

ÚSTAV ORGANICKÉ CHEMIE

STUDENTSKÁ VĚDECKÁ KONFERENCE 2017

Pondělí 20. 11. 2017

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 – 12:00	Jednání jednotlivých komisí
12:15 – 12:40	Společné vyhlášení výsledků v laboratoři A
12:40 – 13:20	Prezentace sponzorů v laboratoři A
13:30	Oběd se zástupci sponzorů v restauraci Cesta časem

Program jednotlivých sekcí:

Studenti magisterského programu:

Sekce:	Organická chemie M1 místnost A278c, 9:15 hod
Komise:	
Předseda:	prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.
Členové:	doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D. - organizační tajemník prof. Ing. Radek Cibulka, Ph.D. doc. Ing. Ladislav Cvak, CSc. (Teva) Ing. Eva Svobodová, Ph.D. Ing. Karel Křenek (Donaulab) Ing. Karel Zelinka (LZ Draslovka)

Soutěžící:	09:15	Heda Jakubův (5)
	09:30	Tereza Horáčková (4)
	09:45	Leoš Valenta (5)
	10:00	Eliška Fikejzlová (5)
	10:10	<i>přestávka</i>
	10:30	Lenka Krepsová (4)
	10:45	Jan Hanus (5)
	11:00	Marek Čubiňák (5)
	11:15	Lucie Mašková (4)

Sekce: **Organická chemie M2**
místnost A278e, 9:15 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. František Hampl, CSc.

Členové: Ing. Michal Himl, Ph.D. - organizační tajemník

prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

prof. Ing. Ivan Stibor, CSc. (TUL Liberec)

Ing. Petra Ménová, Ph.D.

Ing. Martin Křováček, Ph.D. (Katchem)

Ing. Jiří Vokál, Ph.D. (Lach-Ner)

Soutěžící:

09:15	Aneta Bednářová (5)
09:30	Michal Šmahel (5)
09:45	Václav Chmela (4)
10:00	Daniel Kortus (4)
10:15	<i>přestávka</i>
10:30	Antonín Edr (5)
10:45	Tereza Černá (4)
11:00	Kristýna Janků (5)
11:15	Victoria Tarus (5)
11:30	Hana Vachová (4)

Sekce: **Organická chemie M**
posluchárna A11, 9:15 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Členové: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D. - organizační tajemník

doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

prof. Ing. František Liška, CSc.

Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Ing. Jan Velík (CaymanPharma)

Ing. Hana Váňová (Apigenex)

Soutěžící:

09:15	Jessica Špačková (5)
09:30	Róbert Obertík (4)
09:45	Juraj Malinčík (5)
10:00	Anastasia Surina (4)
10:15	<i>přestávka</i>
10:30	Martin Kurfiřt (4)
10:45	Nikola Štěpánková (5)
11:00	Vojtěch Hamala (4)
11:15	Jana Hercíková (5)

Studenti bakalářského programu:

Sekce: **Organická chemie B1**
místnost A250, 9:15 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Členové: doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. - organizační tajemník

doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

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

Ing. Tomáš Jursík (Alchimica)

Soutěžící:

09:15	Jáchym Fibír (3)
09:30	Martin Zbuzek (3)
09:45	Jan Kulička (2)
10:00	Michal Bobek (3)
10:15	<i>přestávka</i>
10:30	Vojtěch Košťál (2)
10:45	Marek Jurtík (3)
11:00	Lukáš Lenz (3)
11:15	Petr Oeser (3)

Sekce: **Organická chemie B2**
laboratoř A (N08), 9:15 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Členové: Ing. Radek Jurok, Ph.D. - organizační tajemník

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

doc. Ing. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK)

Ing. Petra Cuřínová, Ph.D. (ÚCHP AV ČR)

Ing. Ivan Veselý, CSc. (CaymanPharma)

Ing. Kryštof Šigut (Santiago)

Soutěžící:

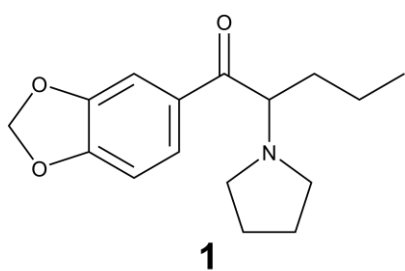
09:15	Ladislav Prener (2)
09:30	Ondřej Pleskač (3)
09:45	Tatiana Nemirovich (3)
10:00	Jakub Copko (3)
10:15	<i>přestávka</i>
10:30	Anežka Marková (1)
10:45	Markéta Bašusová (3)
11:00	Dominika Smržová (3)
11:15	Artem Chayka (3)
11:30	Filip Zavřel (3)

Syntéza metabolitů methylenedioxyprovaleronu

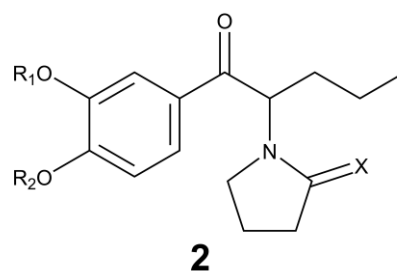
Bc. Heda Jakubův (M2)

Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

Methylenedioxyprovaleron (MDPV) 1 patří mezi psychostimulancia ze skupiny katinonů, což jsou nové syntetické drogy odvozené od katinonu, přirozeně se vyskytujícího alkaloidu v rostlině Kata jedlá (*Catha edulis*). MDPV se v těle složitě metabolizuje za vzniku celé řady metabolitů, jejichž struktura byla prokázána hmotnostní spektrometrií. Cílem práce byla příprava vybraných metabolitů 2, které byly dále použity jako standardy pro toxikologický screening.



1
MDPV



2
R₁, R₂ = CH₃, H R₁+R₂ = -CH₂-
X = -, O

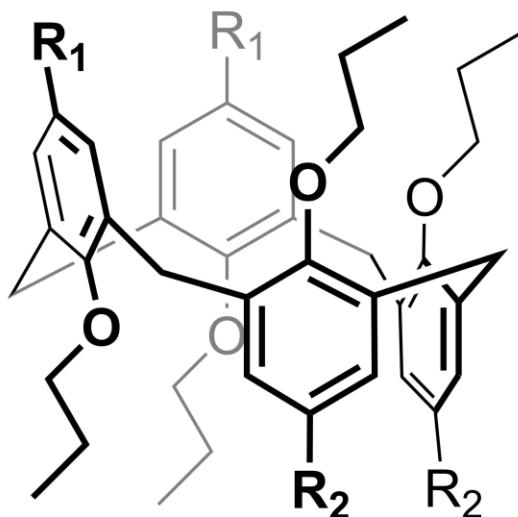
Reaktivita calix[4]arenu v 1,2-střídavé konformaci

Bc. Tereza Horáčková (M1)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Dosud nejméně prozkoumaným konformerem calix[4]arenu je 1,2-střídavý. Právě ten je oproti ostatním třem možným nejhůře dostupný a jeho reaktivita tak stále není v literatuře popsána. V rámci výzkumu jeho reaktivity byla provedena řada reakcí zaměřených na derivatizaci horního okraje (halogenace, nitrace, acylace,...). Při halogenaci bylo pozorováno neobvyklé chování tohoto derivátu. Například bromace, která na ostatních konformacích calix[4]arenu probíhá bez problémů, přináší v případě 1,2-střídavého atropoisomeru překvapivé výsledky. Bylo zjištěno, že za obvyklých podmínek bromace *para*-poloh calixarenového skeletu dochází také k halogenaci methylenových můstků a navázání více než čtyř atomů bromu na molekulu calixarenu. Požadovaný tetrasubstituovaný derivát byl tímto způsobem izolován pouze v 4% výtěžku, který se nicméně podařilo změnou reakčních podmínek optimalizovat až na 86 %.

V rámci této práce byla připravena řada nových tetra a disubstituovaných derivátů calix[4]arenu v 1,2-střídavé konformaci, které lze využít jako synthony pro další reakce a získat tak informace o reaktivitě posledního chybějícího konformeru.



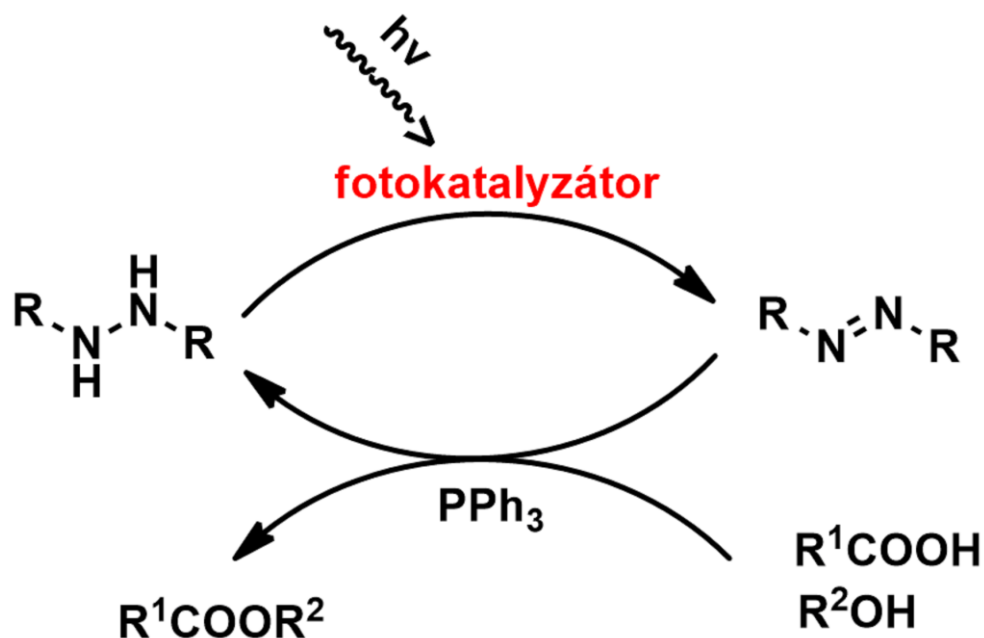
$R_1 = R_2$ nebo H

Fotooxidace derivátů hydrazinu jako princip katalytické Mitsunobuovy reakce

Bc. Leoš Valenta (M2)

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

Mitsunobuova reakce je velmi využívanou reakcí v oblasti organické syntézy. Její omezení tkví v nutnosti použití stechiometrického množství reagentu – azodikarboxylátu, který je jedovatý, nestabilní a potenciálně výbušný. Jako jedno z možných řešení se jeví *in-situ* generování azodikarboxylátu z příslušného stabilního hydrazindikarboxylátu, který je navíc vedlejším produktem reakce, takže v ideálním případě by stačilo jeho katalytické množství. Jednou z možností je tuto regeneraci provádět fotochemicky s využitím fotokatalyzátoru a viditelného světla. Cílem této práce je prozkoumat možné fotokatalyzátory pro oxidace různě substituovaných hydrazinů jako Mitsunobuových reagentů a potvrdit jejich použitelnost v katalytické Mitsunobuově reakci.

