

Témy bakalárskych prác so začiatkom v akademickom roku 2026/2027

Katedra organickej chémie PriF UK

Na témy je potrebné prihlásiť sa e-mailom u vedúceho práce a následne u doc. Márie Mečiarovej (osobne alebo e-mailom). Témy sú vhodné pre študentov študijných programov **Chémia**, **Biochémia**, **Učiteľstvo chémie** a **Biological Chemistry**. V prípade záujmu je možné vypísať ďalšie témy.

VÝSKUMNÁ SKUPINA: prof. Mgr. Radovan Šebesta, DrSc. - Laboratórium asymetrickej katalýzy a zelenej chémie

Téma 1 (vhodná aj pre Biological Chemistry)

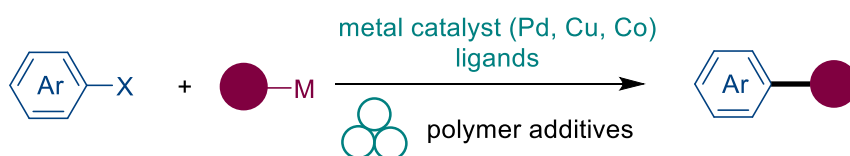
Assisted grinding as an enabling technology for catalytic organic synthesis

Asistované mletie ako technológia pre rozvoj katalytickej organickej syntézy

Supervisor: prof. Mgr. Radovan Šebesta, DrSc.; radovan.sebesta@uniba.sk

Annotation: Organic mechanochemistry recently emerged as a highly efficient tool for synthesis of wide array of compounds including chiral ones. Mechanochemical activation of organic compounds often improves with additive such as molecular or ionic liquids or liquid polymers. The topic of the thesis is to investigate the influence of polymer additives such as polyethyleneglycols or based on oligosaccharides, such as hydroxypropyl methylcellulose and cyclodextrins on selected metal-catalyzed cross-coupling reactions, focusing on Pd, Cu or Co-catalysis. Polymer assisting reagents are likely stabilizing metal catalysts and thus improving catalytic reactions.

Keywords: mechanochemistry, assisted grinding, catalysis, cross-coupling reactions



Téma 2 (vhodná aj pre Biological Chemistry)

Organocatalytic application of persistent carbocations

Organokatalytická aplikácia perzistentných karbokatiónov

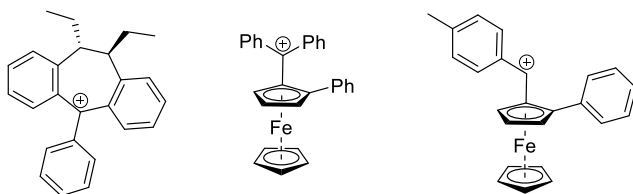
Supervisor: Ing. Péter Kisszekelyi, PhD.; peter.kisszekelyi@uniba.sk

Consultant: prof. Mgr. Radovan Šebesta, DrSc.

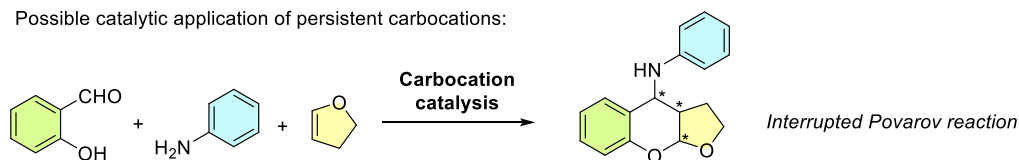
Annotation: Relatively stable carbocationic species have been regularly utilized in organic synthetic procedures. They are usually considered to be unstable intermediates, however, carbocations with delocalized π -systems can be sufficiently stable even under non-inert or even aqueous conditions and can be isolated/purified for further applications. The Lewis acidic character of these persistent carbocations creates an opportunity to explore them as electrophilic reagents or metal-free catalysts in various organic transformations. By incorporating stereogenic centers into the structure of carbocations, the stereochemical outcome of an organic reaction can be controlled, however, this remains an underdeveloped topic so far with only a few known examples.

