

ÚSTAV ORGANICKÉ CHEMIE
STUDENTSKÁ VĚDECKÁ KONFERENCE 2014
Pátek 21. 11. 2014

08:45 – 09:05	Shromáždění členů komisí včetně zástupců sponzorů v laboratoři A (II. patro budovy A, příčná chodba N, místnost NO8)
09:05 – 09:15	Zahájení a rozchod do jednotlivých poslucháren
09:15 – 11:30	Prezentace studentů v jednotlivých komisích
11:30 – 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 - magisterská**
místnost A250, 9:15 hod

Komise:

Předseda:

Členové:

doc. Ing. Igor Linhart, CSc.
prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.
doc. Ing. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK)
Ing. Eva Svobodová, Ph.D.
Ing. Radek Jurok, Ph.D. (organizační tajemník)
PharmDr. Jan Pavlík, Ph.D. (CaymanPharma)
Ing. Marie Dymičová (Apigenex)
Ing. Jiří Vokál, Ph.D. (Lach-Ner)

Soutěžící:

09:15	Aneta Pospíšilová (4)
09:30	Martin Jakubec (5)
09:45	Martin Maroušek (4)
10:00	Tomáš Hodík (5)
10:15	<i>přestávka</i>
10:30	Tomáš Klejch (4)
10:45	Jan Zelenka (5)
11:00	Veronika Bílková (4)
11:15	Tomáš Beránek (5)

Sekce: **Organická chemie M2 - magisterská**
posluchárna A11, 9:15 hod

Komise:

Předseda:

Členové:

doc. Dr. Ing. Jana Hodačová
prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.
Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.
Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.
doc. Ing. Jan Budka, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Ivan Veselý, CSc. (CaymanPharma)
Mgr. Martin Švec (Vitrum VWR)
Ing. Martin Skalický, Ph.D. (Lonza)

Soutěžící: 09:15 Tereza Prausová (5)
 09:30 Lukáš Lattenberk (4)
 09:45 David Just (5)
 10:00 Hana Váňová (5)
 10:15 *přestávka*
 10:30 Tomáš Landovský (4)
 10:45 Iveta Klimánková (5)
 11:00 Kateřina Bártová (4)
 11:15 Bronislav Jurásek (5)

Sekce: **Organická chemie M3 - magisterská**
místnost A278e, 9:15 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. František Hampl, CSc.

Členové: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Ing. Václav Kozmík, CSc.

Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. (organizační tajemník)

Ing. Petr Michálek (NeoTec)

Ing. Hanuš Slavík (Momentive)

Ing. Miroslav Dudič, Ph.D. (Medicem)

Soutěžící: 09:15 Pavel Švec (5)
 09:30 Karolína Straková (4)
 09:45 Vít Zvoníček (5)
 10:00 Jiří Lapčík (4)
 10:15 *přestávka*
 10:30 Lubomír Váňa (5)
 10:45 Pavlína Lipovská (4)
 11:00 Rafael Navrátil (5)
 11:15 Peter Polák (5)

Studenti bakalářského programu:

Sekce: **Organická chemie B - bakalářská**
místnost A278c, 9:15 hod

Komise:

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

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

doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Ing. Petra Cuřínová, Ph.D. (ÚCHP)

Ing. Michal Himl, Ph.D. (organizační tajemník)

Ing. Jan Kočí, Ph.D. (Interpharma)

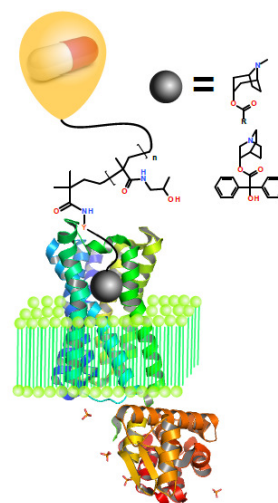
Ing. Jan Kroupa, Ph.D. (Proxim)

Soutěžící: 09:15 Heda Jakubův (3)
 09:30 Adam Pokluda (2)
 09:45 Michaela Houšková (3)
 10:00 Kateřina Kučňírová (3)
 10:15 *přestávka*
 10:30 Martin Tlustý (3)
 10:45 Hana Brunhoferová (3)
 11:00 Pavla Zielonková (3)

Syntéza polymerních konjugátů ligandů MACHR pro onkologickou diagnostiku a terapii

Autor: Aneta Pospíšilová
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

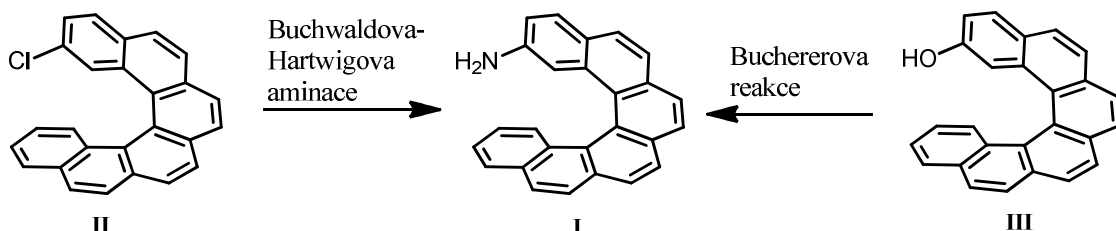
Muskarinový acetylcholinový receptor (MACHR) byl dlouho zkoumán jen pro svou funkci v nervovém systému. Ukazuje se ovšem, že některé typy rakovinných buněk jej silně hyperexprimují. Ligandy MACHR je proto možné použít pro vysoce účinné cílení rakovinné tkáně, pokud se zabrání jejich průniku k nervovým buňkám. Ideálním řešením je navázáním ligandu na vhodnou polymerní nanočástici, která znemožní průnik ligandu k nervové tkáni a navíc může nést a řízeně uvolňovat chemoterapeutikum. Cílem mé práce je syntetizovat takový „drug delivery“ systém. V současnosti připravuji řadu methakrylamidových monomerů, které prostřednictvím různých linkerů ponesou ester tropinu nebo 3-chinuklidinyl-benzilát. Kopolymerací těchto monomerů s 2-hydroxypropylmethakrylamidem a další funkcionalizací polymeru bude připraven požadovaný „drug delivery“ systém. Na základě získaných poznatků v budoucnu připravím širší škálu analog cholinu pro další experimenty *in vitro* a *in vivo*.



Příprava 2-amino[6]helicenu jako prekursoru pro chirální flaviniové katalyzátory

Autor: Martin Jakubec
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.; Ing. Jan Storch, Ph.D.

