

ÚSTAV ORGANICKÉ CHEMIE

STUDENTSKÁ VĚDECKÁ KONFERENCE 2015

Pátek 20. 11. 2015

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 A250, 9:15 hod
Komise:	
Předseda:	prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.
Členové:	doc. Ing. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK) Ing. Tomáš Martinů, Ph.D. doc. Ing. Jan Budka, Ph.D. (organizační tajemník) Ing. Jiří Vokál, Ph.D. (Lach-Ner) PharmDr. Jan Pavlík, Ph.D. (CaymanPharma) Ing. Martin Skalický, Ph.D. (Lonza)

Soutěžící:	09:15	Monika Müllerová (5)
	09:30	Kateřina Kučňírová (4)
	09:45	Tomáš Klejch (5)
	10:00	<i>přestávka</i>
	10:15	David Tetour (5)
	10:30	Michal Vetýška (4)
	10:45	Igor Vyshnytskyi (5)

Sekce:	Organická chemie M2 místnost A278c, 9:15 hod
Komise:	
Předseda:	prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.
Členové:	doc. Dr. Ing. Jana Hodačová Mgr. Roman Holakovský, Ph.D. Ing. Eva Svobodová, Ph.D. (organizační tajemník) doc. Ing. Ladislav Cvak, CSc. (Teva) Ing. Karel Zelinka (LZ Draslovka) Mgr. Petr Novák, Ph.D. (Interpharma)

Soutěžící: 09:15 Aneta Pospíšilová (5)
 09:30 Roman Halaksa (4)
 09:45 Tomáš Landovský (5)
 10:00 Kristýna Kolouchová (5)
 10:15 *přestávka*
 10:30 Matěj Sommer (4)
 10:45 Jiří Lapčík (5)
 11:00 Martin Vařeka (5)

Sekce: **Organická chemie M3**
posluchárna A11, 9:15 hod

Komise:
 Předseda: prof. Ing. Ivan Stibor, CSc. (TUL Liberec)
 Členové: doc. Ing. Stanislav Rádl, CSc. (Zentiva)
 Ing. Václav Kozmík, CSc.
 Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. (organizační tajemník)
 Ing. Ivan Veselý, CSc. (CaymanPharma)
 Ing. Jan Kroupa, Ph.D. (Proxim)

Soutěžící: 09:15 Pavlína Lipovská (5)
 09:30 Martin Tlustý (4)
 09:45 Veronika Bílková (5)
 10:00 *přestávka*
 10:15 Štěpán Laštůvka (4)
 10:30 Kateřina Bártová (5)
 10:45 Lukáš Lattenberk (5)

Studenti bakalářského programu:

Sekce: **Organická chemie B1**
místnost A278e, 9:15 hod

Komise:
 Předseda: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.
 Členové: doc. Ing. František Hampl, CSc.
 Ing. Petra Cuřínová, Ph.D. (ÚCHP)
 Ing. Radek Jurok, Ph.D. (organizační tajemník)
 Mgr. Martin Švec (VWR)
 Ing. Jan Motyčka (Apigenex)

Soutěžící: 09:15 Aneta Bednářová (3)
 09:30 Leoš Valenta (3)
 09:45 Róbert Obertík (2)
 10:00 Filip Gracias (3)
 10:15 *přestávka*
 10:30 Tomáš Neveselý (3)
 10:45 Alena Budínská (2)
 11:00 Daniel Kortus (3)
 11:15 Pavlína Komínová (3)

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

Komise:

Předseda: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Členové: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.
Ing. Hana Kotoučová (PedF UK)
Ing. Michal Kohout, Ph.D. (organizační tajemník)
RNDr. Jiří Tauchman, Ph.D. (Interpharma)
Ing. Jaroslav Píš (Mercachem)

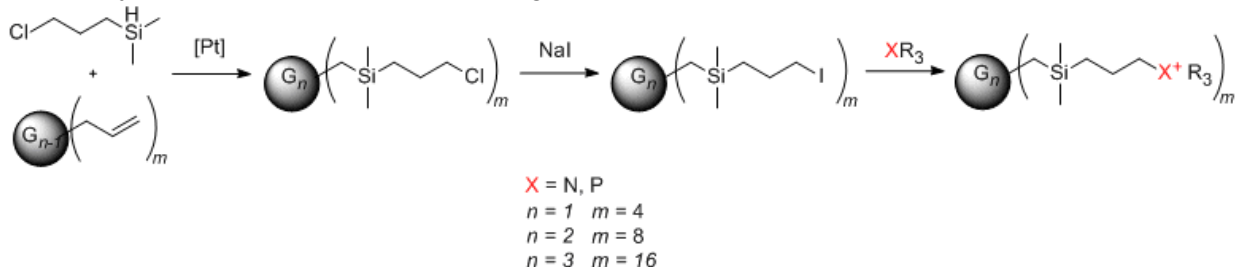
Soutěžící:

09:15	Antonín Edr (3)
09:30	Kristýna Janků (3)
09:45	Nikola Štěpánková (3)
10:00	Jessica Špačková (3)
10:15	Václav Chmela (2)
10:30	<i>přestávka</i>
10:45	Victoria Tarus (3)
11:00	Jakub Ottenschläger (3)
11:15	Adéla Sedlářová (3)
11:30	Juraj Malinčík (3)

Syntéza kationtových karbosilanových dendrimerů pro biomedicínské aplikace

Autor: Monika Müllerová
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Karbosilanové dendrimery jsou trojrozměrné, větvené makromolekuly s přesně definovanou strukturou a molární hmotností. Jejich jedinečné vlastnosti jsou mimo jiné intenzivně studovány pro řadu biomedicínských aplikací. Flexibilní skelet složený z uhlovodíkových řetězců, které se větví na atomech křemíku, je značně hydrofobní, díky čemuž je schopen vázat nepolární látky (např. léčiva). Periferie makromolekuly může být po modifikaci vhodnými funkčními skupinami polární, a tudíž schopná interakce s řadou biologických struktur. V této práci byla připravena série karbosilanových dendrimerů první až třetí generace, na jejichž periferní řetězce byly navázány deriváty fosfoniových a amoniových solí. Jejich biochemické vlastnosti, především toxicita a schopnost interakce s biomolekulami (DNA, RNA) a buněčnými strukturami, jsou zkoumány ve spolupráci s katedrou biologie UJEP v Ústí nad Labem.

