

Zakład Chemii Teoretycznej i Strukturalnej
Pracownia Krystalochemii

Wpływ podstawnika halogenowego na właściwości szczawianów pochodnych 1-fenylopiperazyny

Małgorzata Kucia

Kierownik: **dr Maura Malińska**

Wiele z powszechnie używanych leków zawiera w strukturze pierścień piperazyny. Obiektami badań są także pochodne fenylopiperazyny, szczególnie jeśli chodzi o właściwości analgetyczne^[1]. W ramach pracy magisterskiej wykonałam badania konformacyjne sześciu szczawianów pochodnych 1-fenylopiperazyny. Ponadto zbadałam wpływ podstawnika halogenowego na upakowanie tych soli oraz określiłam wpływ rodzaju i ilości podstawników halogenowych na oddziaływania w cząsteczkach. Zastosowanymi metodami badawczymi były analiza konformacyjna, optymalizacja geometrii, analiza oddziaływań oraz energii dimerów wykonane na podstawie danych z pomiarów dyfrakcyjnych.

W wyniku badań ustaliłam, że wszystkie badane związki, pomimo różnych podstawników halogenowych, cechują się podobnym rodzajem upakowania i tworzonych oddziaływań. Dodatkowo stwierdziłam, że typ i rozmiar zastosowanego podstawnika halogenowego nie wpływa znacząco na oddziaływania wewnątrzcząsteczkowe, ale odgrywa dużą rolę w przypadku oddziaływań międzycząsteczkowych. Ponadto konformacja badanych związków w kryształach znacząco odbiega od ich konformacji w fazie gazowej w wyniku tworzących się oddziaływań, jak wiązania wodorowe, oddziaływania elektrostatyczne z anionem, dipol – dipol i oddziaływania halogenowe.

Literatura:

[1] Soluch, J., Rapacz, A., & Sałat, K. (n.d.). *Aktywność antynocyceptywna pochodnych N-fenylopiperazyny*.