

ÚSTAV ORGANICKÉ CHEMIE

STUDENTSKÁ VĚDECKÁ KONFERENCE 2018

Čtvrtek 22. 11. 2018

08:45 – 09:05	Shromáždění členů komisí včetně zástupců sponzorů v laboratoři A (II. patro budovy A, příčná chodba N, místnost N08)
09:05 – 09:15	Zahájení a rozchod do jednotlivých poslucháren
09:15 – 11:45	Prezentace studentů v jednotlivých komisích
11:45 – 12:20	Jednání jednotlivých komisí
12:30 – 12:50	Společné vyhlášení výsledků v laboratoři A
12:50 – 13:30	Prezentace sponzorů v laboratoři A
14:00	Oběd se zástupci sponzorů v restauraci Cesta časem

Sekce: *Organická chemie bakalářská 1*

Místnost A278e, 9:15 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.
Ing. Radek Jurok, Ph.D. – organizační tajemník
doc. Ing. František Hampl, CSc.
Ing. Ondřej Šimůnek
Ing. Tomáš Jursík (Alchimica)
Mgr. Jiří Kratochvíl, PhD. (CaymanPharma)

Soutěžící: 09:15 Marek Chovanec (B3)
09:30 Jiří Šimánek (B3)
09:45 Vojtěch Musil (B2) - *anglicky*
10:00 Adam Vít (B3)
10:15 Anna Mlčochová (B3)
10:30 *přestávka*
10:45 Lukáš Kaiser (B3)
11:00 Kateřina Babková (B3)
11:15 Vojtěch Košťál (B3)
11:30 Tereza Edlová (B3)
11:45 Kristýna Majerová (B3)

Sekce: *Organická chemie bakalářská 2*
Laboratoř A, 9:15 hod

Komise:

Předseda: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová
 Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D. – organizační tajemník
 prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.
 Ing. Petra Cuřínová, Ph.D. (ÚCHP AV ČR)
 Ing. Martin Křováček, Ph.D. (Katchem)
 Ing. Kryštof Šigut (Santiago)

Soutěžící: 09:15 Jan Kulička (B3)
 09:30 Martina Reisnerová (B3)
 09:45 Matúš Drexler (B3)
 10:00 Lucie Wohlrábová (B3)
 10:15 Jaroslav Cerman (B3)
 10:30 *přestávka*
 10:45 Šárka Bouzková (B3)
 11:00 Jindřich Kropáček (B3)
 11:15 Veronika Boguschová (B2)
 11:30 Eva Tetenková (B3)

Sekce: *Organická chemie bakalářská 3*
Laboratoř B, 9:15 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. František Liška, CSc.
 Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D. – organizační tajemník
 doc. Ing. Igor Linhart, CSc.
 Ing. Václav Kozmík, CSc.
 Mgr. Tomáš Reitschmied (VWR)
 Ing. Hana Váňová (Apigenex)

Soutěžící: 09:15 Denisa Kubešová (B3)
 09:30 Martina Kosmálová (B3)
 09:45 Diana Jágerová (B3)
 10:00 Kateřina Drahošová (B3)
 10:15 Ladislav Prener (B3)
 10:30 *přestávka*
 10:45 Michaela Polanková (B3)
 11:00 Jiří Ledvinka (B2) - *anglicky*
 11:15 Ivana Weisheitelová (B3)
 11:30 Anna Kubičková (B3)

Sekce: *Organická chemie magisterská 1*

Místnost A250, 9:15 hod

Komise:

Předseda:

prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D. – organizační tajemník

doc. Ing. Stanislav Rádl, CSc. (Zentiva)

Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Ing. Jan Kroupa, Ph.D. (Proxim)

Ing. Karel Zelinka (LZ Draslovka)

Soutěžící:

09:15 Tereza Horáčková (M2)

09:30 Jaroslava Šimoniková (M2)

09:45 Jakub Koudelka (M1)

10:00 Václav Chmela (M2) - *anglicky*

10:15 *přestávka*

10:30 Marek Jurtík (M1)

10:45 Vojtěch Hamala (M2)

11:00 Dmytro Makarov (M1)

Sekce: *Organická chemie magisterská 2*

Místnost A11, 9:15 hod

Komise:

Předseda:

doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Mgr. Roman Holakovský, Ph.D. – organizační tajemník

prof. Ing. Ivan Stibor, CSc. (ÚOCHB AV ČR)

Ing. Petra Ménová, Ph.D.

Ing. Hanuš Slavík (Synthomer)

Ing. Jiří Vokál, Ph.D. (Lach-Ner)

Ing. Aneta Bednářová (Donaulab)

Soutěžící:

09:15 Anastasia Surina (M2)

09:30 Tatiana Nemirovich (M1)

09:45 Martin Paškan (M2)

10:00 Artem Chayka (M1)

10:15 *přestávka*

10:30 Lenka Krepsová (M2)

10:45 Karolína Zvolská (M2)

11:00 Jakub Copko (M1)

11:15 Václav Vraštil (M2)

Sekce: ***Organická chemie magisterská 3***
Místnost A278c, 9:15 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.
 doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. – organizační tajemník
 Ing. Zlatko Janeba, Ph.D. (ÚOCHB AV ČR)
 Ing. Ladislav Cvak, Ph.D. (Teva)
 Ing. Ivan Veselý, CSc. (CaymanPharma)
 RNDr. Pavel Slanina (Synthon)

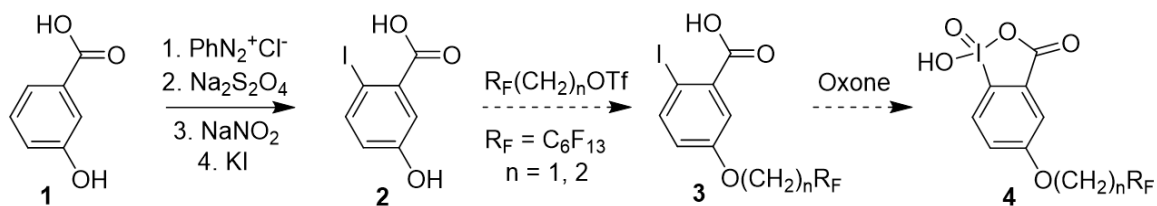
Soutěžící: 09:15 Kamil Mamleev (M1)
 09:30 Tereza Černá (M2)
 09:45 Hana Vachová (M2)
 10:00 Lukáš Lenz (M1)
 10:15 *přestávka*
 10:30 Róbert Obertík (M2)
 10:45 Martin Kurfiřt (M2) - *anglicky*
 11:00 Marco Vitek (M2)
 11:15 Petr Oeser (M1)

Syntéza a modifikace 5-hydroxy-2-jodbenzoové kyseliny

Marek Chovanec (B3)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

2-jodoxybenzoová kyselina (IBX) slouží jako selektivní oxidační činidlo vhodné především pro oxidaci alkoholů na aldehydy. Mezi jeho nedostatky patří především omezená rozpustnost v běžných organických rozpouštědlech a obtížná separace odpadního produktu redukce IBX z reakční směsi. Cílem mé práce bylo připravit polyfluorovanou benzoovou kyselinu 3, která by sloužila jako prekurzor fluorovaného analogu IBX 4. To by pro izolaci produktů z reakční směsi a recyklaci oxidačního činidla umožnilo využít fluorové separační techniky. Klíčový intermediát 5-hydroxy-2-jodbenzoovou kyselinu (2) jsem připravil z 3-hydroxybenzoové kyseliny (1) a využil ji pro alkylaci polyfluorovanými trifláty.

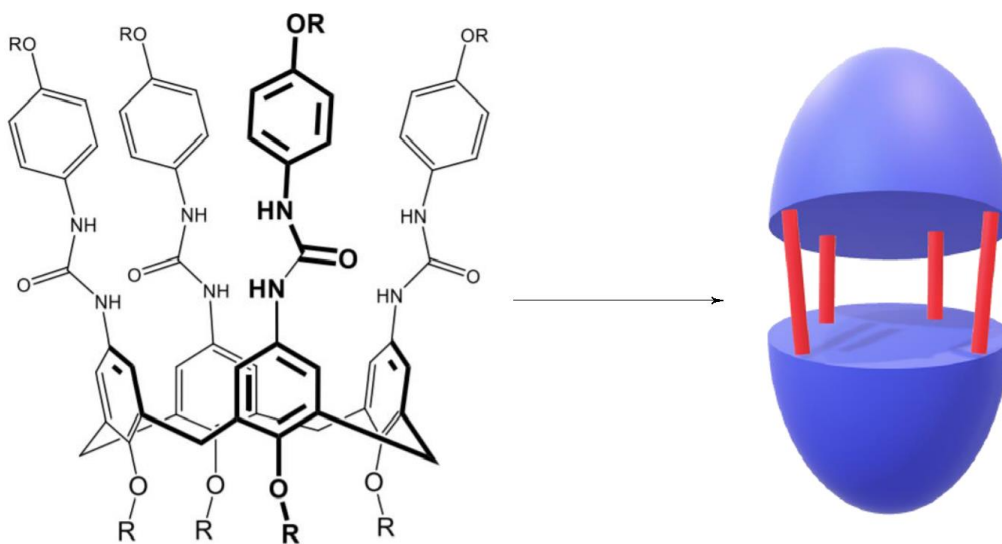


Ureidoderiváty pro studium dimerizace a komplexace aniontů a neutrálních látek

Jiří Šimánek (B3)

Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Práce se zabývá deriváty močoviny ve spojení s calix[4]arenovou a calix[5]arenovou strukturou. Tyto deriváty interagují s anionty, což bude studováno u našich látek pomocí ^1H NMR titrace s důrazem na zjištění selektivity komplexací. Zároveň některé ureidocalix[4]areny tvoří dimery skrze vodíkové můstky mezi močovinovými skupinami, studium těchto dimerizací bude provedeno u našich ureidocalix[n]arenů, které vykazují jak zcela konformačně rigidní, tak konformačně flexibilní chování, což je dáno přítomností hydroxy nebo methoxy skupin na spodním okraji. Vzniklé dimery lze použít při enkapsulaci malých molekul, např. paracetamolu, ibuprofenu.

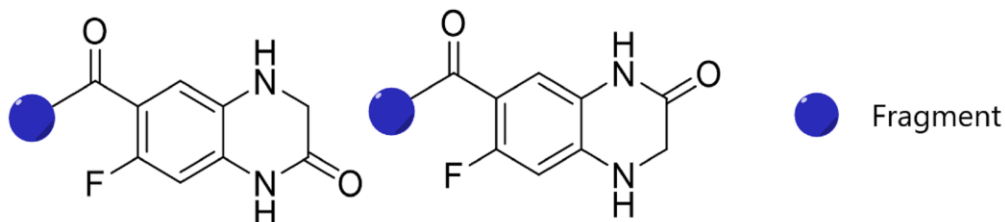


Synthesis of Quinoxalinone-Based Inhibitors of DC-SIGN Receptor

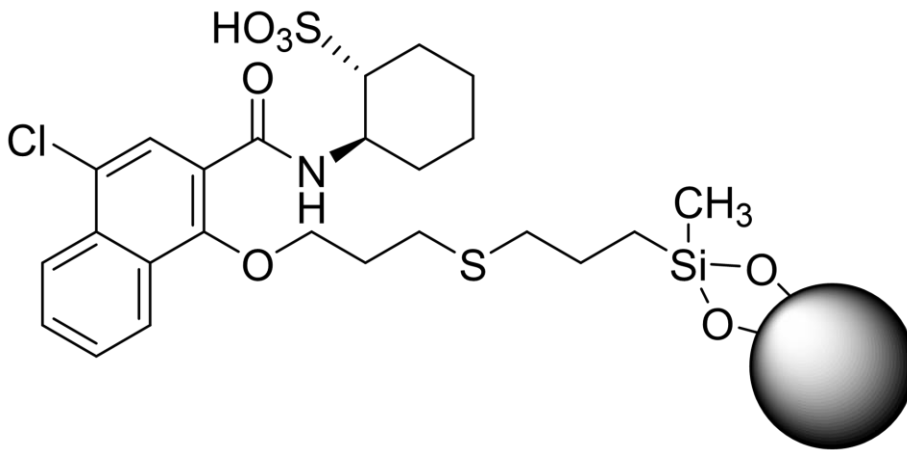
Vojtěch Musil (B2)

Školitel: Ing. Petra Měnová, Ph.D.

DC-SIGN is a surface receptor present mainly on dendritic cells. It directs immune response by recognizing high-mannose carbohydrate antigens present on the surface of various pathogens such as HIV, *Hepatitis C*, *Mycobacterium tuberculosis* or Ebola virus. The interactions of HIV and *Hepatitis C* viruses with DC-SIGN facilitate their spread. Therefore, there is a need for an antagonist of this interplay; however, the hydrophilicity and shallowness of the binding sites make the development of inhibitors rather complicated. Using fragment-based drug discovery (FBDD) method, fluorinated quinoxalinone derivatives were recently proven to be promising antagonists of DC-SIGN–glycan interactions. This project focuses on the synthesis of fluorinated quinoxalinones, their joining with other fragments discovered by FBDD and the evaluation of their affinity to the DC-SIGN receptor.



Proposed structures of quinoxalinone derivatives

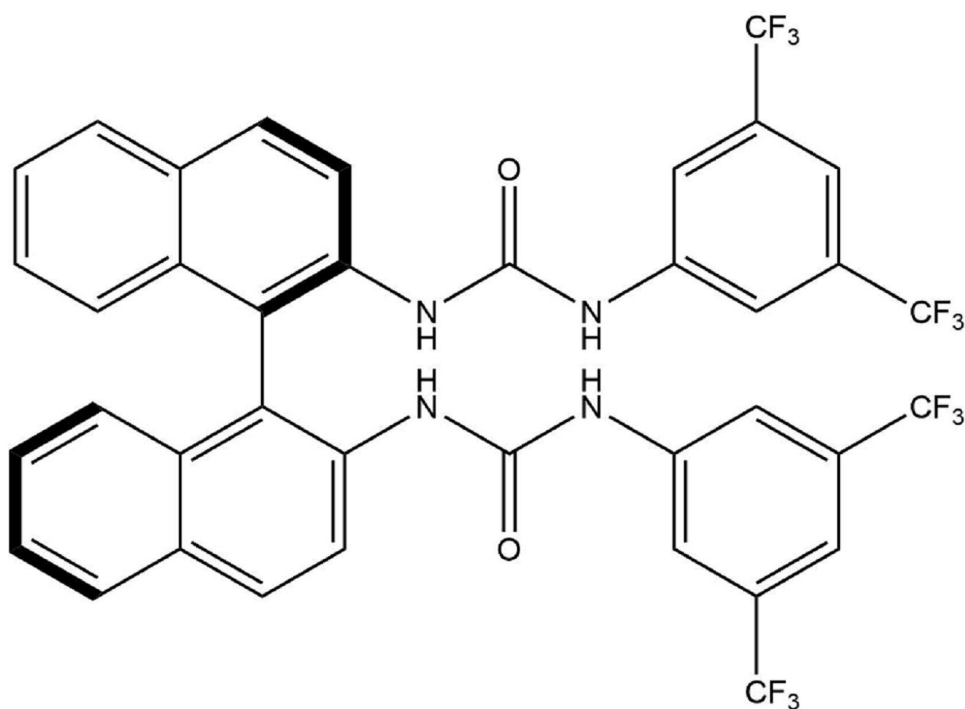


Močovina využitelná jako solvatační činidlo pro chirální karboxylové kyseliny

Anna Mlčochová (B3)

Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Ve farmaceutickém průmyslu hrají významnou roli chirální léčiva. Z důvodu příznivých nebo naopak nežádoucích účinků je potřeba kontrolovat čistotu enantiomerů dané látky. Jedna z možností je použití chirálního solvatačního činidla, které vytvoří diastereomerní komplexy s enantiomery dané látky, což se projeví změnou posunu signálu v NMR spektru. K tomuto účelu je možno použít močovinu na bázi binaftalenu, která působí jako H-donor, a s molekulou, která je akceptorem vodíkových můstků vytváří komplex pomocí vodíkových vazeb. Zkoumala jsem chování chirálních alfa-substituovaných karboxylových kyselin při interakci s močovinou.