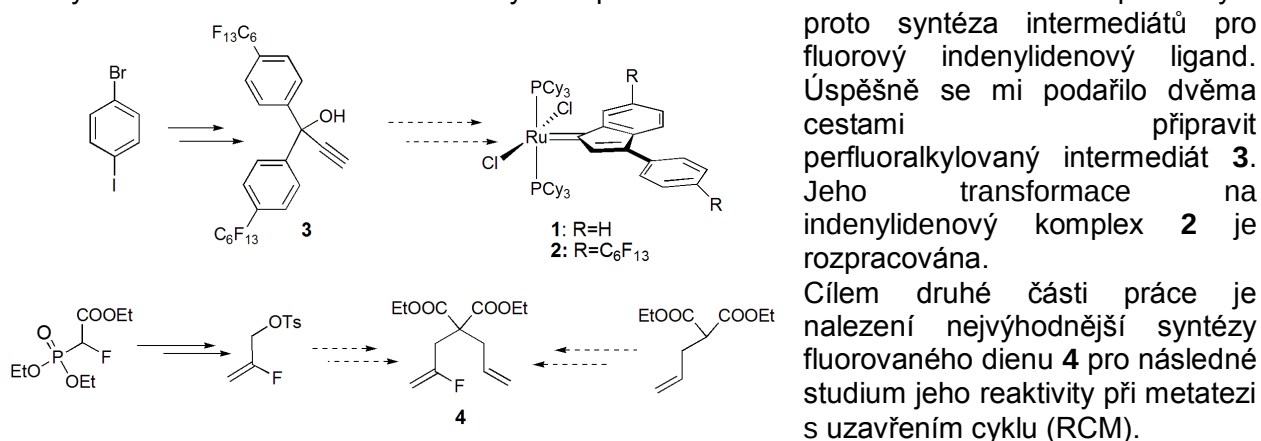


Sekce : Organická chemie M1

Syntéza intermediátů pro fluorované Ru komplexy

Autor: Kateřina Kučňírová
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

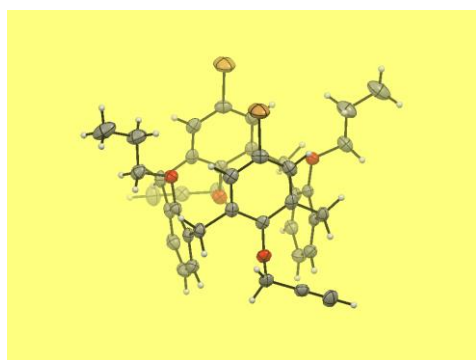
Rutheniový indenylidenový komplex **1** je robustní, komerčně dostupný katalyzátor pro metateze alkenů s vysokou stabilitou, ale pomalou iniciační fází. Modifikací perfluoralkylovými řetězci by mělo vlivem elektronakceptorních skupin dojít k urychlení iniciační fáze a umožnění recyklace katalyzátoru **2** z reakční směsi fluorovými separačními metodami. Prvním cílem mé práce byla



proto syntéza intermediátů pro fluorový indenylidenový ligand. Úspěšně se mi podařilo dvěma cestami připravit perfluoralkylovaný intermediát **3**. Jeho transformace na indenylidenový komplex **2** je rozpracována. Cílem druhé části práce je nalezení nejvýhodnější syntézy fluorovaného dienu **4** pro následné studium jeho reaktivity při metatezi s uzavřením cyklu (RCM).

Zavádění terminálních alkynů do skeletu calix[4]arenu jako příprava stavebních bloků pro následné reakce

Autor: Tomáš Klejch
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.



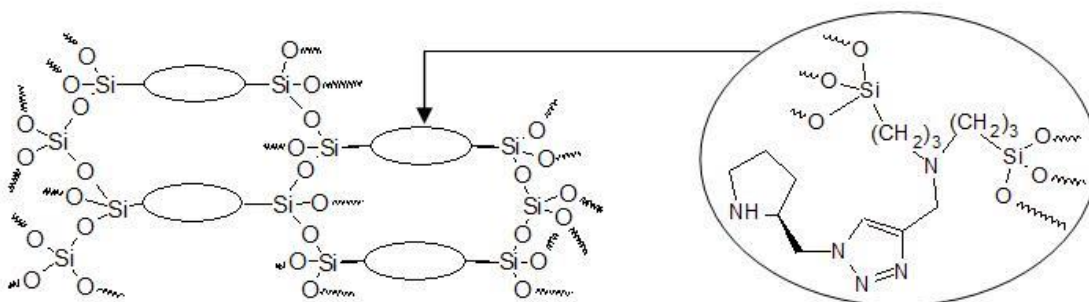
Calixareny jsou díky své preorganizaci výbornými stavebními bloky pro syntézu (nejen) biologicky aktivních látek. Jedním z vhodných způsobů jejich derivatizace je zavedení terminální trojné vazby, která nabízí širokou škálu dalších syntetických transformací. Bohužel, příprava těchto derivátů na bázi calix[4]arenu nebyla doposud systematicky studována.

V rámci této práce byly zkoumány možnosti syntézy terminálních alkynů na bázi calix[4]arenu, a to jak na spodním, tak i na horním okraji. Alkylací spodního okraje propargylovou skupinou byly připraveny různé konformery calix[4]arenu. Pro přípravu acetylenů na horním okraji byly zkoumány různé metody, jako například Corey-Fuchsova reakce nebo použití Ohira-Bestmannova činidla. Takto připravené látky mohou být dále použity například pro click-reakce s vhodnými azidy.

Chirální hybridní organicko-anorganické materiály na bázi pyrrolidinu jako katalyzátory enantioselektivních reakcí

Autor: David Tetour
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

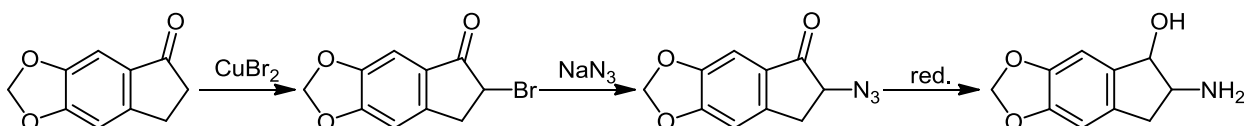
Mnoho vědeckých skupin se v posledních letech zabývá vývojem nových heterogenních katalyzátorů s možným uplatněním v enantioselektivní katalýze. Ve spolupráci s pracovištěm Dr. Wong Chi Mana z Ecole National Supérieure de Chimie de Montpellier se věnujeme přípravě hybridních organicko-anorganických křemičitých materiálů, které by měly sloužit jako katalyzátory některých enantioselektivních reakcí. V této práci bude prezentována příprava dvou typů křemičitého materiálu obsahujících enantiomerně čistý derivát pyrrolidinu a studie jejich schopnosti katalyzovat aldolizační reakce a Michaelovy adice.



Syntéza metabolitu 5,6-methyendioxy-2-aminoindanu (MDAI)

Autor: Michal Vetýška
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

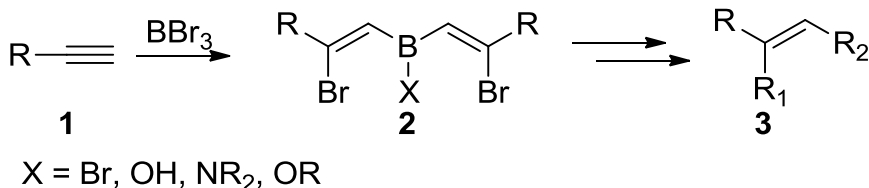
Cílem této práce byla syntéza jednoho z potenciálních metabolitů nové syntetické drogy 5,6-methyendioxy-2-aminoindanu (MDAI), která patří do skupiny 2-aminoindanů. Aminoindany jsou poměrně nová skupina látek, které jsou zejména poslední dobou vyhledávány kvůli svým psychoaktivním účinkům. Prvním stupněm syntézy byla bromace 5,6-methyendioxyindan-1-onu do α -polohy. Bromderivát byl následně převeden nukleofilní substitucí azidovým iontem na 5,6-methyendioxy-2-azidoindan-1-on. 5,6-Methyendioxy-2-azidoindan-1-on byl úspěšně redukován na výsledný produkt 5,6-methyendioxy-2-aminoindan-1-ol a to přímou redukcí nebo postupnou redukcí nejprve azido-skupiny a následně karbonylové skupiny. Výsledné produkty byly kvůli své nízké stabilitě izolovány ve formě stabilních hydrochloridů. Připravený metabolit může být využit při farmakokinetických studiích. Také může najít uplatnění při identifikaci MDAI a jeho metabolitů v moči a jiném biologickém materiálu.



Bromoborace terminálních alkynů

Autor: Vyšnickij Jegor
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Trisubstituované alkeny jsou častým motivem přírodních látek a léčiv. Intermediáty na bázi trisubstituovaných alkenů nacházejí široké spektrum aplikací v organické syntéze. Jednou z možností, jak připravit trisubstituované alkeny je využití bromoborace alkynů **1**. Reakce je obvykle prováděna za vzniku alkenyldibromboranů. Bohužel velmi málo je známo o přípravě derivátů borinové kyseliny **2**. Substituované borany **2** lze velmi snadno připravit stereoselektivní bromoborací terminálních alkynů. V příspěvku budou diskutovány vlastnosti a příprava derivátů borinových kyselin **2** spolu s pokusy o jejich přeměnu na trisubstituované alkeny **3**.



