

Arleta Sierakowska

Synteza, analiza spektroskopowa oraz ocena aktywności biologicznej nowych pochodnych kofeiny

Streszczenie pracy w języku polskim

Celem mojej pracy badawczej była synteza nowych pochodnych kofeiny, ich analiza spektroskopowa oraz ocena aktywności biologicznej. Badania prowadzone były między innymi w celu określenia zależności aktywności biologicznej otrzymanych związków od ich struktury.

Kofeina (1,3,7-trimetyloksantyna) jest głównym przedstawicielem alkaloidów purynowych. Związki oparte na szkielecie ksantyny od zawsze wykazywały interesujące właściwości biologiczne, dlatego też kofeina jest związkiem o szerokim spektrum zastosowania zarówno w przemyśle farmaceutycznym, jak i kosmetycznym.

W wyniku przeprowadzonych reakcji otrzymałam kilkadziesiąt nowych pochodnych kofeiny posiadających w pozycji C-8 podstawniki tioalkilowe, tioarylowe, di- oraz poliaminowe. Wybrane diaminowe pochodne kofeiny zostały wykorzystane do dalszych przekształceń w reakcji z bezwodnikami kwasowymi lub w reakcji otwierania pierścienia tiofenu.

Wszystkie otrzymane pochodne zostały scharakteryzowane spektroskopowo za pomocą analizy NMR, FT-IR, spektrometrii mas. Dla czterech pochodnych określono strukturę krystalograficzną.

Zastosowanie dynamiki molekularnej pozwoliło na zbadanie stabilności termodynamicznej otrzymanych pochodnych.

Otrzymane związki poddano badaniom aktywności biologicznej określając ich właściwości antybakteryjne, przeciwgrzybiczne, przeciwnowotworowe, antyoksydacyjne oraz protekcyjne wobec erytrocytów ludzkich poddanych działaniu silnych utleniaczy.

Do określenia biodostępności pochodnych kofeiny wykorzystano program Molinspiration.