In the theoretical part, a review of persistent carbocations and their application in organic synthesis should be conducted. In the laboratory, the student will utilize self-synthesized and commercially available persistent carbocations for organocatalytic transformations.

Some examples of known chiral persistent carbocations:



Possible catalytic application of persistent carbocations:



Keywords: carbocation, organocatalysis, stereoselectivity

Téma 3

Organokatalytické konjugované adície heterocyklických zlúčenín

Organocatalytic conjugate additions of heterocyclic compounds

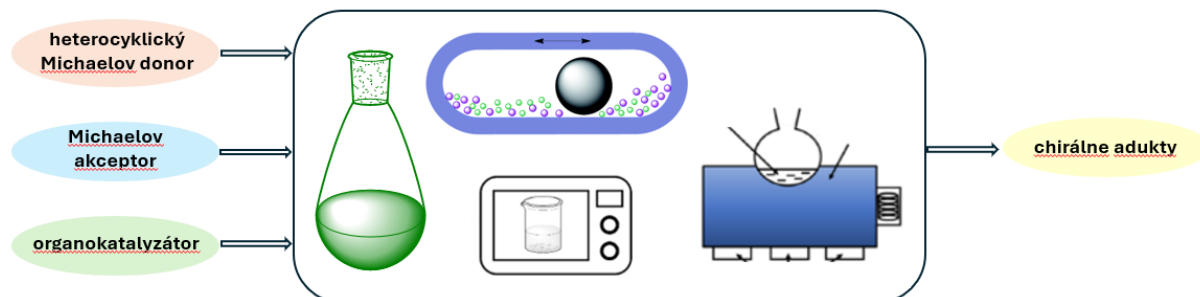
Vedúca BP: doc. Ing. Mária Mečiarová, PhD.; maria.meciarova@uniba.sk

Konzultant BP: Mgr. Tibor Peňaška, PhD.; tibor.penaska@uniba.sk

Charakteristika: Organokatalytické konjugované adície heterocyklických zlúčenín zamerané na vznik väzby uhlík-heteroatóm sú vhodnou metódou prípravy chirálnych zlúčenín s heterocyklickým skeletom. Takéto zlúčeniny majú potenciál byť použité ako stavebné bloky špeciálnych chemikálií,

syntetických analógov prírodných látok, ako aj liekov. Experimentálna práca bude zameraná na syntézu takýchto látok s využívaním metód, ktoré sú preferované z hľadiska udržateľného rozvoja.

