

Streszczenie pracy doktorskiej mgr Weroniki Kozaneckiej-Okupnik

„Synteza, analiza spektroskopowa oraz ocena aktywności biologicznej nowych pochodnych graminy”

Celem rozprawy doktorskiej była synteza, analiza spektroskopowa oraz ocena aktywności biologicznej nowych pochodnych graminy.

Gramina jest alkaloidem indolowym i wykazuje szeroką aktywność fizjologiczną. Jej pochodne znalazły praktyczne zastosowanie w wielu dziedzinach nauki, medycyny i przemysłu. Ze względu na możliwość wielu chemicznych modyfikacji jej szkieletu, stała się ona związkiem modelowym do projektowania nowych, biologicznie aktywnych pochodnych. Łącznie otrzymano czterdzieści dziewięć pochodnych graminy. Dokonano ich klasyfikacji na pięć grup związków:

- Etery alifatyczne indolo-3-karbinolu oraz *N*-acetyloindolo-3-karbinol otrzymane z *N*-acetylo-3-acetoksymetylenoindolu (**grupa I**)
- Pochodne graminy z układami heterocyklicznymi: ftalimidem, imidazolem, pirolidynoditiokarbaminianem oraz DIM (**grupa II**)
- Koniugaty graminy z uracylem oraz jego pochodnymi (**grupa III**)
- Pochodne zawierające pierścień triazolowy otrzymane w reakcji chemii klik (**grupa IV**)
- Sole graminy z formylowymi i acetylowymi pochodnymi kwasów żółciowych (**grupa V**).

Zsyntezowane pochodne graminy zostały scharakteryzowane za pomocą analizy spektroskopowej, spektroskopii w podczerwieni oraz spektrometrii mas i analizy elementarnej.

Przeprowadzono komputerową optymalizację struktur pochodnych graminy za pomocą obliczeń semiempirycznych wykorzystując metodę PM5.

Otrzymane związki poddałam badaniom aktywności biologicznej *in silico*. Do tego celu wykorzystano Kalkulator Molinspiration oraz bazę PASS.

Zbadano aktywność biologiczną *in vitro* nowych pochodnych graminy. Badania dotyczyły oceny aktywności: przeciwnadciśnieniowej, hemolitycznej, antybakteryjnej, antynowotworowej oraz oceny właściwości protekcyjnych i wpływu na morfologię erytrocytów.