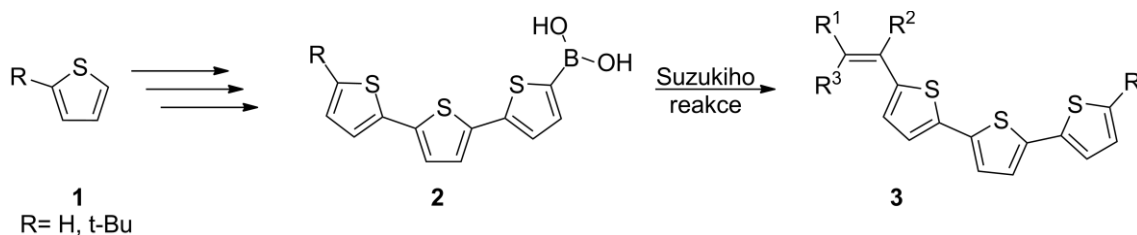


Příprava π -konjugovaných boronových kyselin na bázi terthiofenu pro syntézu potenciálních organických polovodičů

Bc. Eliška Fikejzlová (M2)

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

Tetrasubstituovaná dvojná vazba je motiv, který lze nalézt u látek s biologickou aktivitou nebo při návrhu nových organických materiálů s polovodivými vlastnostmi. V naší laboratoři jsme nedávno publikovali novou metodiku pro stereoselektivní syntézu tetrasubstituovaných alkenů, která využívá cross-coupling reakci dibromenol-fosfátů s boronovými kyselinami. V návaznosti na nedostatek postupů vhodných pro regio- a stereoselektivní syntézu tetrasubstituovaných alkenů s možnou aplikací v materiálové chemii organických polovodičů, jsem se ve své práci zaměřila na vypracování nové metodiky pro přípravu tetrasubstituované dvojně vazby (3) nesoucí π -konjugovaný řetězec. Pro syntetickou studii byla připravena boronová kyselina (2) odvozená od terthiofenu a dále byla studována její reaktivita s dibromenol-fosfátem za podmínek Suzukiho reakce. Získané výsledky během přípravy modelové kyseliny (2) a pokusy o stereoselektivní přípravu alkenů (3) budou diskutovány během prezentace.

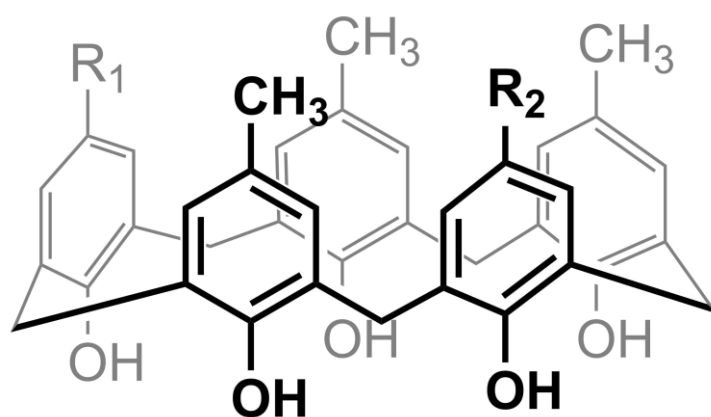


Postupná syntéza calix[5]arenů

Bc. Lenka Krepsová (M1)

Školitel: Ing. Ondřej Kandrát, Ph.D.

Calix[5]areny se řadí mezi tzv. vyšší calixareny a díky větším rozměrům kavity umožňují interakce s většími molekulami (např. fullerenem C_{60}) a ionty. Pro jejich přípravu není používána jednokroková syntéza, která představuje nejjednodušší způsob syntézy calixarenů se sudým počtem fenolických jader, ale postupná konvergentní syntéza, kdy dochází ke kondenzaci předem připravených fragmentů nesoucích substituenty vhodné pro další syntézy. Cílem mé práce je příprava calix[5]arenů pomocí této fragmentové kondenzace a následná modifikace horního okraje za vzniku látek vhodných pro komplexaci fullerenů.



Syntéza axiálně chirálních derivátů bifenyly

Bc. Jan Hanus (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

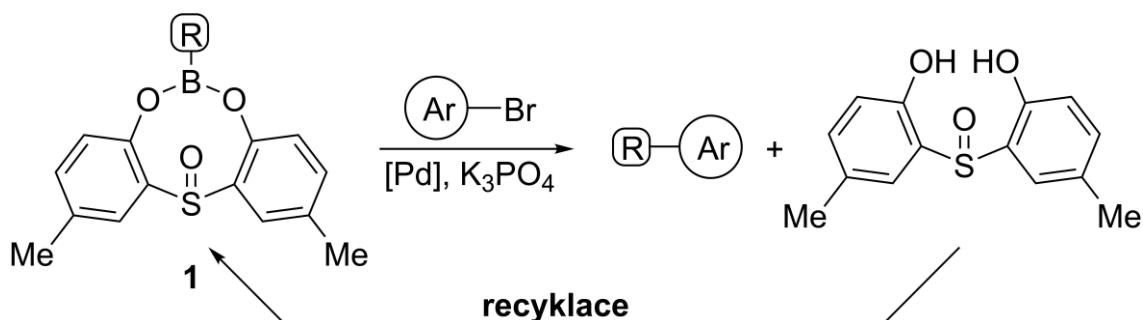
Axiálně chirální sloučeniny jsou v moderní organické syntéze využívány pro katalýzu enantioselektivních reakcí. Cílem projektu je příprava chirálních anorganicko-organických hybridních materiálů na bázi silseskvioxanů. Tyto materiály by měly sloužit jako heterogenní katalyzátory s velkou porézností a povrchem. Výhoda těchto materiálů spočívá v jejich jednoduché separaci z reakční směsi, jejich opakovatelnému využití či využití v kontinuálních procesech. Organickými stavebními jednotkami byly zvoleny deriváty 6,6'-dimethyl-1,1'-bifenylyl-2,2'-diolu, které obsahují v polohách 5 a 5' vhodné funkční skupiny pro připojení do křemičité sítě. Práce se věnuje syntéze 5,5'-dibrom-6,6'-dimethyl-1,1'-bifenylyl-2,2'-diolu a jeho dalšímu syntetickému využití pro přípravu zvolených stavebních bloků.

Nové boronáty odvozené od sulfoxidů: Příprava a reaktivita v Suzukiho cross-couplingu

Bc. Marek Čubiňák (M2)

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

Boronové kyseliny tvoří důležitou skupinu organokovových sloučenin, které umožňují tvorbu C–C vazby pomocí Suzukiho reakce. Přestože mají boronové kyseliny spoustu výhod, podléhají dehydrataci za tvorby boroximů, které se snadno oxidují za vzniku fenolu a kyseliny borité. Klíčovým krokem ke zvýšení stability boronových kyselin je jejich derivatizace na příslušné trifluorboráty nebo estery (boronáty). Známé jsou například estery odvozené od pinakolu, neopentyl glykolu nebo *N*-methyliminodiolctové kyseliny (MIDA). V poslední době je intenzivně studována reaktivita a vlastnosti MIDA boronátů, které se vyznačují vysokou stabilitou z důvodu silné donor – akceptorové vazby mezi borem a volným elektronovým párem atomu dusíku. I přes značný rozvoj v oblasti přípravy nových typů boronátů nebyla doposud publikována příprava stabilních esterů boronových kyselin odvozených od sirných diolů. Proto jsme vyvinuli novou metodiku na přípravu stabilních boronátů (1) obsahující fenolický sulfoxid. V prezentaci budou diskutovány výsledky získané při přípravě boronátů (1), jejich vlastnosti a případné využití v Suzukiho reakci.

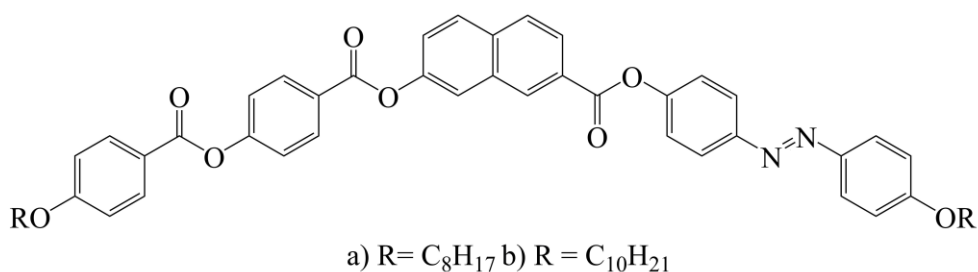


Syntéza lomených kapalných krystalů s fotosensitivní spojovací skupinou

Bc. Lucie Mašková (M1)

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

Kapalné krystaly jsou látky, které nacházejí uplatnění v širokém spektru aplikací od výroby LC displejů až po systémy pro uvolňování léčiv, a proto jsou objektem zájmu také naší pracovní skupiny. Ve své práci jsem se zabývala syntézou nových lomených kapalných krystalů na bázi 7-hydroxynaftalen-2-karboxylové kyseliny, kde je jedna z esterových spojek v postranním řetězci nahrazena fotosensitivní azospojkou. Cílem práce je příprava těchto látek, stanovení jejich mezomorfního chování pomocí diferenční skenovací kalorimetrie a polarizační mikroskopie a následné zhodnocení vlivu záměny esterové spojky za azospojku na typ vznikající mesofáze. Dalším cílem je pak prověření schopnosti těchto sloučenin přepínat jednotlivé fáze za použití UV světla.



Příprava cysteinových a histidinových aduktů pro výzkum aduktů cizorodých látek s krevními proteiny

Bc. Aneta Bednářová (M2)

Školitel: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

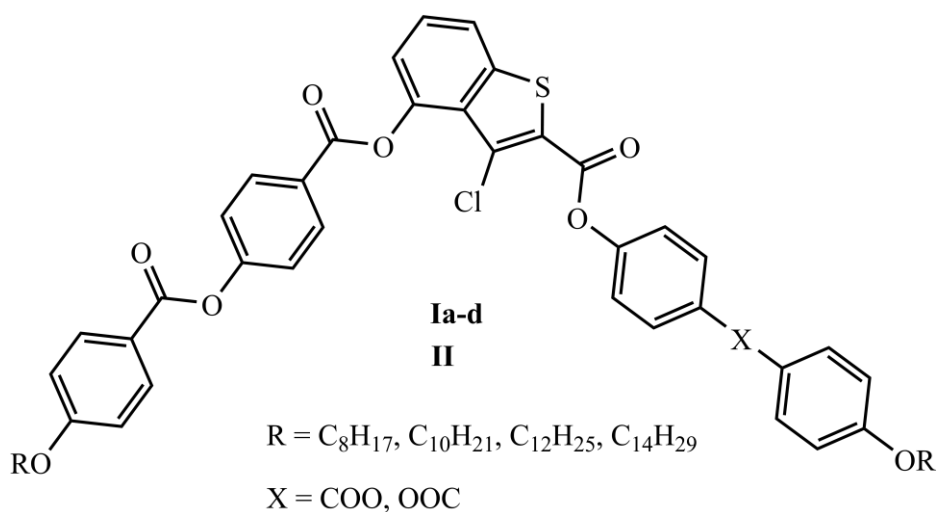
Sulfanylové skupiny cysteinu a aminoskupiny koncových a dibazických aminokyselin představují významná nukleofilní centra v proteinech, na kterých dochází k vazbě elektrofilních látek. Elektrofily mají schopnost vázat se nejen na proteiny, ale i na biologicky významné makromolekuly jako DNA. Proteinové adukty mohou tedy sloužit jako nepřímé indikátory poškození DNA. V rámci své práce jsem připravila cysteinové adukty se styren-7,8-oxidem, který je aktivním metabolitem průmyslově využívaného styrenu. Doposud se mi podařilo optimalizovat syntézu a připravit dva diastereomerně čisté adukty (1,2) a jeden adukt jako směs dvou diastereomerů (3) s využitím *N*-chráněného cysteinu. Dále pracuji na optimalizaci syntézy histidinových aduktů s 2-bromethanolem (4,5), který je používán jako syntetický ekvivalent průmyslově využívaného ethylenoxidu. U této syntézy hodnotím výhodu použití různých chránících skupin pro aminoskupinu histidinu.

