów z wybranymi metalami. Chcemy uzyskać odpowiedź na pytanie, jakie elementy budowy tych związków (np. długość układu nienasyconych wiązań sprzężonych, aromatyczność układów, właściwości akceptorowo-donorowe, polarność cząsteczki, moment dipolowy) mają największy wpływ na aktywność biologiczną. Utworzenie kompleksów naturalnych ligandów z metalami, w tym z wykazującymi działanie antibakteryjne lantanowcami, które od lat stosowane są w medycynie i rolnictwie, poprzez zmiany w rozkładzie ładunku elektronowego ligandów, może spowodować zmianę mechanizmu ich oddziaływania z błonami komórkowymi, efekt synergistyczny, a w konsekwencji zwiększenie ich aktywności biologicznej. Ponadto w wyniku związania ligandów z metalami, zmieni się charakter lipofilowy związków, co może ułatwiać ich przenikanie przez błony biologiczne mikroorganizmów i wzmacniać ich działanie. Badania zaplanowano w sposób systemowy, a mianowicie z wykorzystaniem komplementarnych technik badawczych dla starannie dobranych (na podstawie budowy chemicznej) serii ligandów i serii metali. Zbadana zostanie struktura naturalnych składników oregano i ich kompleksów z metalami za pomocą metod spektroskopowych. Do obliczeń rozkładu ładunku elektronowego, aromatyczności, rzędu wiązania, itp. zastosowane zostaną teoretyczne metody chemii kwantowej, zaś do badania właściwości antyoksydacyjnych metody spektrofotometryczne. Badania mikrobiologiczne przeprowadzone zostaną na mikroorganizmach powodujących choroby przenoszone drogą pokarmową: bakterie gram-ujemne: *Escherichia coli* (EC), *Salmonella spp.*, *Campylobacter spp.*; bakterie gram dodatnie: *Staphylococcus aureus* (SA), *Bacillus subtilis* (BS). Na podstawie badań wytypowane zostaną związki o największej aktywności biologicznej. Za pomocą metod statystycznych przeprowadzona zostanie analiza korelacji pomiędzy wybranymi parametrami budowy chemicznej i aktywnością mikrobiologiczną. Na tej podstawie sformułowane zostaną ogólne zależności pomiędzy strukturą molekularną a aktywnością biologiczną związków chemicznych naturalnie występujących w roślinach. W kolejnym etapie zbadana zostanie toksyczność wybranych związków, wyznaczone zostaną wartości IC₅₀ na dodatkowej grupie bakterii. Zbadana zostanie też cytotoksyczność wybranych związków, potencjalnych konserwantów, na ludzkich liniach komórkowych układu pokarmowego. W perspektywie umożliwi to projektowanie nowych, bezpiecznych dla ludzi, substancji o działaniu przeciwdrobnoustrojowym, które potencjalnie będą mogły być wykorzystane do konserwacji żywności. Podjęta zostanie również próba wyjaśnienia mechanizmu oddziaływania wyselekcjonowanych związków na błony biologiczne oraz układy je modelujące. Poszukamy odpowiedzi na pytanie, czy badane związki mikrobiologicznie czynne przenikają do wnętrza komórek mikroorganizmów, czy niszczą błonę komórkową. Współczesny przemysł spożywczy nie mógłby istnieć bez substancji dodatkowych do żywności, w tym substancji konserwujących; są one stosowane nawet w produktach pochodzenia ekologicznego. Stosowanie konserwantów pozwala na przedłużenie trwałości produktów żywnościowych, a ponadto zabezpiecza je przed tworzeniem się substancji szkodliwych dla zdrowia konsumenta. Polacy, wg Federacji Banków Żywności, rocznie wyrzucają 2 miliony ton żywności, głównie z powodu jej zepsucia. PZH odnotowuje także wzrost liczby przypadków chorób przenoszonych drogą pokarmową, głównie pochodzenia bakteryjnego. Rośliny mają wiele bioaktywnych substancji, takich jak fenole, flawonoidy, chinony, kumaryny, kwasy fenolowe, taniny, flawony i flawonole, terpeny i alkaloidy, które chronią je przed drobnoustrojami. Wiadomo, że olejek z oregano działa na szerokie spektrum bakterii oraz pleśni, ale kompleksy naturalnych ligandów z metalami mogą mieć silniejsze działanie konserwujące od samych ligandów. Lepsze rozumienie wpływu struktury molekularnej na aktywność biologiczną badanych związków, a także oddziaływań pomiędzy kompleksami metali a modelowymi błonami biologicznymi oraz komórkami mikroorganizmów, otworzy nowe możliwości projektowania substancji o właściwościach konserwujących i ich zastosowania w przetwórstwie żywności. Wyniki badań pozwolą poszukiwać nowych substancji o właściwościach przeciwdrobnoustrojowych nie metodą „prób i błędów”, ale racjonalnie je projektować. Zakładamy, że niektóre z badanych związków będą miały lepsze właściwości niż obecnie stosowane konserwanty. Ponadto substancje te oparte na naturalnych ligandach kompleksowanych makro- i mikroelementami, mogą być bezpieczniejsze dla zdrowia człowieka od stosowanych obecnie.