Sekce : Organická chemie M2

Polymerní konjugáty nesoucí muskarinika pro aplikaci v onkologii

Autor: Aneta Pospíšilová
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

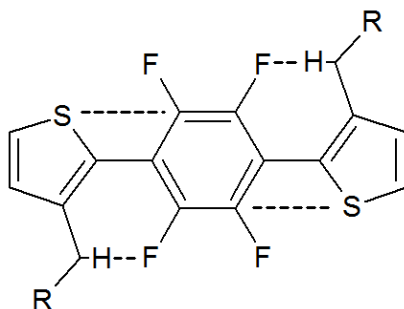
Současný trend v diagnostice a léčbě rakoviny je tzv. cílený transport, který oproti konvenčním metodám vyniká vysokou účinností a menším rizikem vedlejších účinků. Pro cílení nádorové tkáně jsou optimální hydrofilní polymery a nanočástice – díky své velikosti nejsou vylučovány ledvinami a proto setrvávají dlouho v krevním oběhu. Navíc, pokud mají velikost pod cca 200 nm, se hromadí v nádorové tkáni v důsledku tzv. „Enhanced Permeability and Retention“ (EPR) efektu. Toto pasivní cílení zvyšuje koncentraci částic v nádoru až o 1 – 2 řády v porovnání se zdravou tkání. Dalšího navýšení účinnosti lze dosáhnout navázáním aktivně cílící struktury na nanočástici. Bylo zjištěno, že muskarinový acetylcholinový receptor je hyperexprimován řadou nádorů a tak jeho ligandy, muskarinika, mohou aktivně cílit nádorovou tkáň. Můj příspěvek je věnován návrhu a syntéze polymerních nanodiagnostik nesoucích antagonisty muskarinového receptoru. Diskutována bude především syntéza methakrylamidových monomerů s vázanými estery tropinu nebo 3-chinuklidiny benzilátem.

Sekce : Organická chemie M2

Syntéza a studium fluorovaných organických materiálů pro elektronické a optoelektronické aplikace

Autor: Bc. Roman Halaksa
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Jozef Krajčovič, Ph.D. (Ing. Václav Kozmík, CSc.)

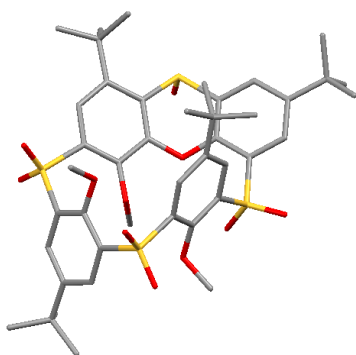
Práce pojednává o využití polyfluorovaných aromatických sloučenin, jakožto silných elektronakceptorních jednotkách, a jejich inkorporaci do pokročilých monomerních a oligomerních systémů s využitím pro elektronické a optoelektronické aplikace. Zabývá se teoretickými aspekty struktury zmíněných skeletů, včetně konkrétních příkladů již připravených molekul dostupných z literatury. Experimentální část práce se zabývá syntézou klíčových intermediátů s využitím Kumadova kaplinku a syntézou alkylovaných thiofenů propojených tetrafluorofenylenovým můstkem pomocí Stilleho kaplinku.



Obrázek 1: Struktura a intramolekulární interakce 3-BATTFPF

Studium reaktivity fenoxathiinového makrocyklu využitelného pro syntézu iontových receptorů

Autor: Tomáš Landovský
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.



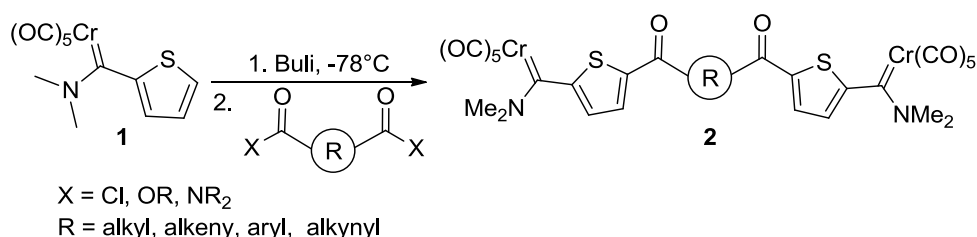
Calixareny a jejich sirná analoga – thiacalixareny, jsou makrocyclické sloučeniny, které mají široké využití coby stavební bloky v supramolekulární chemii. Zajímavou cestou jejich derivatizace je vnášení spirodienonových motivů. Konkrétně *p*-*tert*-butylmono(spirodienon)thiacalix[4]aren pak podle nedávných zjištění při reakci s HCl neposkytuje očekávaný produkt *ipso*-substituce, jako analogický derivát klasického calix[4]arenu, nýbrž dochází k intramolekulárnímu přesmyku za vzniku fenoxathiinového tricyklu. Výsledný inherentně chirální makrocyklus je studován s ohledem na jeho potenciální využití při syntéze iontových receptorů. Bylo prozkoumáno konformační

chování této unikátní struktury s využitím alkylací na spodním okraji, provedeny oxidace sirných můstků do různých stupňů s důrazem na jejich regioselektivitu a získané poznatky využity pro zavedení dalších funkčních skupin, které umožní tvorbu žádaných receptorů.

Reakce metalovaných Fischerových karbenových komplexů chromu s deriváty karboxylových kyselin

Autor: Kristýna Kolouchová
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

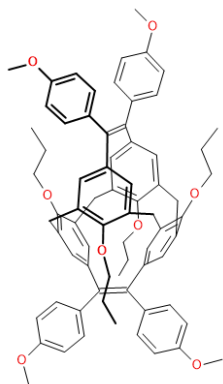
Fischerovy karbenové komplexy nacházejí široké spektrum aplikací v organické syntéze. V návaznosti na využití Fischerových karbenových komplexů jsme v naší laboratoři publikovali metodiku pro přípravu metalovaných karbenových komplexů chromu. Následnou reakcí připravených komplexů s elektrofilními činidly byly získány funkcionalizované biskarbenové komplexy chromu. Cílem mé práce bylo rozšíření publikované metodiky a prostudovat možnosti přípravy konjugovaných biskarbenových komplexů **2**. Výchozí aminokarbenový komplex **1** byl metalován účinkem BuLi a u připraveného organolitního činidla byla studována jeho reakce s deriváty dikarboxylových kyselin.



Sekce : Organická chemie M2

Syntéza *p*-acylcalix[4]arenů a jejich následná transformace

Autor: Matěj Sommer
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.



Calixareny a jejich deriváty hrají důležitou roli na poli supramolekulární chemie. Významným reakčním centrem v organické syntéze je karbonylová skupina, která je dále snadno modifikovatelná. Univerzální metoda pro syntézu *p*-tetraacylcalixarenů zatím nebyla nikde publikována. *p*-Tetraacylcalixareny v 1,3-*střídavé* konformaci byly v naší laboratoři syntetizovány adicí organolithné sloučeniny na *p*-tetrakyanocalixaren, a dále byly přemostěny intramolekulární McMurryho reakcí za vzniku rigidní prostorové struktury. Cílem této práce je optimalizace této reakce, která bude dále využita pro přemostění různých *p*-acylcalixarenů. Kromě toho budou zkoumány i jiné možnosti acylace a syntéza bude rozšířena i na deriváty *kónické*.

Sekce : Organická chemie M2

Příprava nových chráněných aminokyselin cross-methathesí

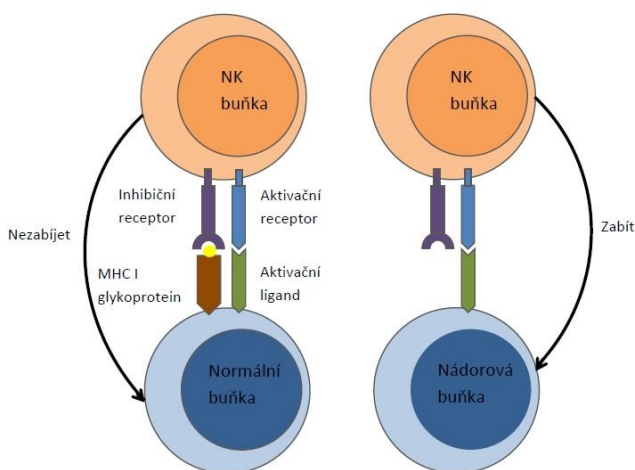
Autor: Jiří Lapčík
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.; Mgr. Miroslav Havránek, Ph.D.