Syntéza 2,4- disubstituovaných derivátů benzothiofenu

Bc. Michal Šmahel (M2)

Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

V rámci uceleného výzkumu kapalně-krytalických materiálů s benzothiofenovým jádrem, který probíhá v naší laboratoři, bylo mým úkolem připravit sérii nových potenciálních mesogenů lomeného tvaru odvozených od 3-chlor-4-hydroxybenzo[*b*]thiofen-2-karboxylové kyseliny. Byla vypracována syntéza centrálního jádra a selektivní chránění hydroxylové skupiny 2,3,4-trisubstituovaného benzo[*b*]thiofenového derivátu. Následně bylo připraveno 5 cílových látek Ia-d a II lišících se délkou terminálních řetězců (C_8H_{17} , $C_{10}H_{21}$, $C_{12}H_{25}$, $C_{14}H_{29}$), popřípadě orientací esterové spojky u derivátu II mezi benzenovými jádry.



Totální syntéza fumichinazolinu F a G, ardeeminu a jeho analogu

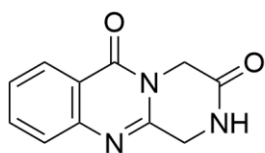
Bc. Václav Chmela (M1)

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

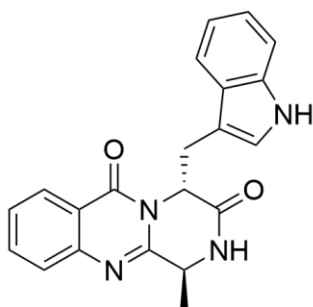
Deriváty chinazolinu patří do rostoucí skupiny alkaloidů, která vykazuje různou biologickou aktivitu.¹ Níže zmínění zástupci jsou biosyntetizováni z anthranilové kyseliny se začleněním dalších jednotek aminokyselin. Zástupci této skupiny snižují mnohočetnou lékovou rezistenci (anti-MDR), vykazují cytotoxické a antivirotické účinky, a proto potřebujeme praktické metody, které umožní syntézu těchto alkaloidů a jejich derivátů.

Níže popisuji metodu vedoucí k derivátům chinazolinu, která využívá silikagelem zprostředkovanou dvojitou kondenzaci. Tato metoda byla úspěšně aplikována na totální syntézu gyantrypinu (3 kroky), fumichinazolinu F a G (3 kroky) a ardeeminu (4 kroky).

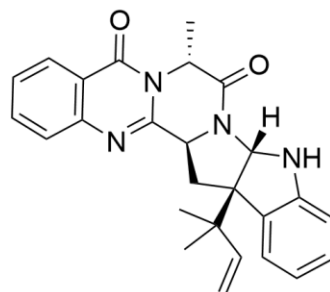
[1] Kshirsagar, U. A. *Org. Biomol. Chem.* 2015, 13, 9336-9352.



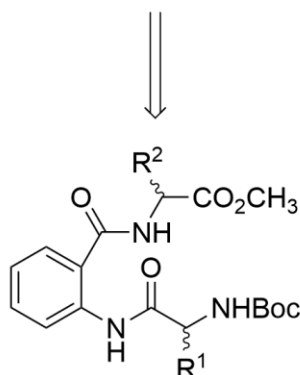
Gyantrypine



Fumiquinazoline F



Ardeemin

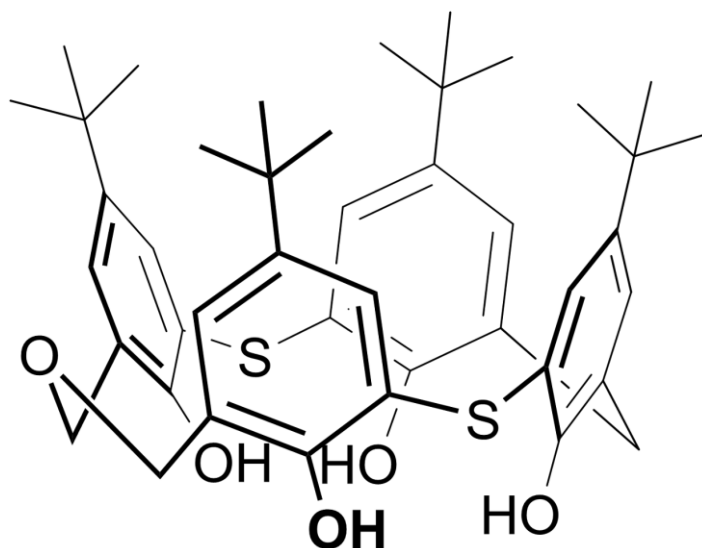


Syntéza a alkylace calixarenů se smíšenými můstky

Bc. Daniel Kortus (M1)

Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Calixareny se smíšenými můstkovými skupinami jsou strukturní kombinací klasických calixarenů, thiacalixarenů a homooxalixarenů. Tyto exotické sloučeniny jsou na poli supramolekulární chemie neprozkoumaným územím, je však zřejmé, že záměny methylenových můstků mají razantní dopad na vlastnosti celého makrocyclu – od velikosti kavity přes flexibilitu a komplexační vlastnosti až po reaktivitu. Cílem mé práce je syntéza a derivatizace takovýchto smíšených calixarenů, určení jejich struktury a studium konformačního chování.

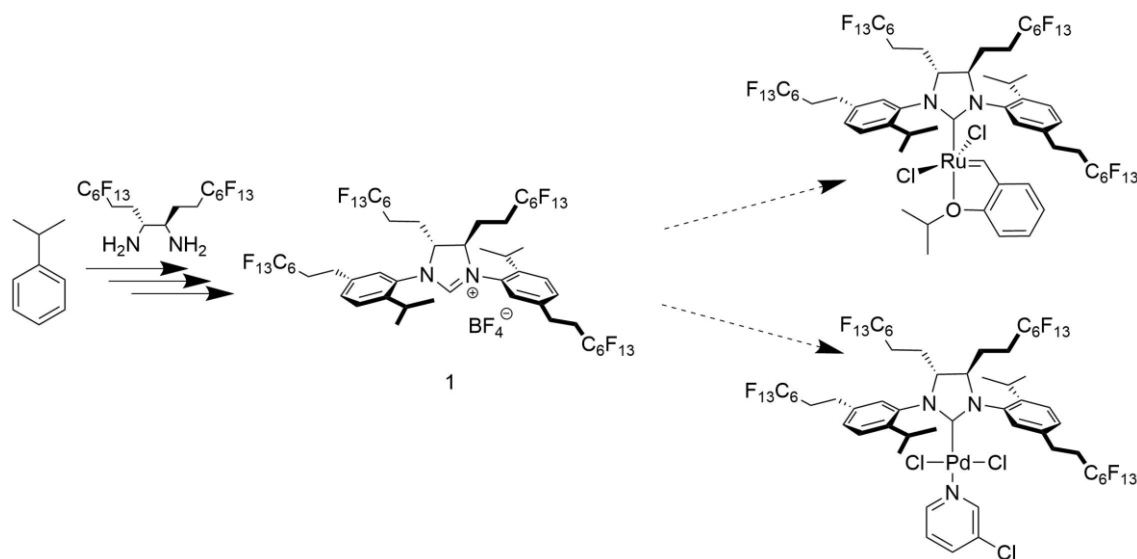


Chirální polyfluorované NHC ligandy

Bc. Antonín Edr (M2)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Komplexy ruthenia, jako je Hoveyduv-Grubbsův prekatalyzátor II. generace, nebo komplexy palladia, jako je PEPPSI, jsou často používány v organické syntéze jako prekatalyzátory metatezí nebo cross-couplingů. Přestože jsou tyto prekatalyzátory finančně nákladné a toxické, běžně nejsou z reakčních směsí recyklovány. Analoga těchto komplexů nesoucí dostatečně fluorofilní NHC ligandy by mohla být rychle recyklovatelná za využití fluorových separačních metod. Cílem mé práce byla příprava dihydroimidazoliové soli 1, která je prekurzorem polyfluorovaného NHC ligandu, který by navíc mohl být vzhledem ke své chiralitě využit pro enantioselektivní varianty výše uvedených reakcí. Při syntéze soli 1 jsem s výhodou využil novou fluorovou separační metodu, která využívá ekologická a dostupná polyfluorovaná rozpouštědla.



Syntéza lomených kapalných krystalů na bázi 7-hydroxynaftalen-2-karboxylové kyseliny

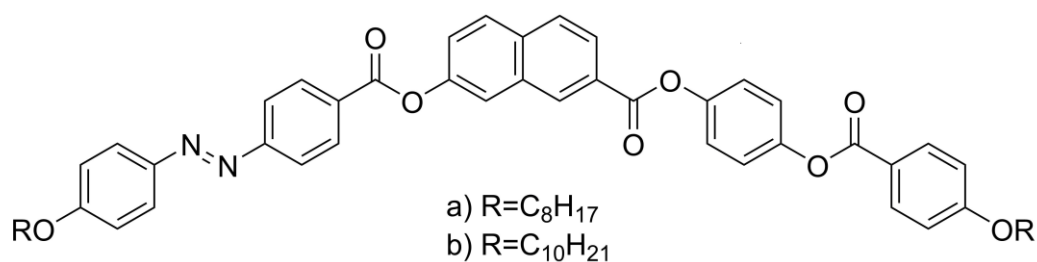
Bc. Tereza Černá (M1)

Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

Pojem „kapalný krystal“ představuje unikátní stav hmoty, jejíž vlastnosti se nacházejí někde mezi tuhou a kapalnou fází. Díky schopnosti reagovat na změny vnějších podmínek našly tyto látky uplatnění v širokém spektru aplikací jako jsou výroba LCD, řízené uvolňování léčiva v organismu nebo lokace zánětlivých a nádorových ložisek.

Tato práce se zabývá syntézou nových lomených kapalných krystalů na bázi 7-hydroxynaftalen-2-karboxylové kyseliny a studiemi jejich mesomorfních vlastností. Připravila jsem molekuly s jedním postranním ramenem obsahujícím inverzní esterovou spojku a s druhým obsahujícím dvě benzenová jádra spojená fotosenzitivní azoskupinou.

U připravených látek bylo stanoveno pomocí DSC a polarizační mikroskopie jejich mesomorfní chování a následně budeme studovat možnost přepínání jednotlivých fází pomocí UV záření.