Kľúčové slová: organokatalýza, heterocyklické zlúčeniny, zelená chémia



Téma 4

Stereoselektívna príprava alkylaminofenolov Petasisovou reakciou

Stereoselective preparations of alkylaminophenols by the Petasis reaction

Vedúca BP: RNDr. Viera Poláčková, PhD.; viera.polackova@uniba.sk

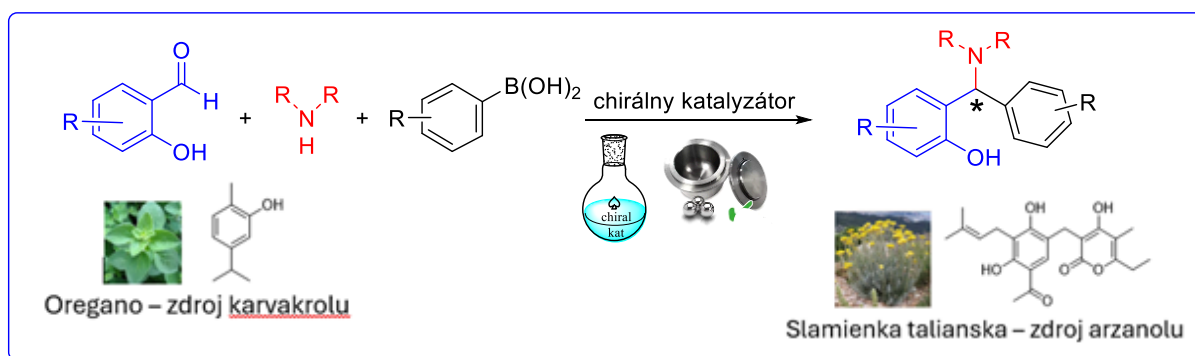
Charakteristika: Petasis a kolektív prezentovali v roku 1997 novú jednoduchú prípravu nových neprírodných amínokyselín v jednom kroku ako trojkomponentnú Mannichovu reakciu (BMR) jednoduchým zmiešaním alkenylborónových kyselín, amínu a α -oxo kyselín pri laboratórnej teplote. Táto relatívne nová metóda nielen dopĺňa už známe metódy prípravy aminokyselín ale umožňuje variabilitou štruktúr použitých východiskových látok získavať ďalšie produkty s pomerne jednoduchým začlenením funkčných skupín do ich štruktúr.

Mnohé fenolové zlúčeniny, či už prírodné alebo syntetické vykazujú biologickú aktivitu. Napríklad jednoduchá štruktúra karvakrolu alebo zložitejší prírodný arzanol. Z hľadiska rezistencie patogénov na aktuálne využívané liečivá je dôležitá neustála syntetická príprava nových štruktúr biologicky aktívnych zlúčenín. Petasisov prístup umožňuje použitím borónových kyselín, amínov a derivátov 2-hydroxysalicylaldehydu pripraviť rôzne fenoly.

Cieľom teoretickej časti bakalárskej práce je vypracovať literárnu rešerš na prehľad syntetických možností Petasisovej reakcie pri príprave fenolových zlúčenín v klasickej i asymetrickej verzii syntézy. V laboratóriu študent preverí praktickú možnosť využitia uvedenej metódy syntetizovať zlúčeniny fenolového typu. Prioritou bude podľa uvedenej schémy overiť aj možnosť pripraviť chirálne produkty fenolového typu pomocou chirálnych katalyzátorov a to klasicky reakciou uskutočnenou v rozpúšťadle a aj pomocou moderných techník organickej syntézy, napríklad v podmienkach mechanickej aktivácie v guľových mlynch.

Pri syntéze prírodných látok Petasisova reakcia umožňuje syntetizovať mnohé štruktúry obohatené o funkčné skupiny, ktoré sú potrebné pre ďalšiu reaktivitu získaných molekúl, ktoré slúžia ako medziprodukty pri syntéze zložitých biologicky aktívnych štruktúr. Cieľom bakalárskej práce je pripraviť literárny prehľad možností syntézy zlúčenín fenolového typu a na základe získaných teoretických skúseností v laboratóriu prakticky overiť možnosť syntézy týchto štruktúr.

Kľúčové slová: Petasisova reakcia, boro-Mannichova reakcia (BMR), syntéza fenolových zlúčenín



Téma 5

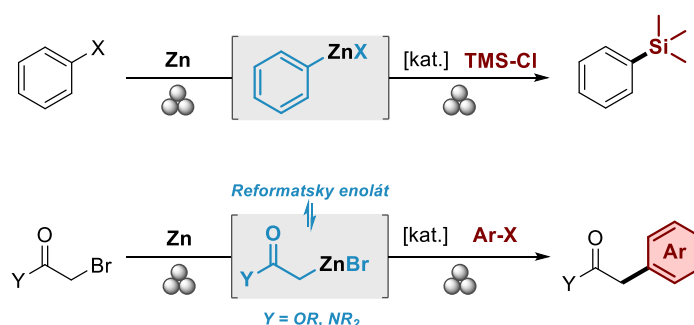
Mechanochemická aktivácia zinku v cross-couplingových reakciách

Mechanochemical activation of zinc in cross-coupling reactions

Vedúci: Ing. Tomáš Čarný, PhD.

