

mgr Dorota Stępień
Pracownia Chemii Teoretycznej i Strukturalnej
Wydział Chemii
Uniwersytetu Warszawskiego

Warszawa, 12.09.2024 r.

Autoreferat rozprawy doktorskiej pt.:

„Rola wiązań wodorowych w wybranych kompleksach pochodnych floroglucyny
oraz kwasów fenylboronowych”

Promotor: Prof. dr hab. Michał K. Cyrański

Badania będące przedmiotem pracy związane są z inżynierią krystaliczną ukierunkowaną na tworzenie układów wieloskładnikowych. Kontrolowana krystalizacja umożliwia uzyskiwanie związków o pożądanych właściwościach fizykochemicznych. Wiele z komponentów kokryształów stanowiących składniki substancji czynnych farmaceutycznie poprawia ich rozpuszczalność, wchłanianie w organizmie, a niejednokrotnie stanowi synergistyczny komponent dla aktywności leku.

Celem pracy doktorskiej było opracowanie metod syntezy oraz charakterystyka strukturalna kompleksów molekularnych zawierających dwie bardzo ważne grupy modelowych układów: pochodne floroglucyny oraz kwasy fenylboronowe. Pierwsze z nich stanowią związki naturalne o dużym znaczeniu farmakologicznym. Są stosowane jako antyoksydanty. Ze względu na swoją budowę mogą oddziaływać z wieloma akceptorami wiązań wodorowych. Drugi modelowy układ (pochodne kwasów boronowych) ma bardzo szerokie zastosowania w chemii organicznej, w medycynie, farmacji czy chemii materiałowej. Układy te mogą być zarówno donorem jak i akceptorem wiązania wodorowego. Zrozumienie tworzenia architektury molekularnej stanowi duże wyzwanie ze względu na szereg czynników, które to warunkują. Należą do nich rotacja grupy boronowej, obecność podstawników w pierścieniu fenylowym, oddziaływania steryczne, również obecność rozpuszczalnika. Partnerami w syntezowanych i badanych przeze mnie kompleksach floroglucinoli oraz kwasów boronowych stanowiły pochodne bipyrydynowe, ich N-tlenki,

etery koronowe, zasady purynowe i pirymidynowe, również wybrane aminokwasy. To również ważne układy modelowe o dużym potencjale biologicznym. Oddziaływań molekularnych w sieci kryształu, które determinują jego strukturę jest wiele. W swojej pracy skoncentrowałam się przede wszystkim na roli wiązania wodorowego. Podjęłam próbę sformułowania ogólnych reguł kierują tworzeniem się kokryształów wymienionych związków oraz określiłam syntony molekularne pojawiające się w ich oddziaływaniach. Łącznie zsyntezowanych zostało przeze mnie 61 różnych kompleksów.

Główne techniki badawcze wykorzystane w pracy to rentgenowska analiza strukturalna na monokryształach poszerzona badaniami z użyciem dyfrakcji proszkowej oraz obliczenia ab initio na wysokim poziomie zaawansowania teorii. W analizie występujących oddziaływań posilkowałam się m.in. mapami powierzchni Hirshfelda.