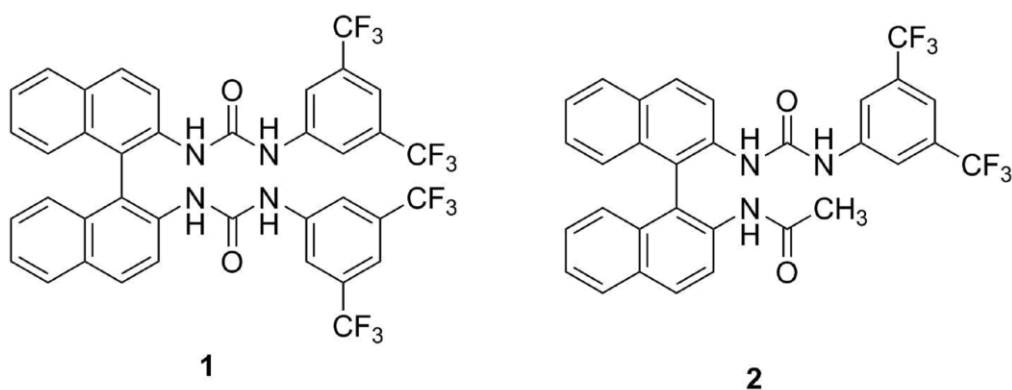


Nesymetrické deriváty binaftalendiaminu pro enantioselektivní interakce

Bc. Kristýna Janků (M2)

Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Je známo, že močovinové deriváty 1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu interagují s chirálními molekulami pomocí vodíkových vazeb. Tato interakce může být sledována měřením ^1H NMR spekter, ve kterých může dojít k rozštěpení signálů obou enantiomerů. Díky tomu mohou být tyto látky využity při stanovení enantiomerního přebytku u mnoha léčiv, katalyzátorů a dalších důležitých látek. Schopnost komplexace sloučeniny 1 byla sledována u 1-fenylethanolu. U obou enantiomerů alkoholu byl po přidání sloučeniny 1 pozorován posun signálů oproti jejich původní pozici. Tento výsledek naznačuje, že sloučenina 1 tvoří komplex s oběma enantiomery, což bylo potvrzeno vypočtenými komplexačními hodnotami, které dosahovaly podobné hodnoty. Selektivní interakce bylo dosaženo se sloučeninou 2. Komplexační konstanty prokázaly, že (*S*)- enantiomer 1-fenylethanolu je vázán mnohem silněji než (*R*)- enantiomer. Sloučenina 2 může být výchozím bodem pro syntézu obdobných struktur pro enantioselektivní interakce.

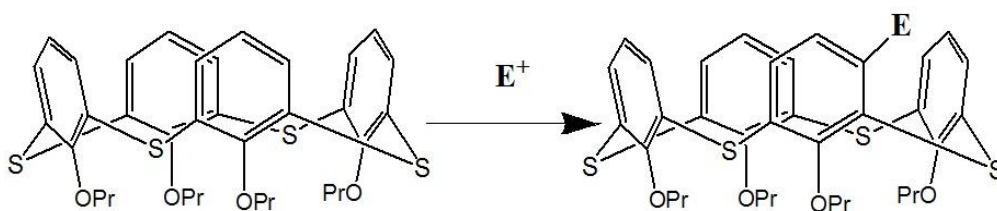


Meta-substituce v thiacalix[4]arenové řadě

Bc. Victoria Tarus (M2)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Během posledních několika let se problematika *meta*-substitucí na thiacalixarenech stává atraktivním předmětem zkoumání naší vědecké skupiny. Nedávno se objevilo několik publikací úspěšných *meta*-substitucí derivátů thiacalix[4]arenů, imobilizovaných v různých konformacích (*konická* a *1,3-střídává* konformace), a to i bez direktivních vlivů jiných substituentů na stejném aromatickém jádře. V průběhu mého výzkumu byla objevena unikátní regioselektivita při *ortho*-lithiační reakci, která dosud nebyla v literatuře popsána. *Ortho*-lithiace umožňuje jednokrokové zavedení různých derivátů do *meta*-polohy thiacalixarenu a tím otevírá široké možnosti využití těchto thiacalixarenů, například jako inherentně chirální receptory.



Príprava derivátov aminokyselín pre toxikologický výzkum proteínových aduktov

Bc. Hana Vachová (M1)

Školiteľ: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

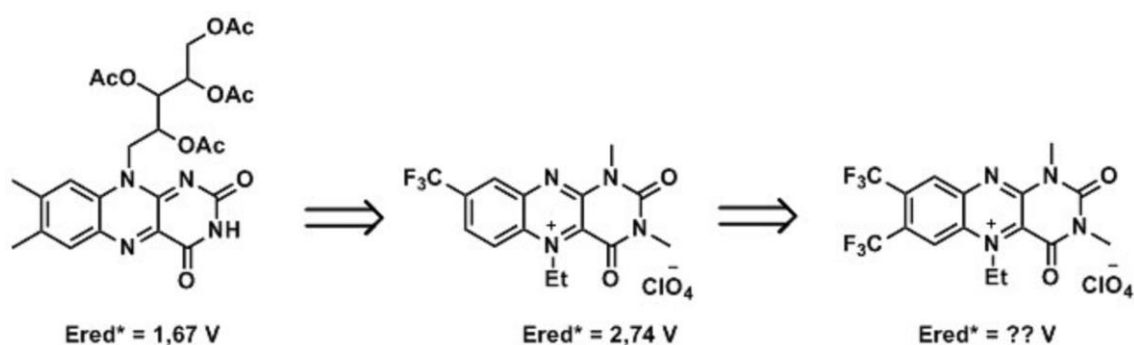
Mnohé elektrofilné látky sú schopné reagovať s nukleofilnými reakčnými centrami v proteínoch a tvoriť tak proteínové adukty. Medzi takéto elektrofilné látky patrí aj akrylamid – karcinogénny a mutagénny priemyslový monomér a arylnitreniové ióny, ktoré vznikajú metabolickou aktiváciou nitroaromátov a aromatických amínov. Cieľom tejto práce bolo pripraviť lyzínové deriváty odvodené od akrylamidu a cysteínové deriváty odvodené od 1-aminonaftalénu. 4-Aminonaftylcysteín a príslušná merkapturová kyselina boli pripravené reakciou 1-brom-4-nitronaftalénu s metylesterom *N*-*tert*-butyloxykarbonylcysteínu resp. *N*-acetylcysteínu, následnou redukciou nitroskupiny a odstránením chrániacich skupín. Lyzínové adukty, *N*_ε-(2-karbamoyletyl)lyzín, *N*_α-acetyl-*N*_ε-(2-karbamoyletyl)lyzín a *N*_α-acetyl-*N*_ε-di-(2-karbamoyletyl)lyzín boli získané priamou reakciou *N*_α-acetyllyzínu s akrylamidom. *N*_α-acetyl-*N*_ε-(2-karbamoyletyl)lyzín bol izolovaný pomocou semipreparatívnej HPLC. Pripravené adukty nachádzajú využitie ako analytické štandardy pre štúdium tvorby a odbúravania proteínových aduktov a v biologickom monitorovaní expozície uvedených xenobiotík.

Elektronově deficitní flaviniové soli s trifluormethylovou skupinou

Bc. Jessica Špačková (M2)

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

Kvarternizací derivátů alloxazinu či isoalloxazinu vznikají flaviniové soli, které se jako organokatalyzátory využívají v řadě redoxních reakcí. Zcela novým konceptem je však jejich použití také ve fotokatalýze, kdy se po excitaci viditelným světlem zvýší jejich redoxní potenciál a figurují tak jako silná oxidační činidla. Aktivitu alloxaziniových solí lze dále ještě navýšit zavedením elektron-akceptorních skupin na aromatické jádro. Ve své práci se zabývám syntézou flaviniových solí s trifluormethylovou skupinou a studiem jejich fotokatalytické aktivity při oxidačních reakcích.

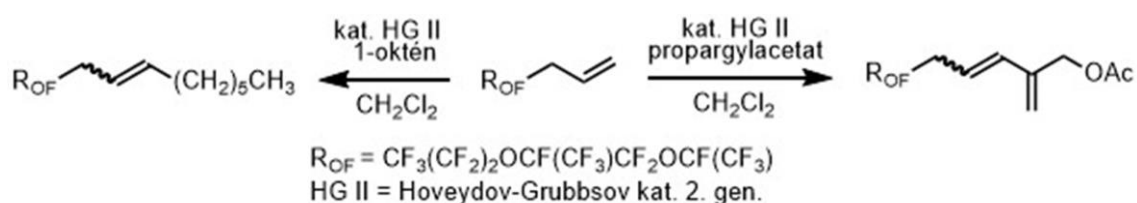


Metatéza nenasýtených polyfluórpolyéterov

Bc. Róbert Obertík (M1)

Školiteľ: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Vo svojej práci som sa venoval príprave polyfluorovaných alkénov obsahujúcich nefluorovanú vinylovú skupinu a polyfluoropolyéterový reťazec, ktorých som následne využil pre skrížené alkénové a enýnové metatézy. Terminálne polyfluoropolyoxaalkény som získal transformáciou polyfluoropolyoxajód derivátov pomocou radikálových adícií a následnou elimináciou. Skríženou alkénovou metatézou polyfluorovaného propénu s 1-okténom vznikla dibloková zlúčenina s potenciálnym využitím vo farmácii. Skríženou enýnovou metatézou je možné získať konjugovaný dién ako potencionálne nový typ monoméru. Pre získanie dostatočne vysokého výťažku bolo nutné použiť veľký prebytok fluorovanej komponenty a upraviť reakčnú dobu. Tak tiež som študoval vplyv štruktúry nefluorovanej komponenty metatézy a zvoleného katalyzátoru (Grubbsov kat. 2. generácie a Hoveyda-Grubbsov kat. 2. generácie).



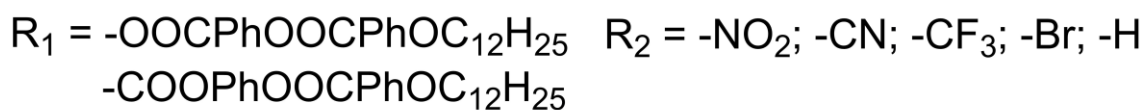
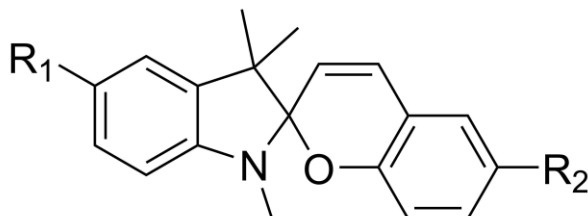
Spiropyrány ako fotoprepínače v materiálovej chémii

Bc. Juraj Malinčík (M2)

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

Modifikácia materiálov fotoprepínačom otvára dvere novým aplikáciám. V oblasti kvapalných kryštálov je to predovšetkým potenciálna aplikácia ako optické dátové úložisko. V prípade, že je na kvapalný kryštál modifikovaný fotoprepínačom posvietené svetlom o vhodnej vlnovej dĺžke, dôjde k štruktúrnej zmene, čo môže zapríčiniť reorganizáciu molekúl a s tým spojený fázový prechod. Fotoprepínačom sa dá modifikovať aj silikagél, ktorý potom môžeme použiť ako stacionárnu fázu pre kvapalinovú alebo plynovú chromatografiu. Zmenou štruktúry fotoprepínača sa dramaticky menia separačné vlastnosti silikagélu, ktoré môžeme reverzibilne meniť aj počas samotnej separácie. Vhodným fotoprepínačom pre tieto aplikácie je 1',3',3'-trimetylspiro[chromén-2,2'-indolín], ktorý sa obvykle nazýva spiropyrán. Táto látka a jej deriváty sa dajú svetlom o vlnovej dĺžke v ultrafialovej oblasti reverzibilne prepnúť na zwitterionické merocyanínové farbivo. Pre spätnú reakciu postačuje viditeľné svetlo alebo zvýšenie teploty. Substitúcia chroménového kruhu značne ovplyvňuje fotochemické vlastnosti systému.

Navrhli sme preto sériu kvapalné kryštalických látok obsahujúcich spiropyrán s rôznymi substituentami chroménového kruhu a niekoľko spiropyránových modifikácií stacionárnych fáz.

