

Studentská vědecká konference 2004

Sekce: ORGANICKÁ CHEMIE II

Ústav organické chemie, 26.11.2004

Zahájení v cca 11.30, budova A, místnost č. 250

Komise (ústav 110):

Prof. Ing. Ivan Stibor, CSc. (VŠCHT) - předseda

Ing. Václav Šťastný (VŠCHT) - organizační tajemník

Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc. (VŠCHT)

Doc. Ing. Dalimil Dvořák CSc. (VŠCHT)

Ing. Michal Beneš (Chemopharma, a.s.)

Ing. Rudolf Smrž CSc. (Synthon, s.r.o.)

Ing. Hanuš Slavík (EASTMAN Sokolov a.s.)

Ing. Pavel Šebek, CSc. (Zentiva, a.s.)

Mgr. Miroslav Havránek, Ph.D. (Re&d VÚFB. a.s.)

Přihlášeno: 7 účastníků

Tomáš Šmejkal	<i>Syntéza thiacalix[4]arenů s rozšířenou kavitou</i>
Zbyněk Hasník	<i>O⁶-Adukty guaninu jako indikátory poškození DNA</i>
Martin Krupička	<i>Stereochemie a konformace tetraarylorthouhličitanů</i>
Jan Rohlíček	<i>MCE - software pro interpretaci solvatace krystalických lékových forem</i>
Petr Kolář	<i>Strukturní studium Risedronátu sodného</i>
Jana Roháčová	<i>Elektrochemie aminokarbenových komplexů chromu</i>
Radek Jurok	<i>Koordinace Ni²⁺ iontů k lipofilním alkyl(pyridin-2-yl) ketoximům jako "sonda" pro studium vlastností micelárních systémů</i>

Syntéza thiacalix[4]arenů s rozšířenou kavitou

Autor: Tomáš Šmejkal

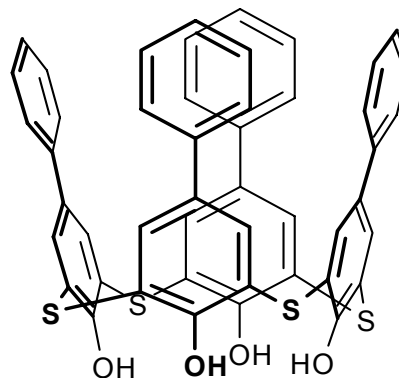
Ročník: 5.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Doc. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Tato práce se zabývá přípravou 5,11,17,23-tetrafenylthiacalix[4]arenu kondenzační reakcí bifenylního 4-olu se sírou. Produkt reakce představuje zcela nový thiacalixarenový derivát se zvětšenou aromatickou kavitou.

Alkylace spodního okraje tohoto nového thiacalix[4]arenu vede k tetraalkylovaným derivátům, jejichž konformační preference byly studovány pomocí ^1H NMR spektroskopie a rentgenostrukturní analýzy. Zatímco příslušné tetramethoxy- a tetraethoxy- deriváty jsou za normální teploty konformačně mobilní (termodynamická směs konformerů v roztoku CDCl_3), připravené tetrapropoxy- a ethoxykarbonylmethoxy- deriváty existují již za identických podmínek (25°C , CDCl_3) ve stabilní konformaci.



O⁶-Adukty guaninu jako indikátory poškození DNA

Autor: Zbyněk Hasník

Ročník: 5.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Jedním z reaktivních intermediátů v metabolismu styrenu je styren-3,4-oxid, který je schopen atakovat nukleofilní centra v nukleosidech. Modifikované base podléhají depurinaci a následně jsou z těla vyloučeny močí, kde mohou sloužit jako indikátory poškození DNA.

Cílem mé práce je příprava syntetických standardů pro diagnostiku poškození DNA. Zejména jde o O⁶-(4-vinylfenyl)guanin, který vzniká atakem styren-3,4-oxidu na exocyklickém kyslíku guaninu. Prokázal jsem, že tento derivát guaninu lze připravit z 2-amino-6-chlorpurinu po následné aktivaci chloru pomocí 1,4-diazabicyklo[2.2.2]oktanu (DABCO) a následnou substitucí 4-vinylfenolátem. Pro srovnání reaktivity aromatického a alifatického alkoholátu jsem připravil O⁶-(2-fenylethyl)guanin jako příklad aduktu alifatického alkoholu.

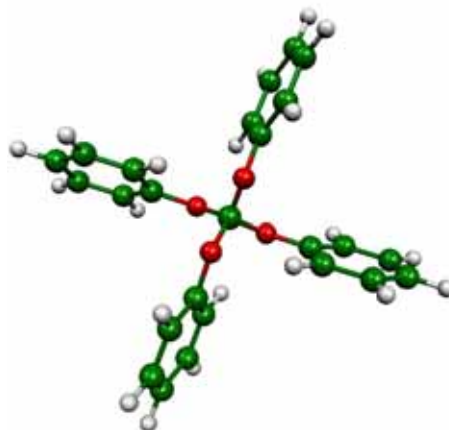
Stereochemie a konformace tetraarylorthouhličitánů

Autor: Martin Krupička
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: doc. ing. Stanislav Böhml, CSc.

V DFT výpočtech i v krystalu vykazuje struktura tetrafenoxymethanu propelerní konformaci. Cíle práce:

- analýza symetrie molekuly
- určení pravděpodobných konformací
- nalezení izomeračních mechanismů
- přiřazení NMR spektra

Po zpracování výše uvedených bodů bude navržena vhodná substituce skeletu s cílem pozorování stereochemie prostřednictvím NMR v kapalné fázi.



MCE - software pro interpretaci solvatace krystalických lékových forem

Autor: Jan Rohlíček
Ročník: 4.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: ing. Michal Hušák dr.