Nové chráněné aminokyseliny jsou významné pro přípravu derivatizovaných peptidů s aplikací například ve vývoji nových hormonálních léčiv. Pro syntézu funkcionalizovaných chráněných stavebních bloků je intenzivně zkoumána i methathese olefinů. Jedním z důvodů je vysoká tolerance přítomnosti funkčních skupin při methatesi. Limitujícím prvkem využití cross-methathese je vznik směsi *E*, *Z* izomerů produktu, produktů homomethathese a nízké výtěžky při reakcích některých substrátů. V této práci je studována příprava chráněných aminokyselin. Výchozí látkou je vhodně chráněný allylglycin, který reakcí s terminálním olefinem poskytne žádanou aminokyselinu. Je studován vliv reakčních podmínek a optimalizace reakce pro syntézu ve větším množství. Minimalizace vzniku vedlejších produktů a zajištění průběhu s definovanou konfigurací na dvojně vazbě při ekonomicky příznivých podmínkách vyžaduje hledání nových přístupů.

Nová imunostimulancia na bázi glykolipidů odvozených od trehalózy 6,6'-dimycolatu

Autor: Bc. Martin Vařeka
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Trehalóza 6,6'-dimycolat byla identifikována jako nejvíce zastoupený glykolipid v buněčné stěně bakterie *Mycobacterium tuberculosis*. Struktura trehalózy 6,6'-dimycolatu je vysoce efektivně rozpoznávána imunitním systémem, kde vyvolává silnou imunitní reakci, především antigenně specifických mechanismů. Těchto imunostimulačních vlastností může být využito pro design moderních vakcín, či pro posílení protinádorové imunity. Použití přímo trehalózy 6,6'-dimycolatu jako imunostimulancia není možné, z důvodu její extrémní pyrogenity. Byla připravena série 6,6'-diacyl trehalóz s očekávaným imunostimulačním účinkem a jejich aktivita je nyní testována v *in vivo* a *in vitro* testech. Dále byly zahájeny formulační experimenty s cílem zakomponovat tyto látky do micel nebo liposomů.

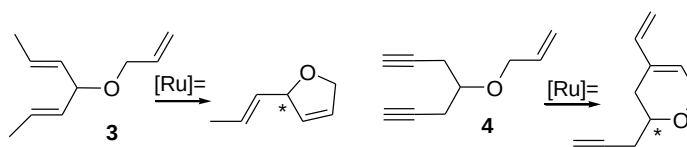
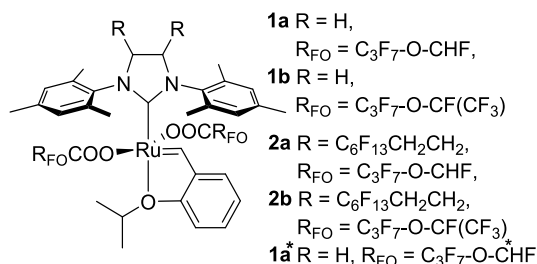


Rutheniové komplexy modifikované racemickými polyfluoretherovými řetězci

Autor: Pavlína Lipovská
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Ve své práci jsem se zabývala modifikacemi Hoveyda-Grubbsova prekatalyzátoru 2. generace s cílem získat jeho racemická „středně fluorová“ analoga **1** a **2**, recyklovatelná pomocí fluorového environmentálně benigního systému. Připravené komplexy jsou aktivní nejen v modelových metatezích s uzavřením cyklu (RCM) a enynových metatezích s uzavřením cyklu (RCEYM), ale také v RCM prochirálního trienu **3** a RCEYM prochirálního endiynu **4**. S využitím rezoluce racemického prekursoru jsem dále získala enantiomerně

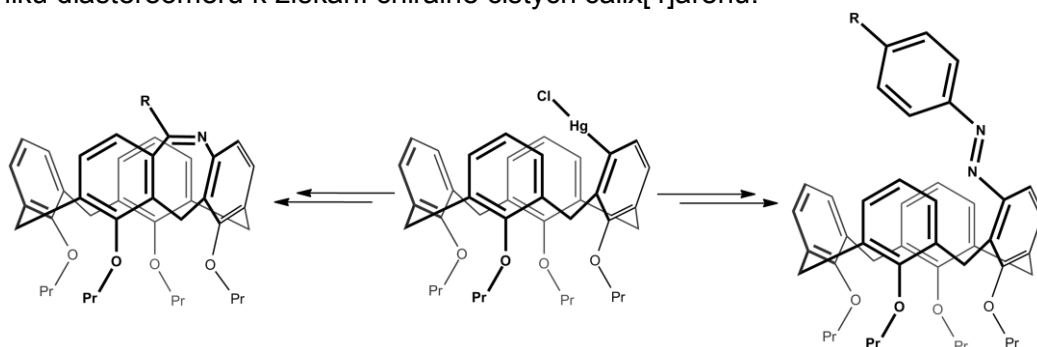
obohacený komplex **1a***. Paralelně jsem se věnovala modifikaci alkoxybenzylidenového ligandu v komplexech **1** polyfluoropolyoxaalkoholy.



Meta-nitrosace calix[4]arenu a její využití v syntéze azosloučenin a přemostěných derivátů calix[4]arenu

Autor: Martin Tlustý
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

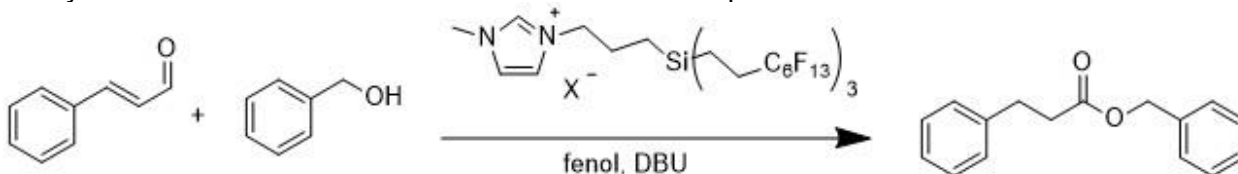
Elektrofilní aromatická merkurace calix[4]arenu představuje pravděpodobně jediný známý způsob, jak selektivně provést substituci v *meta*-poloze na nederivatizovaném horním okraji calix[4]arenu. V této práci byly merkurované deriváty převedeny na nitrososloučeniny. Takto získané mono- i disubstituované deriváty byly v první části práce dále transformovány na azosloučeniny, které by mohly být využity jako prekurzory pro přípravu složitějších inherentně chirálních receptorů. U jedné ze získaných azosloučenin byla zjišťována její schopnost komplexovat *N*-methylpyridinium jodid. Ve druhé části práce pak byly syntetizovány sloučeniny obsahující sedmičlenný kruh vzniklý intramolekulárním přemostěním horního okraje proximálních jader calix[4]arenu. Při využití chirálních derivátů kyselin může tento postup vést díky vzniku diastereomerů k získání chirálně čistých calix[4]arenů.



Syntéza fluorofilních imidazoliových solí a studium jejich katalytických vlastností

Autor: Veronika Bílková
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Imidazoliové soli jsou díky svým unikátním vlastnostem studovány z mnoha pohledů – jako rozpouštědla (iontové kapaliny), prekurzory NHC ligandů pro přechodné kovy i jako samostatné organokatalyzátory. Má práce je zaměřena na syntézu vysoce fluorovaných imidazoliových solí a jejich využití jako organokatalyzátorů. Takové sloučeniny jsou extrémně fluorofilní, čehož se dá využít například k snadnému odstranění katalyzátoru z reakční směsi a jeho recyklaci. Byly připraveny imidazoliové soli s různými anionty a byla zkoumána reakční kinetika jimi katalyzované benzoinové kondenzace a vliv aniontu na průběh reakce.