Anotácia: Využitie mechanochemie poskytuje veľa syntetických výhod, či už ide o zníženie reakčného času a reakčnej teploty, elimináciu používania rozpúšťadiel alebo uskutočnenia reakcie s látkami s nízkou rozpustnosťou. Ďalšou výhodou oproti klasickým reakciám prebiehajúcim v roztoku, je možnosť aktivácie kovov mechanochemickým mletím. Mechanochemickou aktiváciou zinku je možné *in-situ* generovať Reformatského enoláty, alebo všeobecne organozinočnaté reagenty bez použitia inertnej atmosféry a rozpúšťadla, čo prispieva k rozvoju zelenej chémie a atóm-ekonomických reakcií. Organozinočnaté reagenty je následne možné využiť v reakcii s rôznymi elektrofilnými činidlami, napríklad v Negishiho cross-couplingových reakciách. Cieľom bakalárskej práce je spracovanie literárnej rešerše o mechanochemicky generovaných organozinočnatých reagentoch a preskúmanie ich využitia v cross-couplingových reakciách.

Kľúčové slová: mechanochemia, organozinočnaté zlúčeniny, Reformatského enolát, katalýza, cross-coupling



Téma 6 (vhodná aj pre Biological Chemistry)

Materiály pre modifikáciu povrchov v molekulovej elektronike

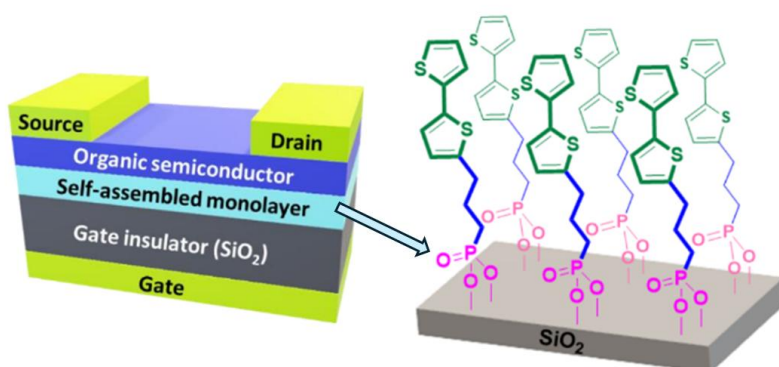
Materials for surface modification in molecular electronics

Vedúca BP: Mgr. Iveta Kmentová, PhD.; iveta.kmentova@uniba.sk

Charakteristika: Inžinierstvo rozhraní je zložitým umením prispôsobovania vlastností rozhraní medzi rôznymi materiálmi. Teoretickej časti bakalárskej práce študent/ka vypracuje prehľad o kovalentne viazaných zlúčeninách použitých pre modifikáciu povrchov pre zvýšenie „zmáčateľnosti“ v OFET zariadení (rozhranie medzi dielektrikom a organickým polovodičom). Víťané je zapojenie sa do designu, syntézy a štúdia zlúčenín pre modifikáciu povrchov.

Characteristic: Interface engineering is the intricate art of tailoring the properties of interfaces between different materials. For the theoretical part of bachelor thesis, the student should work out a review on covalently compound used surface modification to increase the 'wettability' of OFET devices (interface between gate insulator and organic semiconductor). Practical involvement in the design, synthesis, and study of compounds for surface modification is welcomed.

