

Mgr Angelika Głębocka

Badania równowag przeniesienia protonu dla pirazyno-2-amidooksymu metodami doświadczalnymi i obliczeniowymi.

Streszczenie rozprawy doktorskiej

Prowadzone przeze mnie badania dotyczyły analizowania struktury oraz szczegółowego określenia właściwości fizykochemicznych pirazyno-2-amidooksymu. Struktura tego związku nie została wcześniej zbadana ani metodami eksperymentalnymi ani teoretycznymi. Niniejsza rozprawa doktorska stanowi kompletną analizę strukturalną pochodnej pirazyny, tzn. pirazyno-2-amidooksymu, wykonaną przy użyciu metod obliczeniowych oraz spektroskopowych. Zbadałam piętnaście możliwych form tautomerycznych pirazyno-2-amidooksymu wraz z ich izomerami i rotamerami metodą DFT(B3LYP)/6-311+G**. Wyniki obliczeń są zgodne z wynikami otrzymanymi przy użyciu spektroskopii IR. Druga część moich badań dotyczyła wyznaczenia równowag kwasowo-zasadowych oraz stałej pK_a metodami kwantowochemicznymi pirazyno-2-amidooksymu. Obliczenia te wykonywałam przy użyciu trzech funkcjonałów (B3LYP, OLYP, M05-2X) w trzech różnych modelach rozpuszczalnikowych (CPCM, COSMO, SMD). Trzecia część badań obejmowała określenie charakteru hydrofilowego bądź lipofilowego pirazyno-2-amidooksymu. Wyniki, które uzyskałam dla pojedynczej molekuly potwierdziły słabą rozpuszczalność w wodzie przy jednoczesnym wskazaniu na charakter hydrofilowy badanego związku. Jednak, przeprowadzone przeze mnie dodatkowe badania cząsteczki tetramerycznej pirazyno-2-amidooksymu wykazały jej charakter lipofilowy.

Badany związek wykazuje właściwości przeciwgrzybicze przeciwko *Candida albicans*, który jest patogenem mogącym powodować ciężkie choroby w organizmie ludzkim. Istnieje zatem potrzeba ciągłego poszukiwania preparatów do stosowania w leczeniu grzybic oraz zapobiegania nim. Właściwości fizykochemiczne pirazyno-2-amidooksymu zbadane w niniejszej pracy mogą być podstawą do prowadzenia dalszych badań nad zastosowaniem tego związku w preparatach przeciwgrzybiczych.