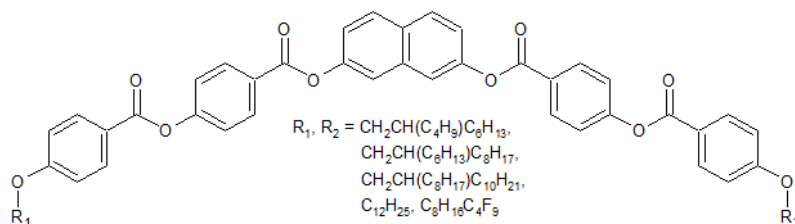


Syntéza kapalných krystalů s rozvětvenými alkylovými řetězci

Autor: Štěpán Laštůvka
 Ročník: M1
 Ústav: Organická chemie
 Školitel: Ing. Václav kozmík, CSc.; Ing. Martin Horčic

Současná společnost tlačí vědecký pokrok a technologie stále více kupředu a to i na poli zobrazovací techniky (LCD panely, apod.), kde se uplatňují právě kapalně krystalové. Bylo prokázáno, že mesomorfní vlastnosti lze také ovlivnit rozvětvením terminálních řetězců. Z těchto důvodů bylo mým úkolem syntetizovat kapalně krystalové tohoto typu a prozkoumat vliv rozvětvení alkylových řetězců, tzv. „vlaštovčích ocasů“ na jejich mesomorfní vlastnosti.

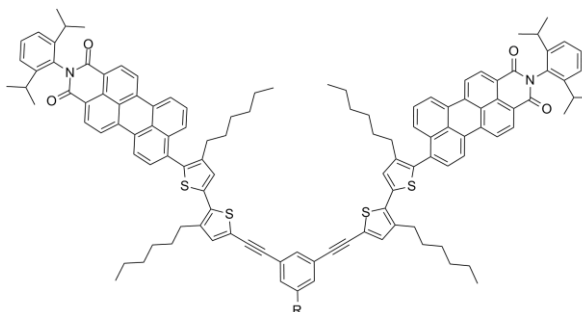
Pro syntézu byl použit jako centrální jádro naftalen-2,7-diol, který se v předchozích syntézách velmi osvědčil. V práci byla připravena tři prodlužující ramena s různou délkou terminálních rozvětvených alkylových řetězců. Tato byla použita k syntéze série cílových kapalných krystalů s různými prodlužujícími rameny. Mesomorfní vlastnosti připravených látek byly studovány na FZU AV ČR.



Syntéza barviv pro senzitivaci fotočlánků na bázi diamantu

Autor: Kateřina Bártová
 Ročník: M2
 Ústav: Organická chemie
 Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

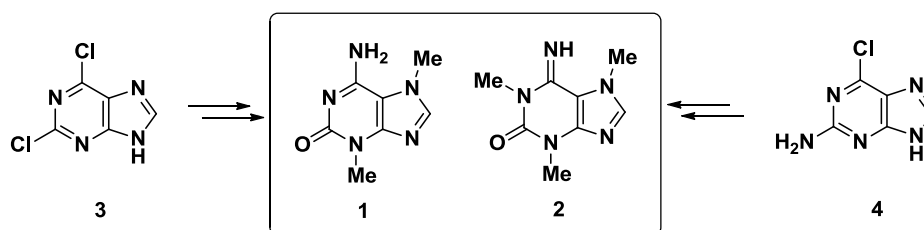
Barvivem senzitivované fotočlánky (DSSCs) budí zájem odborné veřejnosti již od roku 1991, kdy Michael Grätzel a Brian O'Regan publikovali první práci na toto téma. Důvodem, proč právě tyto články přitahují pozornost, je bezesporu jejich nízká cena oproti článkům z čistého křemíku. Mezi další výhody DSSCs patří také jejich technické provedení, články mohou být tenké jako fólie, a dokonce mohou být ohebné. Obecnou nevýhodou fotočlánků je jejich nízká účinnost, která se pohybuje okolo 15 %. Teoretickým limitem pro DSSCs s jednou fotoaktivní elektrodou je 31 %, kterého ale zatím nebylo dosaženo. Zvýšení účinnosti až na 43 % by mohly přinést tzv. tandemové fotočlánky, které na rozdíl od článků Grätzelova typu mají fotoaktivní obě elektrody. Ve své práci se zabývám syntézou donor-akceptorového barviva pro senzitivaci fotokatody tandemového článku. Klíčovou komponentou barviva je dvojitá fotoanténa, založená na molekulárně vodivé struktuře na bázi perylenmonoimidu jako akceptoru. Jako donor slouží kotvící struktura kovalentně spojená se substituovaným dithiofenem.



Regioselektivní syntéza N^7 -substituovaných isoguaninů

Autor: Lukáš Lattenberk
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Isoguanin je heterocyklická sloučenina, jejíž N^9 -substituované deriváty vykazují zajímavou biologickou aktivitu. 3,7-dimethylisoguanin (**X**) a 1,3,7-trimethylisoguanin (**x**) jsou biologicky aktivní deriváty isoguaninu, které byly izolované z přírodních materiálů. O biologické aktivitě syntetických N^7 -substituovaných derivátů toho není mnoho známo, pravděpodobně z důvodů jejich obtížné dostupnosti. Proto byla vypracována metodika pro přípravu N^7 -substituovaných isoguaninů **x**. V příspěvku bude diskutována možnost použití 2,6-dichlorpurinu (**x**) a 2-amino-6-chlorpurinu (**X**) jako výchozích látek.



Příprava merkapturových kyselin odvozených od styren-7,8-oxidu

Autor: Aneta Bednářová
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

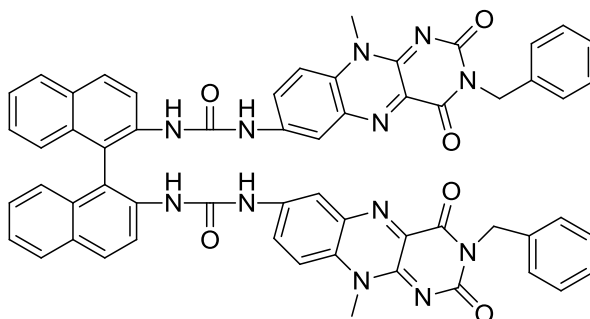
Styren-7,8-oxid (SO) je klíčovým elektrofilním metabolitem styrenu, který v buňkách reaguje s tripeptidem glutationem a vzniklé adukty se pak dále metabolicky přeměňují až na *S*-substituované deriváty cysteinu, merkapturové kyseliny. Tyto metabolity mají využití jako indikátory expozice. SO obsahuje epoxidový kruh, který se může nukleofilním atakem otevírat na α a β uhlíku, což má za následek vznik dvou regioisomerů. V případě racemického SO pak vzniknou dva páry diastereomerů. Ve své práci jsem vycházela z *N*-acetyl-L-cystein-methylesteru (NAC-Me), který reakcí s čistými enantiomery SO po následné hydrolýze esteru poskytuje stereospecificky dva regioisomery, *N*-acetyl-*S*-(1-fenyl-2-hydroxyethyl)cystein (1-fenyl-2-hydroxyethylmerkapturová kyselina, 21-HPEMK) a *N*-acetyl-*S*-(2-fenyl-2-hydroxyethyl)cystein (2-fenyl-2-hydroxyethylmerkapturová kyselina, 22-HPEMK), které jsem oddělila pomocí sloupcové chromatografie. Za přítomnosti $(C_6H_5)_3B$ jako Lewisovy kyseliny dochází k regioselektivnímu otevírání epoxidového kruhu SO na α uhlíku. Tímto způsobem byly připraveny oba diastereomery 21-HPEMK.

Sekce : Organická chemie B1

Syntéza axiálně chirálních ligandů nesoucích flavinové zbytky

Autor: Leoš Valenta
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Již dříve byla v naší laboratoři zkoumána vlastnost močovín vzniklých z 1,1'-binaftalenu-2,2'-diaminu enantioselektivně interagovat s látkami. Vytvořením chirální močoviny s molekulou flavinu, jež má zajímavé optické vlastnosti, se otevírají nové možnosti využití, jako např. studium interakcí měřením fluorescenčních spekter. Cílem mé práce je vytvořit močovinu na bázi binaftalenu nesoucí flavinový substituent.