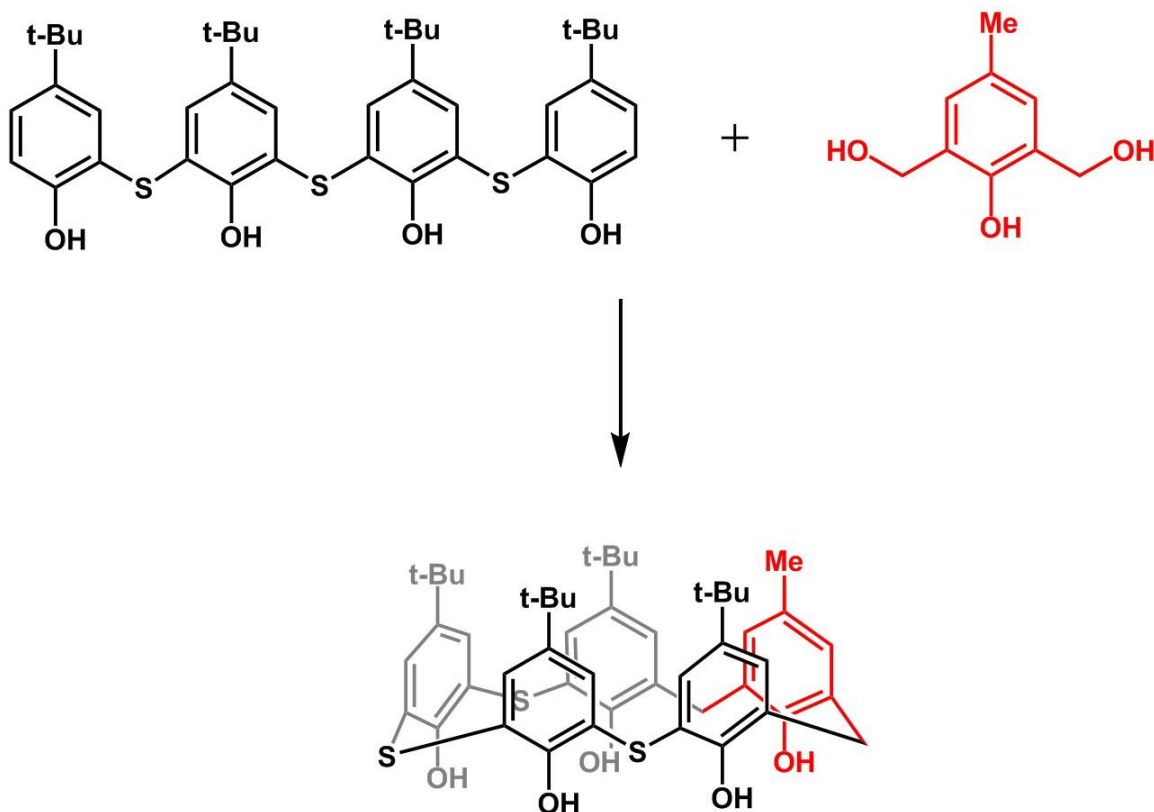


Sulfinylcalix[4]areny jako prekurzory syntézy větších calixarenů

Lukáš Kaiser (B3)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Thiacalix[4]areny, sirné analogy calix[4]arenů, jsou známy více než 20 let. Vyhledávány jsou zejména pro své zajímavé komplexační schopnosti a snadnou opracovatelnost jejich makrocyclického skeletu. Jednou z běžně využívaných modifikací je oxidace sirných můstků, teprve nedávno však bylo objeveno, že sulfoxidové deriváty thiacalix[4]arenů podléhají zajímavému štěpení svého cyklického skeletu reakcí s *n*-butyllithiem. V případě monosulfoxidu je produktem takové reakce lineární tetramer. Po jeho opracování získáme užitečný stavební blok, který můžeme využít v reakci s dalšími vhodnými prekurzory k syntéze větších calixarenů. Výsledný makrocyklus bude ve své struktuře obsahovat kombinaci methylenových a sirných můstků. U získaných látek bude zkoumána především jejich schopnost komplexace fullerenu.



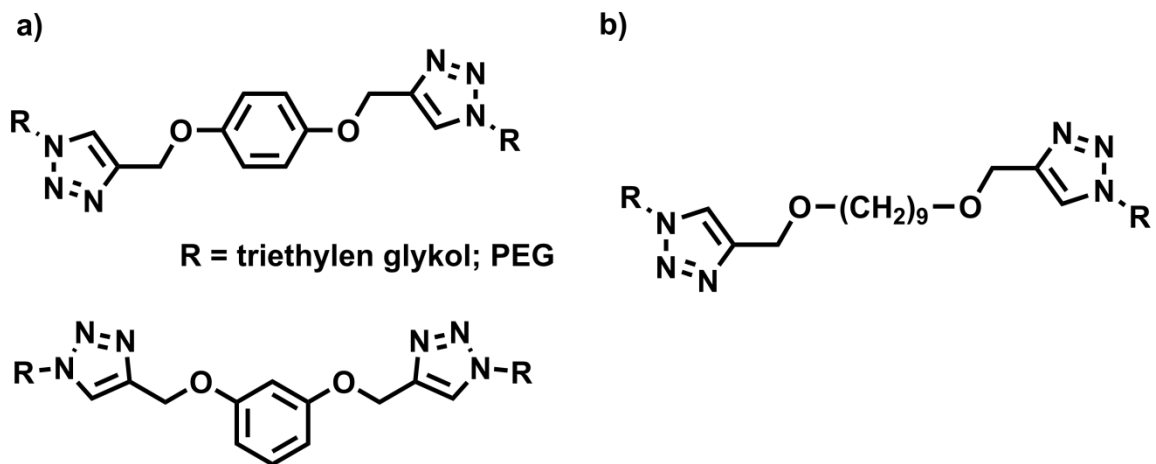
Standardy a slepé vzorky pro mechanochemické fluorescenční indikátory

Kateřina Babková (B3)

Školitel: Ing. Martin Krupička, Ph.D.

Mechanochemie se zabývá vlivem mechanické síly na molekuly. Mechanická síla nejvíce působí na mechanicky citlivý molekulární fragment (mechanofor), který je připojen přes linker doprostřed polymerního řetězce. Pro kvantifikaci mechanické síly lze použít spektroskopicky aktivní mechanofor, tj. mechanochemický indikátor. Cílem této práce je syntetizovat molekuly bez indikátorů. Tyto sloučeniny jsou pak využity jako slepé vzorky, které slouží k popsání účinku ostatních přítomných funkčních skupin. Sloučeniny s jednodušším mechanoforem jsou para- a meta-dihydroxybenzeny substituované triethylenglykolem a polyethylenglykolem (PEG, MW = 10 kDa; 40 kDa) (Schéma 1a). Velikost síly působící na mechanofor závisí na délce řetězce, proto jsou připravovány série látek s různou délkou polymeru. Byly připraveny i nearomatické analogy – deriváty nonandiolu (Schéma 1b), za účelem zjištění účinku triazolu, bez vlivu aromatických funkčních skupin. Byla měřena UV absorpce a emise s vlivem a bez vlivu ultrazvuku. Výsledky byly vyhodnoceny s ohledem na koncentraci, rozpouštědlo, délku polymeru a intenzitu ultrazvuku.

Schéma 1

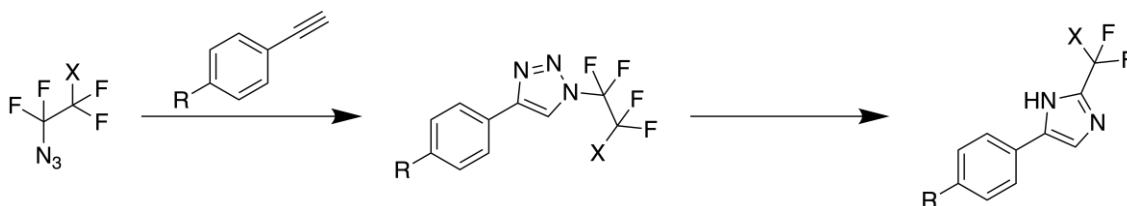


Syntéza *N*-fluoralkyltriazolů a jejich transannulace

Vojtěch Košťál (B3)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Organofluorové sloučeniny představují zajímavou skupinu látek jak z pohledu jejich často neobvyklé reaktivity, tak i z pohledu vlastností. Vyskytují se v mnoha léčivech, agrochemikáliích a funkčních materiálech. V posledních letech bylo poměrně hodně pozornosti věnováno zavedení skupin CF_3 , CF_2CF_2 nebo CF_2H . Pětičlené heterocyklické sloučeniny jako triazoly a imidazoly se vyskytují v mnoha biologicky aktivních látkách. Jejich modifikace fluoralkylovými skupinami vede k látkám s potenciálně zajímavými vlastnostmi. V mé práci jsem se věnoval syntéze již popsaných i zcela nových *N*-fluoralkyltriazolů, které jsem následně jedнокrokovou reakcí transformoval na imidazoly. Tato transannulace představuje zcela nový přístup k syntéze těchto těžko dostupných 2-trifluormethyl imidazolů.

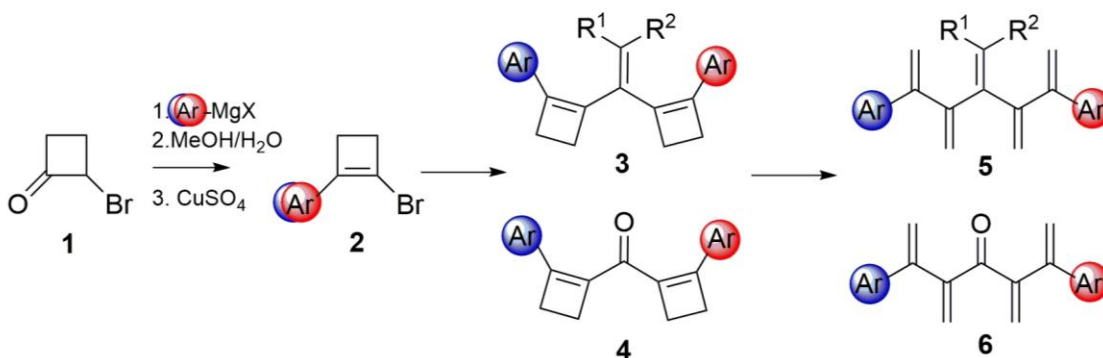


Příprava derivátů bromcyklobutenu a jejich aplikace v organické syntéze

Tereza Edlová (B3)

Školitel: doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

[n]Dendraleny jsou látky, které mají ve své struktuře tři a více vzájemně cross-konjugovaných ethylenových jednotek. Tyto sloučeniny si získaly výraznou vědeckou pozornost díky svému potenciálu jako cenné výchozí látky pro výstavbu komplexních organických molekul. V naší laboratoři byl v nedávné době vyvinut a publikován nový postup pro přípravu [3] a [4]dendralenů, který využívá termicky iniciované elektrocyklické otevření disubstituovaných cyklobutenů. Ve své práci jsem se soustředila na vytvoření nové metodiky pro přípravu bromcyklobutenů (2) z 2-bromcyklobutanonu (1) a jejich převedení na [5]dendraleny (5) a [5]oxadendraleny (6). Bromcyklobuteny (2) jsem připravila z ketonu (1) přeměnou na odpovídající bromhydrin, jehož vznik touto cestou dosavadní literatura nepřipouštěla. Následná dehydratace poté poskytla kýžený bromalken (2). V další části práce jsem se věnovala převedení připravených bromcyklobutenů na meziprodukty (3) a (4) a jejich následnému otevření za vzniku [5]dendralenů (5,6).

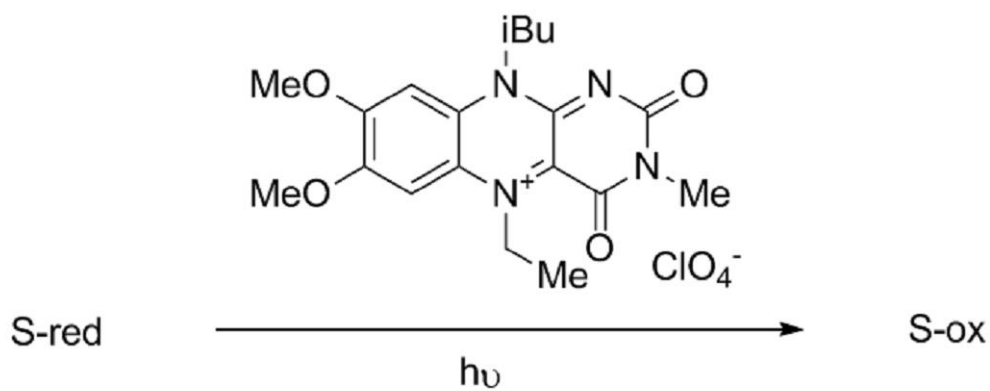


Kvartérní isoalloxazinové soli jako fotokatalyzátory

Kristýna Majerová (B3)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Flavinové deriváty jsou známy svými schopnostmi absorbovat světlo z viditelného oblasti spektra. Ukázaly se být dobrými fotokatalyzátory u různých typů reakcí, například benzylové oxidace, sulfidové oxidace, *E/Z*-izomerace elektronové chlorace a jiné. Zvýšit oxidační schopnosti flavinových derivátů je možné buď excitací účinkem viditelného světla, nebo převedením na kvartérní flavinové soli. Spojením obou způsobů je možné ještě posunout redukční potenciál a oxidovat i sloučeniny s vyšším oxidačním potenciálem. Cílem mé práce je příprava 5-ethyl-7,8-dimethoxyisoalloxazinové soli, studium jejich vlastností a otestování jejich katalytických schopností např. při oxidaci sulfidů na sulfoxidy.

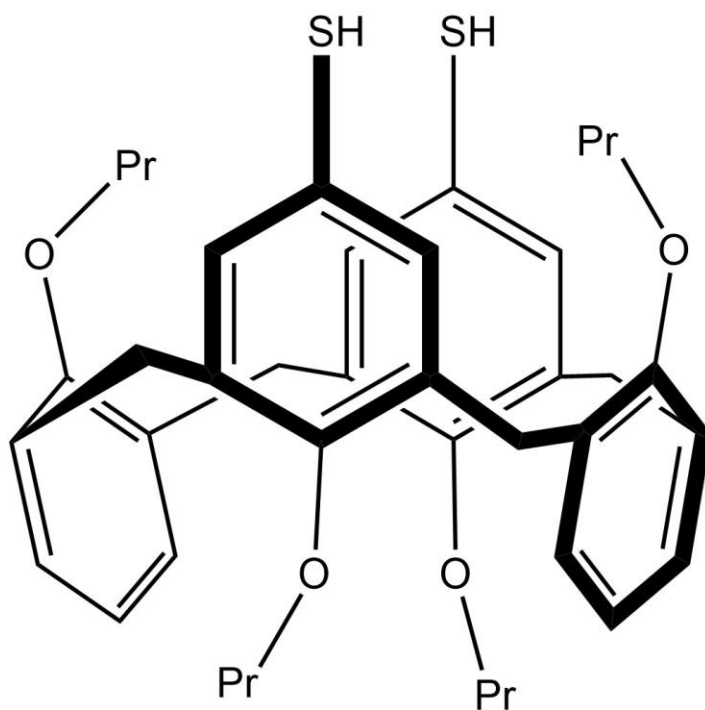


Syntéza sulfanylderivátů calix[4]arenu

Jan Kulička (B3)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Calix[n]areny, objekty dlouholetého zkoumání v naší skupině, jsme schopni stabilizovat v různých konformacích s odlišnými fyzikálně-chemickými vlastnostmi. Po následné substituci horního okraje mohou calixareny nalézt mnohá uplatnění jako například chemické senzory. Jedním z vhodných prekurzorů mohou být *p*-sulfanylderiváty. Cílem této práce je připravit sulfanylderiváty v *kónické* a *1,3-střídavé* konformaci a s dvěma či čtyřmi thiolovými skupinami. Jako výchozí látka byl zvolen komerčně dostupný *p*-*tert*-butylcalix[4]aren a jako klíčové činidlo byl použit tetramethylthiuramdisulfid.