Kľúčové slová: kotviace skupiny, organické polovodiče, oxid kremičitý



Téma 7 (vhodná aj pre Biological Chemistry)

Naftalénové deriváty na biozobrazovanie

Naphthalene derivatives in bioimaging

Vedúca BP: Mgr. Iveta Kmentová, PhD.; iveta.kmentova@uniba.sk

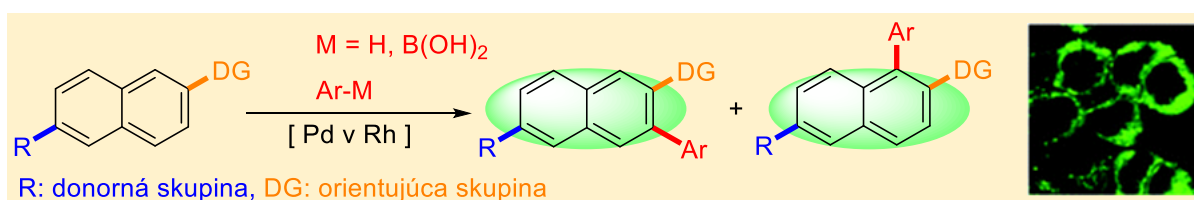
Charakteristika: Vhodne substituované naftalénové deriváty často vykazujú zaujímavé luminesenčné vlastnosti a vďaka za to ich konjugovanému π -systému. Keďže majú aj hydrofóbnu povahu, využívajú sa aj na zobrazovanie niektorých biologicky významných zlúčenín na molekulovej úrovni alebo zložiek živých buniek, napr. na organel alebo membrán. Rovnako sa dajú využiť aj na fluorescenčnú detekciu vybraných iónov a to aj v biologických vzorkách, napríklad v krvi.

Bakalárska práca má podať prehľad o oligoarylových zlúčeninách obsahujúcich naftalén, ktoré majú fluorescenčné vlastnosti. Študent(ka) sa môže aj zapojiť do výskumu v oblasti designu a syntézy nových funkčných materiálov pomocou moderných metód vytváranie väzby C(aryl)–C(aryl), ako sú C–H aktivácia alebo Suzukiho coupling.

Characteristic: Appropriately substituted naphthalene derivatives often exhibit interesting luminescence properties, owing to their conjugated π -system. Since they also have a hydrophobic nature, they are also used for imaging some biologically significant compounds at the molecular level or components of living cells, e.g. to organelles or membranes. They can also be used for fluorescence detection of selected ions, even in biological samples, for example in blood.

The bachelor's thesis is to provide an overview of oligoaryl compounds containing naphthalene, which have fluorescent properties. The student can also participate in research in the field of design and synthesis of new functional materials using modern methods of C(aryl)–C(aryl) bond formation, such as C–H activation or Suzuki coupling.

Kľúčové slová: biozobrazovanie, C–H aktivácia, aryl-naftalény



Téma 8 (vhodná aj pre Biological Chemistry)

Synthesis of thiazol containing organic semiconducting materials

Syntéza organických polovodičovových materiálov obsahujúce tiazol

Vedúci BP: MSc. Madhav Pathak; pathak2@uniba.sk

Characteristic: Thiazole-based semiconductors have attracted significant attention in the field of organic electronics due to their strong electron-withdrawing nature, planarity, and ability to facilitate π -conjugation. These characteristics make them promising candidates for applications in organic photovoltaics (OPVs), organic field-effect transistors (OFETs), and light-emitting diodes (OLEDs). The thesis should provide an up-to-date literature overview of the structures and properties of thiazole based semiconductors, with an emphasis on the possibility of their synthesis by C–H activation. The student can also participate in the synthesis and study of new materials in cooperation with the FEI STU.

Keywords: semiconductor materials, C–H activation, thiazole



Téma 9

Zelené prístupy k syntéze chromenónov

Green approaches towards synthesis of chromenones

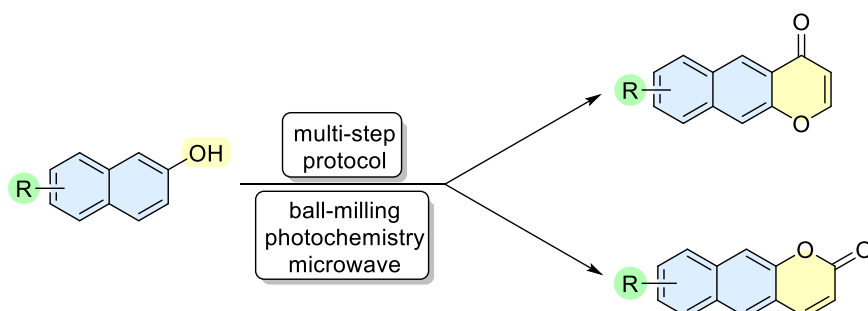
Vedúci BP: Mgr. Jakub Orság; orsag13@uniba.sk