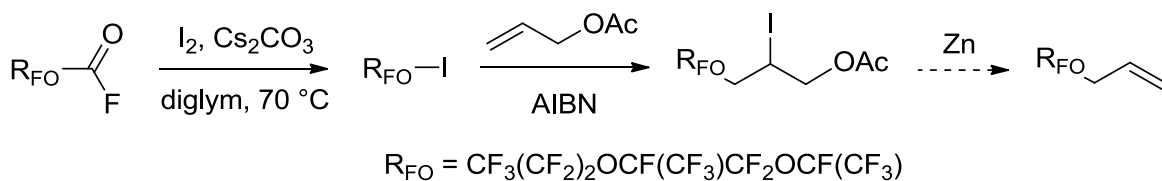


Sekce : Organická chemie B1

Príprava a radikálové reakcie perfluoropolyoxaalkyljodidov

Autor: Obertík Róbert
Ročník: B2
Ústav: Organické chemie
Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

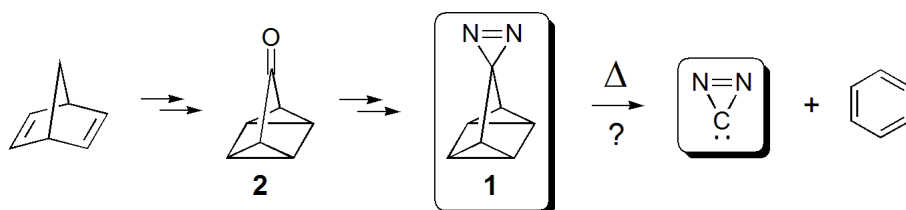
V našej výskumnej skupine sme zistili, že zlúčeniny modifikované perfluoropolyetherovými reťazcami sú často fluorofilnejšie než odpovedajúce polyfluoralkylované látky. Vo svojej práci som sa preto venoval príprave stavebných blokov pre metatézy alkenov, obsahujúce perfluoropolyetherový reťazec a nefluorovanú násobnú väzbu. V prvom kroku som skúmal premenu trimeru HFPO na perfluor-2-jod-5-methyl-3,6-dioxanónan v závislosti na teplote reakčnej zmesi a rozpúšťadle. Produkt som v druhom kroku následne podrobil radikálovej adícii na ethén a alyl acetát.



Syntéza azikvadricyklanu jako prekursoru cyklického karbenu CN_2

Autor: Filip Gracias
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.

Projekt se zabývá syntézou 7-azikvadricyklanu (**1**), dosud nepopsané pentacyklické sloučeniny $C_7H_6N_2$ s vysokým pnutím, jako potenciálního prekursoru cyklického karbenu CN_2 (jehož existence v roztoku a v plynné fázi byla nedávno diskutována). Při vakuové pyrolýze s izolací produktů v kryogenní matrici je očekávána vyšší kinetická stabilita diazirinového cyklu k denitrogenaci sloučeniny **1** ve srovnání s jejím známým tetracyklickým diazo izomerem. Syntéza **1** vychází z norbornadienu a zahrnuje 9 reakčních kroků, klíčovým intermediátem je kvadricyklan-7-on (**2**).

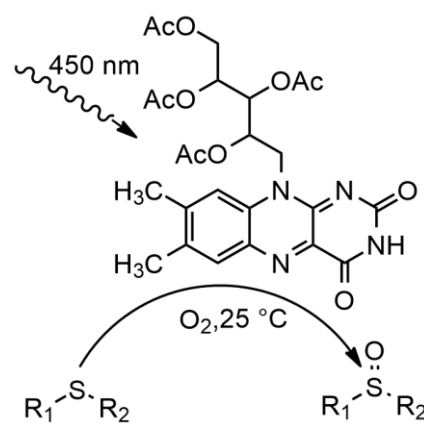


Příprava sulfoxidů oxidací sulfidů katalyzovanou deriváty vitaminu B2

Autor: Tomáš Neveselý
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Byla vyvinuta efektivní metodika pro chemoselektivní oxidace sulfidů na sulfoxidy katalyzovaná tetraacetyl-riboflavinem, využívající viditelné záření a kyslík jako stechiometrické oxidační činidlo. Metoda je vhodná zejména kvůli použití malého množství snadno připravitelného katalyzátoru, viditelného záření o vlnové délce 450 nm na místo zahřívání a životní prostředí nezatěžujících rozpouštědel.

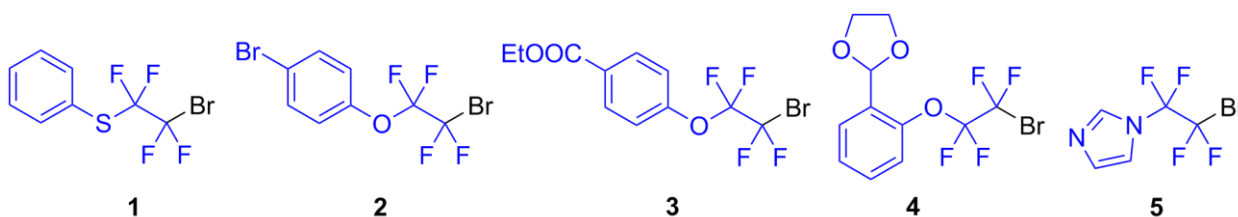
Výhodou této metody je vysoký kvantový výtěžek, tolerance širokého spektra funkčních skupin, rychlá oxidace stericky náročných substrátů, kterými jsou například diarylsulfidy či *tert*-butylsulfidy, a elektronově deficitních substrátů. Touto metodou lze připravit nejen farmaceuticky zajímavé sloučeniny, ale také konvertovat síru nesoucí bojové látky na méně toxické a snadněji odbouratelné produkty. Mechanistické studie ukázaly, že se uplatňuje oxidace singletovým kyslíkem či elektronovým přenosem v závislosti na povaze substrátu.



Nový přístup k nukleofilní tetrafluorethylaci

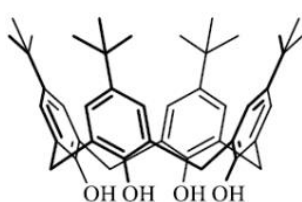
Autor: Alena Budinská
 Ročník: B2
 Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
 Školitel: Ing. Petr Beier, Ph.D.

Organické sloučeniny obsahující fluor dnes díky svým jedinečným vlastnostem nacházejí uplatnění např. jako léčiva, agrochemikálie, pokročilé polymerní materiály či kapalně krystalizující látky. Práce se zabývá zaváděním substituované tetrafluorethylové skupiny ($\text{R}-\text{CF}_2\text{CF}_2-$) na organické substráty. Z výchozích tetrafluorethylbromidů (**1–5**) je v prvním kroku reakcí s $i\text{-PrMgCl}\cdot\text{LiCl}$ *in-situ* generováno činidlo $\text{R}-\text{CF}_2\text{CF}_2\text{MgCl}$, jehož využití je následně ukázáno na nukleofilních adičních reakcích. Po optimalizaci podmínek pro adice na karbonylové sloučeniny byl proveden screening dalších substrátů, jako jsou např. epoxidy, nitrony, sulfonyliminy či iminy. Metoda poskytuje nejen produkty nesoucí poměrně vzácné $-\text{CF}_2\text{CF}_2-$ uskupení, ale umožňuje také další transformace připravených aduktů s využitím funkčních skupin přítomných jak na výchozích bromidech, tak na zvolených elektrofilech.

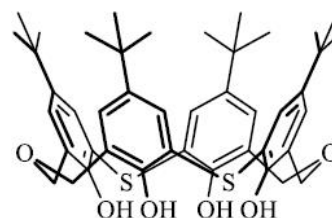


Syntéza calix[4]arenů se smíšenými můstkovými skupinami

Autor: Daniel Kortus
 Ročník: B3
 Ústav: Organická chemie
 Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.