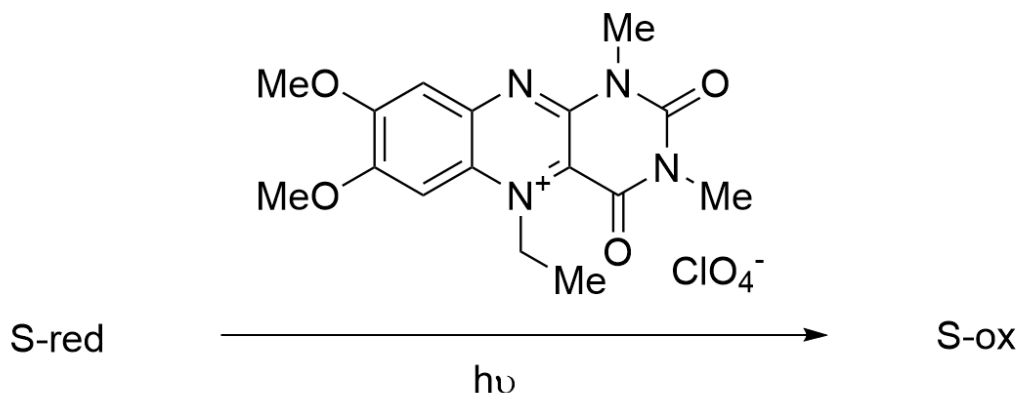


Příprava 7,8-dimethoxyalloxaziniových solí a studium jejich reaktivity ve vybraných fotochemických reakcích

Martina Reisnerová (B3)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Flavinové deriváty jsou obecně známy pro svou schopnost absorbovat viditelné světlo, což lze využít při redoxních fotokatalýzách. Po excitaci účinkem viditelného světla se zvýší oxidační schopnosti derivátů flavinů, které tak můžeme použít k fotooxidaci i sloučenin s vyšším oxidačním potenciálem. Cílem mé práce je připravit 5-ethyl-7,8-dimethoxy-1,3-dimethylalloxaziniovou sůl, která je ve svém excitovaném stavu poměrně stálá a následně vyzkoušet její katalytické schopnosti u oxidací jednoduchých substrátů, např. 4-chlorbenzylalkoholu a následně u složitějších fotochemických reakcí.

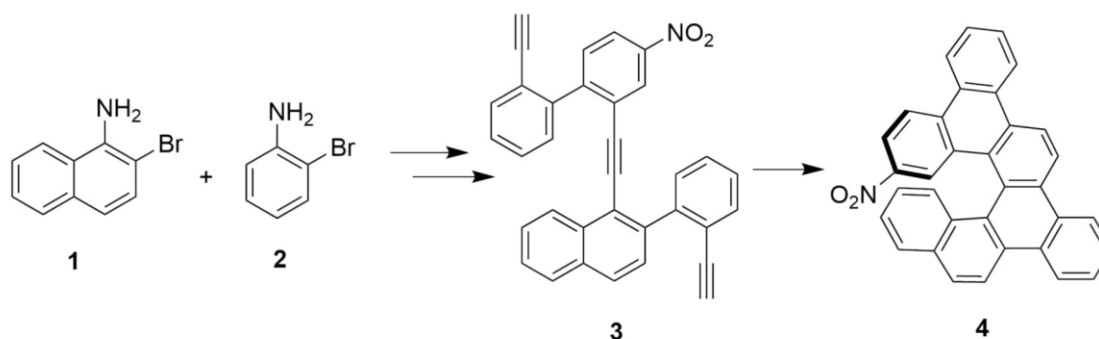


Syntéza funkcionalizovaných dibenzohelicénov

Matúš Drexler (B3)

Školiteľ: RNDr. Ivo Starý, CSc.

V posledných dekádach došlo k významnému rozvoju chémie helicénov a ich aplikácií v materiálovej chémii, enantioselektívnej katalýze, organickej elektronike apod. Mojou úlohou bola príprava nitrodibenzohexahelicénu (4) v opticky čistej forme ako intermediátu pre syntézu helikálnych ligandov a funkčných materiálov. Pripojenie dvoch benzénových kruhov k vonkajšiemu okraju hexahelicénu zjednodušuje jeho syntézu s použitím [2+2+2] cyklotrimerizácie alkínov. Na prípravu aromatického triínu (3) bola využitá séria paládiom katalyzovaných Suzuki-Miyaura a Sonogashira reakcií. Kľúčový krok mojej syntézy je cyklotrimerizácia triínu (3) za vzniku cieľovej látky (4), ktorá je katalyzovaná prechodným kovom (Ni) s možnosťou využitia chirálnych ligandov. Uvedená štúdia predstavuje efektívnu syntézu nových funkcionalizovaných helicénov.

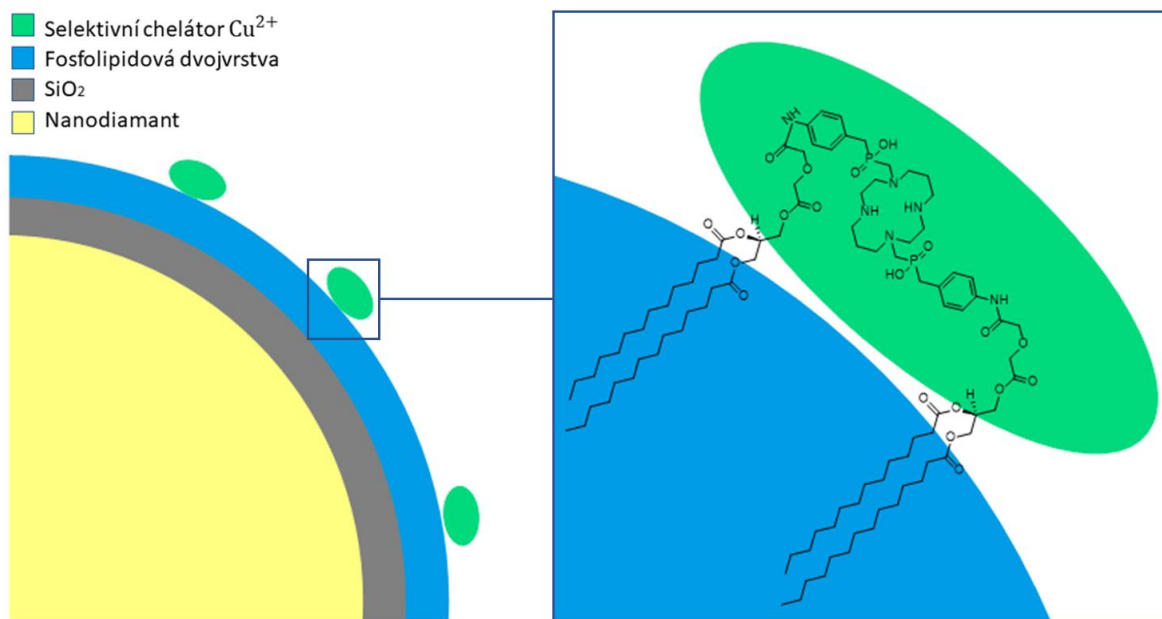


Syntéza lipidů pro kvantové nanosenzory detekující Cu^{2+}

Lucie Wohlrábová (B3)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

Lokalizovaná optická detekce Cu^{2+} má zásadní význam pro pochopení patologických procesů v buňkách spojených s oxidačním stresem a defektní komunikací neuronů. Jednou z nejcitlivějších technik pro detekci paramagnetik je snímání změn elektronických vlastností krystalových poruch diamantu způsobených přítomností paramagnetik. Cílem práce je připravit kompozitní nanosenzor s diamantovým jádrem pokrytý lipidickou dvojrůstvou vázající ionty Cu^{2+} . Tato tzv. dvojrůstva na pevném podkladu (supported lipid bilayer, SLB) bude obsahovat amfifilní chelátor iontů Cu^{2+} . Syntetická část práce je proto zaměřena na návrh a přípravu makrocyclického selektivního chelátoru Cu^{2+} na bázi cyclamu nesoucího na pendentních ramenech kovalentně připojené lipidy.

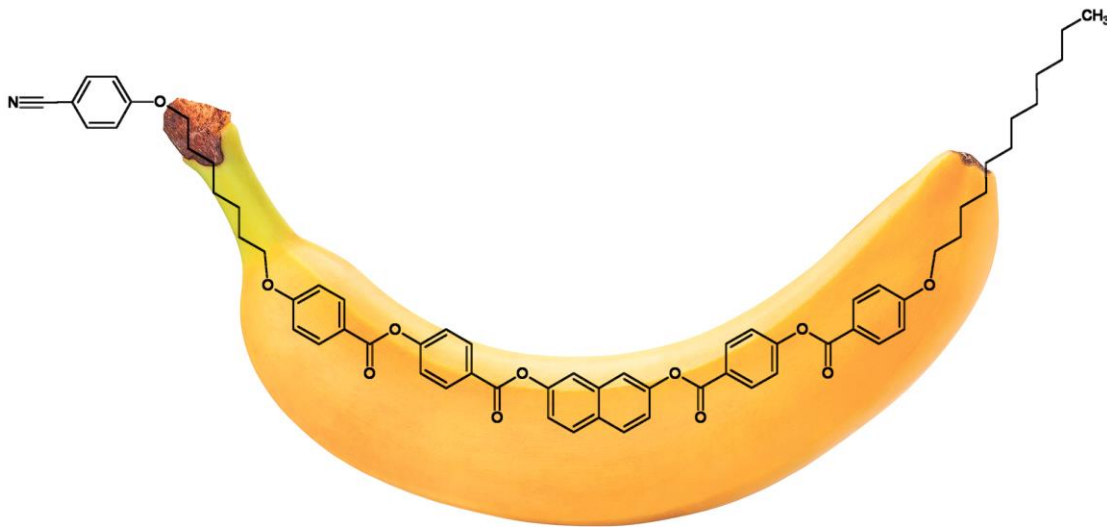


Syntéza kapalných krystalů s terminální arylovou jednotkou

Jaroslav Cerman (B3)

Školitel: doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.

V naší skupině se dlouhodobě zabýváme studiem termotropních kapalných krystalů, tedy materiálů, které mají široké použití v elektronice a zobrazovací technice. Termotropní kapalně krystaly jsou látky, které zahříváním při přechodu z pevné do kapalně fáze tvoří uspořádané nadmolekulární struktury, tzv. mezofáze. Mezofázi rozumíme speciální stav hmoty, ve kterém si molekuly zachovávají definovanou orientaci obdobnou fázi krystalické, avšak zároveň disponují mobilitou kapalin. Termotropní kapalně krystaly lze obecně rozdělit na tyčinkovité, diskovité a lomené. Cílem práce je syntéza lomených (též banana-shaped) kapalných krystalů na bázi naftalen-2,7-diolu. Na rozdíl od dosud studovaných látek zakončených alkylovým řetězcem, obsahuje cílová molekula benzonitrilovou terminální skupinu navázanou na alkylové spojce. Alkylová spojka má lichý počet uhlíků, což má příznivý vliv na snížení přechodových teplot. Předpokládáme, že tyto molekuly budou tvořit nové typy mezofází, neboť se nachází na hranici mezi klasickými lomenými materiály a dimery tyčinkovitých a lomených materiálů.

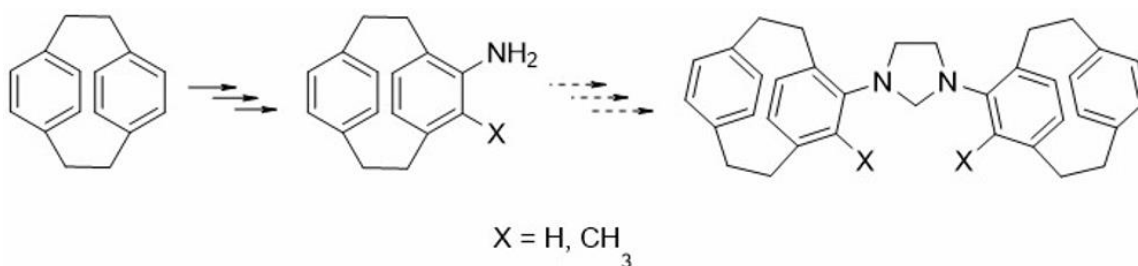


Příprava prekursorů chirálních rutheniových katalyzátorů na bázi [2.2]paracyklofanu

Šárka Bouzková (B3)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

4-Substituované [2.2]paracyklofany jsou zajímavými chirálními stavebními bloky. Předmětem mé práce je syntéza prekursorů NHC ligandů pro rutheniové komplexy (analoga Grubbsových a Hoveydvých-Grubbsových katalyzátorů). Při jejich přípravě jsem vycházela z [2.2]paracyklofanu, který jsem převedla na odpovídající aryl-4-amin. S cílem zvýšit stabilitu NHC ligandu budu dále syntetizovat 5-methyl[2.2]paracyklofan-4-amin. Zavedení methylové skupiny do *ortho*- polohy k aminoskupině by mělo přispět ke zvýšení stability vznikajícího karbenu.

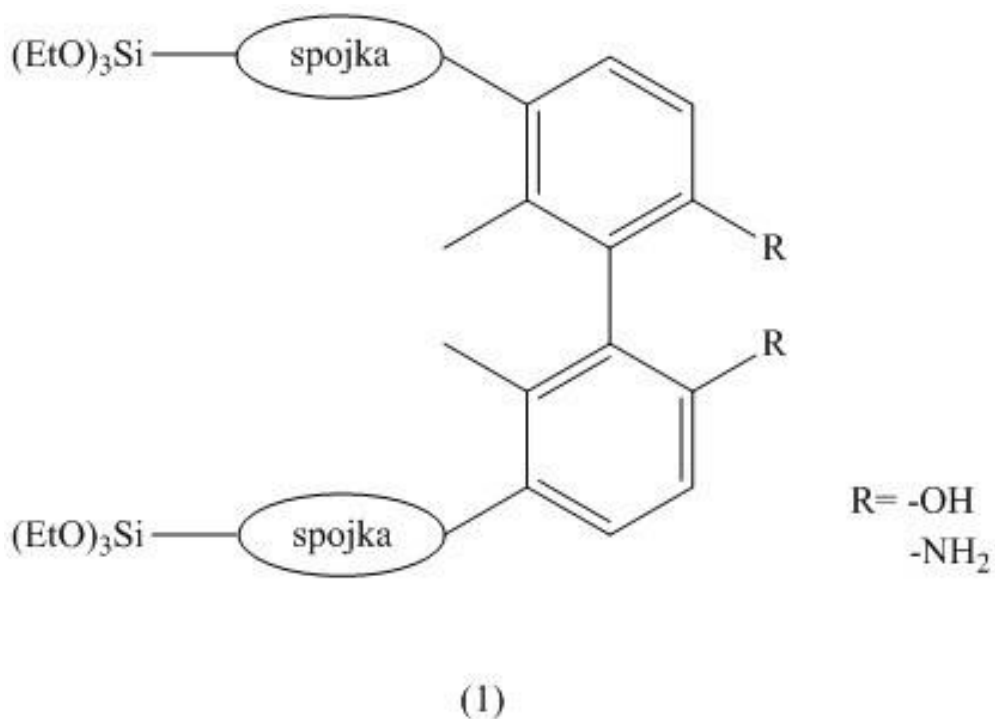


Syntéza 5, 5' funkcionalizovaných derivátů 6,6'-dimethylbifenyl- 2,2'- diolu a 6,6'-dimethylbifenyl- 2,2'- diaminu

Jindřich Kropáček (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Cílem práce je syntéza hybridních organicko-anorganických materiálů obsahujících axiálně chirální organický fragment, které budou studovány jako potenciální heterogenní katalyzátory enantioselektivních reakcí. Hybridní materiály budou připraveny z organických bis(trialkoxysilanů) obecné struktury (1). Jako axiálně chirální jednotky byly zvoleny 6,6'-dimethylbifenyl-2,2'-diamin a 6,6'-dimethylbifenyl-2,2'-diol, které budou mít v polohách 5,5' přes vhodnou spojku připojeny triethoxysilové skupiny. Příprava intermediátů bis(triethoxysilanů) (1) bude diskutována v rámci prezentace.

