

Chemie potravin a bioaktivních látek

Témata diplomových prací v akademickém roce 2013/2014

1. Téma: Příprava 3-butyl-4-alkyliden-1'-alkyl-1'H-spiro[imidazolidin-5,3'-indol]-2,2'-dionů a studium jejich reaktivity

Vedoucí: Mgr. Monika Ondrášová, Ph.D.

Anotace: Cílem práce je připravit výchozí látky, 3-butylamino-3-alkyl/aryl-1-fenyl/methyl-chinolin-2,4(1*H*,3*H*)diony, z příslušných substituovaných 4-hydroxy-chinolin-2(1*H*)-onů chlorací a následnou reakcí s butylaminem. Z výchozích látek budou reakcí s močovinou připraveny titulní sloučeniny, u kterých bude studována reakce s bromem.

Student: Bc. Petra Volková

2. Téma: Studium přípravy purinových sloučenin substituovaných 1-adamantylem

Vedoucí: Ing. Michal Rouchal, Ph.D.

Anotace: V rámci diplomové práce bude provedena série experimentů s cílem připravit novou sérii di-, příp. trisubstituovaných purinových derivátů obsahujících adamantanový motiv. Struktura připravených sloučenin bude určena pomocí běžných instrumentálních metod jako jsou nukleární magnetická rezonance, hmotnostní spektrometrie či infračervená spektroskopie.

Student: Bc. Kateřina Kočvarová

3. Téma: Studium reakcí 3-substituovaných 3-halogenchinolin-2,4(1*H*,3*H*)-dionů s kyanidy a některých přeměn jejich produktů

Vedoucí: Ing. Ondřej Rudolf, Ph.D.

Anotace: Práce bude zaměřena především na přípravu a charakterizaci nových chinolin-2,4-dionů nesoucích v poloze 3 nitrilovou skupinu. Výchozími látkami budou snadno dostupné 3-chlorchinolin-2,4-diony, v poloze 1 nesubstituované nebo substituované alkylem či arylem a v poloze 3 substituované alkylem nebo arylem. Na několika výchozích sloučeninách budou optimalizovány reakční podmínky z hlediska získání žádoucích 1,2,3,4-tetrahydro-2,4-dioxochinolin-3-karbonitrilů. Dalším krokem bude užití nejvhodnějších podmínek k přípravě dalších sloučenin této řady. S připravenými nitrily budou provedeny pokusy o hydrolyzu za vzniku odpovídajících amidů nebo karboxylových kyselin, případně budou podrobeny reakci s některým redukčním činidlem, jejímž výsledkem by mělo být převedení nitrilové skupiny na aminomethylovou skupinu a případně redukce karboxylové skupiny v poloze 4 za vzniku derivátu 4-hydroxychinolin-2-onu. Připravené sloučeniny budou charakterizovány pomocí teploty tání a TLC. Jejich složení a struktury budou stanoveny pomocí elementární analýzy a pomocí hmotnostní, NMR a IR spektrometrie.

Student: Bc. Zdeněk Černoš

4. Téma: Sledování složení surových reakčních směsí při přípravě cucurbit[n]urilů pomocí hmotnostní spektrometrie

Vedoucí: Mgr. Robert vícha, Ph.D.

Anotace: Cucurbit[n]urily (CBn) představují velmi zajímavou, a v posledních letech velmi detailně studovanou, skupinu makrocyclických molekul s vnitřní lipofilní kavitou se schopností vázat neutrální a zejména kladně nabitě ligandy. Skupina známých CBn zahrnuje několik strukturních typů pro $n = 5-14$, přičemž všechny tyto látky se vyskytují v surových reakčních směsích při přípravě CBn. Jednotlivé cucurbiturily se pak ze surové směsi izolují poměrně náročnými krystalizačními sekvencemi nebo pomocí selektivní vazby na vhodné hostující ligandy. Oba dva tyto přístupy vyžadují vhodnou analytickou metodu pro zjištění obsahu jednotlivých CBn ve směsích během purifikačního procesu. Cílem práce je prozkoumat možnost využití hmotnostní spektrometrie (MS) pro tyto účely a vyhodnotit výhody a nevýhody MS v porovnání s $^1\text{H-NMR}$.

Student: Bc. Martina Pekníková

5. Téma: Syntéza a supramolekulární vlastnosti adamantanovaných 3,3'-dibenzimidazolů

Vedoucí: Mgr. Robert vícha, Ph.D.

Anotace: V posledních dvaceti letech byly velmi intenzívně studovány supramolekulární vlastnosti cucurbit[n]urilů (CBn) s různým počtem jednotek v makrocyccku. Ukázalo se, že ligandy s objemnými lipofilními strukturami (adamantan, bicyklo[2.2.2]oktan, ferrocen) a vhodně umístěnou kladně nabitou skupinou (amonium, imidazolium) vykazují extrémně silnou afinitu zejména k CB7, v řádech až do $10^{12}-10^{15} \text{ M}^{-1}$. Různá struktura ligandů pak umožňuje konstrukci systémů s kineticky nebo termodynamicky řízenými mody tvorby strukturně odlišných komplexů. Cílem práce je připravit a prozkoumat supramolekulární chování ligandů pro CB7 na bázi 1-adamantylem substituovaných 3,3'-dibenzimidazoliolových solí.

Student: Bc. Lucie Ovsíková

6. Téma: Syntézy chinolin-2,4(1H,3H)-dionů s propargylovou skupinou a jejich reakce s azidosloučeninami

Vedoucí: doc. Ing. Stanislav Kafka, CSc.

Anotace: Budou připraveny 3-propargylaminochinolin-2,4(1H,3H)-diony reakcí 3-halogenchinolin-2,4(1H,3H)-dionů s propargylaminem a případně alkylací chinolin-2,4(1H,3H)-dionů nesubstituovaných na atomu dusíku v poloze 1 budou připraveny jejich 1-propargylderiváty. Připravené chinolin-2,4(1H,3H)-diony s propargylovou skupinou budou podrobeny reakci s azidobenzenem a případně s jinými azidosloučeninami za katalýzy mědi s cílem připravit deriváty chinolin-2,4(1H,3H)-dionu s 1,2,3-triazolovými kruhy v molekule.

Student: Bc. Iveta Kapavíková

7. Téma: Studium přesmyků 3-aminochinolin-2,4(1*H*,3*H*)-dionů

Vedoucí: doc. Ing. Stanislav Kafka, CSc.

Anotace: Působením roztoku ekvimolární směsi hydrochloridu semikarbazidu a hydrogenuhličitanu sodného ve vodném ethanolu na 3-cyklohexylamino-1-methyl-3-fenylchinolin-2,4(1*H*,3*H*)-dion nevzniká očekávaný semikarbazon, ale probíhá přesmyk substrátu na 4-cyklohexyl-3,4-dihydro-1-methyl-3-fenyl-1*H*-benzo[*e*][1,4]diazepin-2,5-dion. V diplomové práci budou sledovány přeměny chinolin-2,4(1*H*,3*H*)-dionů se substituovanou nebo nesubstituovanou aminoskupinou v poloze 3 v uvedeném prostředí a v jiných kyselých nebo zásaditých prostředích.

Student: Bc. Filip Křemen