

Témy bakalárskych prác pre študentov odboru Chémia a Biochémia (akademický rok 2009/2010)

1. Kombinované prístupy v asymetrickej katalýze (Šebesta)

Asymetrická katalýza je perspektívnou oblasťou prípravy enantiomérne čistých látok efektívnymi a ekonomickými spôsobmi. Spájanie rôznych postupov a princípov v asymetrickej katalýze môže rozšíriť paletu účinných transformácií. Témou bakalárskej práce je vypracovať prehľad známych kombinovaných prístupov v asymetrickej katalýze ako a) komplex prechodného kovu a enzým; b) komplex prechodného kovu a organokatalyzátor a pod. V laboratóriu sa môže študent podieľať na výskume kombinácie organokatalýzy a Pd-katalyzovaných alylových substitúcií.

2. Enantioselektívne homogénne ukotvené katalyzátory (Šebesta)

Výskum recyklácie drahých enantioselektívnych katalyzátorov je dôležitou oblasťou súčasnej zelenej chémie. Heterogénne katalyzátory umožňujú ľahkú izoláciu z reakčného prostredia ale často trpia nižšími aktivitami oproti rozpustným analógom. Homogénne ukotvené katalyzátory spájajú výhody heterogénnej ako aj homogénnej katalýzy. Práca sa zameriava na spôsoby ukotvenia v homogénnych podmienkach (iónové kvapaliny, rozpustné polyméry, fluorované rozpúšťadlá a ďalšie). Študent sa môže spolupodieľať na prebiehajúcom výskume ferocénových katalyzátorov v iónových kvapalinách.

3. Enantioselektívna imíniová katalýza (Mečiarová)

Predmetom štúdia sú enantioselektívne reakcie karbonylových zlúčenín katalyzované chirálnymi amínmi. Katalyzátor vytvorí s karbonylovou skupinou reaktívny imíniový intermediát, čo sa využíva v cykloadičných reakciách, Michaelových adíciách, Friedelových-Craftsových reakciách, 1,3-dipolárnych cykloadíciách alebo [4+3]cykloadíciách. Náplňou experimentálnej časti práce je študovanie priebehu (rýchlosť, výťažky, selektivita) vybraných reakcií v závislosti od použitého imíniového katalyzátora, ako aj od reakčných podmienok (mikrovlnné žiarenie, ultrazvukové vlnenie, iónové kvapaliny).

4. Organokatalytické domino reakcie (Mečiarová)

Domino alebo tandemové reakcie sú viacstupňové reakcie, v ktorých jednotlivé stupne prebiehajú plynule za sebou bez nutnosti izolácie medziproduktov. Organokatalytické domino reakcie sú katalyzované chirálnymi sekundárnymi amínmi, ktoré zabezpečujú tandemovú imíniovo-enamínovú aktiváciu. Príkladom takejto reakcie je syntéza substituovaných chirálnych cyklohexénkarbaldehydov. Prvým krokom je často Michaelova adícia nitroketónu na α,β -nenasýtený aldehyd (imíniový intermediát), po ktorom nasleduje vnútramolekulová aldolová kondenzácia (enamínová aktivácia). Náplňou experimentálnej časti práce je štúdium vybraných reakcií v závislosti od použitého imíniového katalyzátora, ako aj od reakčných podmienok.

5. Mikrovlnné žiarenie v enantioselektívnej katalýze (Poláčková)

Mikrovlnného žiarenie je etablovanou technikou účinného dodávania energie v organickej chémii. Jeho použitie je však málo preskúmané v oblasti enantioselektívnej katalýzy, kde sa všeobecne verí, že zvýšená teplota je prekážkou dosiahnutia vysokých selektívít. Pre enantioselektívne reakcie s vysokou aktivačnou bariérou však môže byť práve použitie mikrovlnného žiarenia mimoriadne zaujímavým riešením. Táto téma má za cieľ vyhľadať v literatúre známe použitia MW v asymetrických katalyzovaných reakciách. V rámci experimentálnej časti študent bude skúmať vplyv mikrovlnného žiarenia na Cu-katalyzovanú énovú reakciu a ďalšie teplotne náročné reakcie.

6. Voda ako reakčné médium pre asymetrické organokatalyzované reakcie (Veverková)

Stereoselektívna syntéza vo vode sa začína presadzovať najmä v poslednom desaťročí. Zistilo sa, že mnohé základné organické reakcie, ako aldolizácia, alkylácia, aminohydroxylácia, cykloadície, hydrogenácie atď., prebiehajú vo vode rýchlejšie, s vyššími výťažkami a lepšou stereoselektivitou v porovnaní s korešpondujúcimi reakciami uskutočnenými v organických rozpúšťadlách. Úlohou bakalárskej práce je podať prehľad asymetrických organokatalyzovaných reakcií prebiehajúcich vo vode alebo v zmesiach voda/organické rozpúšťadlo. Experimentálna časť bude zameraná na skúmanie nových organokatalytických reakcií vo vodnom prostredí.