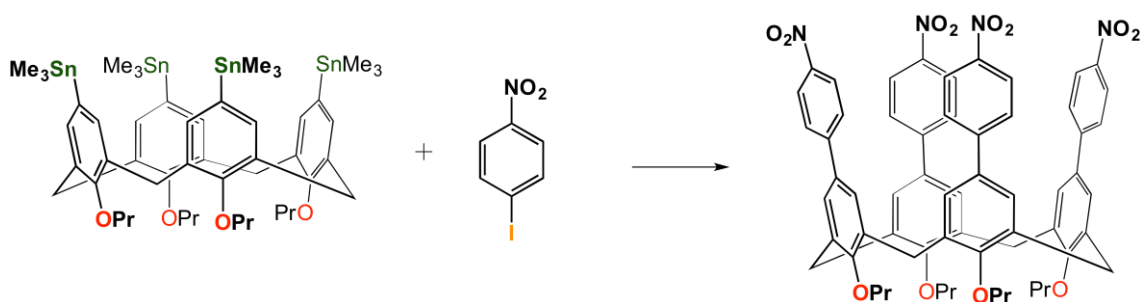


Cross-coupling reakce v chemii calixarenů

Bc. Anastasia Surina (M1)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Použití *cross-coupling* reakcí v calixarenové chemii výrazně obohatí možnosti modifikace základního skeletu těchto makrocyclických látek. Cílem této práce připravit stabilní substráty na bázi calixarenů pro provedení různých typů *cross-coupling* reakcí. Byly připraveny organocíníčitě deriváty calix[4]arenu v *kónické* a *1,3-střídavé* konformaci, na kterých byly dále vyzkoušeny *cross-coupling* reakce Stilleho typu s různě substituovanými halogenderiváty benzenu. Podařilo se připravit několik nových látek, které by mohly být dále využity k tvorbě složitějších receptorů a následně k vytváření struktur typu MOF.



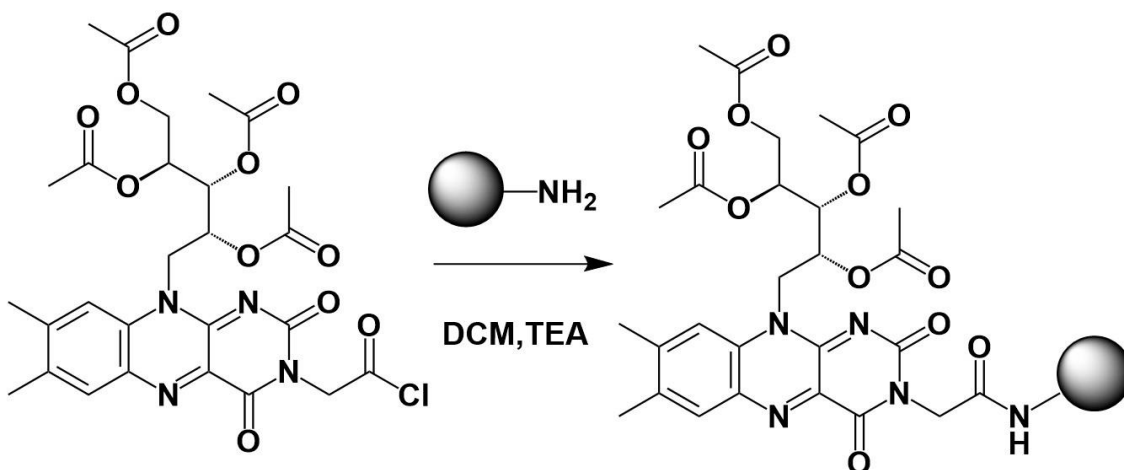
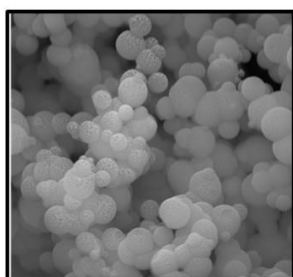
Nový heterogenní fotokatalytický systém založený na tetraacetyl-riboflavinu a viditelném světle

Bc. Martin Kurfiřt (M1)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Tetraacetyl-riboflavin (TARF) je typickým zástupcem flavinů, je velmi dobře známý ve fotokatalýze. Po ozáření viditelným světlem je excitován a stává se silnějším oxidačním činidlem. V tomto stavu je schopen katalyzovat reakce jako jsou sulfoxidace, oxidace benzylových alkoholů či esterifikace Mitsunobuova typu. Tyto reakce jsou prováděny za mírných podmínek a mohou využívat kyslík jako stechiometrické oxidační činidlo. Produkt musí být následně od zbytků katalyzátoru, či produktů jeho rozkladu separován sloupcovou chromatografií, což použití těchto reakcí omezuje na laboratorní měřítko. Tento problém je možno řešit imobilizací TARF na vhodný pevný nosič, který umožní separovat produkt reakce od katalyzátoru pouhou filtrací. Pro tento účel byl zvolen křemičitý mezoporezní materiál MCM-41, který je pro svoji stabilitu, transparentnost, jednoduchou přípravu a funkcionalizaci ideálním kandidátem. TARF byl na materiál připojen pomocí amidové vazby. Katalytická účinnost takto vytvořeného heterogenního katalyzátoru byla otestována na modelových sulfoxidacích, oxidacích benzylalkoholů a esterifikacích Mitsunobuova typu.

MCM-41 (SEM)

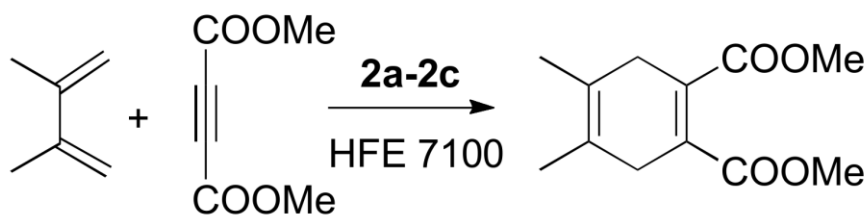
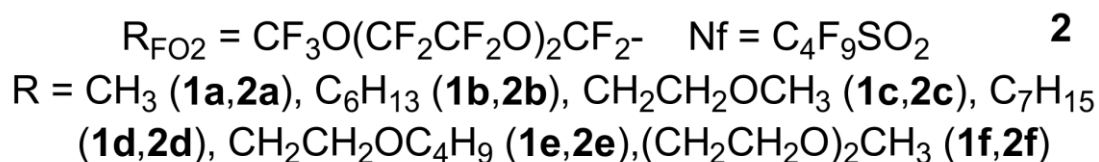
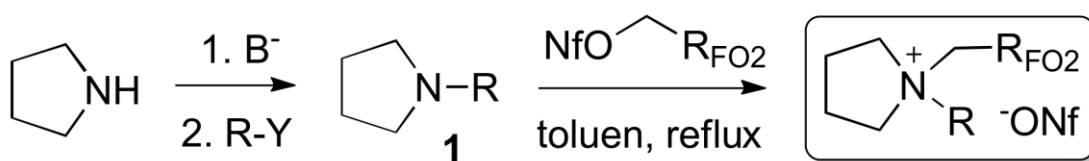


Fluorované iontové kapaliny s pyrrolidiniovým jádrem

Bc. Nikola Štěpánková (M2)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Ve své práci se zabývám syntézou nových fluorovaných iontových kapalin, které se vyznačují hydrofobními a fluorofilními vlastnostmi. Fluorofilní látky jsou dobře rozpustné v perfluorovaných rozpouštědlech a je možné je recyklovat fluorovými separačními metodami. Alkylací pyrrolidinu a následnou kvarternizací polyfluorpolyoxaalkyl-nonaflátem jsem získala sérii fluorovaných pyrrolidiniových solí **2a – 2f**. Vzniklé soli jsou dobře rozpustné v hydrofluoretherech HFE 7100 a 7500. Jejich účinnost jako korozpouštědla a chemickou stabilitu jsem testovala v modelové Dielsově-Alderově reakci. Dále jsem studovala jejich elektrochemickou stabilitu pro potenciální aplikace v elektrochemii.



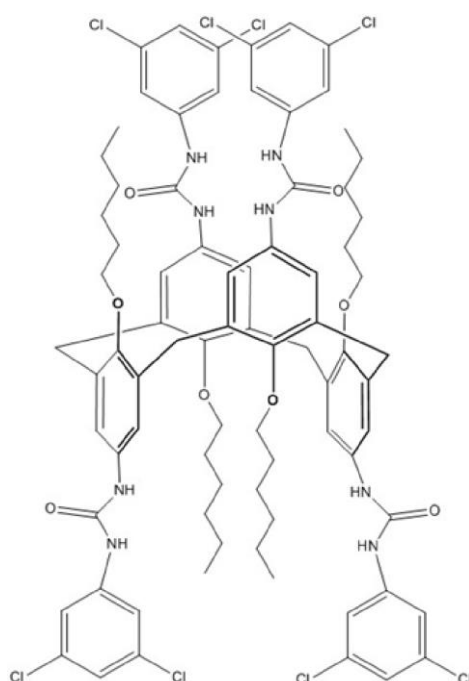
1,3-Střídavé ureidoderiváty calixarenu: syntéza a komplexační vlastnosti

Bc. Vojtěch Hamala (M1)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Calix[n]areny jsou makrocyclické sloučeniny, které mohou být použity jako molekulární lešení v supramolekulárních strukturách. Calix[4]areny se vyskytují ve 4 různých konformacích, předmětem této práce je *1,3-střídavý* isomer. Převodem calix[4]arenu na *p*-aminoderiváty a adicí na různě substituované fenylosokyanáty lze připravit *p*-ureidocalixareny, které jsou vhodnými receptory pro anionty.

Cílem této práce je příprava *1,3-střídavých* ureido-receptorů z *p*-*terc*-butylcalix[4]arenu. Problémem *1,3-střídavých* konformerů bývá často nízká rozpustnost v organických rozpouštědlech. Z tohoto důvodu byly k substituci na atomech kyslíku využity hexylové skupiny. Komplexační vlastnosti připravených receptorů vůči vybraným organickým i anorganickým aniontům budou zkoumány pomocí ¹H NMR titrací.



Syntéza nových chirálních stacionárních fází pro HPLC

Bc. Jana Herciková (M2)

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

Vysokotlaká kapalinová chromatografie (HPLC) je v dnešní době jedna z nejdůležitějších separačních metod pro určení optické čistoty léčiv. Díky různým chirálním stacionárním fázím je možné separovat nejrozumnější racemické látky často však s výjimkou látek vysoce polárních. Chirální katexy syntetizované v této práci jsou mimořádně vhodné právě pro enantioseparaci ionizovaných či ionizovatelných látek především pak chirálních aminů.

Syntéza nových stacionárních fází vycházela z 6-hydroxynaftalen-2-karboxylové kyseliny, která byla sekvencí reakcí převedena na odpovídající amidy, které byly následně různými způsoby imobilizovány na silikagel. Připravené chirální stacionární fáze byly naplněny do analytických HPLC kolon (150x4 mm) a otestovány na enantioseparaci 25 racemátů bazických léčiv.