Cílem mé práce je syntéza calix[4]arenů se smíšenými můstkovými skupinami a následné studium jejich struktury a dynamického chování. Calix[4]areny se smíšenými můstkovými skupinami vznikají nahrazením některých nebo všech methylenových spojek mezi jednotlivými

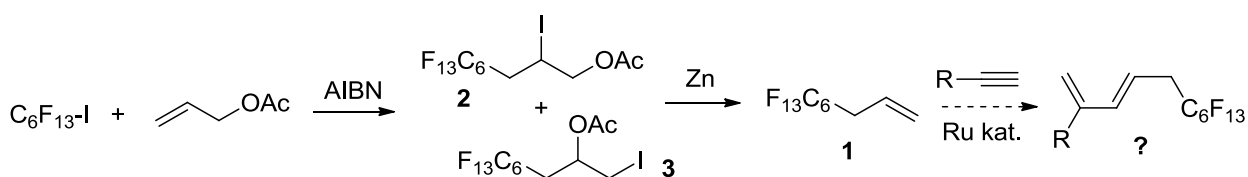


fenolickými jádry calix[4]arenu spojkami sulfidickými či dimethylenetherickými. Tyto exotické sloučeniny jsou na poli supramolekulární chemie neprozkoumaným územím, je však zřejmé, že změny methylenových můstků mají razantní dopad na vlastnosti celého makrocylu – od velikosti kavity přes flexibilitu a komplexační vlastnosti až po reaktivitu. Svou snahu budu soustředit na studium chemických a fyzikálních vlastností těchto pozoruhodných látek a na jejich možnou aplikaci v praxi.

Syntéza fluorovaných intermediátů pro enynovou metatezi

Autor: Pavlína Komínová
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

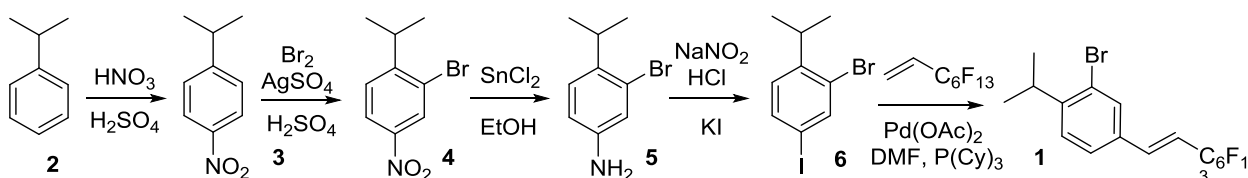
Ve své práci jsem studovala polyfluoralkeny jako substráty pro enynovou metatezi. Získané produkty, polyfluoralkylované dieny, mohou sloužit jako monomery pro polyfluorované kaučuky nebo jako intermediáty pro polyfluorované cyklické sloučeniny. První skupina fluoralkenů, perfluoralkyletheny, je komerčně dostupná, ale má nízkou reaktivitu. Proto jsem se věnovala syntéze 3-(perfluorhexyl)propenu (**1**). V prvním kroku jsem s využitím iniciace AIBN nebo $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_4$ získala z perfluorhexyljodidu a allyl-acetátu produkt radikálové adice **2** spolu s vedlejším produktem **3**, vzniklým termální isomerizací primárního produktu **2**. Dehalogenace směsi obou látek zinkem poskytla fluoralken **1**. Pro oba typy fluoralkenů jsem provedla pilotní enynové metateze s modelovými substráty, trimethylsilylacetylenem a 4-brombut-1-ynem.



2-Brom-1-isopropyl-4-[2-(perfluorhexyl)ethenyl]benzen

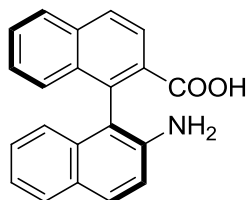
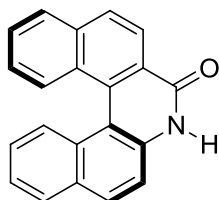
Autor: Antonín Edr
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Častou součástí chirálních rutheniových katalyzátorů enantioselektivní metateze alkenů jsou NHC ligandy modifikované 2,5-disubstituovanými arylovými skupinami. Vzhledem k zaměření naší laboratoře na fluorofilní komplexy přechodných kovů byla cílem mé práce syntéza 2-brom-1-isopropyl-4-[2-(perfluorhexyl)ethenyl]benzen (**1**) jako stavebního bloku pro NHC ligandy. V prvním kroku syntézy jsem nitroval kumen (**2**) za vzniku směsi *o*- a *p*-nitrokumenu (**3**), kterou jsem separoval rektifikací. Bromací *p*-nitrokumenu (**3**) za katalýzy Ag_2SO_4 jsem získal 2-brom-1-isopropyl-4-nitrobenzen (**4**), který jsem redukoval SnCl_2 na odpovídající substituovaný anilin **5**. Diazotace anilinu **5** vedla k odpovídající diazoniové soli, která reakcí s KI poskytla klíčový intermediát, 2-brom-1-isopropyl-4-jodbenzen (**6**). Kritickým krokem syntézy je v současné době studovaná Heckova reakce arenu **6** s (perfluorhexyl)ethenem na cílový fluoraren **1**.



Optimalizace přípravy aminokyseliny na bázi binaftalenu

Autor: Kristýna Janků
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.



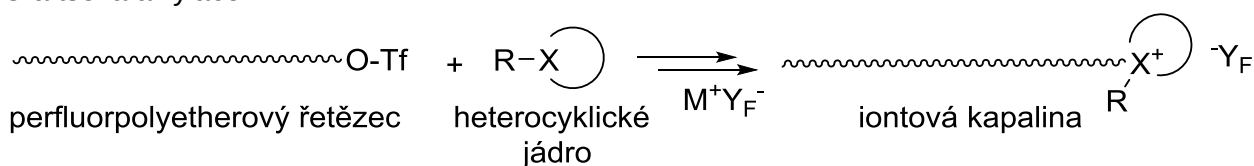
Axiálně chirální aminokyselina na bázi binaftalenu je známá, ale její poměrně komplikovaná příprava zatím brání širšímu využití této molekuly. Již dříve byl v naší laboratoři zkoumán postup přípravy této aminokyseliny jednodušším způsobem. Nakonec se ovšem podařilo získat pouze

cyklický amidový derivát. Cílem mé práce je nalézt takové podmínky přípravy aminokyseliny, které zabrání vzniku tohoto cyklického derivátu.

Syntéza a využití fluorofilních iontových kapalin

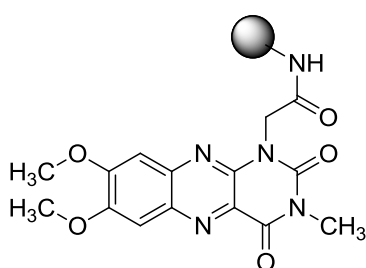
Autor: Nikola Štěpánková
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

V naší laboratoři jsme při studiu fluorofilních vlastností organických sloučenin zjistili, že modifikace perfluoropolyetherovými řetězci vede ke sloučeninám s vyšší fluorofilitou než modifikace řetězci perfluoralkylými. Nejvýraznější byl tento rozdíl pro iontové kapaliny na bázi bis(polyfluorpolyoxaalkylovaných) imidazoliových solí, které jsou vysoce rozpustné v perfluorovaných rozpouštědlech. Jejich nevýhodou je nízká stabilita heterocyklického jádra. Cílem mé práce je proto syntéza nových typů fluorofilních iontových kapalin, které by obsahovaly stabilnější heterocyklické centrální jednotky. Zjistila jsem, že kvarternizace těchto jader jedním polyfluorpolyoxaalkylovým řetězcem vede k látkám s teplotou tání přes 150 °C, které proto nejsou iontovými kapalinami. Ve své práci dále studuji roli fluorovaných aniontů a nefluorovaného alkyly na teplotu tání získaných kvarterních solí a jejich stabilitu jako rozpouštědel v modelových reakcích jako je Dielsova-Alderova reakce nebo Friedelova-Craftsova alkylace.



Nové fotokatalyzátory na bázi funkcionalizovaných nanočástic

Autor: Jessica Špačková
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.