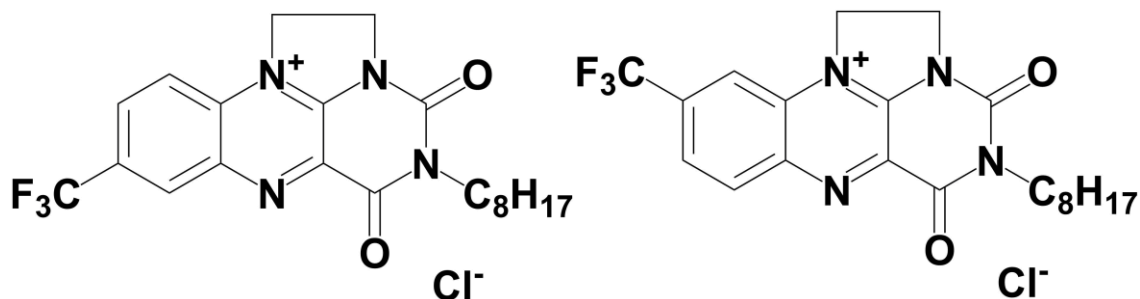


Přemostěné flaviniové soli jako fotokatalyzátory oxidace benzylalkoholů

Veronika Boguschová (B2)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Flaviny a flaviniové soli jsou známými katalyzátory oxidačních reakcí. Fungují buď na principu fotokatalytickém, kdy se flavin nebo flaviniová sůl po excitaci viditelným světlem stává silnějším oxidačním činidlem, nebo organokatalytickém, kdy působením peroxidu vodíku flaviniová sůl přechází na svůj hydroperoxid a dále oxiduje substrát. Moje práce se zabývá syntézou nových přemostěných flaviniových solí s elektronakceptorní trifluormethylovou skupinou, studiem jejich vlastností a otestováním jejich katalytických vlastností při fotooxidaci substituovaných benzylalkoholů.

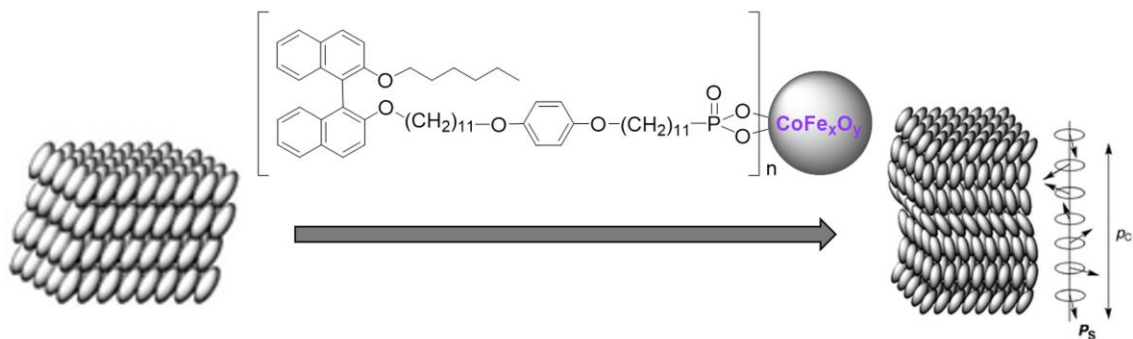


Nové chirální dopanty pro kapalně-krystalické matrice

Eva Tetenková (B3)

Školitel: doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.

Kapalné krystaly představují unikátní materiály kombinující uspořádání pevných látek s mobilitou tekutin. Díky tomu pak mohou tyto materiály uspořádané do kapalně-krystalické fáze (mesofáze) reagovat na vnější podněty, např. elektrické pole, a zaujmout nové uspořádání s minimální energií. Cílem této práce je syntéza chirálního systému odvozeného od 1,1'-binaftalen-2,2'-diolu, který bude možné použít k přípravě magnetického nanomateriálu. Při následném smísení nanomateriálu s achirálním kapalným krystalem by měl enantiomerně čistý dopant indukovat chirální uspořádání a vytvoření chirální mesofáze, a to i při nízkých koncentracích. Přítomnost magnetické nanočástice by měla vliv chirálního působení BINOLu ještě zvýšit a zároveň umožnit řízení samoskladby výsledného materiálu i slabým magnetickým polem.

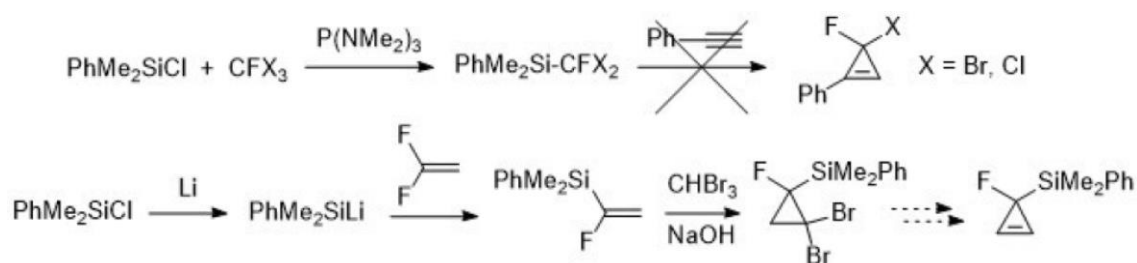


Příprava prekurzorů pro fluorcyklopropeny

Denisa Kubešová (B3)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Přestože cyklopropeny vykazují z důvodu vysokého úhlového a torzního pnutí zvýšenou reaktivitu, jejich metateze s otevřením kruhu je v dnešní době stále velmi málo prozkoumaná. Substituované 3-fluorcyklopropeny jsou dosud zcela neznámé sloučeniny. Prvním cílem mé práce byl proto pokus o syntézu 3-brom-3-fluor- a 3-chlor-3-fluorcyklopropenu. Obě syntézy však nevedly k cíli. Rozhodla jsem se proto pro vícekrokovou syntézu 3-(fenyldimethylsilyl)-3-fluorcyklopropenu a připravila jsem první klíčový intermediát (1-fluoroethenyl)-fenyldimethylsilan.

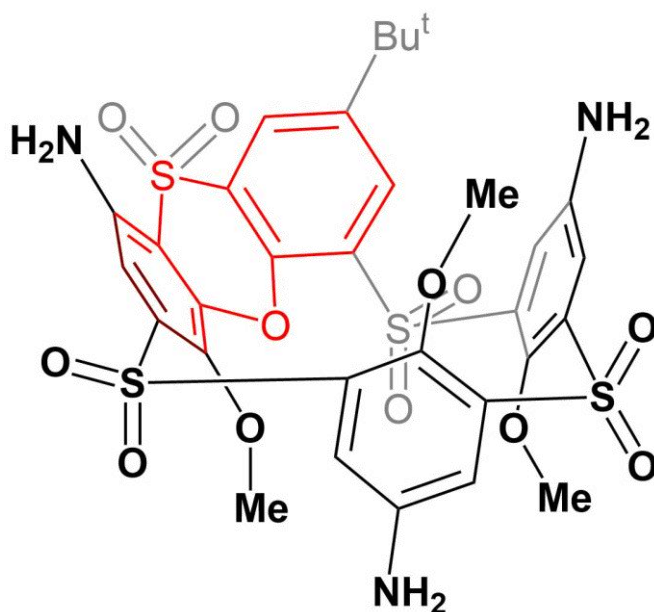


Syntéza ureidoderivátů pro rozpoznávání chirálních substrátů

Martina Kosmálová (B3)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Fenoxathiinový makrocyklus je snadno dostupný inherentně chirální derivát thiacalix[4]arenu s potenciálním využitím v supramolekulární chemii. V nedávné době byly několikastupňovou syntézou vycházející z tohoto makrocyklu připraveny močovinné deriváty ochotně komplexující anionty. Práce je zaměřená na syntézu chirálně čistých ureidoderivátů fenoxathiinového makrocyklu, využitelných jako receptory chirálních molekul. Nejprve byla připravena oxidovaná forma fenoxathiinového makrocyklu, která byla dále alkylována dvěma různými činidly, methyljodidem a ethyljodidem, abychom zjistili, zda bude mít volba alkylačního činidla vliv na průběh dalších reakcí. Poté byla optimalizována *ipso*-nitrace a následná redukce vzniklého nitroderivátu. Reakcí s vybranými chirálními isokyanáty pak budou připraveny cílové ureidoderiváty ve formě diastereomerních směsí. Po jejich rozdělení budou zkoumány jejich komplexační vlastnosti.

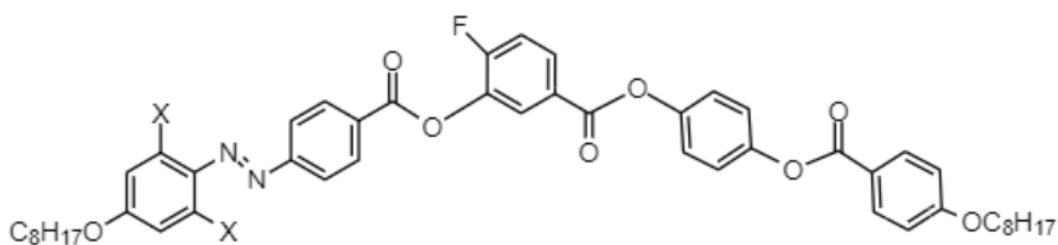


Lomené kapalné krystaly s fotosensitivní jednotkou

Diana Jágerová (B3)

Školitel: doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.

V naší pracovní skupině se dlouhodobě věnujeme studiu termotropních kapalných krystalů. Tyto materiály tvoří při přechodu z krystalické fáze do isotropní kapaliny uspořádané nadmolekulární struktury (mesofáze), ve kterých si molekuly látky zachovávají orientaci krystalické látky, ale získávají i určitý stupeň mobility kapalin. V současné době se do popředí výzkumu dostávají materiály, které v molekulární struktuře obsahují fotosensitivní azobenzenovou jednotku. Cílem práce je příprava nových lomených kapalných krystalů, které při ozáření UV světlem vytvoří stabilní Z-isomer přítomné azo skupiny (Obr. 1). Vysokou stabilitu Z-isomeru jsme zajistili vhodnou laterální substitucí na aromatických jednotkách v jejím těsném sousedství. Připravené látky budou testovány pro použití v prototypu zařízení pro difrakci laserových paprsků působením UV záření.



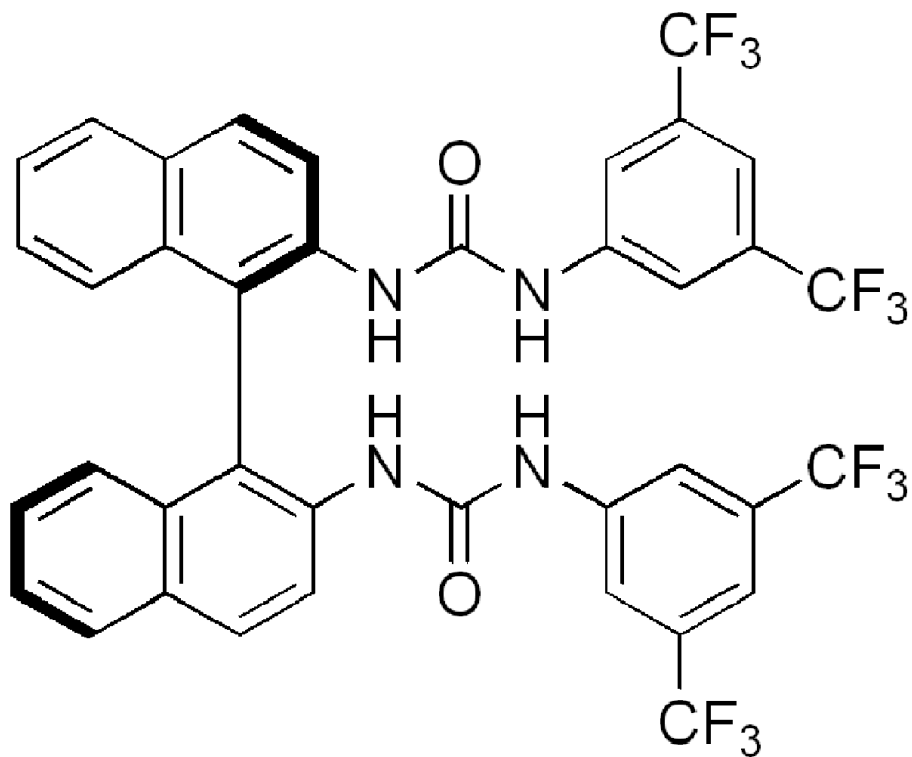
X = F, Cl, Br, CH₃

Chirální solvatační činidlo na bázi močoviny pro aminokyseliny

Kateřina Drahošová (B3)

Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Byly syntetizovány opticky aktivní deriváty močoviny reakcí (R)-1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu s izokyanátem. Tyto močoviny byly testovány jako chirální solvatační činidlo pro rozlišení enantiomerů několika vybraných N-acetylovaných aminokyselin analýzou ^1H -NMR. Chirální solvatační činidlo vytváří s vybranou racemickou aminokyselinou diastereomerní komplex. To vedlo k rozštěpení signálů v NMR spektru racemické aminokyseliny tak, že by bylo možno stanovit její enantiomerní čistotu.

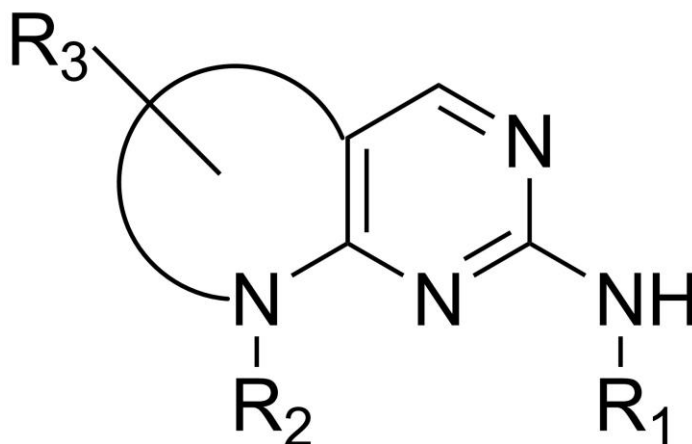


Syntéza nového typu NNRTIs s bicyklickým jádrem

Ladislav Prener (B3)

Školitel: Ing. Ondrej Baszczyński, Ph.D.

Virus HIV má od roku 1980 na svědomí životy asi 35 milionů lidí. Přibližně stejné množství pacientů je dnes diagnostikováno jako HIV pozitivní a jejich počet se stále zvyšuje.¹ Kvalita a délka života těchto pacientů závisí na tzv. anti-retrovirové terapii, jejíž důležitou součástí jsou inhibitory reverzní transkriptázy viru HIV. Jedním z hlavních zástupců této skupiny léčiv jsou nenukleosidové inhibitory reverzní transkriptázy (NNRTIs). Tyto látky se vážou do allosterického vazebného místa v „palm“ doméně reverzní transkriptázy viru HIV-1, čímž způsobí konformační změny v aktivním místě enzymu, a zabrání tak transkripci virové RNA do DNA hostitele. Hlavní výhodou těchto inhibitorů je, že jsou nekompetitivní, vysoce specifické a nevyžadují intracelulární metabolizaci. Značnou nevýhodu ovšem představuje fakt, že virus HIV vůči nim získává rychle rezistenci a jsou obvykle extrémně málo rozpustné.² Cílem této práce je připravit skupinu NNRTIs s bicyklickým jádrem, se zvýšenou rozpustností a širokou aktivitou vůči klinicky relevantním mutantům viru HIV-1. 1. UNAIDS Global HIV & AIDS statistics — 2018 fact sheet. <http://www.unaids.org/en/resources/fact-sheet> (accessed 2. 11.). 2. Béthune, M.-P. d., *Antiviral Research* 2010, 85 (1), 75-90.