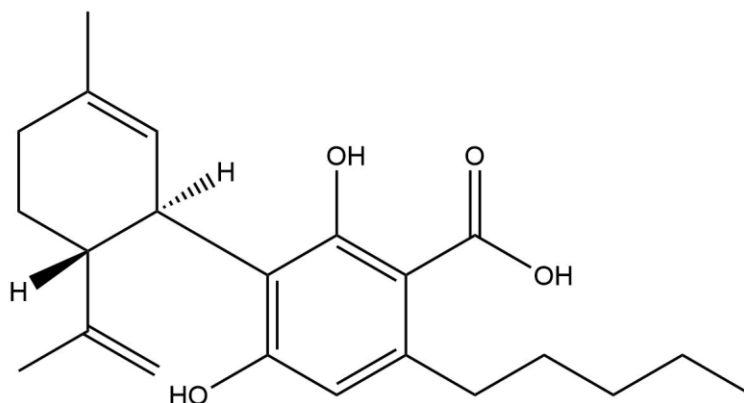
Izolace a derivatizace kanabidiolové kyseliny

Jáchym Fibír (B3)

Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

Práce se zabývá účinnými látkami obsaženými v rostlinách rodu konopí (*Cannabis*) – tzv. fytokanabinoidy – konkrétně kyselinou kanabidiolovou (CBDA). Ta působí mimo endokanabinoidní systém také jako významné topické antibiotikum. Přesný mechanismus tohoto antibakteriálního účinku však není znám. Pro jeho lepší pochopení je látka izolována a její struktura je obměňována, přičemž nové deriváty této látky (zejména estery této kyseliny) jsou dále posílány na testování antibakteriální aktivity na běžných bakteriálních kulturách.

Klíčová slova: kanabinoidy, kyselina kanabidiolová, CBDA, antibakteriální aktivita

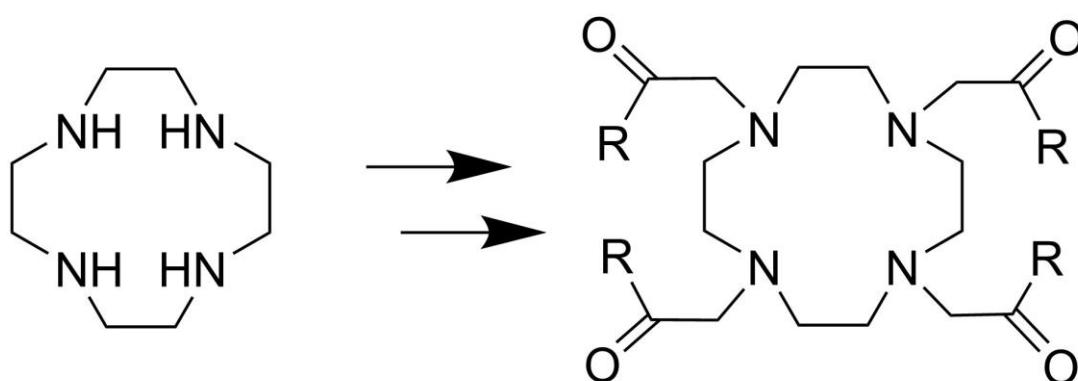


Příprava ligandů odvozených od cyklenu

Martin Zbuzek (B3)

Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Cyklen a jeho deriváty se v praxi využívají v medicíně, např. jeho nejznámější ligand DOTA se v komplexu s Gd^{3+} kationtem využívá jako kontrastní látka při lokalizaci nádorů pomocí magnetické rezonance. První část mé práce je zaměřena na syntézy di a tripeptidů, ve kterých budou zastoupeny aminokyseliny o různých vlastnostech - polární, nepolární, bazické i kyselé. Za použití chloracetylchloridu budou tyto peptidy následně využity jako alkylační činidla v reakcích s cyklenem, kde proběhne substituce na atomech dusíku. Ve spolupráci se specializovanou laboratoří bude ověřena schopnost interakce připravených ligandů cyklenu s C4-symetrickými receptory, např. draselným kanálem Kv1.3.

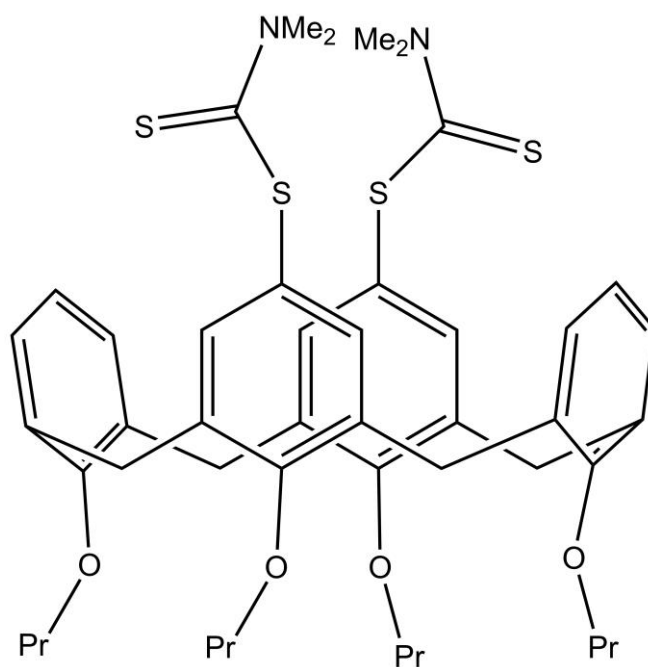


Sulfanylderiváty calix[4]arenu

Jan Kulička (B2)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Calixareny, které mají bohatou historii výzkumu v naší skupině, jsou typické mj. tím, že je lze stabilizovat v jednotlivých konformacích pomocí vhodné substituce spodního okraje. Přípravené atropoisomery mohou být využity jako molekulární lešení pro výstavbu různých receptorů o rozdílné flexibilitě skeletu. Jedním z vhodných precursorů pro další syntézy mohou být p-sulfanylderiváty. Cílem práce byla příprava těchto derivátů z běžně dostupných p-bromcalix[4]arenů za použití tetramethylthiuramdisulfidu a následné redukce nebo alkalické hydrolýzy vzniklých dithiokarbamátů. Provedené pokusy o syntézu prvního z nich, kónického 25,26,27,28-tetrapropoxy-5,17-disulfanylcalix[4]arenu, jsou v práci diskutovány.

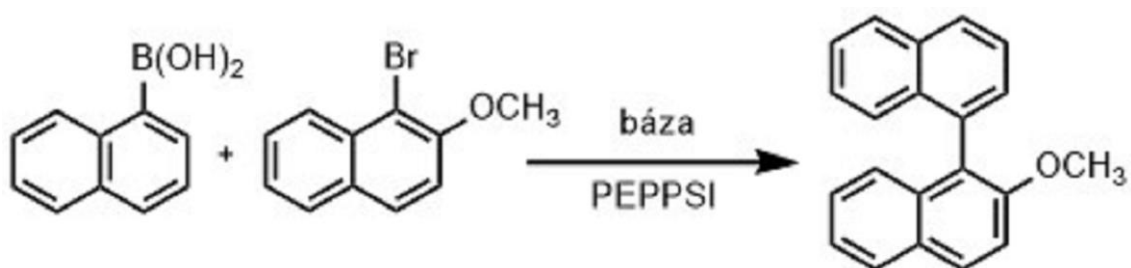


Suzukiho-Miyaurov cross-coupling derivátov naftalénu

Michal Bobek (B3)

Školiteľ: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Suzukiho-Miyaurov cross-coupling je všeobecne známa a využívaná reakcia v organickej syntéze. Časť nášho laboratória sa zaoberá práve prípravou katalyzátoru, ktorý by umožňoval enantioselektívny priebeh couplingu. Náplňou mojej práce bola optimalizácia reakčných podmienok Suzukiho couplingu naftylboronovej kyseliny a 1-halogén naftalénu za katalýzy komplexom PEPPSI, ktorý je na vzduchu stály a preto je s ním veľmi dobrá manipulácia. Práve použitím týchto substrátov je možné sledovať axiálnu chiralitu vznikajúceho binaftylového derivátu, a tým tak hodnotiť stereoselektivitu enantioselektívnych palládiových katalyzátorov. Študoval som vplyv rôznych báz, množstvo katalyzátora, použitie trifluorborátu ako alternatívy k boronovej kyseline, ale aj pridanie Hg do reakčnej zmesi. Práve ortuť je zaujímavá tým, že dokáže eliminovať elementárne palladium, ktoré vzniká rozkladom katalyzátoru v priebehu reakcie. Vzniknuté nanopalladium môže predstavovať problém práve pri testovaní enantioselektívnych katalyzátorov. Síce je katalyticky aktívne, no nie je stereoselektívne a skresľuje tak výsledky pokusu.



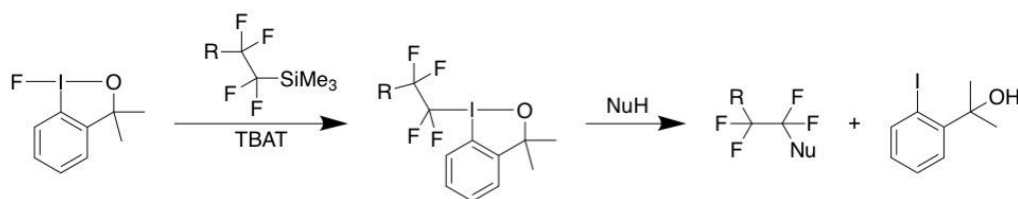
Příprava nových sloučenin hypervalentního jódu a jejich reaktivita

Vojtěch Košťál (B2)

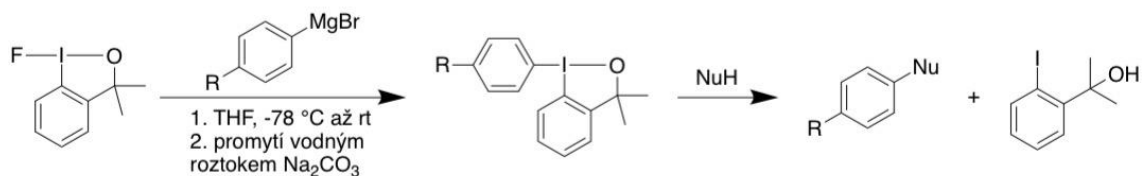
Školitel: Ing. Petr Beier, Ph.D.

V posledních letech bylo připraveno mnoho cyklických sloučenin hypervalentního jódu v oxidačním stupni III, které nacházejí široké uplatnění při elektrofilním nebo radikálovém přenosu různých funkčních skupin, a to např. CF_3 , RCF_2CF_2 , CN nebo N_3 .

V mé práci jsem se zabýval syntézou nových činidel nesoucích na hypervalentním jódu aryl nebo skupinu $\text{RCF}=\text{CF}$ pomocí organokovových činidel. Připravená činidla s aromatickými zbytky byla poté testována v reakcích s nukleofily – thiolem, Grignardovo činidlem a enolátem.