V posledních letech je intenzivně studováno uplatnění nanočástic (NPs) v heterogenní katalýze,¹ jejíž výhodou je průběh reakce v mírnějších podmínkách, vysoká selektivita, snadnější separace a díky možnosti opakovaného použití katalyzátoru také snížení nákladů celého procesu. Velmi rozšířené jsou křemičité nanočástice, zejména pro jejich snadnou přípravu, která navíc nezatěžuje životní prostředí.² Navázáním fotochemicky aktivních látek na mezoporézní křemičitý nosič je možné připravit sloučeniny využitelné ve fotokatalýze. Cílem mé práce je připravit

a funkcionalizovat křemičité nanočástice MCM-41, navázat „alloxazin“ na jejich povrch a otestovat účinnost připraveného katalyzátoru při [2+2] cykloadicích alkenů, které již byly v homogenním prostředí úspěšně provedeny v naší laboratoři³.

¹ Ciriminna R., Demma Carà P., Lopez-Sanchez J. A., Pagliaro M. *ChemCatChem* **2014**, 6, 3053.

² Meynen V., Cool P., Vansant E. F. *Microporous Mesoporous Mater.* **2009**, 125, 170.

³ Mojr V., Svobodová E., Straková K., Neveselý T., Chudoba J., Dvořáková H., Cibulka R.: *Chem. Comm.* **2015**, 51, 12036.

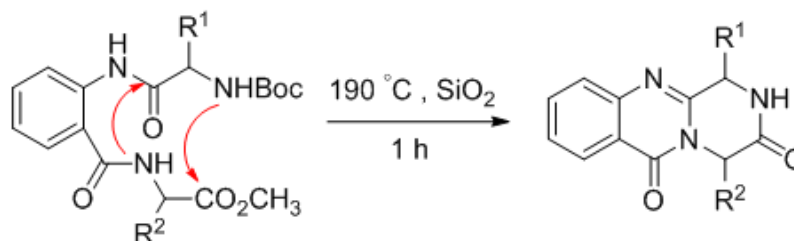
Nový přístup k derivátům chinazolinu, čtyřkroková syntéza ardeeminu

Autor: Václav Chmela
Ročník: B2
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Školitel: Ullrich Jahn, Dr. habil. (UOCHB)

Deriváty chinazolinu jsou rostoucí skupinou alkaloidů mající různou biologickou aktivitu.^[1] Biosynteticky jsou tvořeny z tryptofanu a anthranilové kyseliny se začleněním dalších jednotek aminokyselin. Zástupci této skupiny vykazují mnohočetnou rezistenci k lékům (MDR), cytotoxické a antivirotické účinky, a proto je potřeba praktických metod, které umožní syntézu těchto alkaloidů a jejich derivátů ve větších množstvích.

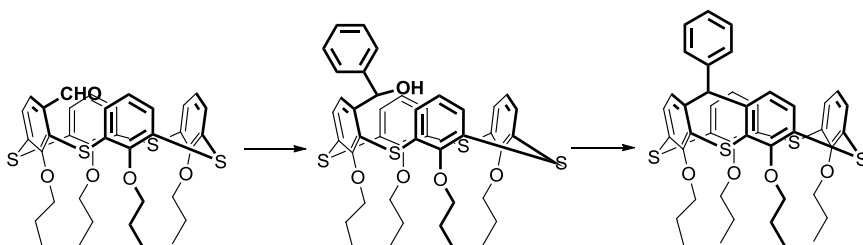
Níže popisující metodou vedoucí k derivátům chinazolinu je přístup využívající silikagelem zprostředkovanou dvojitou kondenzací. Tato metoda byla úspěšně aplikována na totální syntézu gyantrypinu a ardeeminu.

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



Příprava intramolekulárně přemostěných derivátů thiacalix[4]arenů a calix[4]arenů

Autor: Victoria Tarus
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Petr Slavík



V naší skupině byla nedávno publikována unikátní metoda přípravy intramolekulárně přemostěných calixarenů, které vykazují jedinečné vlastnosti a reaktivitu. Nicméně přemostění

thiacalixarenů není dosud popsáno, a proto se tímto tématem zabývám. Cílem této práce je vytvoření přemostěných derivátů thiacalixarenů, jejichž molekula je dodatečně zpevněna dalším intramolekulárním mostem. Pro přípravu těchto sloučenin byla využita *meta*-formylace thiacalix[4]arenů v *konické* konformaci. Dalším cílem práce je zkoumání vlivu různých substituentů, umožňujících další funkcionalizaci, na horním okraji klasických calixarenů na intramolekulární přemostění. Tyto vysoce preorganizované makrocikly budou sloužit základem pro konstrukci nového typu ligandů pro selektivní komplexaci a rozpoznávání.

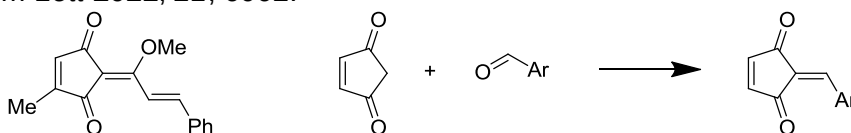
Syntéza a biologická aktivita 2-aryldencyklopent-4-en-1,3-dionů

Autor: Jakub Ottenschläger
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

Tato práce se zabývá syntézou a studiem biologické aktivity syntetických analogů odvozených od přírodní látky Coruscanonu A (Schema 1) vyznačující se antimikrobiálními a antifungicidními účinky. Tyto analogy tak představují deriváty cyklopent-4-en-1,3-dionu (CPD), přičemž již předchozí testy jednoduchého derivátu: 2-benzyliden-4-cyklopenten-1,3-dionu¹ ukázaly, že tato látka má oproti přírodnímu derivátu nižší cytotoxicitu. Tento výsledek proto skýtá vysokou pravděpodobnost, že existuje prostor ke zlepšení, vhodnou volbou strukturního motivu molekuly.

Syntéza 2-aryldencyklopent-4-en-1,3-dionů využívá Knoevenagelovu kondenzační reakci příslušně substituovaného aromatického aldehydu a komerčně dostupného cyklopent-4-en-1,3-dionu.

(1) Tichotova, L.; Matousova, E.; Spulak, M.; Kunes, J.; Votruba, I.; Buchta, V.; Pour, M. *Bioorg Med Chem Lett* **2011**, 21, 6062.

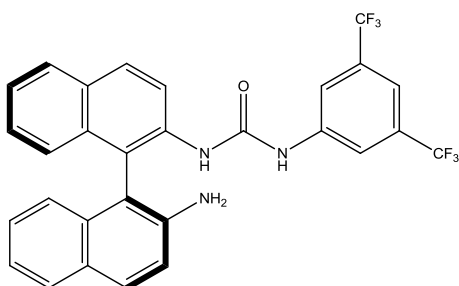


Schema 1. Coruscanon A, obecná syntéza CPD derivátů

Sekce : Organická chemie B2

Nesymetricky substituované deriváty **1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu**

Autor: Adéla Sedlářová
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.



Je známo, že močovinnové deriváty 1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu enantioselektivně interagují s chirálními molekulami nesoucími akceptory vodíkové vazby. Nesymetrická substituce výchozího diaminu by umožnila lépe přizpůsobit výslednou molekulu. Cílem mé práce tedy bylo připravit molekulu nesoucí pouze jednu močovinnovou skupinu a jednu volnou aminoskupinu, která by umožnila následné syntetické transformace podle požadovaného použití.

Sekce : Organická chemie B2

Syntéza kvapalné kryštalických dimérů na bázi **3,5-dihydroxybenzoové kyseliny**

Autor: Juraj Malinčík
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Michal Kohout, Ph.D.

Kvapalné kryštály sa stali neoddeliteľnou súčasťou elektrotechnického priemyslu. Dnes sú predmetom záujmu molekuly, tvoriace biaxiálne nematickú fázu, ktorá je zaujímavá z dôvodu potencionálneho zrýchlenia odozvy kvapalné kryštalického displeja na použité elektrické napätie. Doposiaľ pripravené molekuly vo svete vykazovali túto fázu pri teplotách nad 200 °C. Naším cieľom bolo pripraviť molekuly, tvoriace biaxiálne nematickú fázu pri nižších teplotách. Základom molekúl bola 3,5-dihydroxybenzoová kyselina, z ktorej bola pripravená séria molekúl nižšie uvedenej obecné štruktúry.