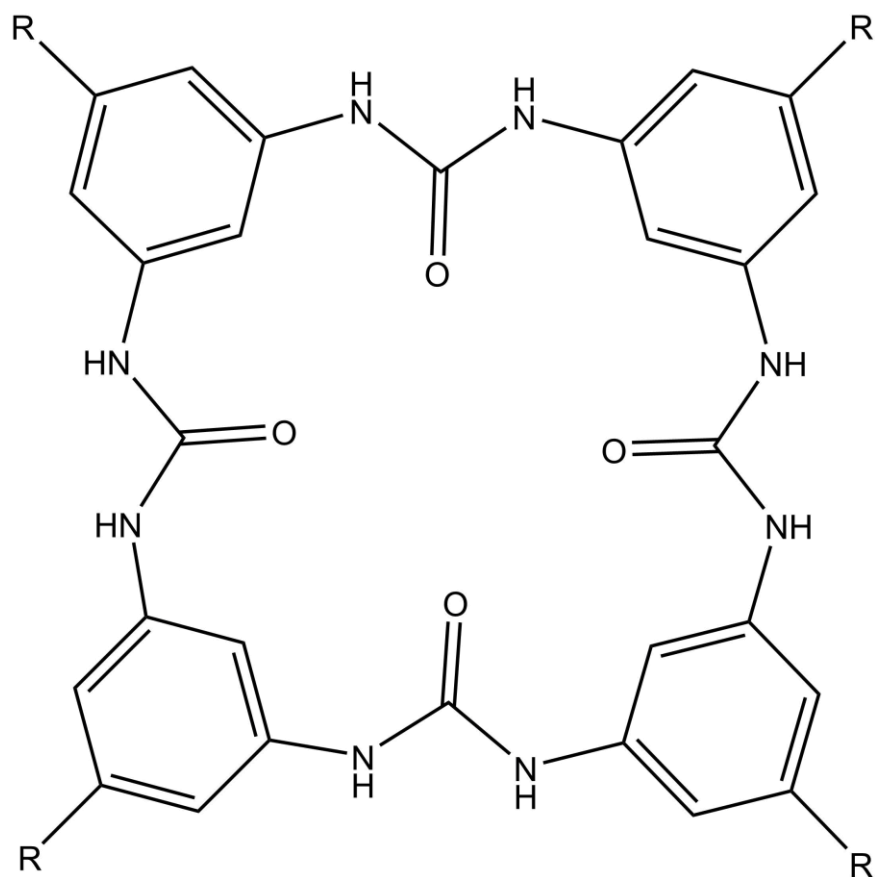


Syntéza makrocyklů s močovinovými jednotkami

Michaela Polanková (B3)

Školitel: Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.

Práce se zabývá syntézou makrocyklů s močovinovými spojkami s různými substituenty na aromatických jádrech s potenciálním uplatněním v nejrůznějších supramolekulárních systémech. Cílem práce je pokus o zopakování v literatuře popsané přípravy těchto makrocyklů a studium jejich reaktivity, konformačních a popřípadě komplexačních vlastností jak v kapalně, tak v pevné fázi.

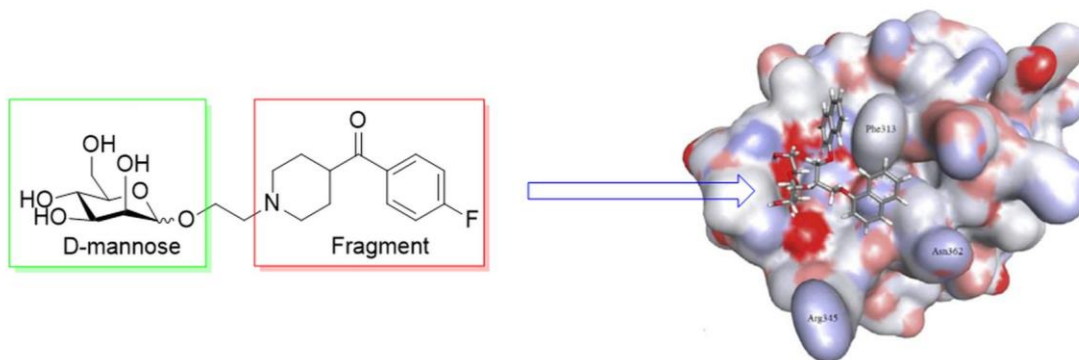


Synthesis of Mannose-Based DC-SIGN Antagonists

Jiří Ledvinka (B2)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

DC-SIGN (Dendritic Cell-Specific Intercellular adhesion molecule-3-Grabbing Non-integrin) is a C-type lectin (carbohydrate-binding protein domain) present on the surface of dendritic cells. It recognizes and binds to mannose-containing carbohydrates on various pathogens and is thus a promising therapeutic target for the inhibition of pathogen entry and the prevention of immune cells infections. The interaction of DC-SIGN with HIV virus is of main interest. The current research in this field takes advantage of fragment-based drug discovery. Recently, several small-molecule fragments with significant affinities to DC-SIGN receptor were discovered. Our aim is to synthesize molecules containing one of these fragments connected with different linkers to a mannose moiety in order to increase their affinity to DC-SIGN receptor and their therapeutic potential.

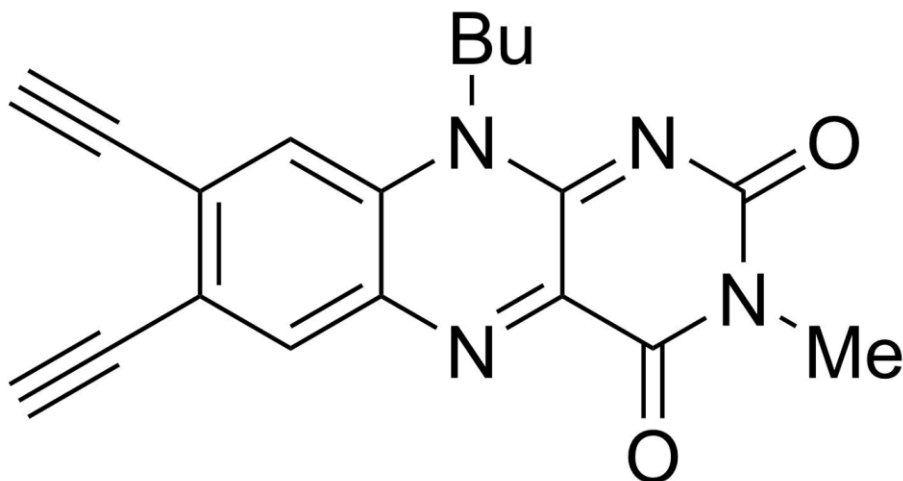


Syntéza dialkynylflavinů

Ivana Weisheitelová (B3)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Flaviny a jejich deriváty jsou známy organo- a fotokatalyzátory. Isoalloxaziny jsou např. součástí enzymů fotolýz (jako kofaktory, např. FAD, FMN). Modifikované přírodní flaviny (např. tetraacetylriboflavin) nebo syntetické flaviny (alloxaziny a iso a alloxaziniové soli) slouží jako modely pro studium organo a fotokatalytického působení flavinů v biologických systémech. Pro hlubší pochopení dějů probíhajících ve fotokatalytických a fotobiologických systémech jsme navrhli modelový systém, ve kterém bude derivát isoalloxazinu navázán na rigidní skelet v definované vzdálenosti od substrátu. Moje práce je zaměřena na přípravu 7,8-dialkynylisoalloxazinů, které bude možné navázat na rigidní skelet.

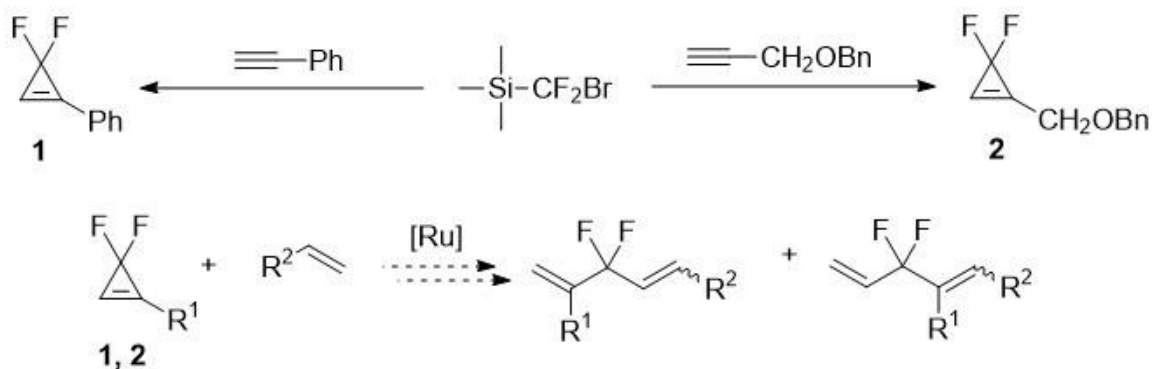


Syntéza a stabilita 3,3-difluorcyklopropenů a jejich metateze

Anna Kubičková (B3)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Cyklopropeny jsou vlivem velkého úhlového pnutí vysoce reaktivní sloučeniny, což z nich dělá vhodné substráty pro metatezi s otevřením cyklu za vzniku nových typů dienů. Ve své práci se zabývám přípravou 1-substituovaných-3,3-difluorcyklopropenů pomocí [1 + 2] cykloadice a testováním jejich stability. Připravené cyklopropeny 1 a 2 jsem následně podrobila metatezi s otevřením cyklu (ROM) a metatezi s otevřením cyklu následované zkříženou metatezí (ROCM), katalyzovaným Grubbsovými nebo Hoveydoými-Grubbsovými komplexy.

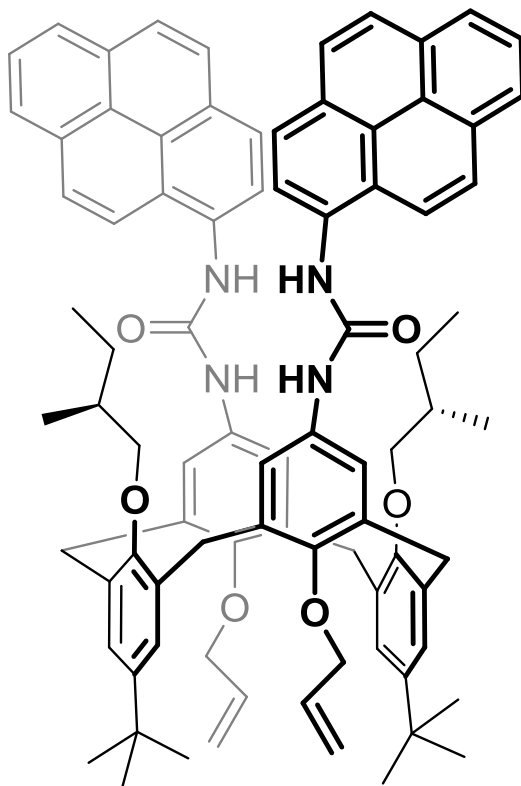


Syntetické přeměny střídavých atropoisomerů calix[4]arenu

Bc. Tereza Horáčková (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Tato práce se zabývá syntézou střídavých atropoisomerů calix[4]arenu a následným zkoumáním jejich reaktivity. Calix[4]areny v 1,2- a 1,3-střídavé konformaci nabízejí zajímavé vlastnosti díky jejich preorganizovanému tvaru kavity. Calixareny v 1,3-střídavé konformaci substituované dvěma ureidoskupinami na protější straně skeletu patří mezi nejefektivnější aniontové receptory. V rámci této práce tak byla navržena několikastupňová syntéza, která umožnila přípravu receptoru v 1,3-střídavé konformaci s chirálními alkylovými řetězci na spodním okraji. Použití pyren-1-ylisokyanátu umožnilo syntézu chromogenního a fluorogenního chirálního receptoru, jehož komplexační vlastnosti vůči vybraným chirálním aniontům budou dále zkoumány. 1,2-Střídavý konformer je naproti tomu mnohem obtížněji dostupný a jeho reaktivita stále není v literatuře dostatečně popsána. Jedním z dalších cílů této práce je proto také příprava chirálního receptoru v 1,2-střídavé konformaci.

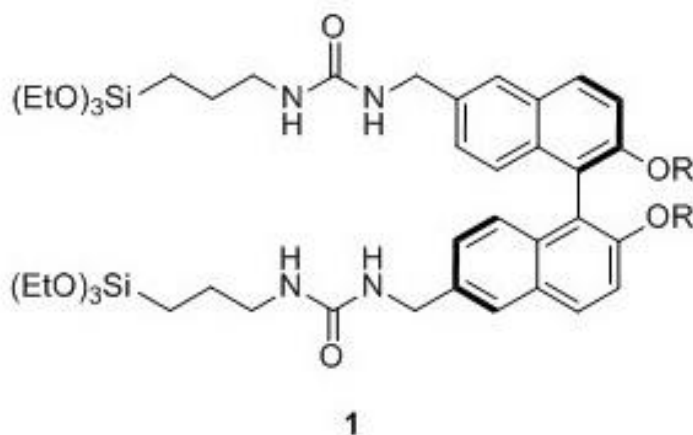


Deriváty BINOLu ako stavebné bloky pre hybridné organokremičité materiály

Bc. Jaroslava Šimoniková (M2)

Školiteľ: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Hybridné organokremičité materiály sú materiály na báze siloxánov so zabudovanou organickou jednotkou. Jednou z aplikácií týchto materiálov je ich využitie pri katalýze enantioselektívnych reakcií. Cieľom práce je príprava tzv. premostených organokremičitých materiálov sol-gel procesom z organických bis-trialkoxysilánov obsahujúcich axiálne chirálny BINOL, alebo jeho deriváty, ktoré sú na kremičitý materiál pripojené pomocou vhodných funkčných skupín v polohách 6,6'. Jedným z uvažovaných východiskových bis-trialkoxysilánov je derivát 1, ktorého syntézou sa zaoberá moja práca.

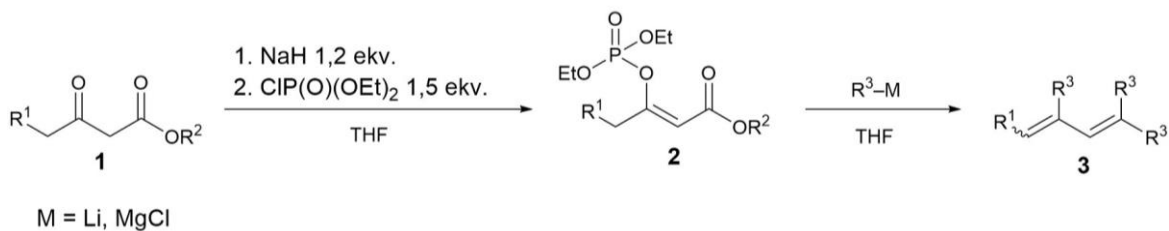


Příprava trisubstituovaných alkenů reakcí enol-fosfátů s organokovovými činidly

Bc. Jakub Koudelka (M1)

Školitel: doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Alkeny představují obecně významnou skupinu látek, které lze využít v organické syntéze anebo materiálové chemii. Zejména substituované alkeny s vysokým počtem substituentů lze využít jako jednoduché výchozí látky pro přípravu aromatických i alifatických supramolekul, makromolekul, bioaktivních látek a také jako substráty pro cykloadiční reakce, např. Diels-Alderovu reakci. Vysoce substituované konjugované alkeny s π -konjugovanými řetězci mají rozsáhlý aplikační potenciál v oblasti organických polovodivých látek. Ve snaze připravit vysoce konjugované trisubstituované dieny (3), jsem se ve své práci zaměřil na možnost převedení β -oxoesterů (1) na enol-fosfáty (2) a jejich následnou konverzi na dieny (3). Fosfáty (2) byly připraveny enolizací výchozích β -oxoesterů (1) a reakcí vzniklého enolátu s diethylchlorfosfátem. Výsledky získané během studia reakce fosfátů (2) s organokovovými činidly budou diskutovány během příspěvku.



