

## STRESZCZENIE

Związki kompleksowe, metaloorganiczne i polimery koordynacyjne obejmują obszar chemii, który doświadczył niesamowitego rozwoju w ciągu ostatnich dziesięcioleci, na co wskazuje nie tylko liczba opublikowanych artykułów naukowych, ale także stale poszerzający się zakres badań i zastosowań tego typu związków.

Głównym celem niniejszej rozprawy doktorskiej była synteza nowych związków kompleksowych czterech N,O-donorowych ligandów na bazie indolu (kwasu indolo-3-karboksyłowego, kwasu 5-metoksyindolo-3-karboksyłowego) i 7-azaindolu (kwasu 7-azaindolo-3-karboksyłowego, 7-azaindolo-3-karboaldehydu) z wybranymi jonami metali. Zasadniczym elementem było wyznaczenie struktur krystalicznych i molekularnych otrzymanych związków kompleksowych oraz dwóch badanych ligandów, opracowanie ich szczegółowej charakterystyki spektroskopowej (FT-IR i FT-Raman) oraz zbadanie aktywności biologicznej wybranych ligandów i ich związków kompleksowych.

W wyniku przeprowadzonych badań otrzymano po raz pierwszy monokryształy kwasu 7-azaindolo-3-karboksyłowego i 7-azaindolo-3-karboaldehydu oraz dziesięć nowych związków kompleksowych. Dla sześciu związków kompleksowych wyznaczono struktury krystaliczne i molekularne za pomocą badań rentgenograficznych. Dla wszystkich związków opracowano pełną i szczegółową interpretację widm oscylacyjnych przy użyciu metod chemii kwantowej (DFT). W tym celu wykonano obliczenia struktur molekularnych i widm oscylacyjnych dla badanych układów z użyciem modeli teoretycznych, które obrazują struktury występujące w sieciach krystalicznych tych związków oraz z uwzględnieniem oddziaływań międzycząsteczkowych. Szczegółową interpretację widm oscylacyjnych przeprowadzono w oparciu o obliczone rozkłady energii potencjalnej. W pracy wykazano również, że kompleksowanie obu badanych pochodnych 7-azaindolu jonami Pt(II) i Pd(II) oraz kwasu indolo-3-karboksyłowego jonami Co(II) prowadzi do wzrostu aktywności biologicznej otrzymanych związków kompleksowych w porównaniu z wolnymi ligandami. Szczególnie obiecujące wyniki otrzymano dla związku kompleksowego 7-azaindolo-3-karboaldehydu z jonami Pt(II) i polimeru koordynacyjnego kwasu indolo-3-karboksyłowego z jonami Co(II).

Uzyskane wyniki są istotne dla chemii koordynacyjnej, bionieorganicznej, spektroskopii oscylacyjnej oraz potencjalnie, chemii medycznej. Przeprowadzone badania dostarczają cennych informacji na temat oddziaływania pochodnych indolu i 7-azaindolu z jonami Pt(II), Pd(II), Cu(II), Co(II), Cd(II) i Na(I), a wykonana analiza spektroskopowa może być przydatna do charakterystyki innych, podobnych strukturalnie związków.

08.10.2021 r. K. Szmigiel-Bakolana