7. Prehľad použitia komerčných lipáz v biotransformácii zložiek nukleových kyselín (Koiš)

Lipázy patria nielen k dôležitým priemyselným biokatalyzátorom, ale aj k najčastejšie používaným enzýmom v bioorganickej chémii. Práca bude venovaná syntetickým aj hydrolytickým reakciám lipáz v selektívnej biotransformácii nukleobáz, nukleozidov a nukleotidov ako aj porovnaniu s analogickými chemickými viacstupňovými reakciami.

8. DNA-templátové reakcie pre systematickú identifikáciu nových chemických transformácií (Koiš)

Väčšina problémov chemickej biológie je orientovaná na použitie chemických prostriedkov na biologické otázky. DNA-templátové reakcie naopak využívajú metódy analýzy nukleových kyselín pre screening možných reakcií reaktívnych funkčných skupín naviazaných cez flexibilný linker na reťazec oligonukleotidu. Použitie DNA čipov zefektívňuje výber podmienok reakcií ako aj analýzu produktu.

9. Prehľad chemosenzorov pre fluorescenčné enzýmové testy (Koiš)

V práci sa budú študovať chemosenzory ako komplexné aromatické zlúčeniny, ktorých fluorescenčné vlastnosti sú rozdielne v závislosti od štruktúry substrátu, resp. produktu enzýmovej reakcie, konkrétne transferu glykozylu z UDP-cukrov glykozyltransferázami.

10. Moderné metódy štúdia interakcie proteínov a syntetických ligandov (Koiš)

V práci sa budú študovať a porovnávať najnovšie fyzikálnochemické metódy merania nekovalentných interakcií biomakromolekúl s prirodzenými aj syntetickými ligandami, hlavne pomocou hmotnostnej spektroskopie.

11. Nové optoelektronické materiály na báze trifenylamínu (Sigmundová)

Zlúčeniny s prenosom náboja z donornej časti na akceptornú cez konjugovaný systém majú značné využitie v optoelektronických prístrojoch. Rôzny typ štruktúrnej symetrie umožní ovplyvniť prenos náboja a tým aj elektrické a optické vlastnosti zlúčenín. Zaujímavými zlúčeninami v tejto oblasti sú štruktúry, ktoré vzniknú reakciou benzotiazolu s trifenylamínom. V rámci bakalárskej práce bude uskutočnená príprava niekoľkých derivátov a budú študované ich spektrálne vlastnosti.

12. Príprava a spektrálne štúdium nových heterocyklických zlúčenín s intenzívnou fluorescenciou (Magdolen)

Heterocyklické zlúčeniny s predĺženým konjugovaným systémom s elektrónodonným a elektroakceptorným substituentom vo zvýšenej miere emitujú žiarenie, čo umožní ich využitie ako značkovače pri skúmaní biologických systémov a v medicíne. V rámci tejto témy budú pripravené a študované nové fluoreskujúce látky na báze heterocyklov.

13. Deriváty tiazolotiazolu ako nové prvky pre optoelektronické využitie (Magdolen)

Tiazolotiazol predstavuje nový typ heterocyklov, ktorý má predpoklady pre praktické využitie v oblasti nelineárnej optiky. V rámci bakalárskej témy bude preštudovaná a optimalizovaná cesta k príprave nových tiazolotiazolov. Variabilitou substituentov budú pripravené tepelne stabilné zlúčeniny s vhodnou rozpustnosťou.

14. Tiazoloftalokyaníny, nová skupina potenciálnych chromofórov (Sigmundová, Zahradník)

Zlúčeniny s porfyrínovým konjugovaným mostíkom našli veľké uplatnenie pri liečbe niektorých typov rakovinových ochorení v metóde nazvanej fotodynamická terapia. Podobné chemické vlastnosti aj účinok majú aj ftalokyaníny. Témou bakalárskej práce je teoretické štúdium, návrh štruktúry a pokus o syntézu nových typov zlúčenín obsahujúcich heterocykly.

15. Využitie chirálnych esterov kyseliny fosforečnej ako organokatalyzátorov v stereoselektívnej syntéze (Putala)

Mnohé liečivá obsahujú stereogénne centrá a pre ich zavedenie do praxe musia byť dostupné v stereoizoméne čistej forme. Najefektívnejšou možnosťou ich prípravy je pri ich syntéze využiť stereoselektívne katalyzátory – jednoduché syntetické analógy enzýmov. Moderným trendom je použitie organokatalyzátorov – zlúčenín schopných katalyzovať reakcie bez prítomnosti kovu. Predmetom rešerže bude spracovanie literárnych poznatkov o aplikácii uvedených organokatalyzátorov v stereoselektívnej syntéze. Otvorená je možnosť praktického zapojenia sa do spomenutého projektu.