Chirální flaviniové soli jsou látky schopné působit jako enantioselektivní oxidačně-redukční katalyzátory v řadě reakcí, například u sulfoxidací, *N*-oxidací, nebo v Baeyerových-Villigerových reakcích. Heliceny jsou naproti tomu polycyklické, inherentně chirální sloučeniny, jež disponují velkým potenciálem pro řadu využití, mimo jiné v enantioselektivní katalýze. Cílem této práce je připravit 2-amino[6]helicen (I), který může být následně inkorporován do struktury flaviniové soli tak, aby fungoval jako chirální selektor. Bylo připraveno několik prekurzorů potenciálně vedoucích ke struktuře I, z nichž sloučeniny II a III poskytují 2-amino[6]helicen pomocí Buchererovy, respektive Buchwaldovy-Hartwigovy reakce v dobrých výtěžcích.

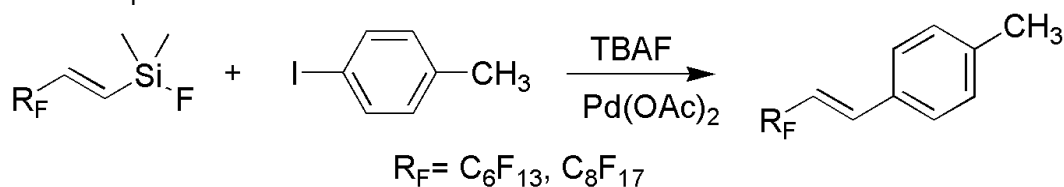


Sekce : Organická chemie M1

Studie Hiyamova couplingu polyfluoralkenyl- a polyfluorpolyoxaalkenylsilanů

Autor: Martin Maroušek
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

V naší laboratoři se v současné době zabýváme syntézou polyfluoralkylovaných NHC ligandů pro rutheniové katalyzátory recyklovatelné pomocí fluorových separačních metod. Ve své práci jsem se zabýval přípravou polyfluoralkenylsilanů a polyfluorpolyoxaalkenylsilanů a jejich potenciálním využitím pro Hiyamův coupling s modelovou látkou, 4-jodtoluenem, a fluorderiváty 4-jodanilinu jako potenciálními intermediáty pro fluorové NHC ligandy. Hiyamův coupling polyfluoralkenylsilanů s 4-jodtoluenem proběhl podle očekávání, ale coupling s fluorderiváty 4-jodanilinu neproběhl.

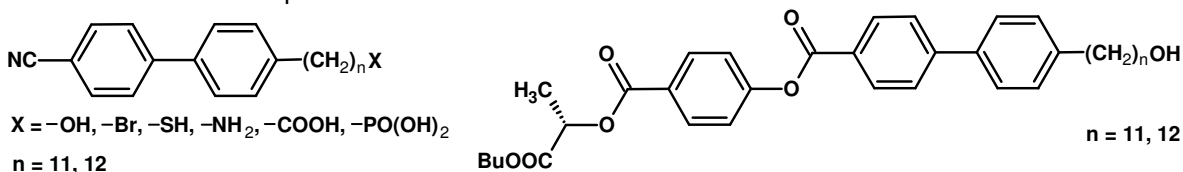


Sekce : Organická chemie M1

Kapalné krystaly: Ligandy pro magnetické nanočástice

Autor: Tomáš Hodík
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Kapalně-krystalické materiály představují pestrou paletu sloučenin, které v sobě skrývají nevyčerpatelné možnosti aplikace. Využití bifenylního 4-karbonitrilu pro design a syntézu kapalně-krystalických materiálů je široce rozšířená oblast zájmu. Naším cílem bylo připravit ω -substituované modelové kapalně-krystalické materiály a studovat vliv terminální funkční skupiny ($-\text{Br}$, $-\text{OH}$, $-\text{COOH}$, $-\text{SH}$, $-\text{NH}_2$, $-\text{PO}(\text{OH})_2$) na mesomorfní chování. Ve své práci se zabývám jak syntézou cílených potenciálních mesogenů, tak i studiem mesomorfního chování ve vztahu ke struktuře produktů.



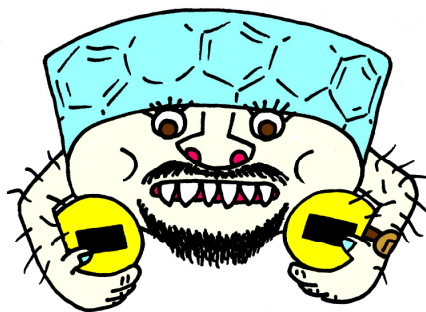
Příprava iontových receptorů na bázi calix[4]arenů – syntéza a studium vlastností

Autor: Tomáš Klejch
Ročník: M1
Ústav: Organické Chemie
Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Calixareny jsou makrocyclické sloučeniny, jejichž deriváty tvoří již několik desítek let důležitou součást supramolekulární chemie. Zavedením vhodných funkčních skupin do skeletu calixarenu lze připravit receptory, které nacházejí využití v různých multioborových aplikacích. Tato práce je zaměřena na přípravu receptorů pro anionty, jejichž rozpoznávání je obtížnější než rozpoznávání kationtů a je méně prozkoumáno.

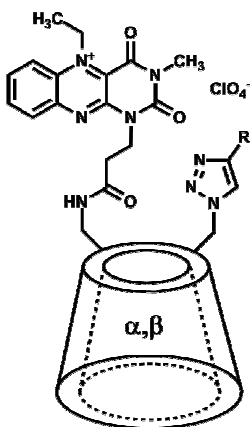
Pro syntézu receptorů byly připraveny deriváty s nitro skupinami v různých pozicích. Deriváty s nitro skupinou na horním okraji nesou dále acetátové, nebo propargylové funkce na spodním okraji, které umožňují další derivatizaci. Deriváty s nitro skupinou na spodním okraji byly připraveny nosylací a obsahují sulfonylové elektronakceptorní skupiny, které zlepšují komplexační vlastnosti výsledného receptoru.

V dalším kroku byly zredukovány nitroskupiny a reakcí takto připravených aminoderivátů s různými isokyanáty byly připraveny cílové receptory. Jejich komplexační vlastnosti byly zkoumány pomocí NMR spektroskopie.



Flavin-cyklodextrinové katalyzátory s modifikovanou cyklodextrinovou podjednotkou

Autor: Jan Zelenka
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D., Mgr. Tomáš Kraus, Ph.D.