$\text{R} = \text{RS}, \text{ArS}, \text{ArO}, \text{HetAr}$



$\text{R} = \text{H}, \text{Me}, \text{OMe}, \text{F}$

Příprava cysteinových aduktů odvozených od arylnitreniových iontů

Marek Jurtík (B3)

Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

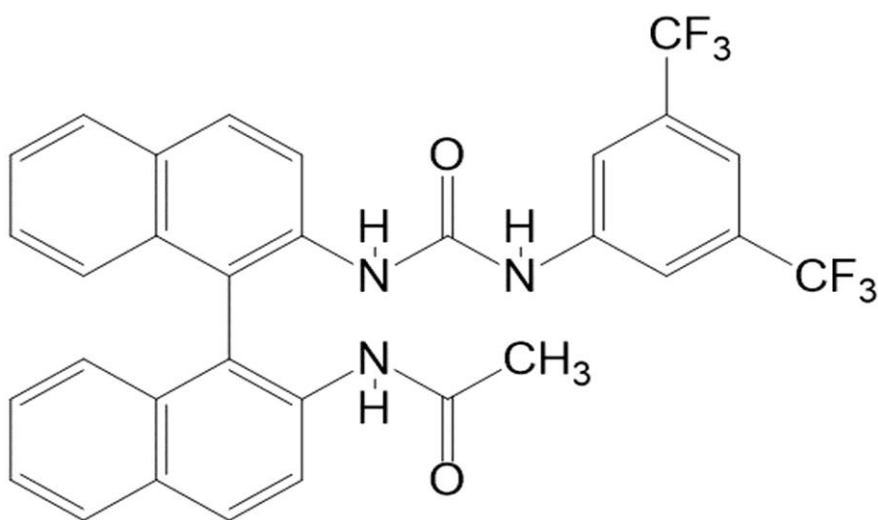
Reaktivní elektrofilní arylnitreniové ionty vznikají v organismu metabolickou aktivací z aromatických amino- a nitro- sloučenin. Mají schopnost se vázat na nukleofilní místa v bílkovinách (zejména v sérovém albuminu a v globinu) nebo v DNA. Arylnitreniové ionty atakují především sulfanylovou skupinu cysteinu, ale i další volné skupiny bílkovinných (globinových) řetězců. Ale protože sirné nukleofily jsou silnější než dusíkové (histidin, lysin), vznikají přednostněji. Bílkovinné adukty nejsou opravovány reparačními mechanismy, a tím pádem může expozice aromatickým amino- a nitro-sloučeninám vést k iniciaci karcinogeneze. Dosud jsem připravil analytické standardy aduktů odvozených od karcinogenního 2-naftylaminu s cysteinem, a to *S*-(2-aminonafthyl)cystein a *S*-(2-aminonafthyl)merkapturovou kyselinu, které budou sloužit pro výzkum tvorby globinových aduktů a případně pro vývoj metod biologického monitorování expozice této látky.

Nesymetricky substituované deriváty binaftalendiaminu pro enantioselektivní interakce s chirálními sloučeninami

Lukáš Lenz (B3)

Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Bylo zjištěno, že nesymetricky substituovaný derivát 1,1'-binaftalen-2,2'-diamin enantioselektivně interaguje s chirálními molekulami, které jsou schopné vytvářet vodíkové vazby. Klíčovým meziproduktem při syntéze níže uvedené molekuly je monoacetyl derivát. Posledním krokem syntézy monoacetyl derivátu je chromatografie směsi tří produktů po acetylaci 1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu, a proto jsem se pokusil zlepšit syntézu tak, aby bylo možno obejít chromatografii. Dále byla připravena močovina reakcí monoacetyl derivátu s izokyanátem. Tato sloučenina by mohla být použita pro štěpení chirálních molekul, např. transportem přes chloroformovou vrstvu.

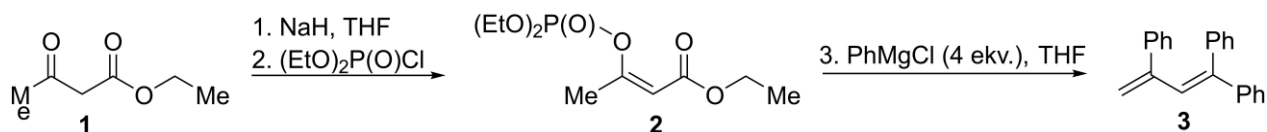


Příprava konjugovaných dienů z ethyl-acetoacetátu

Petr Oeser (B3)

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

Alkeny tvoří významnou skupinu látek, které nacházejí všestranné využití jako stavební jednotky nebo výchozí substráty v organické syntéze. Zejména konjugované dieny mají široké využití např. v syntézách bioaktivních látek, v materiálové chemii nebo jako výchozí látky pro Diels-Alderovu reakci. Dosavadní přípravy alkenů i konjugovaných dienů vycházejí z Wittigovy, Juliaovy a Petersonovy olefinace a jejich modifikací. V návaznosti na intenzivní rozvoj postupů pro přípravu konjugovaných dienů jsme vypracovali zcela novou metodiku pro přípravu trisubstitovaných dienů (3). Tato metodika je založena na enolizaci ethyl-acetoacetátu (1) hydridem sodným a následné tvorbě enol-fosfátu (2). Konjugovaný dien (3) vzniká reakcí enol-fosfátu (2) s přebytkem fenylmagnesium chloridu. V příspěvku bude diskutován mechanismus reakce a vliv reakčních podmínek na tvorbu dienu (3).



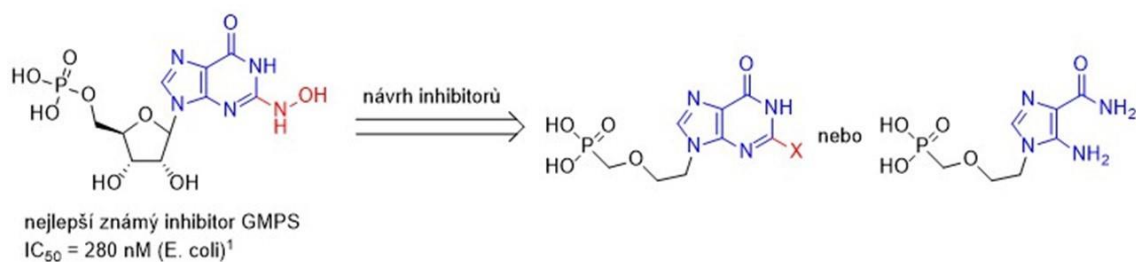
Syntéza 2-substituovaných PME-hypoxantinů jako potenciálních inhibitorů GMP synthetasy

Ladislav Prener (B2)

Školitel: Ing. Zlatko Janeba, Ph.D.; Ing. Ondřej Baszczyński, Ph.D.

Guanosinmonofosfát synthetasa (Guanosine monophosphate synthetase, GMPS) je bi-funkčním, dvou doménovým enzymem purinového metabolismu, který v buňkách přeměňuje xanthinmonofosfát (XMP) na guanosinmonofosfát (GMP). Amoniak potřebný pro tuto reakci se získává z glutaminu deaminační reakcí. GMPS byla označena jako potenciální terapeutický cíl nejen v léčbě infekcí způsobených bakteriálními a parazitickými patogeny, ale také v léčbě rakoviny. Acyklické nukleosidfosfonáty (ANP) jsou známými inhibitory enzymů purinového metabolismu a dnes také významnými terapiemi v léčbě HIV a jiných virových onemocnění. Cílem této práce je navrhnout a připravit vhodné inhibitory GMPS, které jsou založené na podobnosti ANP se strukturou substrátu, produktu či případně transitního stavu enzymatické reakce.

1. Deras, M. L., et al.: *N*²-Hydroxyguanosine 5'-Monophosphate Is a Time-dependent Inhibitor of *Escherichia coli* Guanosine Monophosphate Synthetase. *Biochemistry* 1999, 38(1), 303-310.

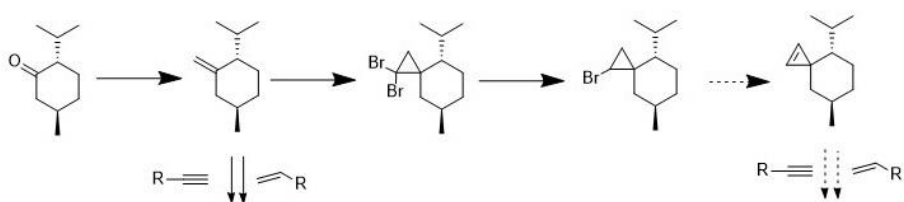


Metateze alkenů na bázi menthonu

Ondřej Pleskač (B3)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Enantioselektivní metateze s otevřením cyklu v kombinaci se zkříženou metatezí (ROCM – Ring Opening Cross Metathesis) je perspektivní metoda pro syntézu chirálních dienů. Cílem mé práce byla syntéza chirálního substrátu, který by umožnil sledování průběhu ROCM pomocí ^1H NMR spektroskopie. Jako základ pro tento substrát jsem zvolil menthon ((2*S*,5*R*)-2-isopropyl-5-methylcyklohexan-1-on). V průběhu syntézy jsem dále testoval alkenovou a enynovou metatezi methylenmenthanu.

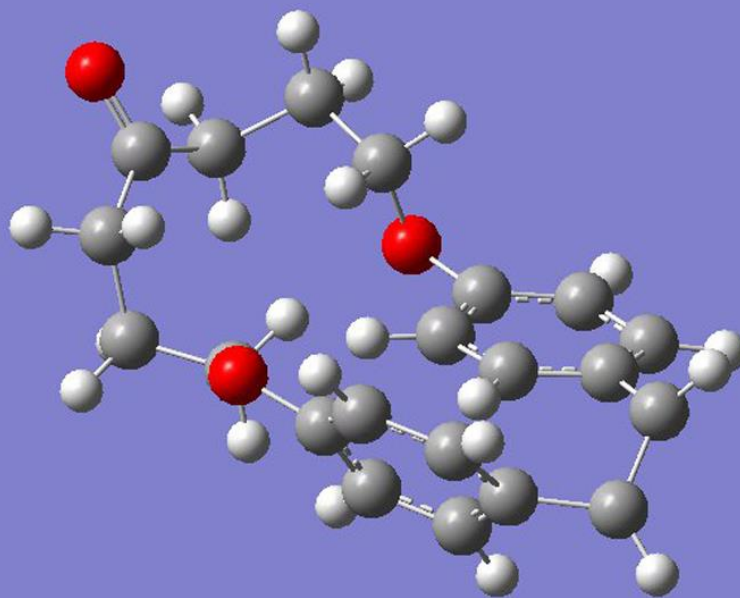


Mechanochemické indikátory pro IČ spektroskopii

Tatiana Nemirovich (B3)

Školitel: Ing. Martin Krupička, Ph.D.

Cílem práce bylo navrhnout molekulu mechanochemického indikátoru pro IČ spektroskopii a provést její syntézu. Mechanochemický indikátor je látka, jejichž spektrum se mění vlivem vnější mechanické síly. Vhodným indikátorem může být napnutý makrocyklus, obsahující karbonylovou skupinu, kterou jsme zvolili jako funkční skupinou pro IČ spektroskopii. UV záření vyvolává změnu konfigurace na dvojné vazbě (*cis*/*trans*), což vede k deformaci celého makrocyklu a předpokládané změně v IČ spektru. Byly zvoleny 3 různé makrocykly na bázi para- a meta- stilbenu a meta-indanonu a byly provedeny kvantově-mechanické výpočty pro zjištění geometrie molekul a energetického rozdílu mezi *cis*- a *trans*- konfiguracemi. Byla provedena 4-kroková syntéza, byl získán požadovaný produkt, který následovně bude použit k mechanochemickým studiím.