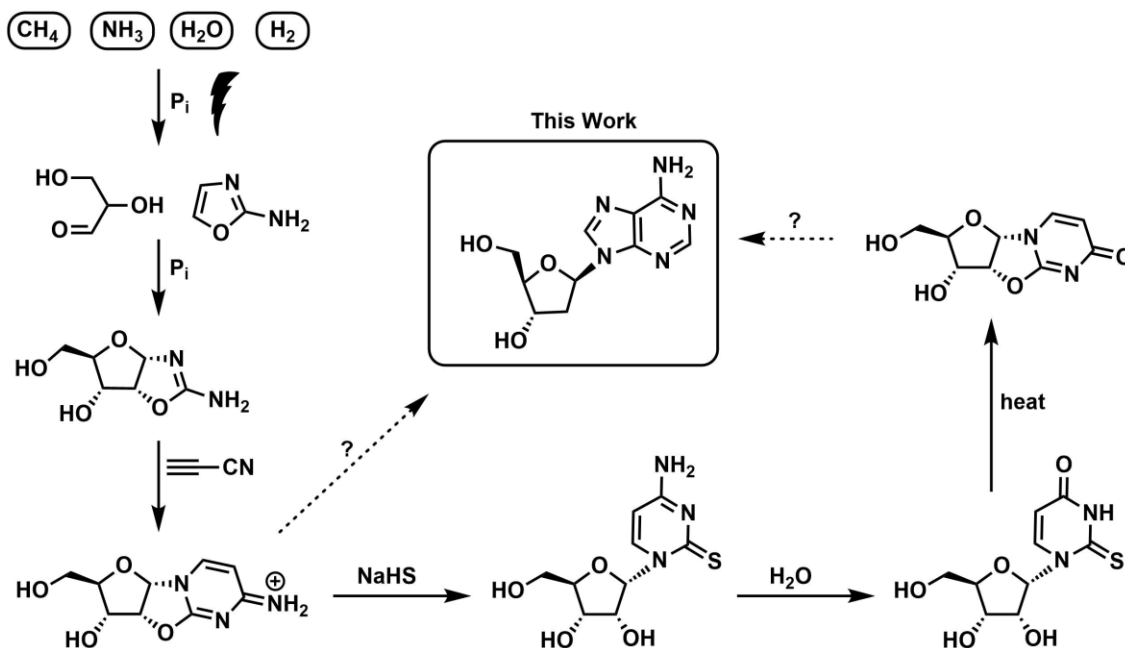
Prebiotic Synthesis of 2'-Deoxyadenosine

Bc. et Bc. Václav Chmela (M2)

Školitel: prof. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

We have previously discovered a short, highly efficient route to activated ribonucleotides from plausible prebiotic feedstock molecules such as cyanamide, cyanoacetylene, glycoaldehyde, glyceraldehyde and inorganic phosphate.¹ We can accomplish the synthesis of all precursors of ribonucleotides, amino acids and lipids by the reductive homologation of hydrogen cyanide and some of its derivatives. The key steps are driven by UV using hydrogen sulphide as a reductant and can be accelerated by Cu^I-Cu^{II} photoredox cycling.² Anomerization of α -ribonucleosides to β -anomers is extremely inefficient. However, an extraordinarily efficient anomerization can be accomplished using α -2-thionucleosides.³ Here we describe a novel prebiotic approach to 2'-deoxyadenosine.

References: 1 Powner, M. W.; Gerland, B.; Sutherland, J. D. *Nature* 2009, 459, 239. 2 Patel, B. H.; Percivalle, C.; Ritson, D. J.; Duffy, C. D.; Sutherland, J. D. *Nature Chemistry* 2015, 7, 301. 3 Xu, J.; Tsanakopoulou, M.; Magnani, C. J.; Szabla, F.; Šponer, J. E.; Šponer, J.; Góra, R. W.; Sutherland, J. D. *Nature Chemistry* 2017, 9, 303.

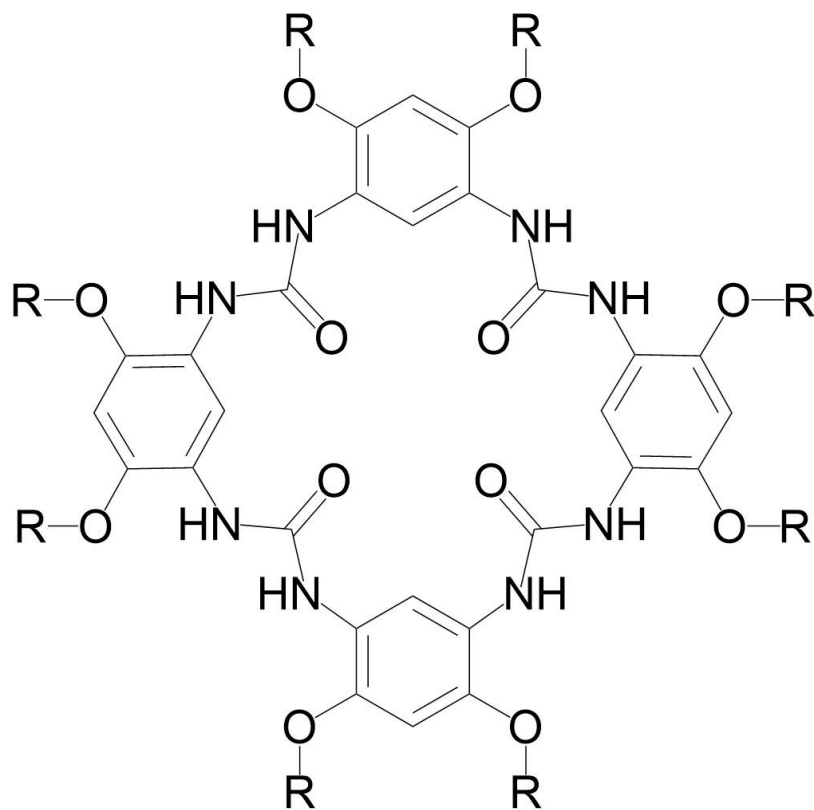


Příprava makrocyklů s močovinovými jednotkami

Bc. Marek Jurtík (M1)

Školitel: Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.

Mezi velkou skupinu makrocyklů patří různé známé látky, jako crown-ethery, kryptandy, cyklofany, porfyriny, makrolidy a další. Makrocykly mohou sloužit například jako receptory iontů, kdy příslušný ion je vázán nekovalentními vazbami. Práce se zabývá přípravou makrocyklu se čtyřmi dialkoxy substituovanými benzenovými jádry, které jsou spojeny močovinovými jednotkami. Dalším krokem výzkumu bude studium reaktivity, konformace a komplexačních vlastností připravených makrocyklů.

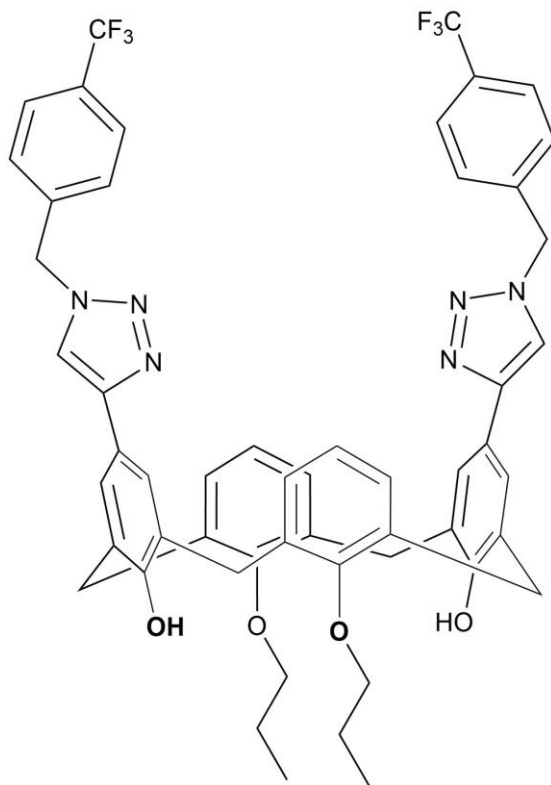


Calix[4]aren-triazoly

Bc. Vojtěch Hamala (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Calix[4]areny jsou makrocyclické sloučeniny používané v supramolekulární chemii jako molekulární lešení. V této práci je základní skelet calix[4]arenu v *kónické* konformaci použit jako stavební kámen pro syntézu makrocyclických receptorů, schopných komplexovat anionty pomocí 1,2,3-triazolových skupin. Tyto heterocykly jsou na horním okraji calix[4]arenu vystavěny nekonvenčním způsobem: multikomponentní reakcí primárního aminu, aryl(methyl)ketonu a 4-nitrofenylazidu. Získané 1,4-disubstituované 1,2,3-triazoly jsou schopné rozpoznávat anionty v roztoku díky kyselému vodíku v poloze 5, který interaguje s anionty pomocí vodíkových můstků. Tuto interakci lze ještě zesílit pomocí *N*-alkylace triazolového jádra vedoucího ke vzniku triazoliových solí. Využitím různých primárních aminů byla připravena řada receptorů a od nich odvozených solí. Komplexační vlastnosti nově připravených sloučenin byly měřeny pomocí ^1H NMR titrací.

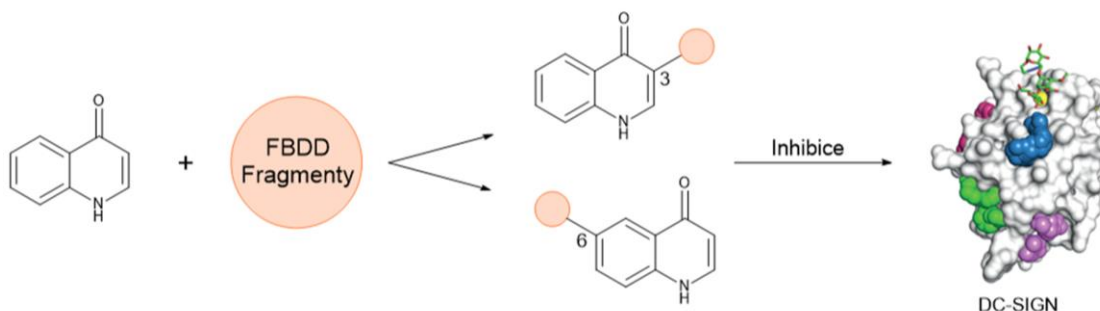


Syntéza substituovaných chinolonů jako potenciálních inhibitorů DC-SIGN receptoru

Bc. Dmytro Makarov (M1)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

DC-SIGN receptor patří do skupiny transmembránových C-lektinových receptorů, nacházejících se zejména v membráně buněk imunitního systému. Je zodpovědný za navázání patogenu, jeho inkapsulaci a následné odbourání v lysozomech. Při hledání potenciálních inhibitorů DC-SIGN receptoru byla využita metoda fragment-based drug design. V nedávné studii bylo popsáno několik malých molekul (fragmentů) s relativně vysokou afinitou k DC-SIGN receptoru, mezi nimi (4-fluorfenyl)(piperidin-4-yl)methanon a řada heterocyklických aromátů na bázi chinoxalinonu. Cílem práce bylo připravit sérii látek vzniklých spojováním těchto fragmentů. Jako základ struktury byl zvolen 4-oxo-1,4-dihydrochinolin („4-chinolon“), který je strukturně podobný derivátům chinoxalinonu a jehož struktura se objevuje v řadě biologicky aktivních látek. Syntetické postupy byly optimalizovány na přípravě jednoduchých nesubstituovaných chinolonů a následně byly využity pro syntézu složitějších 3- a 6-substituovaných chinolonů.

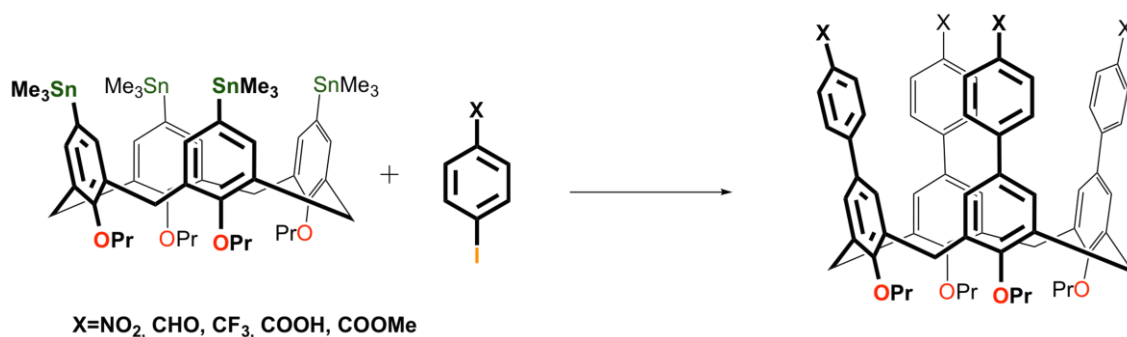


Studium cross-coupling reakcí calix[4]arenů

Bc. Anastasia Surina (M2)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Základní skelet calixarenu nabízí široké spektrum možností derivatizace horního okraje. Jednou z možností je rozšíření aromatického systému makrocyclu pomocí *cross-coupling* reakcí. První část této práce je proto zaměřena na přípravu stabilních organokovových substrátů odvozených od calix[4]arenu v *kónické* a *1,3-střídavé* konformaci z odpovídajících halogenderivátů. Takto připravené substráty byly ve druhé části využity ke studiu *cross-coupling* reakcí, především Stilleho a Negishiho couplingu s různě substituovanými arylhalogenidy. Získané sloučeniny budou následně využity k syntéze složitějších receptorů a konstrukci struktur typu MOF.

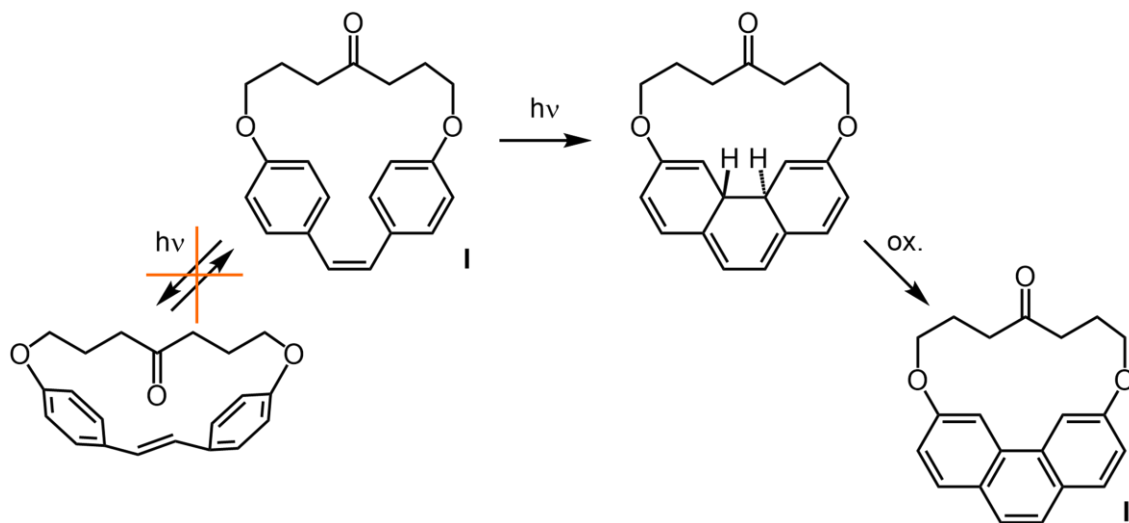


Molekulové siloměry pro infračervenou spektroskopii

Bc. Tatiana Nemirovich (M1)

Školitel: Ing. Martin Krupička, Ph.D.