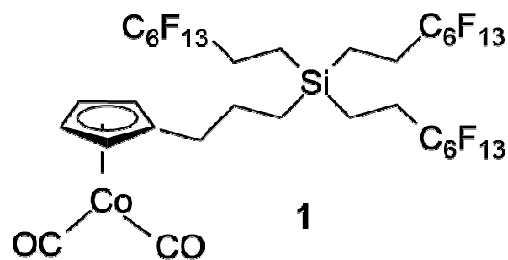


Flavin-cyklodextrinové a pyrimidin-cyklodextrinové konjugáty představují slibné katalyzátory enantioselektivních oxidací sulfidů na sulfoxidy peroxidem vodíku. S jejich využitím je dosahováno enantioselektivity až 91 % při oxidacích alifatických sulfidů. Za enantioselektivní průběh reakce v přítomnosti flavin-cyklodextrinového katalyzátoru je zodpovědná inherentně chirální cyklodextrinová jednotka. Stávající struktura konjugátů neumožňuje jejich modifikaci na cyklodextrinovém skeletu, a tím pádem neumožňuje případné zlepšení enantioselektivity pro konkrétní substrát. Cílem práce je syntéza cyklodextrinového skeletu, který by mohl být snadno selektivně substituován dvěma substituenty: flavinovou jednotkou a stereodiskriminantem, a prozkoumání vlivu různých stereodiskriminantů a způsobu jejich připojení na cyklodextrinový skelet.

Syntéza a využití fluorofilního cyklopentadienu

Autor: Veronika Bílková
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Vysoce fluorované látky vykazují výbornou preferenční rozpustnost ve fluorových rozpouštědlech oproti rozpouštědlům organickým, dobrou rozpustnost ve superkritickém CO₂ a vysokou afinitu k fluorovaným povrchům. Těchto vlastností se, mimo jiné, dá využít v řadě separačních metod. V této práci byl připraven polyfluorovaný silanový tag využitelný k fluorofilizaci různých substrátů, například cyklopentadienu, acetylenu nebo pyridinu.



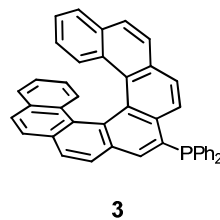
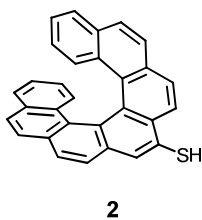
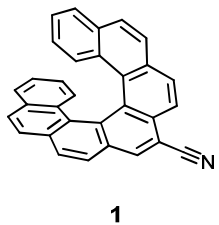
Cyklopentadien s polyfluorovaným tagem byl využit k syntéze fluorofilních komplexů - titanocen dichloridu a komplexů kobaltu, které jsou běžně využívány jako katalyzátory cyklotrimerizačních reakcí. Katalytická aktivita komplexu **1** byla otestována na modelovém substrátu fenylacetyleny za různých podmínek v scCO₂.

Syntéza N, S a P derivátů [7]helicenu a studium jejich koordinačních vlastností s přechodnými kovy

Autor: Tomáš Beránek
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.; Konzultant: Ing. Jan Storch, Ph.D.

Heliceny představují díky svým unikátním elektronickým a chiroptickým vlastnostem vhodné kandidáty pro širokou škálu aplikací. Přestože byly heliceny již úspěšně použity například také v asymetrické katalýze, neexistuje rozsáhlejší studie přípravy komplexů helicenových ligandů s katalyticky významnými přechodnými kovy.

S důrazem na poslední zmíněnou oblast byl připraven nitrilový (**1**), sulfanylový (**2**) a fosfinový (**3**) derivát [7]helicenu¹ a jejich syntéza byla v rámci této práce dále optimalizována. Byly provedeny pilotní studie komplexačních vlastností 9-(difenylofosfanyl)[7]helicenu (**3**) a pokusy o imobilizaci 9-sulfanylo[7]helicenu (**2**) na nanočástice CdSe.

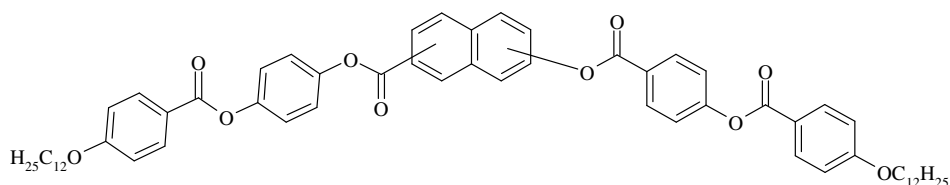


[1] Žádný, J. et al. *Tetrahedron* **2013**, 69, 6213.

Vliv úhlu zalomení na mesomorfní chování kapalných krystalů

Autor: Tereza Prausová
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

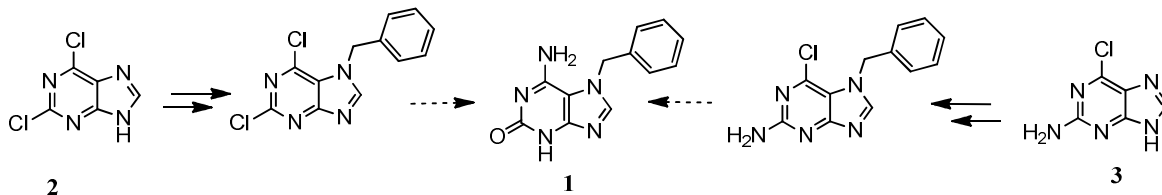
Studium kapalných krystalů je v dnešní době širokým oborem zahrnujícím nejen chemii a fyziku, ale i elektroinženýrství, biologii a další. Své uplatnění ale stále nacházejí především v zobrazovací technice. Tato práce je zaměřena na syntézu nových lomených kapalných krystalů s různým úhlem zalomení. Jako centrální jádro těchto nových sloučenin byly využity polohové izomery hydroxynaftalenkarboxylové kyseliny. Cílem práce je zjistit vliv velikosti úhlu zalomení a místa připojení prodlužujících řetězců na mesomorfní vlastnosti připravených kapalně-krystalických materiálů. Bylo připraveno šest modelových cílových materiálů níže uvedené obecné struktury.



Regioselektivní příprava *N*⁷-substituovaných isoguaninů

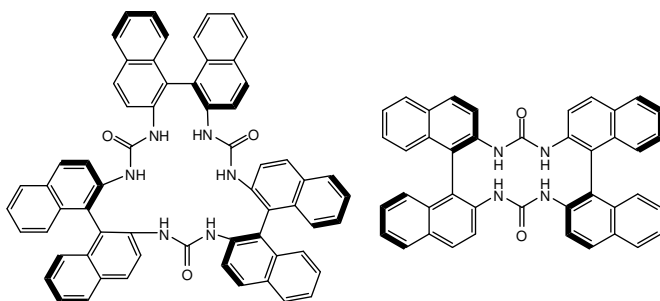
Autor: Lukáš Lattenberk
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Isoguanin je heterocyklická látka odvozená od purinu, jehož strukturní motiv se nachází v řadě biologicky aktivních látek. Na rozdíl od *N*⁶-isomerů je velmi málo známo o biologické aktivitě *N*⁷-substituovaných isoguaninů, pravděpodobně z důvodu jejich obtížné dostupnosti. Proto je cílem této práce vyvinout vhodnou metodu pro regioselektivní syntézu *N*⁷-substituovaných isoguaninů **1**. V příspěvku budou diskutovány výsledky získané během pokusů o přeměnu 2,6-dichlorpurinu (**2**) a 2-amino-6-chlorpurinu (**3**) na koncové produkty **1** s využitím chemie 7,8-dihydropurinů.