Konzultant: Mgr. Henrieta Stankovičová, PhD.; henrieta.stankovicova@uniba.sk

Charakteristika: Chromenóny (chromóny a kumaríny) nachádzajú využitie v širokej škále odborov. Vďaka aromaticite substrátu je jedným z využití spektroskopia, pri ktorej je nutné vhodne modifikovať chromenónový skelet na vylepšenie fotofyzikálnych vlastností zlúčenín. Ukázalo sa, že predĺžením konjugácie o jedno alebo viac benzénových jadier a vytvorením takzvaného *push-pull* systému vieme dosiahnuť dostatočnú zmenu spektrálnych vlastností. Problematická však zostáva syntéza takýchto derivátov, keďže klasické metódy často poskytujú nižšie výťažky a využívajú toxické chemikálie, ktoré sú predstavujú riziko pre životné prostredie. Riešením môže byť využitie metód zelenej chémie, pri ktorej sa eliminuje environmentálna záťaž a v niektorých prípadoch tiež vedie k lepšej výťažnosti reakcií.

Cieľom bakalárskej práce je vyhľadať v odbornej literatúre údaje týkajúce sa zelených metód syntézy chromenónov. Experimentálna časť bude zameraná na syntézu (benzo)chromenónov s využitím netradičných metód organickej syntézy ako je mikrovlnná alebo mechanochemická aktiváciu molekúl.

Kľúčové slová: chromón, kumarín, zelené metódy, fluorescencia



Téma 10 (vhodná aj pre Biological Chemistry)

Binaftylové chemosenzory s detekciou katiónov kovov

Binaphthyl chemosensors with metal cation detection

Vedúci BP: Mgr. Lukáš Huska; huska8@uniba.sk

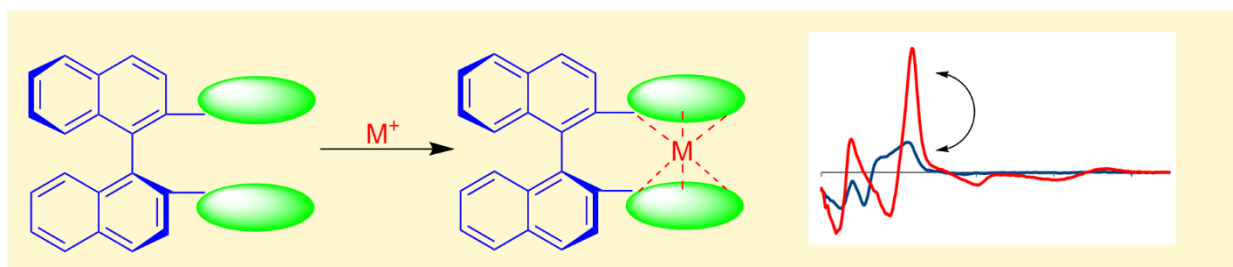
Charakteristika: Binaftylové deriváty s vhodne naviazanými koordinujúcimi skupinami sú schopné komplexovať katióny kovov z roztoku. Interakciu katiónu kovu-binaftyl je možné pozorovať chiroptickými metódami (napr. ECD spektroskopia). Binaftylové chemosenzory majú potenciálne využitie v oblastiach materiálnej, analytickej a medicínskej chémie.