Kovalentní mechanochemie představuje koncept aktivace reakčního systému působením mechanické síly. Tento přístup je komplementární k tradičním metodám aktivace, jako zahřívání, elektromagnetické záření nebo elektrická energie. Molekulové siloměry jsou makrocyclické látky umožňující přímé měření užitého mechanického stresu. Konkrétně byly zkoumány systémy obsahující (i) fotopřepínač schopný vyvolávat mechanickou deformaci makrocyclu a (ii) fragment citlivý k působícímu mechanickému stresu (mechanofor). Tato práce je zaměřena na vývoj nových molekulových siloměrů umožňujících spektroskopickou charakterizaci vnější mechanické síly. UV-fotoizomerizace fotopřepínače vede k deformaci celého makrocyclu a změnám spektroskopických vlastností mechanoforu. Nejprve byla navržena série makrocyclů s fotopřepínačem stilbenového typu a karbonylovou skupinou jakožto IČ citlivého mechanoforu. Na bázi provedených DFT výpočtů (optimalizace geometrie, IČ spektra) byl zvolen a připraven jeden nejvhodnější kandidát (sloučenina I). Získaná cílová látka I byla podrobena UV ozáření, které vedlo k oxidativní aromatizaci systému za vzniku sloučeniny II namísto očekávané Z-E izomerizace. Změřená IČ spektra obou sloučenin I a II poskytovala shodu s vypočítanými hodnotami.

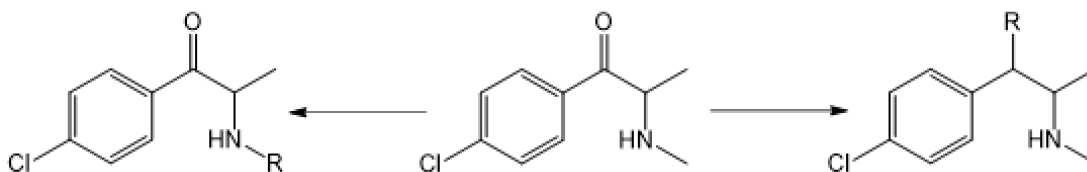


Syntéza nových syntetických drog a jejich metabolitů

Bc. Martin Paškan (M2)

Školitel: doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.

Cieľom tejto práce je syntéza metabolitov nových syntetických drog. Konkrétne látok s rôznou substitúciou na atóme dusíku, ale aj ďalších metabolitov (Obr. 1). Práca je venovaná syntéze metabolitov drogy Clephedrone. Je to droga, ktorá je v dnešnej dobe veľmi ľahko dostupná v internetových obchodoch avšak, informácie o jej metabolickej premene a predovšetkým biologickej aktivite jej metabolitov dostupné nie sú. Predmetom je práve syntéza metabolitov a to z nasledovných dôvodov: a) štúdiá cytotoxicity metabolitov *in vitro* b) štúdiá účinku metabolitov na psychickú aktivitu živých organizmov a c) zisťovanie ďalšej biologickej aktivity predovšetkým s ohľadom na možné využitie v medicíne.

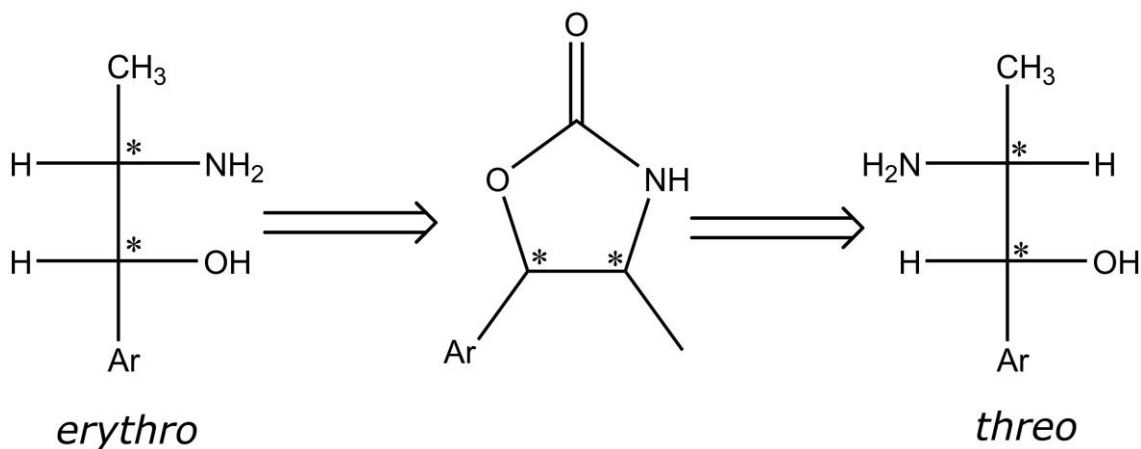


Metody přípravy diastereoisomerně čistých vicinálních aminoalkoholů odvozených od norefedrinu

Bc. Artem Chayka (M1)

Školitel: Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.

Vicinální aminoalkoholy odvozené od norefedrinu mohou mít biologickou aktivitu ve smyslu inhibice enzymů monoaminoxidasy (MAO) A a B, které mají v organismu mimo jiné funkci odbourávání neurotransmiterů a udržování jejich množství na určité hladině. Anomálně nízká hladina neurotransmiterů je symptomem doprovázejícím deprese, posttraumatické stresové poruchy a dokonce i Parkinsonismus. Pro zmírnění projevů popsaných stavů se používají právě inhibitory MAO, jejichž biologická aktivita závisí jak na konstituci jednotlivých substancí tak i na absolutní konfiguraci na jejich stereogenních centrech. Cílem této práce bylo ověření v literatuře popsané metody pro syntézu diastereoisomerně čistého norefedrinu a rozšíření této metody na nový substrát odvozený od normefedronu. Byly prozkoumány možnosti stereoselektivní syntézy každého diastereoisomeru zvlášť a možnost jejich převedení z *erythro* konfigurace na obtížně synteticky dostupnou *threo* konfiguraci pomocí tvorby karbamátového cyklu.

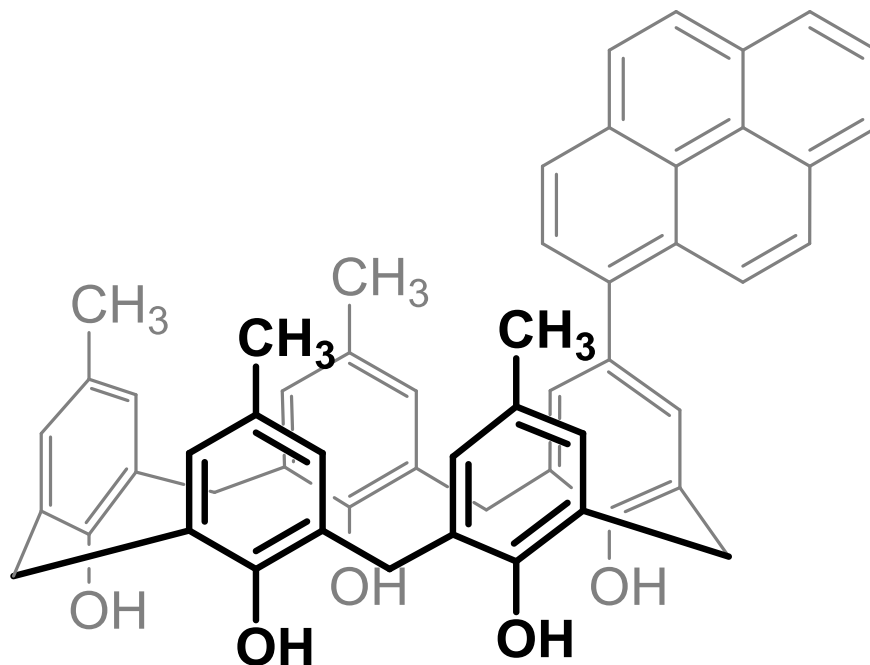


Příprava receptorů využívajících calix[5]areny

Bc. Lenka Krepsová (M2)

Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Calix[5]areny se řadí mezi tzv. vyšší calixareny, které (z hlediska supramolekulární chemie) představují makrocykly s větším rozměrem kavity, čímž je umožněna interakce s objemnějšími ionty a molekulami, jako je např. fullerén C_{60} . Pro přípravu calix[5]arenů se obvykle nevolí přímá jednokroková syntéza, ale využívá se postupné konvergentní metody, kdy dochází ke kondenzačním reakcím vhodně substituovaných fragmentů, což umožňuje následnou selektivní modifikaci vzniklé molekuly, především jejího horního okraje. Cílem mé práce je příprava vhodně substituovaných calix[5]arenů a jejich následná modifikace vedoucí k receptorům využitelných pro komplexace fullerénů.



Design a syntéza fotosensitivních kapalně-krystalických materiálů

Bc. Karolina Zvolská (M2)

Školitel: doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.

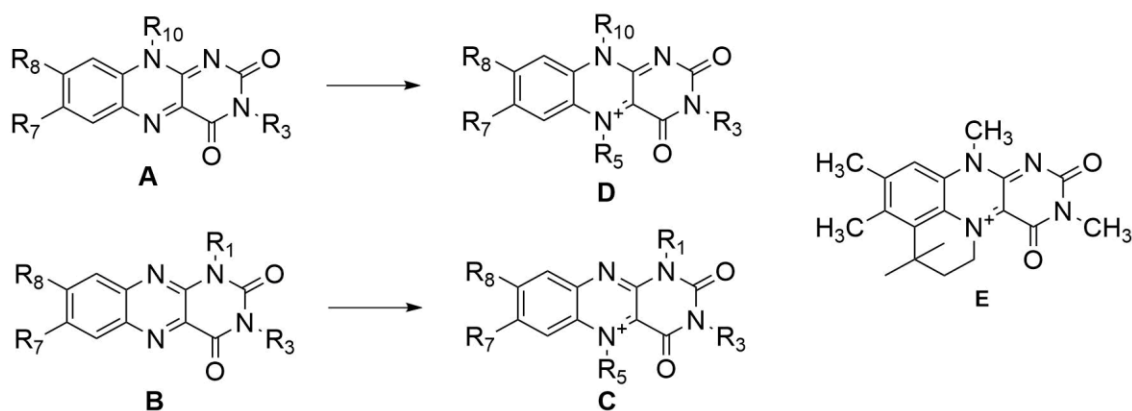
Kapalné krystaly jsou jedním z nejvyužívanějších soudobých materiálů. To především díky tomu, že jejich organizované supramolekulární struktury (mezofáze), vznikající při přechodu mezi pevným a kapalným stavem, reagují na různé vnější podněty (mechanická síla, světlo, elektrické pole). Tato reakce je pak pozorovatelná jako změna uspořádání organizované struktury mezofáze za vytvoření nové struktury s minimem energie. To je i základem aplikací kapalných krystalů např. v kapalně-krystalických displejích (LCD). Současným trendem ve výzkumu kapalných krystalů je příprava multifunkčních materiálů, které umožňují definované řízení uspořádání molekul v mezofázi. Cílem této práce je syntéza materiálů, které obsahují ve struktuře molekuly fotosensitivní azo-skupinu. Vhodnou laterální substitucí na aromatických jádrech vedle azo-skupiny je možné dosáhnout stabilizace fotochemicky indukovaného Z-izomeru a tím řídit samoskladbu molekul materiálu v mezofázi.

Syntéza flaviniových solí - katalyzátorů redoxních reakcí

Bc. Jakub Copko (M1)

Školitel: prof. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Flaviniové soli C, D, vznikající derivatizací alloxazinových A či isoalloxazinových B skeletů, jsou synteticky připravené obdoby přírodních katalyzátorů na bázi riboflavinu. V laboratoři našly uplatnění nejen jakožto organokatalyzátory redoxních reakcí, ale i ve fotokatalýze. Doposud se však nepodařilo nalézt robustní metodu syntézy flaviniových solí použitelnou pro širokou škálu derivátů. Má práce se zaměřuje na aplikace doposud použitých metodik příprav, hledání a optimalizaci nových metodik - primárně na přípravu přemostěné prenylované flaviniové soli E, která je syntetickou analogií nedávno nalezeného přírodního kofaktoru.

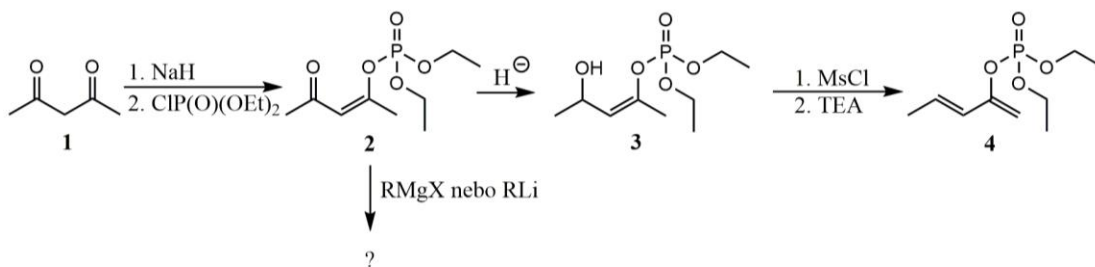


Studium reaktivity fosfátů strukturně odvozených od pentan-2,4-dionu s organokovovými činidly

Bc. Václav Vraštil (M2)

Školitel: doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Konjugované dieny jsou látky, které ve své molekule obsahují dvě konjugované dvojně vazby. Tyto látky našly široké uplatnění pro přípravu širokého spektra organických molekul. Jako příklad lze zmínit např. Diels-Alderovu reakci, která je využívána pro tvorbu cyklohexanového skeletu. S vysokým počtem aplikací konjugovaných dienu kontrastuje relativně malé množství postupů vhodných pro jejich přípravu. Proto jsem se ve své práci zaměřil na využití pentan-2,4-dionu a jeho převedení na substituované penta-1,3-dieny. Nejprve byl připraven enol-fosfát 2 a to reakcí enolátu odvozeného od pentan-2,4-dionu 1 s diethyl-chlorfosfátem. Následně byla prostudována reaktivita připraveného enol-fosfátu 2 s organokovovými a hydridovými činidly. Ukázalo se, že připravený alkohol 3 lze dehydratovat na konjugovaný dien 4 ve velmi vysokých výtěžcích. Možné syntetické využití dienu 4 pro přípravu konjugovaných dienu a trienů pomocí Kumada a Negishiho reakce v přítomnosti palladnatých a nikelnatých katalyzátorů bude detailně diskutováno v prezentaci.

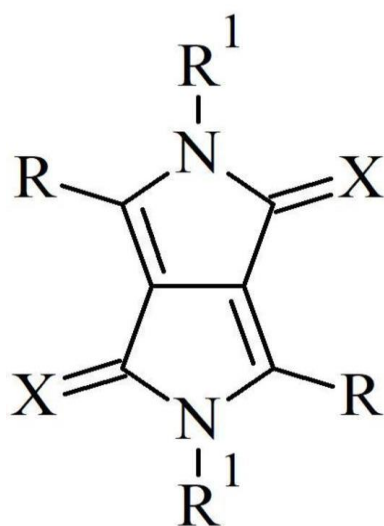


Syntéza a funkcionalizace derivátů diketopyrrolopyrrolů pro organickou elektroniku

Bc. Kamil Mamleev (M1)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Organická elektronika je jedním z nejdynamičtěji se rozvíjejících směrů moderní vědy. O rychlosti vývoje tohoto odvětví vědy svědčí využití organických solárních článků, OLED technologií, OFET tranzistorů a biosenzorů. Práce je zaměřena především na deriváty diketopyrrolopyrrolu (DPP) a dithioketopyrrolopyrrolu (DTPP), jejich syntézu, vlastnosti a využití v různých oblastech organické elektroniky. V rámci práce byly studovány možnosti syntézy derivátů DTPP s thiofenovými a fenylovými substituenty. Thiofenové deriváty byly dále modifikovány pomocí S-alkylace. Všechny připravené deriváty byly izolovány pomocí sloupcové chromatografie, jejich struktury byly charakterizovány pomocí ^1H NMR spektroskopie a budou v budoucnu využity ke studiu jejich vlastností.