Cyklické ligandy na bázi binaftalenových močovin pro enantiomerní komplexaci

Autor: David Just
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.



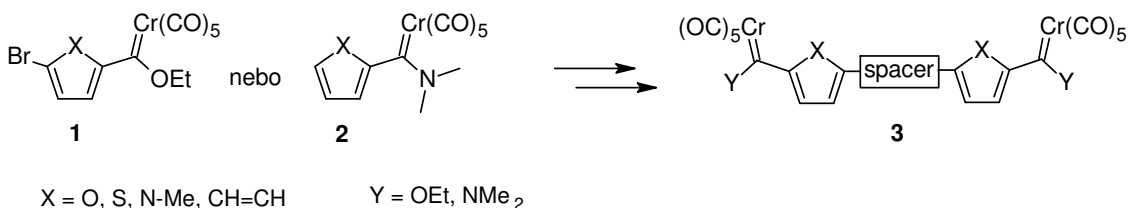
uzavřením kruhu, čímž by vznikla kavita a bylo by dosaženo preorganizované molekuly s definovaným vnitřním prostorem. Cílem této práce je syntéza různých cyklických derivátů močoviny obsahující binaftalenové jednotky, které by mohly být využity k enantiomerní komplexaci chirálních organických látek.

U organokatalytických reakcí hrají významnou roli nekovalentní interakce a tvorba komplexů. Deriváty močoviny a thiomčoviny mají schopnost interagovat s organickými sloučeninami a proto jsou využívány jako ligandy pro komplexaci. Zavedením binaftalenové jednotky vzniká chirální látka a otevírá se tak možnost enantiomerní komplexace. Větší účinnosti by mohlo být docíleno

Regioselektivní příprava Fischerových biskarbenových komplexů chromu

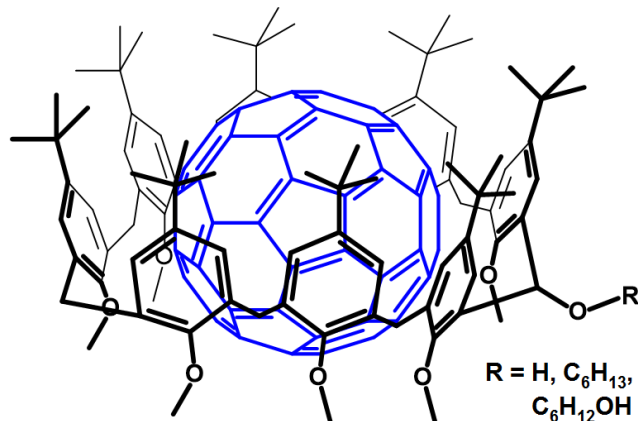
Autor: Hana Váňová
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Fischerovy karbenové komplexy jsou sloučeniny s formální dvojnou vazbou uhlík–kov, které nachází četné aplikace v moderní organické chemii, zejména pak při přípravě přírodních biologicky aktivních látek. Na rozdíl od jednoduchých Fischerových karbenových komplexů je velmi málo známo o elektrochemických vlastnostech, reaktivitě a přípravě Fischerových biskarbenových komplexů. Proto jsme se v naší práci zaměřili na vypracování vhodné metodiky pro syntézu biskarbenových komplexů **3**, kde jsou dva karbenové fragmenty spojeny prostřednictvím různých spojek. Při přípravě cílových molekul **3** vycházíme ze snadno dostupných karbenových komplexů **1,2**. Metalací výchozích látek a následnou reakcí s elektrofilu jsou získány odpovídající symetrické a nesymetrické biskarbenové komplexy **3**.



Příprava derivátů calix[8]arenu vhodných pro chromatografickou separaci fullerenu

Autor: Tomáš Landovský
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

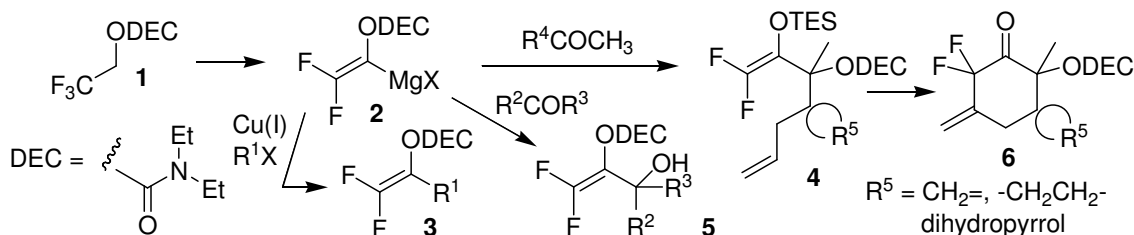


Calix[6]- a calix[8]aren mají díky rozsáhlému π -systému značnou afinitu k fullerenu, se kterým tvoří inkluzní komplexy. Navázáním calixarenu na vhodný nosič (silikagel) lze připravit stacionární fázi pro chromatografickou separaci fullerenu. Cílem práce je syntéza derivátů calix[8]arenu, které by na jednom z můstků nesly substituent vhodný k připojení na nosič. Radikálová bromace ve vodě vede k hydroxyderivátu a v alkoholu k alkoxyderivátu - logickým dalším krokem je proto reakce prováděná v přítomnosti diolu, který po připojení na calix[8]aren bude obsahovat dále transformovatelnou hydroxyskupinu.

2,2,2-Trifluorethanol jako syntetický stavební blok

Autor: Iveta Klimánková
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc., prof. Jonathan M. Percy

Molekuly obsahující fluor nacházejí široké uplatnění v různých oblastech chemie včetně farmakochemie. Fluorované látky s pěti- a šestičlennými kruhy mohou být využity jako analoga cukrů a lze na nich zkoumat specifitu substrátu v příslušných enzymatických reakcích. Dehydrofluorací a metalací chráněného 2,2,2-trifluorethanolu **1** jsem získala enolát **2**, použitelný pro syntézu široké řady sloučenin. Ve své práci jsem se zabývala optimalizací jak jeho přípravy, tak jeho reakcí s elektrofilu na fluorované produkty **3-5**. Difluorkarbamat **4** jsem využila pro syntézu spirocyklů **6** pomocí Saguesovy-Itovy cyklizace.



