

STRESZCZENIE

Czwartorzędowe halogenki amoniowe są stosowane jako przeciwbakteryjne i przeciwgrzybowe dezynfektanty. Wykazują one aktywność biologiczną i są szeroko stosowane w przemyśle. Czwartorzędowe halogenki amoniowe są prekursorami do syntezy cieczy jonowych. Prosta wymiana nieorganicznego anionu na anion organiczny pozwoliła otrzymać nową grupę cieczy jonowych. Praca doktorska "Badanie zależności struktura chemiczna-aktywność biologiczna grupy cieczy jonowych o działaniu przeciwdrobnoustrojowym" dotyczy cieczy jonowych z anionem organicznym. Otrzymano i scharakteryzowano serię migdalanów alkilobenzylodimetyloamoniowych. Był to szereg homologiczny, ze związkami różniącymi się długością podstawnika alkilowego w kationie. Synteza jest prosta, a wydajności wysokie (88-99%).

Wszystkie otrzymane związki były testowane *in vitro* na dziesięciu szczepach bakterii i dwóch szczepach grzybów. Wyznaczono parametry takie jak minimalne stężenie hamujące (MIC) oraz minimalne stężenie bójcze (MBC). Migdalan y alkilobenzylodimetyloamoniowe z krótkim podstawnikiem alkilowym okazały się nieaktywne biologicznie wobec wszystkich testowanych mikroorganizmów. Najwyższą przeciwdrobnoustrojową aktywność wykazywały związki z podstawnikiem alkilowym o długości 12, 14 i 16 atomów węgla.

Wykonano badania lipofilowości migdalanów alkilobenzylodimetyloamoniowych metodami eksperymentalnymi i obliczeniowymi (matematycznymi). Badania eksperymentalne obejmowały trzy metody. Wyznaczono najbardziej znany log P, współczynnik podziału n-oktanol-woda. Wszystkie trzy parametry, chociaż wyznaczone w różnych systemach, były ze sobą skorelowane. Do wyznaczenia log P metodami obliczeniowymi wykorzystano dwie popularne metody np. ALogP. Okazało się, że wartości eksperymentalnego log P oraz obliczeniowego ALogP są ze sobą skorelowane.

QSAR (*Quantitative Structure-Activity Relationship*) jest to ilościowa zależność pomiędzy strukturą związku i jego aktywnością biologiczną. Bardzo często aktywność biologiczną koreluje się z fizyczno-chemicznymi parametrami takimi jak lipofilowość. Aktywność szeregu migdalanów alkilobenzylodimetyloamoniowych przedstawia paraboliczny (lub dwuliniowy) model QSAR korelujący aktywność biologiczną

z lipofilowością. Dla każdej wyznaczonej aktywności (MIC, MBC) przeprowadzono analizę QSAR w programie BuildQSAR z wykorzystaniem AlogP obliczonym w programie Dragon. Otrzymano zbiór bardzo dobrych korelacji parabolicznych z lipofilowością wyrażoną za pomocą ALogP.

12.06.2015r.

Anne Wiśniewska