

STRESZCZENIE

UNIWERSYTET MARII CURIE-SKŁODOWSKIEJ
Wydział Chemii
Zakład Krystalografii, Laboratorium Analityczne

Lublin – 2019

ROLA CZĄSTECZEK KWERCETYNY W CHEMII SUPRAMOLEKULARNEJ

Autor: mgr inż. Urszula Maciołek
Promotor: prof. dr hab. Anna E. Koziół
Promotor pomocniczy: dr Ewaryst Mendyk

W przedstawionej rozprawie doktorskiej opracowano metody syntezy i otrzymano w stanie stałym osiem nowych ko-kryształów i jeden kompleks kwercetyny z zastosowaniem metody mechanochemicznej. W wyniku przeprowadzonych analiz ustalono, że ko-formerami mogą być zarówno cząsteczki obojętne, jak i sole z organicznym kationem lub anionem. Z sukcesem jako ko-formery zastosowano: 4-(1-benzofuran-2-ylo)pirydynę, 4-(5-etylo-1-benzofuran-2-ylo)pirydynę, 1,10-fenantrolinę, o-dianizydyne, kofeinę, kwas pirydino-3-sulfonowy, sól sodową naproksenu, sól sodową diklofenaku i chlorowoderek ketaminy. W nowo otrzymanych fazach wieloskładnikowych kryształy wykazują różny skład chemiczny. Dla otrzymanych kryształów wykonano mikrografie (mikroskopia optyczna i SEM), ustalono skład chemiczny, rozwiązano struktury krystaliczne, zinterpretowano widma (IR i Ramana) oraz określono stabilność termiczną. Wykazano, że kwercetyna jest polimorficznym syntonem supramolekularnym, zdolnym do zmiany konformacji, a kierunkowość tworzonych międzycząsteczkowych wiązań wodorowych z jej udziałem jest zmienna.

Przeprowadzone badania obejmowały również opracowanie warunków i syntezę nowych kompleksów kwasu kwercetyno-5'-sulfonowego z kationami sodu, potasu i ich solwatów, a także soli amoniowej. Otrzymano łącznie osiem nowych faz krystalicznych i wykazano, że obojętne ligandy O-donorowe w sferze koordynacyjnej i poza sferą kationów metali w kompleksach QSA^- są łatwo wymienialne na obojętne cząsteczki rozpuszczalników (Ace, DMSO, EtOH) na drodze syntezy solwotermalnej. Dla otrzymanych krystalicznych kompleksów przeprowadzono charakterystykę ich morfologii, ustalono struktury, wykonano charakterystykę spektroskopową w zakresie IR i Ramana, a także charakterystykę właściwości termicznych. Dla trzech spośród zsyntezowanych nowych kompleksów wykonane zostały obliczenia rozkładu ładunków topologicznych w kryształach. Ustalono, że anion kwercetyno-5'-sulfonowy jest ligandem o zmiennych własnościach koordynacyjnych. Na podstawie wielu metod badawczych wykazano zależności pomiędzy strukturą cząsteczek i sieci krystalicznych a własnościami fizykochemicznymi.

Otrzymane związki są interesujące nie tylko z punktu widzenia chemii supramolekularnej. Dla wybranych związków wykonano badania aktywności przeciwnowotworowej (wobec nowotworowych komórek jelita grubego). Przeprowadzone badania *in vitro* wykazały, że niektóre związki posiadają wysoki potencjał oparty o zdolność do indukcji apoptozy w stosunku do komórek nowotworowych. Otrzymane wyniki sugerują, że posiadają one potencjał aplikacyjny do wykorzystania jako substancje wspomagające lub uczestniczące w terapii nowotworowej.