Syntéza haptenu drog odvozených od fenylethylaminu

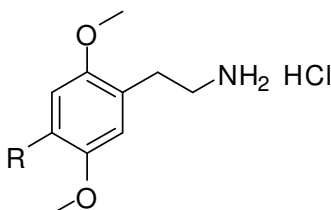
Autor: Kateřina Bártová
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D., Ing. Martin Kuchař, Ph.D.

Nárůst popularity nových syntetických drog v posledních letech odhalil nedostatky v detekci těchto látek v biologických matricích. Rychlý screening ukazující na požití drogy umožňují imunochromatografické testy.

Jejich základem jsou polyklonální

protilátky, které se získávají imunizací laboratorních zvířat konjugáty haptenu s BSA. Hapteny vycházejí ze struktury cílové skupiny drog a jsou opatřeny spojkou zakončenou karboxylovou funkcí, přes kterou jsou dále navázány na volné aminoskupiny lysinu obsažené v BSA.

Byly připraveny dva hapteny **1** a **2** k modelové skupině 2C fenylethylaminů lišící se délkou spojky. Hapten s kratší spojkou byl navázán na BSA a připraveným konjugátem byla imunizována laboratorní zvířata.

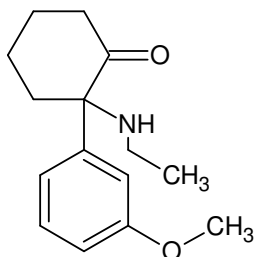


1: R = -CH₂COOH

2: R = -CH₂CH₂CH₂COOH

Syntéza metabolitů psychoaktivní látky methoxetaminu

Autor: Bronislav Jurásek
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.



Methoxetamin

Methoxetamin je z hlediska strukturního i farmakologického analogem ketaminu. I přes komerční dostupnost methoxetaminu jeho kompletní syntéza zatím publikována nebyla. Zatímco ketamin je klasifikován jako látka omamná a psychotropní, držení methoxetaminu u nás protizákonné není. Důkladná znalost jeho účinků a metabolismu je kritickým faktorem pro takzvaný "risk assessment", na základě kterého jsou látky zařazovány mezi zákonem zakázané látky. Vzhledem k řadě intoxikací, včetně fatálních případů, je včasná diagnostika klíčová pro správnou terapii. Pro správnou diagnostiku je nutné srovnání se standardy. Byla navržena syntéza methoxetaminu a několika jeho metabolitů. Takto připravené metabolity budou použity jako standardy pro následné metabolické studie, analytické testy a studium

farmakokinetiky. Změřené přesné hmoty látek budou zařazeny do toxikologické knihovny hmotnostních spekter.

Syntéza nových ligandů cholinového transportéru

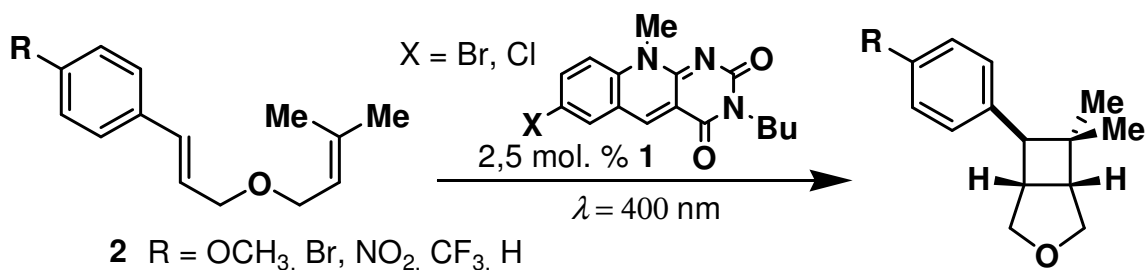
Autor: Pavel Švec
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

Cholinový transportér (ChT) je hyperexprimován na povrchu některých typů nádorových buněk a představuje tak molekulární strukturu využitelnou pro cílení diagnostických a terapeutických radiofarmak. Předložený syntetický postup vede k novým radioznačitelným derivátům cholinu a umožňuje syntézu řady strukturně příbuzných látek. Přípravu radioizotopově značených derivátů jsem optimalizoval k dosažení vysokých radiochemických výtěžků ve vodném prostředí bez nutnosti chromatografické separace. Při *in vitro* testování první série látek byla pozorována jejich preferenční vazba na nádorové linie hyperexprimující ChT, a to s řádově vyšší afinitou než u běžně používaných standardů (cholin, hemicholinium-3). Na základě získaných poznatků v budoucnu připravím širší škálu analog cholinu pro další experimenty *in vitro* a *in vivo*.

Halogendeazaflaviny jako nové katalyzátory pro fotochemické [2+2] cykloadice

Autor: Karolína Straková
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

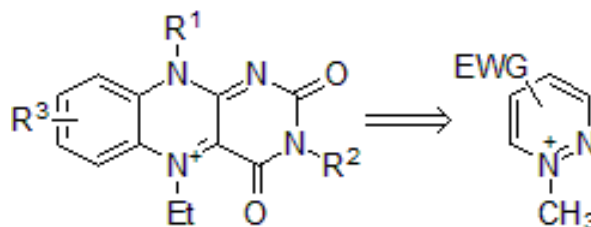
V posledních pěti letech dochází k rychlému rozvoji nových syntetických postupů založených na reakcích využívajících viditelného světla ve spojení s vhodnými fotokatalyzátory. Jednou z takových reakcí je fotochemická [2+2] cykloadice představující pravděpodobně nejužitečnější způsob přípravy derivátů cyklobutanu. Zatímco dosud známé přístupy využívají UV záření nebo viditelné světlo v kombinaci s komplexními katalyzátory ušlechtilých kovů, byla u nás v laboratoři pozorována fotochemická [2+2] cykloadice iniciovaná viditelným světlem a flavinovým fotosenzitizátorem. S cílem využít tzv. efektu těžkého atomu byly připraveny nové katalyzátory 7-halogen-5-deazaflaviny **1** a jejich katalytická aktivita byla otestována na řadě 1,6-nenasycených etherů **2**. Studován byl dále vliv rozpouštědla na průběh reakce, stabilita katalyzátorů a možnost aplikace intramolekulárních [2+2] cykloadic při totální syntéze přírodních látek.