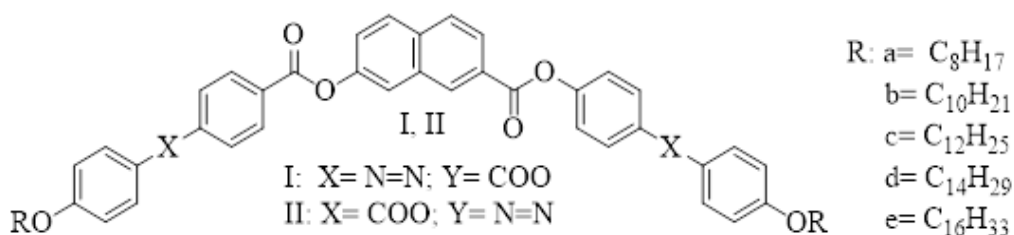
$X = \text{O}, \text{S}$

Syntéza nových fotosensitivních lomených kapalných krystalů

Bc. Tereza Černá (M2)

Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

Kapalné krystaly (LC), látky vykazující anizotropické vlastnosti pevných látek a zároveň mobilitu látek kapalných, byly objeveny už v roce 1888. Nicméně až jejich aplikace při konstrukci prvního LCD nastartovala rychlý vývoj v této výzkumné oblasti. Kromě okamžité odezvy na aplikované elektrické pole byly studovány LC reagující na magnetické pole, světlo nebo mechanické impulsy. V současné době je věnována zvláštní pozornost návrhu a syntéze funkčních LC materiálů reagujících na světlo. Z tohoto důvodu jsme navrhli a syntetizovali nové lomené kapalné krystaly na bázi 7-hydroxynaftalen-2-karboxylové kyseliny. Připravili jsme dvě série materiálů obsahujících jedno prodlužující rameno esterovou vazbou a druhé s fotosenzitivní azoskupinou. Mesomorfní chování cílových struktur bylo určeno diferenční skenovací kalorimetrií a polarizační optickou mikroskopií. Bylo zjištěno, že pozice azoskupiny a délka koncových alkylových řetězců výrazně ovlivňují mezomorfní vlastnosti studovaných materiálů.

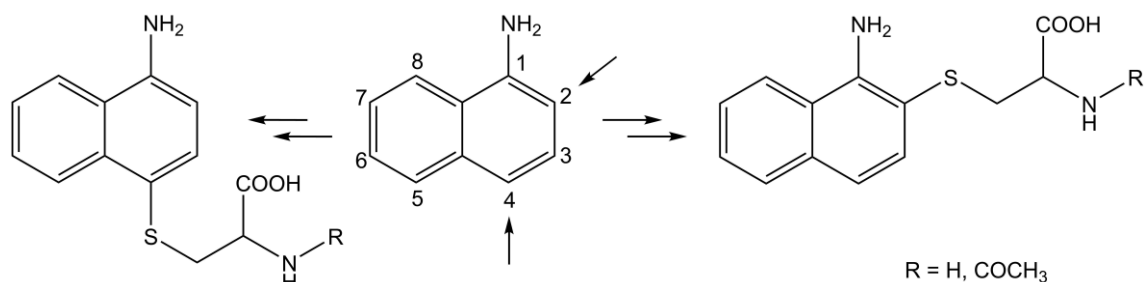


Syntéza cysteínových derivátov odvodených od 1-naftylamínu

Bc. Hana Vachová (M2)

Školiteľ: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Mnohé elektrofilné látky a ich reaktívne metabolity sú schopné reagovať s nukleofilnými reakčnými centrami v proteínoch a tvoriť tak proteínové adukty. Medzi takéto elektrofilné látky patria arylnitreniové ióny, vznikajúce *in vivo* biotransformáciou nitroaromátov a aromatických amínov. Cieľom práce bola syntéza merkapturových kyselín a cysteínových aduktov odvodených od 1-naftylamínu, ktorý je využívaný ako prekursor pri výrobe azofarbív. V organizme môžu pri biotransformácii 1-naftylamínu vznikať adukty naviazaním cysteínového zbytku do polohy 2 alebo 4 aromatického jadra, preto boli syntetizované príslušné 1,2 a 1,4 deriváty (viz. Obr.). Pre syntézu bol použitý C-S coupling 1-amino-2-brómnaftalénu (resp. 1-amino-4-brómnaftalénu) s chráneným cysteínom, nasledovaný redukciou nitroskupiny a odstránením chrániacich skupín. Pripravené adukty nachádzajú využitie ako analytické štandardy pre štúdium tvorby a odbúravania proteínových aduktov a v biologickom monitorovaní expozície xenobiotík.



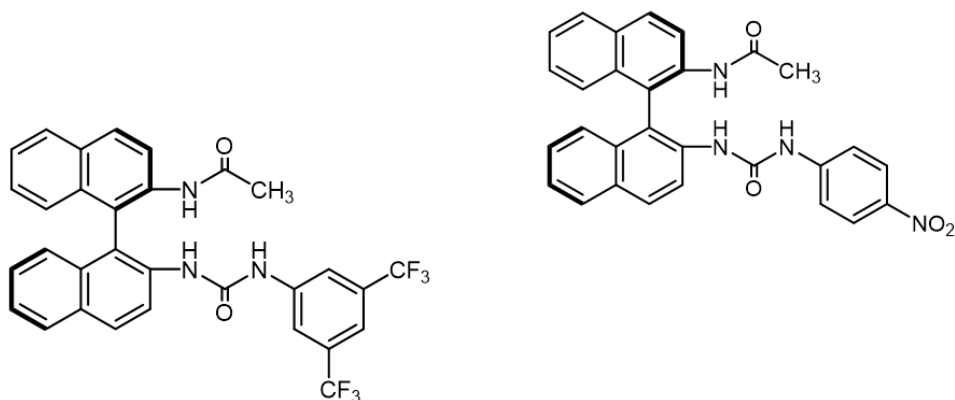
Nesymetricky substituované deriváty binaftalenu pro enantioselektivní interakce

Bc. Lukáš Lenz (M1)

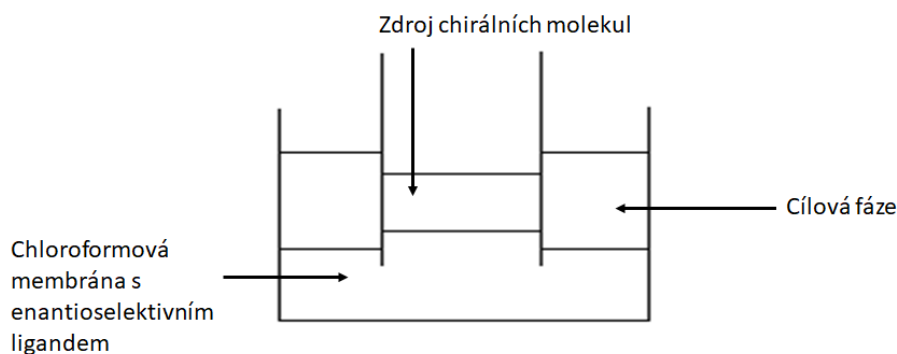
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Chirální látky jsou v oblasti léčiv zastoupeny ve velké míře. Jednotlivé optické isomery mohou mít různou biologickou aktivitu. Z tohoto pohledu je technikám k oddělení enantiomerů chirálních léčivých látek věnována ve farmaceutickém průmyslu velká pozornost. V této práci jsem se zaměřil na chirální separaci pomocí nesymetricky substituovaných binaftalenových močoviny. Byly připraveny nesymetricky substituované močoviny, u kterých byla zjišťována schopnost enantioselektivně interagovat s racemickou kyselinou mandlovou. Studovaným ligandem byla (*S*)-2-[*N'*-(3,5-bis(trifluormethyl)fenyl)ureido]-2'-(*N*-acetylamino)-1,1'-binaftalen a (*S*)-2-[*N'*-4-(nitrofenyl)ureido]-2'-(*N*-acetylamino)-1,1'-binaftalen. Pro ověření schopnosti enantioselektivní interakce byla vybrána metoda transportu racemické kyseliny mandlové přes chloroformovou membránu a dvoufázová třepací extrakce. Výsledky toho transportu prokázaly, že (*S*)-2-[*N'*-(3,5-bis(trifluormethyl)fenyl)ureido]-2'-(*N*-acetylamino)-1,1'-binaftalen jeví vůči racemické kyselině mandlové enantioselektivitu.

(*S*)-2-[*N'*-4-(nitrofenyl)ureido]-2'-(*N*-acetylamino)-1,1'-binaftalen



(*S*)-2-[*N'*-(3,5-bis(trifluormethyl)fenyl)ureido]-2'-(*N*-acetylamino)-1,1'-binaftalen

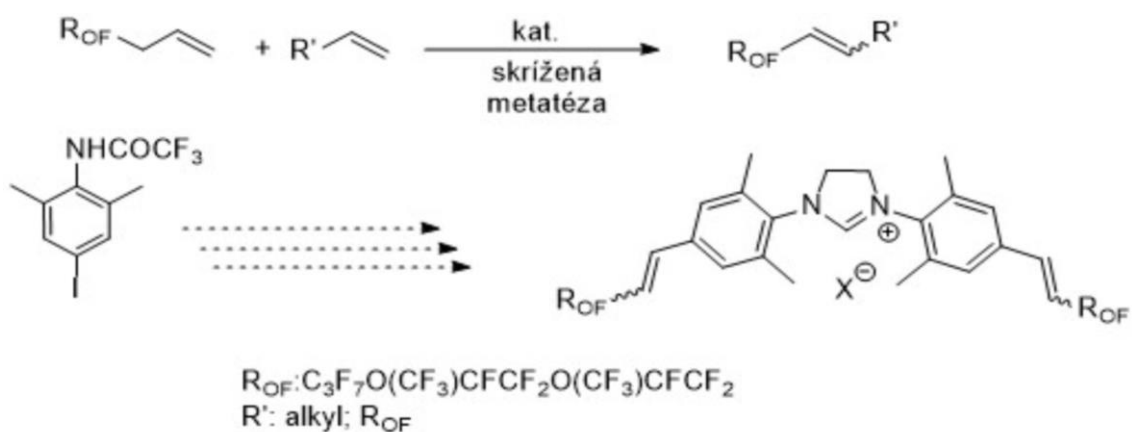


Nové ligandy pre stredne fluorovú chémiu

Bc. Róbert Obertík (M2)

Školiteľ: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

V prvej časti svojej práce sa venujem implementácii vetvených polyfluoropolyoxaalkénov do molekúl pomocou skrížených alkénových metatéz za vzniku diblokových zlúčenín, skrížených enýnových metatéz s propargyl-acetátom za vzniku konjugovaných diénov a Heckovmu couplingu za vzniku prekursoru pre NHC ligand. V druhej časti práce som transformoval perfluoro(2-methylpentan-3-ón) na alkoxid a reagoval ho s nefluorovaným substrátom. Pri reakcii vzniknutý alkoxid prekvapivo odštiepuje heptafluoropropan-2-idový anión, ktorý je možné využiť k modifikácii elektrónovo chudobných arénov

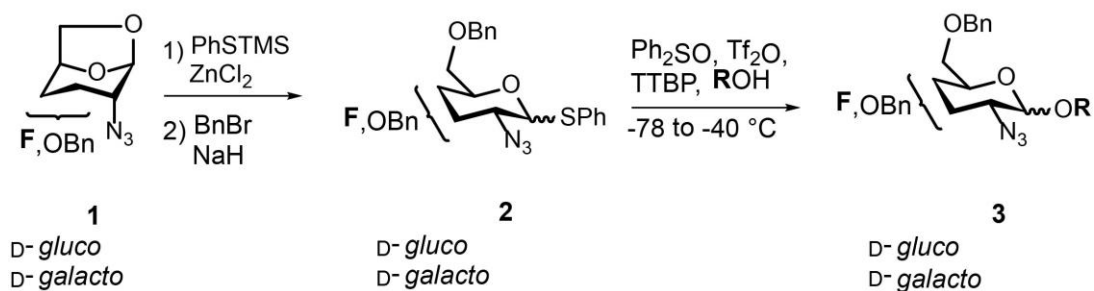


Influence of Deoxofluorination on Stereoselectivity of Glycosylation

Bc. Martin Kurfiřt (M2)

Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Amino sugars are ubiquitous in nature. Both α and β linked D-glucosamine and D-galactosamine derivatives are essential components of cell-surface glycoconjugates and participate in processes like tumour metastasis or an immune response. Derivatives of these monosaccharides can be utilized for studying mentioned processes. Replacement of a hydroxyl group in carbohydrates by fluorine (deoxofluorination) is a useful approach to modulate the properties of the target carbohydrate molecules. Fluorine introduction has a minimal steric impact but results in a variety of electronic effects. To synthesize oligosaccharides containing deoxofluorinated analogues of these monosaccharides, the corresponding deoxofluorinated 2-amino-2-deoxyhexopyranosyl donors need to be prepared and their reactivity and stereoselectivity in glycosylation examined. Deoxofluorinated 1,6-anhydro-2-azido-2-deoxy-D-gluco- and galactopyranoses **1** have been converted to the corresponding phenyl 1-thioglycoside donors **2**. The results obtained in glycosylation of a range of model carbohydrate acceptors with donors **2** using diphenyl sulfoxide/triflic anhydride ($\text{Ph}_2\text{SO}/\text{Tf}_2\text{O}$) are presented and discussion of the stereoselectivity is included.



ROH = carbohydrate acceptor

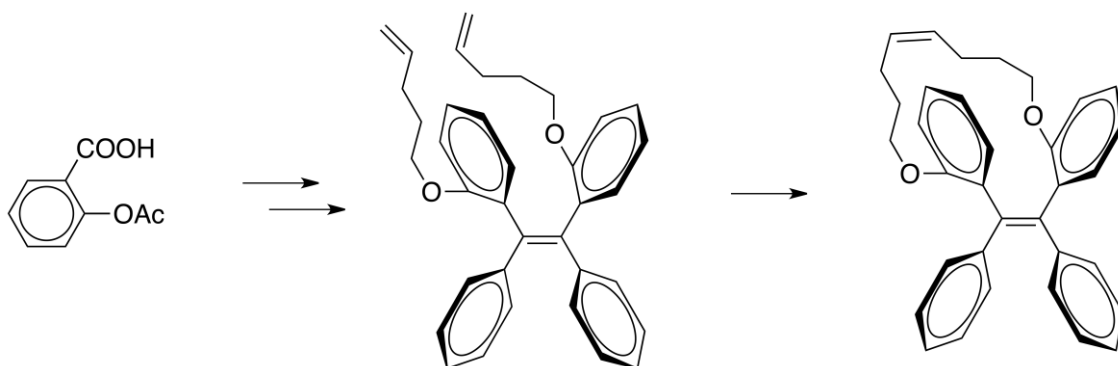
TTBP = 2,4,6-tri-*tert*-butylpyrimidine

Makrocykly založené na tetrafenylethyléne aplikovateľné ako fluorescenčné indikátory

Bc. Marco Vitek (M2)

Školiteľ: Ing. Martin Krupička, Ph.D.

V súčasnosti patrí mechanochémia k rapídne sa rozvíjajúcim disciplínam v oblasti syntetickej chémie. Kľúčovým problémom v tomto odbore je kvantifikácia mechanickej sily pôsobiacej na pozorovaný systém. V našej výskumnej skupine sa zaoberáme vývojom metodológie stanovenia veľkosti tejto sily pôsobiacej na takzvaný mechanofor na základe zmeny jeho spektrochemických vlastností. V tejto práci sa venujeme syntéze nových makrocyclických látok, ktoré obsahujú tetrafenyletýlén ako centrálny fluorescenčný mechanofor. Na základe ab-initio výpočtov bol navrhnutý modelový makrocyclus a následne vyvinutá syntetická cesta umožňujúca jeho prípravu.



Nové syntetické využití β -ketoesterů pro přípravu trisubstituovaných alkenů

Bc. Petr Oeser (M1)

Školitel: doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Alkeny jsou důležitou skupinou sloučenin v organické chemii. Zejména konjugované dieny nacházejí široké uplatnění např. v materiálové chemii, organické syntéze a v nedávné době našly vysoce konjugované systémy uplatnění v elektrotechnice jako organické tranzistory. V návaznosti na usilovný vývoj nových postupů přípravy alkenů jsme v naší laboratoři vyvinuli zcela nové syntetické využití β -ketoesterů pro přípravu trisubstituovaných alkenů. Tato metoda využívá enolizace β -ketoesterů (1) a jejich převedení na enol-fosfáty (2). Reakcí enol-fosfátu (2) s organokovovými činidly vznikají trisubstituované alkeny (3). V příspěvku bude diskutován mechanismus reakce, vliv reakčních podmínek a derivatizace výchozího β -ketoesteru na vznik alkenů.