16. Organické zlúčeniny ako molekulové polovodiče (Putala)

Spracovanie rešerže o organických zlúčeninách, ktoré sa správajú ako polovodiče (vodivosť ktorých je ovplyvnená vonkajšími faktormi, napríklad elektrickým poľom). Takéto zlúčeniny nachádzajú široké využitie v modernej elektronike (v zariadeniach označovaných ako OFET alebo

TFT). Otvorená je možnosť praktického zapojenia sa do designu, syntézy a štúdia nových molekulových polovodičov. V tejto problematike priamo spolupracujeme s elektrotechnikmi.

17. Organické svetlovyžarujúce diódy (OLED) (Putala)

Organické zlúčeniny vykazujúce elektroluminiscenciu (pri prechode elektrického prúdu cez ne vyžarujú svetlo) sú základom nových úsporných svetelných zdrojov a obrazoviek označovaných ako OLED. Predmetom rešerže bude spracovanie literárnych poznatkov o aplikácii organických zlúčenín v OLED. Otvorená je možnosť praktického zapojenia sa do designu, syntézy a štúdia nových zlúčenín pre využitie v OLED. V tejto problematike priamo spolupracujeme s elektrotechnikmi.

18. Organické zlúčeniny pre solárne články (Putala)

Ožiarení organických zlúčenín s vhodnou štruktúrou môže dôjsť k prenosu elektrónu v rámci molekuly (fotoindukovaný prenos elektrónu). Ak sa podarí tento elektrón odvieť na dostatočnú vzdialenosť, dá sa využiť pre generovanie elektrického napätia (premena svetelnej energie na elektrickú – fotovoltaické články) alebo uskutočnenie chemických reakcií (premena svetelnej energie na chemickú – solárne palivové články). Posledný uvedený princíp využíva aj príroda napr. pri fotosyntéze. Predmetom rešerže bude spracovanie literárnych poznatkov o organických zlúčeninách, ktoré po ožiarení vykazujú fotoindukovaný prenos elektrónu. Otvorená je možnosť praktického zapojenia sa do designu, syntézy a štúdia nových zlúčenín s takýmito vlastnosťami.

19. Tie-2 receptor a jeho inhibítory – kandidáti antitumorových liečiv (Boháč)

Receptorový proteín Tie-2 patrí do skupiny transmembránových receptorov endoteliálnych buniek zodpovedných za ich aktiváciu vedúcu k novotvorbe ciev a akcelerácii onkologických a iných ochorení. Práca je zameraná na opis vlastností tohto receptoru, jeho endogénnych ligandov, ako aj na vytvorenie chemoinformatickej databázy štruktúr dosiaľ identifikovaných inhibítorov s využitím dostupných databáz, primárnej literatúry a softvéru.

20. Návrh a syntéza derivátu oxadiazolbenzimidazolónu s VEGFR-2 inhibičnou aktivitou (Sališová)

Koncom roku 2008 bola v PDB databáze zverejnená štruktúra komplexu TK VEGFR-2 receptoru s inhibítorom nazvanom 3C7Q. Ligand s inhibičnými vlastnosťami má indolín-2-ónový nosný skelet. Analýzou tohto inhibítora a počítačovým modelovaním sme navrhli štruktúru bioizostéru s oxadiazol-imidazolónovým skeletom u ktorého predpokladáme antitumorovú aktivitu s VEGFR-2 receptorovou selektivitou. Nakoľko sa jedná o novú zlúčeninu, je potrebné nájsť v literatúre spôsoby jej syntézy a látku pripraviť. Získaný produkt bude testovaný HUVEC, CAM a enzýmovým testom na určenie antiangiogénnej účinnosti.

21. Analýza a získanie údajov z dostupných chemoinformatických štruktúrnych knižníc (Boháč)

Moderné metódy navrhovania nových liečiv aplikujú počítačové predikcie a virtuálny skrining. Chemoinformatika sa zaoberá selekciou informácií ohľadom štruktúr a ich biologických vlastností. Táto práca je zameraná na preštudovanie možností získavania chemických štruktúr

v elektronickej podobe pre potreby virtuálneho skrínungu. Výsledkom práce bude komplexná informácia o dostupných databázach, ako aj elektronická objemná kolekcia štruktúr vhodných pre navrhovanie nových liečiv.