Pyridaziniové soli jako katalyzátory oxidací peroxidem vodíku

Autor: Vít Zvoníček
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

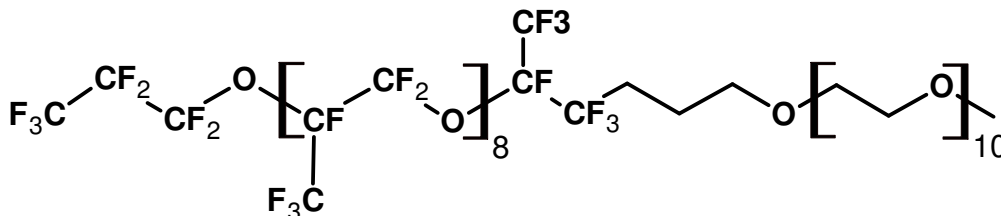
Flaviniové soli byly studovány jako účinné chemoselektivní katalyzátory oxidací pomocí peroxidu vodíku. Bylo zjištěno, že je možno relativně složitý skelet flavinového katalyzátoru nahradit jednoduchou heteroarenií, která nese elektronegativní substituent, za dosažení podobné katalytické účinnosti. Tím se zjednoduší syntéza a zvýší dostupnost takových katalyzátorů pro praktické aplikace. Dosud byly testovány soli připravené z pyrazinu, pyridinu a pyrimidinu. Cílem práce je příprava substituovaných pyridaziniových solí a otestování jejich katalytické účinnosti s využitím modelových substrátů. Do budoucna se uvažuje i možnost zavedení chirálního selektoru pro katalýzu enantioselektivních oxidací.



Příprava nové povrchově aktivní látky radikálovou adicí

Autor: Jiří Lapčík
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Chadron Mark Friesen Ph.D.; doc. Ing. Jaroslav Kvičala, CSc.

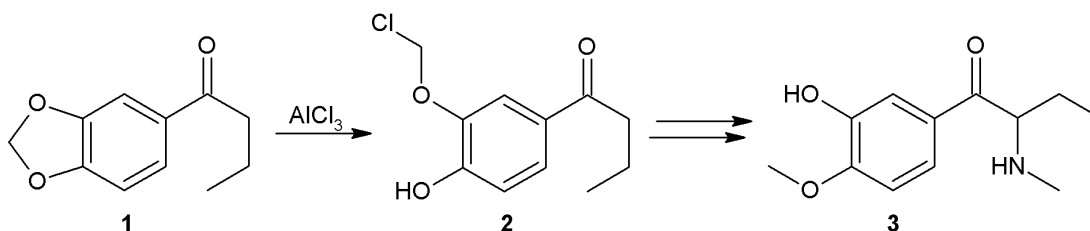
Polyfluorované povrchově aktivní látky nacházejí široké využití v běžném životě, například ve voděodolných membránách, při povrchové ochraně materiálů, i jako přísada do hasících pěn. Nevýhodou je minimální biodegradabilita dříve běžně používaných sloučenin jako je perfluorooctanová kyselina (PFOA) a tím jejich akumulace v životním prostředí. Cílem mé práce bylo připravit látku potenciálně schopnou nahradit používanou PFOA a provést její základní charakterizaci. Jako výchozí látka byl použit jodoligoheptafluoropropylenoxid (pHFPO-I). Reakcí s allylpolyethylenglykolem na fázovém rozhraní byl radikálovou adicí připraven odpovídající diblok. Následnou redukcí byla získána nová povrchově aktivní látka s výrazně nižší kritickou micelární koncentrací než jakou vykazovala pro srovnání použitá amonná sůl kyseliny perfluorooctanové.



Syntéza metabolitů nových syntetických drog s 1,3-dioxolanovým kruhem

Autor: Lubomír Váňa
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

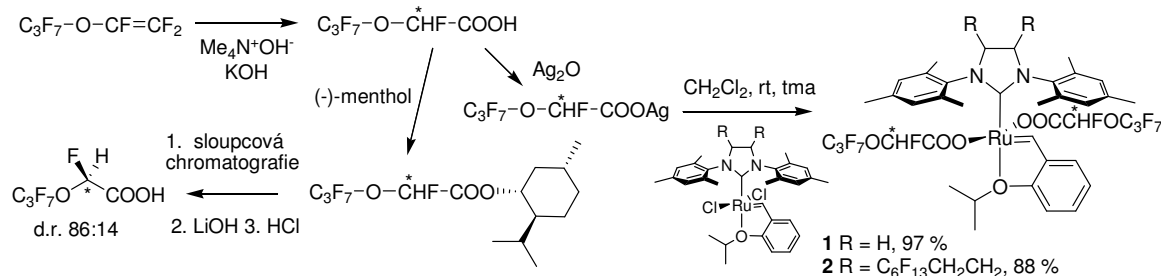
Celá řada psychoaktivních látek (např: MDMA (extáze), Eden, Butylon...) obsahuje ve své struktuře 1,3-dioxolanový kruh. Tyto látky podléhají v organismu metabolickému otevření kruhu, a proto bylo cílem této práce vypracovat metodu štěpení tohoto kruhu vhodnou k syntéze analytických standardů využitelných pro studium metabolismu nových syntetických drog, které ve své struktuře 1,3-dioxolanový kruh zahrnují. Štěpení bylo prováděno pomocí AlCl_3 a rovněž byla studována regioselektivita této reakce. Jedna z připravených látek (3-chlormethoxy-4-hydroxybutyrofenon (**2**)) byla použita k syntéze potenciálního metabolitu (**3**) drogy Butylonu. Takto synteticky připravené látky mohou sloužit jako autentické standardy pro studium metabolismu a pro praktické aplikace v klinické a forensní toxikologii.



Rutheniové katalyzátory modifikované polyfluoroxaalkanoáty

Autor: Pavlína Lipovská
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

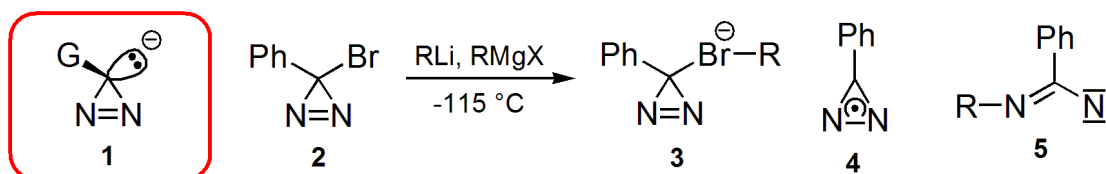
Ve své práci jsem se zabývala syntézou rutheniových komplexů **1**, **2** nesoucích racemické polyfluoroxaalkanoátové ligandy. Tyto katalyzátory jsou poměrně stabilní a překvapivě vysoce aktivní při metatezi alkenů za vzniku tetrasubstituované dvojné vazby. V další části práce jsem studovala rezoluci racemických polyfluoroxaalkanových kyselin jako prekurzorů pro přípravu chirálních rutheniových katalyzátorů enantioselektivní metateze alkenů. Jako zatím nejúspěšnější se ukázala separace distereoisomerních (-)-menthyl-esterů pomocí sloupcové chromatografie.