Při charakterizaci krystalických forem organických látek, je důležité znát přesné informace o interakcích mezi molekulami v mřížce, obsahu solventů a interakcích základní molekuly se solventem. Výsledky RTG strukturní analýzy standardně popisují pouze nezbytně velkou část prostoru krystalu – tzv. asymetrickou část základní buňky. Pro interpretaci mezimolekulárních interakcí je nutné na základě znalostí vlastností prostorových grup a symetrie mřížky vygenerovat větší počet molekul tvořící krystal. Program MCE umožňuje interaktivně generovat větší části prostoru krystalu, zobrazovat elektronové hustoty a mapy volného prostoru v krystalu. V praxi byl program testován při interpretaci solvatace immunosupresivní látky cyklosporin A.

Strukturní studium Risedronátu sodného

Autor: Petr Kolář
Ročník: 3.
Ústav: Ústav Chemie pevných látek
Školitel: Ing. Hana Petříčková

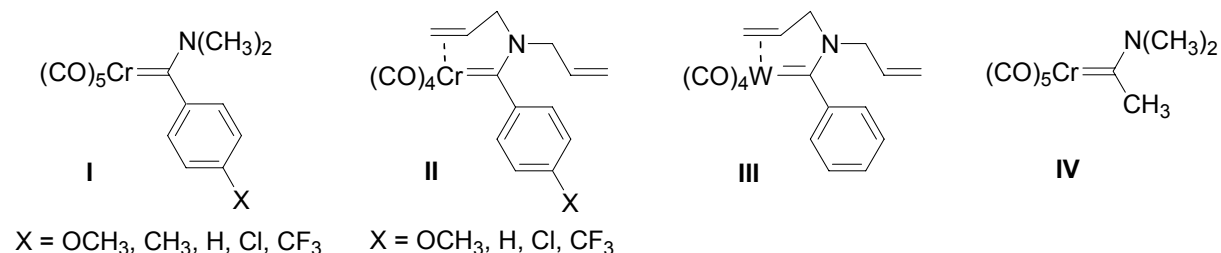
Farmaceuticky aktivní substance jsou velmi často podávány v pevné lékové formě (např. tablety). Charakteristické pro tyto látky je výskyt ve více krystalových modifikacích, tzv. polymorfie. Je nezbytné, s ohledem na účinnost a biodostupnost, polymorfii studovat, protože jednotlivé polymorfy dané aktivní substance mají odlišné vlastnosti (rozpuštěnost, b.t., atd...). V prezentované práci bude ukázáno strukturní studium Risedronátu sodného, který se v moderní medicíně užívá jako účinná látka v léčbě osteoporózy.

Byla studována stabilita polymorfu H risedronátu sodného v závislosti na teplotě. Změny krystalové struktury pak byly ověřeny RTG práškovou difrakcí. Bylo zjištěno, že forma H není stabilní, při sušení přechází na jiný polymorf. Protože tyto látky s oblibou poutají vodu, byl obsah vody stanovován pomocí termální analýzy.

Elektrochemie aminokarbenových komplexů chromu

Autor: Jana Roháčová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Dalimil Dvořák CSc., Ing. Irena Hoskovcová CSc.

Byly připraveny a elektrochemicky studovány dvě série aminokarbenových komplexů nesoucích substituovanou fenylovou skupinu na karbenovém atomu uhlíku: *N,N*-dimethylaminokarbenové komplexy **I** a chelatované η^2 -*N*-allyl-*N*-allylaminokarbenové komplexy **II**. Pro srovnání byl rovněž připraven komplex wolframu **III** a aminokarbenový komplex chromu nesoucí metylovou skupinu na karbenovém atomu uhlíku **IV**. Výsledky mimo jiné ukazují, že k redukci dochází na karbenovém atomu uhlíku, zatímco oxidace probíhá na kovu. Bude rovněž diskutován vliv substituce na redoxní děje.



Koordinace Ni²⁺ iontů k lipofilním alkyl(pyridin-2-yl)ketoximům jako "sonda" pro studium vlastností micelárních systémů

Autor: Radek Jurok
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: doc. Ing. František Hampl, CSc.

Využití micel různých tenzidů jako reakčního prostředí uvádí nesčetná literatura věnovaná fenoménu micelární katalýzy¹. Pozornost chemiků však byla dosud soustředěna na možnost ovlivnění průběhu reakcí strukturou micelárních katalyzátorů a příspěvek vlivu micelární matrice byl spíše zanedbáván. Přitom se ukazuje, že charakter nanoagregátu může ovlivnit rychlost chemické reakce o několik řádů². Racionální design micelárních katalyzátorů proto musí vycházet ze znalosti vlastností fázového rozhraní v různých typech nanoagregátů. Jako potenciální "sonda" pro studium těchto vlastností nanoagregátů se ukazuje koordinace Ni²⁺ iontů k lipofilním alkyl(pyridin-2-yl)ketoximům.

Literatura:

1. Např.: a) Fendler J. H.: *Membrane Mimetic Chemistry*. Wiley, New York, 1982; b) Reinhoudt D.(Ed.): *Comprehensive Supramolecular Chemistry, Vol. 10*, 267-360. Elsevier, Oxford, 1996; c) Shah D. O. (Ed.): *Micelles, Microemulsions, and Monolayers*. Dekker, New York, 1998.
2. Kivala M., Hampl F., Cibulka R., Liška F.: Hydrolýza organofosfátů funkcionalizovanými tenzidy: jak ovlivňuje struktura tenzidu a typ nanoagregátu pozorovanou reaktivitu? XXVII. Konference organických chemiků. Červen 2004, Pardubice.