Cieľom rešerše bude spracovanie odbornej literatúry o chemosenzoroch obsahujúcich binaftylovú jednotku so zameraním na detekciu katiónov. Možnosť zapojenia sa do syntézy a štúdia takýchto molekúl je vítaná. Analýza je umožnená prístrojmi na našom pracovisku.

Characteristic: Binaphthyl derivatives with suitably bound coordinating groups are capable of complexation of metal cations from the solution. The interaction between metal cations and binaphthyl can be observed using chiroptical methods (e.g., ECD spectroscopy). Binaphthyl chemosensors have potential applications in the fields of materials, analytical, and medicinal chemistry.

The aim of the research will be to process scientific literature on chemosensors containing a binaphthyl unit with a focus on cation detection. The possibility of participating in the synthesis and study of such molecules is welcome. Analysis is possible using instruments at our workplace.

Kľúčové slová: binaftyl, chemosenzor, chiroptický



Téma 11 (vhodná aj pre Biological Chemistry)

Príprava substrátov a ich Click Chemistry reakcií určených na inhibíciu aldóza reduktázy – na zabránenie rozvoju diabetických komplikácií

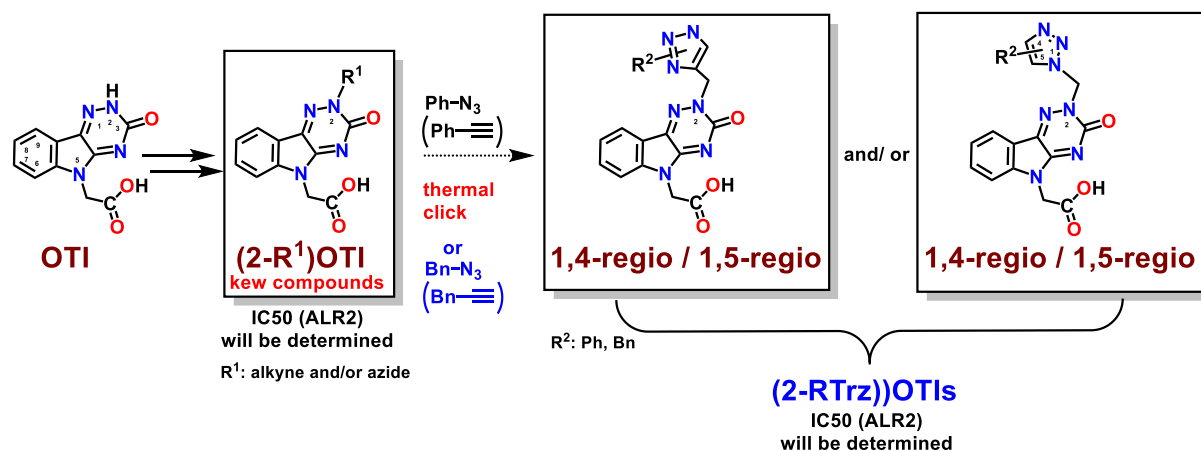
Synthesis of substrates for their Click Chemistry reactions designed to inhibit aldose reductase focused on a prevention of development of diabetic complications