Metalace 3*H*-diazirinů

Autor: Rafael Navrátil
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.

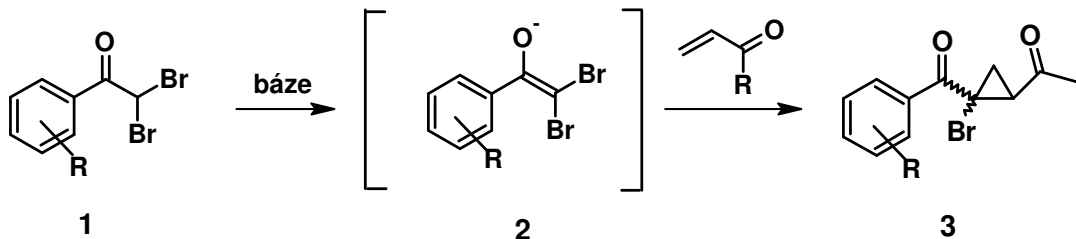
3*H*-Diaziriny jsou cyklické valenční izomery diazoslučenin. Na rozdíl od snadné metalace diazoslučenin na centrálním atomu uhlíku není metalace diazirinů prozkoumána. Odpovídající karbanionty **1**, formálně antiaromatické 4π elektronové systémy, byly již dříve generovány v plynné fázi a kvantově-chemické výpočty předpovídají jejich relativní stabilitu. Reakce 3-brom-3-fenyldiazirinu (**2**) jako modelové sloučeniny s organolithnými sloučeninami za velmi nízkých teplot poskytuje „ate“ komplexy **3** a radikál **4**, zatímco reakce s organohorečnatými sloučeninami poskytuje imidoynitreny **5**. Reaktivní intermediáty **3**, **4**, **5** následnými reakcemi poskytují izolovatelné produkty – dehalogenovaný diazirin, benzonitril, resp. *N,N'*-dialkylamidiny.



Příprava substituovaných bromcyklopropanů s využitím α,α-dihalogenketonů

Autor: Peter Polák
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

V přírodě se cyklopropanové uskupení vyskytuje velmi často jako součást metabolických derivátů a biologicky aktivních látek. Proto jsme se pokusili vypracovat vhodnou metodiku pro přípravu substituovaných bromcyklopropanů **3**. Výchozí látkou při přípravě cyklopropanových derivátů jsou dibromketony **1**, které byly získány reakcí terminálních alkynů s NBS. Přeměna výchozí látky **1** na enolát **2** byla provedena účinkem vhodné báze a následná reakce enolátu **2** s Michaelovskými akceptory poskytla cyklopropanové deriváty **3**. V příspěvku bude diskutován vliv reakčních podmínek, struktury výchozích látek a aditiv na průběh cyklopropanační reakce.

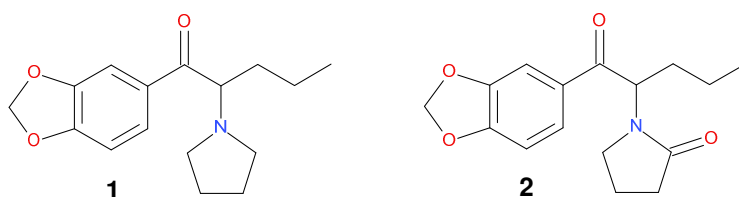


Sekce : Organická chemie B

Syntéza metabolitu methylenedioxyprovaleronu

Autor: Heda Jakubův
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

Kathinony tvoří skupinu nových syntetických drog tzv. "designer drugs" se silnými psychostimulačními účinky, jež jsou v hojně míře zneužívány jako náhražka za klasické drogy. Jsou odvozeny od katinonu, alkaloidu fenylalkylaminového typu vyskytujícího se v rostlině Kata jedlá (*Catha edulis*). Do této skupiny drog patří i methylenedioxyprovaleron **1**, jenž se v těle uživatelů přeměňuje za vzniku celé řady metabolitů, jejichž struktura byla prokázána pomocí hmotnostní spektrometrie. Pro plánovanou diagnostiku je proto nutné připravit veškeré metabolity a mým úkolem bylo připravit laktam **2**.

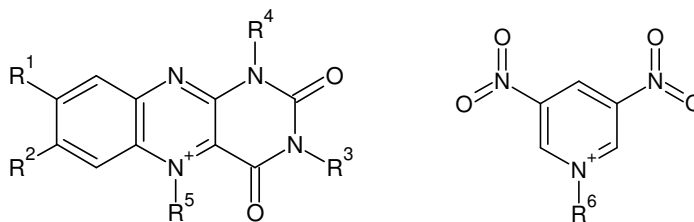


Sekce : Organická chemie B

Deriváty 3,5-dinitropyridinu jako katalyzátory oxidací peroxidem vodíku v dvoufázových prostředích

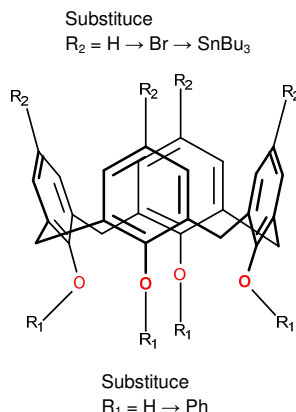
Autor: Adam Pokluda
Ročník: B2
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D., Ing. Jiří Šturala

V nedávné době byla v naší laboratoři popsána oxidace sulfidů na sulfoxidy peroxidem vodíku v dvoufázovém prostředí voda – organické rozpouštědlo katalyzovaná amfifilními flaviniovými solemi, které zde fungují jako katalyzátory fázového přenosu peroxidu vodíku (*ChemCatChem* **2014**, 6 (10), 2843-2846). V této reakci by flaviniové soli mohly být nahrazeny jednoduššími heteroareniiovými solemi, které jsou snadněji synteticky dostupné. Cílem mé práce je příprava série lipofilních 1-alkyl-3,5-dinitropyridiniových solí a jejich otestování jako katalyzátorů oxidace modelových substrátů v prostředí chloroform – voda.



Substituce calix[4]arenového skeletu

Autor: Michaela Houšková
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.