22. Syntéza farmakofórového ligandu s KDR selektivitou (Boháč)

Táto práca je zameraná na návrh prípravy a cielenú syntézu N-(6-aminopyridín-3-yl)propiolamidu zlúčeniny s afinitou ku KDR proteínu určenou pre Click chemistry aplikáciu vývoja kandidátov nových liečiv. Výsledkom práce bude spôsob prípravy navrhutej zlúčeniny, ako aj jej syntéza.

23. Príprava 3-hydroxy-N-metylpikolínamidu - prekursoru selektívnych angiogénnych inhibítorov (Sališová)

3-Hydroxy-N-metylpikolínamid má selektívnu afinitu k TK KDR proteínu ktorý je kľúčovým pre neovaskularizáciu tumorov. Cieľom diplomovej práce bude vyhľadanie spôsobov prípravy 3-hydroxy-N-metylpikolínamidu, selekcia najhodnejšieho syntetického postupu a samotná syntéza uvedenej zlúčeniny. Výsledná zlúčenina bude použitá ako prekursor pre Click chemistry identifikáciu účinných antiangiogénik.

Témy bakalárskych prác pre študentov pedagogických kombinácií s chémiou (akademický rok 2009/2010)

1. Polyfluorované zlúčeniny v organickej syntéze (Mečiarová)

Organické zlúčeniny, v ktorých sú všetky atómy vodíka alebo aspoň časť týchto atómov nahradené atómami fluóru, majú z hľadiska organickej syntézy veľmi zaujímavé vlastnosti. Katalyzátory s polyfluórovým fragmentom sú dobre separovateľné z reakčných zmesí. Miešateľnosť perfluorovaných rozpúšťadiel s klasickými organickými rozpúšťadlami veľmi výrazne závisí od teploty, čo sa využíva pri separácií produktov. Známe sú aj chromatografické separačné metódy, ktoré využívajú obmedzenú miešateľnosť klasických a polyfluorovaných rozpúšťadiel. Vďaka týmto a mnohým ďalším možnostiam aplikácie v organickej syntéze sa polyfluorované zlúčeniny radia k veľmi účinným nástrojom zelenej chémie.

2. Pokroky v syntéze oligonukleotidov a dizajne automatických syntetizérov (Koiš)

Oligonukleotidy sú dôležité nástroje štúdia a modifikácie biologických systémov. Práca bude venovaná vývoju riešenia zásadných chemických problémov vzniku internukleotidovej väzby, chránenia funkčných skupín, efektívnej analýzy a purifikácie oligonukleotidov. Porovnajú sa princípy základných typov automatických DNA a RNA syntetizérov ako aj nebezpečenstvo bioterorizmu s čoraz lacnejšími surovinami a prístrojmi na syntézu génov.

3. Synteticky užitočné reakcie na pevnej fáze pre výučbu chémie na strednej škole (Koiš, Mečiarová)

Moderné chemické reakcie na pevnej fáze majú mnoho výhod pred reakciami v roztoku. V navrhnutých lacných a rýchlych školských experimentoch sa ilustrujú základné typy chemických reakcií bezpečným a atraktívnym spôsobom.

4. Chemická biológia v modernej farmárskej praxi (Koiš)

Ako spotrebitelia sa v živote stretávame s množstvom prirodzených ale aj cudzorododých látok v potravinách. O tom, aké sú to látky a ako sa k nám dostanú, rozhodujú v súčasnosti aj poľnohospodárske technológie. Práca bude zameraná na prehľad stimulačných a regulačných látok, herbicidov, pesticídov a pod., ich transport do potravín a prípadné biotransformácie.

5. Charakteristika databáz 3D štruktúr biomakromolekúl a prehľad vizualizačných programov (Koiš)

Cieľom práce bude populárnou formou pomocou dostupných počítačových programov spracovať databázy proteínov, nukleových kyselín a ostatných biomolekúl. Vybrané modely sa použijú na ilustráciu rozmanitosti a dôležitosti molekúl okolo nás.

6. Metódy imobilizácie biomolekúl na povrch biočipov a nanočastíc (Koiš)

S rozvojom nanotechnológií sa čoraz častejšie stretávame s rôznymi formami analyzátorov, senzorov alebo biosenzorov. Špecifickosť biosenzora zabezpečujú biologické molekuly, napr. proteín, nukleová kyselina, receptor, ktoré sú podľa typu senzora rôznymi fyzikálnymi alebo chemickými spôsobmi pripojené k materiálu senzora, napr. k zlatej elektróde.

7. Organické zlúčeniny v modernej elektronike a optoelektronike (Putala)

Na vybranú tému je treba sa zapísať u Prof. Zahradníka (CH2-431). Ak sa chcete dozvedieť viac informácií alebo by bolo viac záujemcov o jednu tému kontaktujte príslušného školiteľa (v zatvorke).