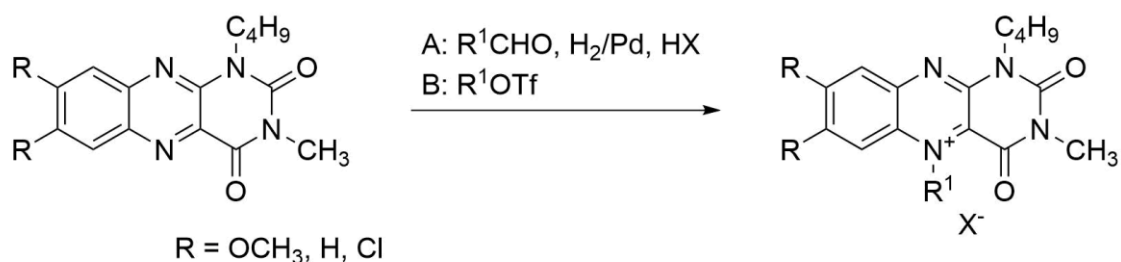


Nový přístup k přípravě kvarterních flaviniových solí

Jakub Copko (B3)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Flaviniové soli jsou používány jako organokatalyzátory v řadě oxidačních reakcí. Jejich použití ve fotoorganokatalýze je zatím málo známé. Tato práce je zaměřena na studium přípravy kvartérních flaviniových solí dvěma způsoby: reduktivní alkylací a přímou kvarternizací alkyl-trifláty. V práci je studována reaktivita různě substituovaných flavinů a vliv délky alkylového řetězce na výtěžek reakce. Byly zvoleny flaviny substituované elektronově bohatými i elektronově chudými substituenty.



Příprava aromatických sloučenin s pentafluorsulfanylovou funkční skupinou

Anežka Marková (B1)

Školitel: Ing. Petr Beier, Ph.D.

Sloučeniny s pentafluorosulfanylovou funkční skupinou vykazují zajímavé fyzikální i chemické vlastnosti. Tato oblast organické chemie je dosud poměrně málo známá a tyto sloučeniny jsou i přes svůj vysoký potenciál málo dostupné. Přístup k nim je komplikován tím, že neexistuje dostupné činidlo pro zavedení SF_5 skupiny do molekuly. Hlavními průmyslově vyráběnými produkty s SF_5 skupinou jsou 1-nitro-4-(pentafluorsulfanyl)benzen a 2-nitro-3-(pentafluorsulfanyl)benzen, které vznikají přímou fluorací příslušných disulfidů. Proto je třeba vyvíjet metody přípravy SF_5 látek na základě substituce dostupných SF_5 benzenů.

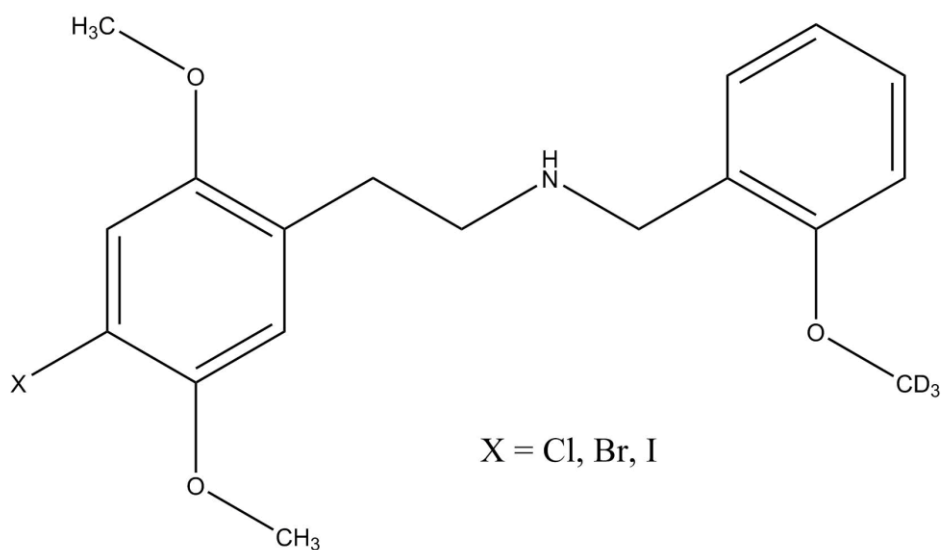
Byla provedena řada reakcí, jejichž produkty jsou nové látky, které mají potenciál být dále zkoumány a využity. Jednou z látek s nezanedbatelným potenciálním využitím by mohla být 3-boron-5-(pentafluorsulfanyl)benzoová kyselina. Byla provedena série experimentů s cílem připravit tuto kyselinu z dostupných surovin, aby mohla být později zkoumána její reaktivita a význam. Další část práce je věnována přípravě 1-azido-(pentafluorsulfanyl)benzenu a z něho přípravě triazolů s příslušnými alkyny. Nakonec byla připravena řada 2-substituovaných benzimidazolů z 5-(pentafluorsulfanyl)-N1-fenylbenzen-1,2-diaminu.

Příprava deuterovaných standardů nových syntetických drog

Markéta Bašusová (B3)

Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

Nové syntetické drogy představují nejčastěji deriváty již známých a kontrolovaných psychotropních látek. Výrobci pouze napodobují efekt původní psychoaktivní látky tím, že mírně obmění její strukturu, ale zachovají shodný farmakofor. Vzhledem k nárůstu jejich popularity v posledních letech je stěžejní jejich správná detekce. Pro správnou diagnostiku těchto drog je potřeba mít autentické standardy. Cílem práce je syntéza deuterovaných derivátů fenethylaminu, především látek typu 25X-NBOMe. Takto připravené látky budou využity jako vnitřní standardy při stanovení sloučenin typu 25X-NBOMe metodou HPLC-MS.

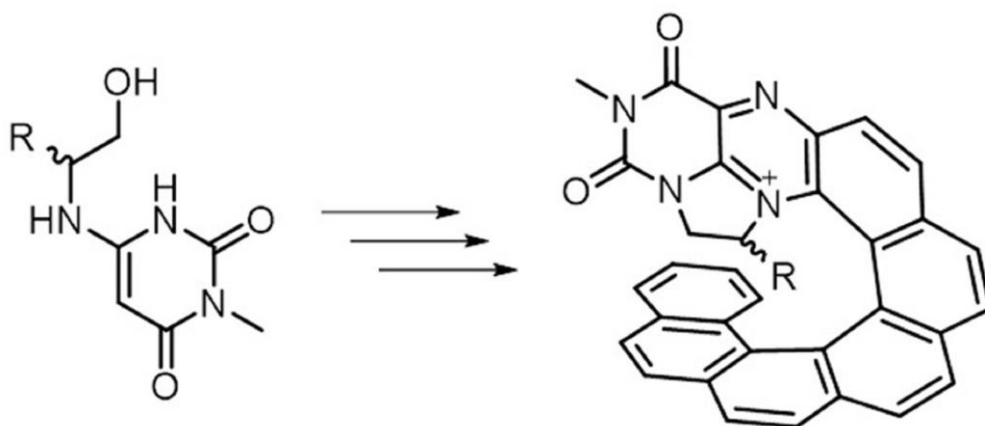


Příprava prekurzorů pro nové helikálně chirální flaviny

Dominika Smržová (B3)

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

Flavohelicený jsou helikálně chirální látky složené z několika ortho-kondenzovaných aromatických kruhů. Ve svojí struktuře obsahují flavinový skelet, který je zodpovědný za jejich redoxní vlastnosti. Pro využití těchto látek jako enantioselektivních organokatalyzátorů je nutná vhodná alkylace flavinového skeletu zvyšující jeho reaktivitu a zároveň umožňující zavedení dalšího stereogenního prvku. Cílem této práce je připravit chirální aminouracily jako prekurzory pro flavohelicený se dvěma stereogenními prvky, vedle helikální chiralitý také se stereogenním centrem na bočním řetězci. Pro zavedení stereogenním centra budou použity přírodní aminokyseliny s krátkým postranním řetězcem nebo snadno dostupné enantiomerně čisté aminoalkoholy. Tyto látky budou použity pro syntézu flavohelicenů v reakci aminouracilu s nitrosohelicenem.

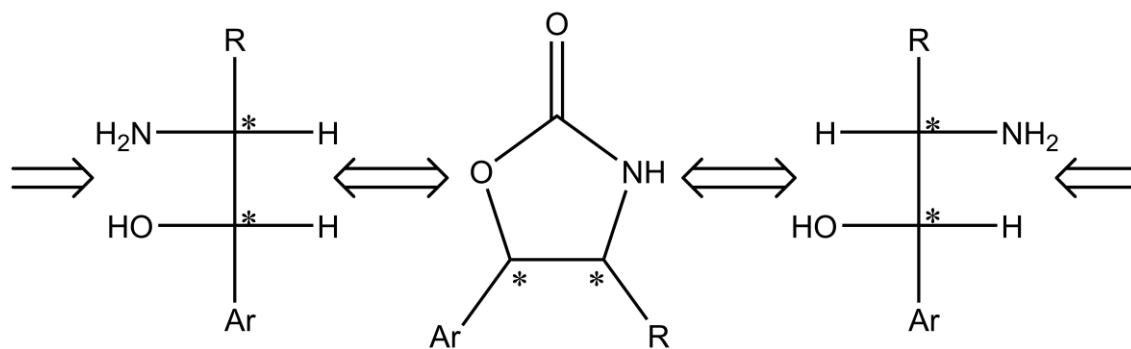


Metody přípravy diastereoisomerně čistých vicinálních aminoalkoholů

Artem Chayka (B3)

Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

Vicinální aminoalkoholy odvozené od norefedrinu mají biologickou aktivitu ve smyslu inhibice enzymů monoaminoxidasy (MAO) A a B, které mají v organismu funkci odbourávání neurotransmiterů a udržování jejich množství na určité hladině. Inhibice těchto enzymů vede ke zvýšení hladiny neurotransmiterů, čehož se využívá při léčení například Parkinsonismu, deprese nebo posttraumatických stressových poruch. Biologická aktivita inhibitorů MOA a jejich účinek na organismus je silně ovlivňována absolutní konfigurací na příslušných stereogenních centrech. Cílem této práce je ověření a rozšíření laboratorní metody syntézy vybraných diastereoisomerně čistých vicinálních aminoalkoholů pro následný výzkum jejich biologických aktivit. Zkoumány byly především možnosti stereoselektivní syntézy každého diastereoisomeru zvlášť a možnost jejich převedení z konfigurace *erythro* na *threo* a obráceně pomocí tvorby karbamátového cyklu.



Syntéza organických ligandů pro přípravu heterogenních materiálů

Filip Zavřel (B3)

Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Specifické organické ligandy v přítomnosti palladnatých solí vykazují tendenci utvářet v roztoku a v tuhém stavu koordinační mnohostěny takzvaným “self-assembly” mechanismem. Tyto ligandy se skládají z heterocyklických pětičetných jader, kde se v různých polohách váže pyridin-4-yl. V závislosti na atomu v ose ligandu se mění velikost charakteristického úhlu těchto můstkových ligandů, což má za důsledek formaci buď větších $M_{24}L_{48}$, či menších $M_{12}L_{24}$ struktur.

Jednou z koordinačních struktur podobných těmto látkám jsou i vysoce porézní krystaly. Takovéto struktury, sestávající se například z derivátu triazinu a zinečnaté soli, jsou ve svých pórech schopny nevazebnými interakcemi ukotvit organické molekuly, jež lze dále studovat pomocí rentgenové strukturní analýzy. Lze tedy takto určit i absolutní konfiguraci látek, které díky svým vlastnostem nevyhovují přímému použití metody rentgenové difrakce.

Cílem mé práce je připravit pomocí couplingových reakcí ligandy nesoucí pyridinové jednotky, jejichž jádrem jsou deriváty thiofenu, pyrrolu a furanu. Dále se budu zabývat přípravou vysoce porézních krystalů a jejich použitím pro získání informací o struktuře organických látek obtížně získatelných v krystalické podobě.