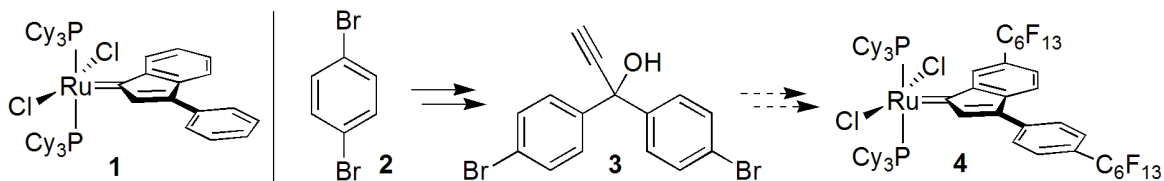
V projektu budou prezentovány reakce na calixarenech, které mohou být substituovány na horním nebo spodním okraji. První část bude věnována fenylacím spodního okraje calixarenů. V této oblasti byla provedena celá řada pokusů, jejichž výsledky budou diskutovány. V druhé části budou představeny substituce horního okraje, konkrétně tvorba stannanů, které budou v budoucnosti využity ke cross-coupling reakcím.

Intermediáty pro fluorované indenylidenové komplexy Ru

Autor: Kateřina Kučňirová
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Rutheniový komplex **1** je komerčně dostupný katalyzátor metateze alkenů s vysokou stabilitou, ale pomalou iniciační fází. U jeho bis-perfluoralkylovaného analogu **4** by vlivem elektronakceptorních skupin mělo dojít k urychlení iniciační fáze a zvýšení fluorofility, která by umožnila recyklaci katalyzátoru z reakční směsi.

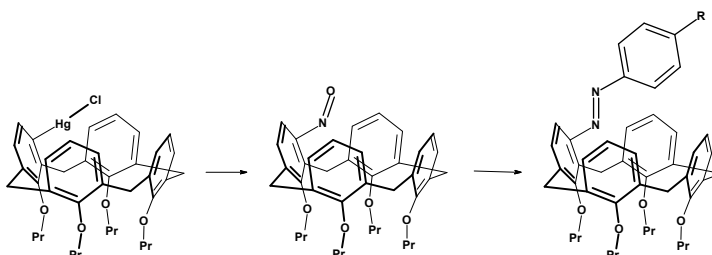
Cílem mé práce byla syntéza intermediátů pro fluorový indenylidenový ligand komplexu **4**. Studovala jsem dvě reakční cesty: v první jsem získala z *p*-dibrombenzenu (**2**) tříkrokovou syntézou diarylovaný propynol **3**, výchozí sloučeninou druhé cesty byl 1-brom-4-(perfluorhexyl)benzen. Pokusy o zavedení perfluoralkylových skupin do molekuly propynolu **3** byly zatím neúspěšné.



Příprava *meta*-nitrosocalix[4]arenů a jejich využití v syntéze azosloučenin

Autor: Martin Tlustý
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Petr Slavík

Calixareny jsou makrocyclické sloučeniny, které tvoří již po několik desítek let spolu s cyklodextriny, porfyriny a fullereny nedílnou součást supramolekulární chemie. Většina popsaných metod derivatizace horního okraje calix[4]arenu vede k substituci do *para*-polohy. Využitím



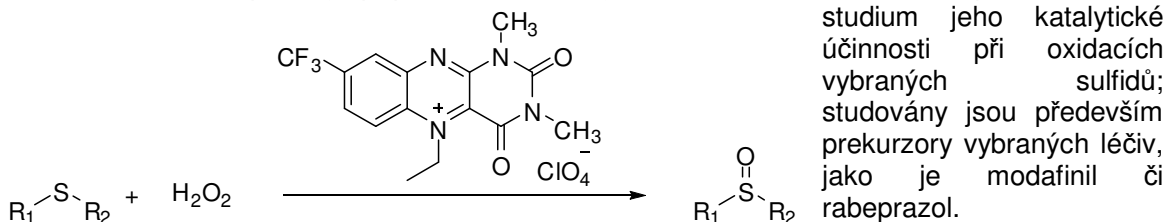
elektrofilní aromatické merkurace je však možné selektivně provést substituci v poloze *meta*.

Tato práce se zabývá přípravou calix[4]arenů nesoucích v poloze *meta* nitroso skupinu. Těchto sloučenin bylo dále využito především v přípravě azosloučenin, které by mohly sloužit jako prekursor pro syntézu složitějších inherentně chirálních receptorů. Další část práce se zabývá využitím mononitrosoderivátu k přípravě intramolekulárně přemostěných derivátů calix[4]arenu. Tyto sloučeniny mají pravděpodobně velmi odlišné chování oproti běžným calixarenům.

Příprava a studium katalytické aktivity alloxaziniové soli s elektronakceptorní trifluormethylovou skupinou

Autor: Hana Brunhoferová
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Sulfoxidy představují významné intermediáty v organické syntéze, některé z nich vykazují výraznou biologickou aktivitu a používají se jako farmaceutické substance, například inhibitory protonové pumpy, známé jako prazoly, či analeptikum modafinil. Sulfoxidy jsou obvykle připravovány oxidací odpovídajících sulfidů. Mezi perspektivní organokatalyzátory oxidace sulfidů na sulfoxidy peroxidem vodíku patří flaviniové soli. Bylo pozorováno¹, že elektronakceptorní skupina navázaná v poloze 8 alloxaziniového katalyzátoru zvyšuje jeho účinnost. Cílem této práce je příprava 1,3-dimethyl-8-trifluormethylalloxazinium-perchlorátu **1** a

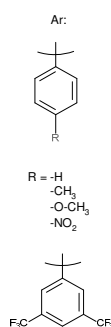
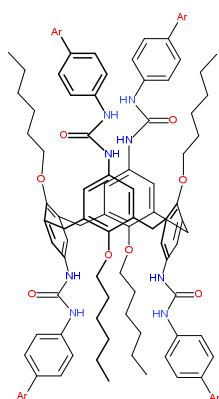


studium jeho katalytické účinnosti při oxidacích vybraných sulfidů; studovány jsou především prekursor vybraných léčiv, jako je modafinil či rabeprazol.

¹ Ménová P., Dvořáková H., Eigner V., Ludvík J., Cibulka R.: *Adv. Synth. Catal.* **2013**, *355*, 3451-3462.

Syntéza a využití 1,3-alternujících p-ureidoderivátů calix[4]arenu

Autor: Pavla Zielonková
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.



p-Ureidoderiváty calixarenu jsou látky známé svou schopností komplexovat anionty, které hrají důležitou roli mj. i v přírodních procesech. Tato práce je zaměřena na doplnění řady 1,3-alternujících ureidoreceptorů, které dosud nebyly systematicky zkoumány. Základem byl zvolen tetra-*O*-hexyloxy-*p*-*tert*-butylcalix[4]aren v 1,3-alternující konformaci, který byl postupně převeden na *p*-aminoderivát a následnou adicí na různě substituované (elektron-donorními nebo elektron-akceptorními skupinami) fenyloisokyanáty na požadované ureidoreceptory (viz obrázek). Komplexační vlastnosti připravených receptorů vůči vybraným aniontům budou studovány pomocí ^1H NMR titrací.