Vedúci BP: Mgr. Ambroz Almásky, PhD.; ambroz.almassy@uniba.sk

Charakteristika: Diabetické komplikácie ohrozujú život ľudí s diabetom. Inhibícia aldóza reduktázy, prvého enzýmu polyolovej dráhy je považovaná za kľúčovú pre zabránenie diabetických komplikácií ako sú katarakta, nefropatia, neuropatia, angiopatia, zápal, oxidačný stres, infarkt, mŕtvica, amputácia končatín..., ktoré vedú k významnému skráteniu života ľudí s diabetom (odhaduje sa, že je to zhruba o 20 rokov menej ako je priemerné bežné dožité u ľudí bez diabetu). Dosiaľ v západných krajinách takýto typ liečiva chýba. Naším cieľom je vyvinúť kandidáta na liečivo predstavujúce kvalitný základ pre jeho ďalšiu cestu k liečivu zohľadňujúci tak aktivitu, selektivitu, ako aj bio-dostupnosť, ktoré následnou spoluprácou s významnou farmaceutickou firmou bude ďalej rozvíjané smerom k novému typu liečiva. Jednou z metód ako to dosiahnuť je metodika *in situ* Click Chemistry, ktorá bola v roku 2022 odmenená Nobelovou cenou. Jej nositeľmi sú Carolyn R. Bertozzi, Morten Meldal a K. Barry Sharpless (jeho druhá Nobelova cena). Na to, aby sme mohli uskutočniť Click reakciu v prostredí enzýmu, potrebujeme pripraviť vhodné chemické substráty na uskutočnenie termickej Click reakcie a v prípade identifikácie úspešných biologických parametrov produktov aj *in situ* Click Chémiu, kde samotný enzým odkatalyzuje vznik svojho vlastného veľmi účinného inhibítora.

Bakalárska práca je zameraná na štúdium odbornej literatúry, selekciu vybraných poznatkov a syntézu počítačom predpovedaných zlúčenín, ktoré budú slúžiť, ako základ, pre pripravovanú Click Chemistry reakciu a ďalší výskum.

Kľúčové slová: Click Chemistry, aldóza reduktáza, syntéza, alkylácia, alkíny, azidy



Téma 12 (vhodná aj pre Biological Chemistry)

Syntéza azido derivátu oxotriazinoindolu, ako kľúčového prekursoru pre prípravu Click Chemistry produktov – inhibítorov aldóza reduktázy

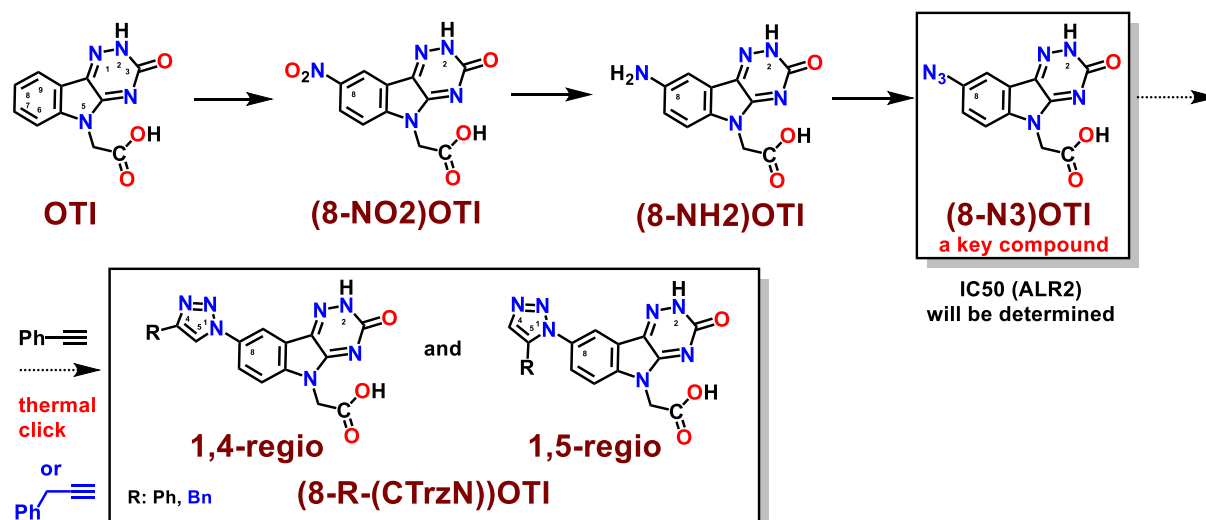
Synthesis of the azido derivative of oxotriazinoindole, as a key precursor for the preparation of Click Chemistry products in development of aldose reductase inhibitors

Vedúca BP: Mgr. Terézia Teplanová; teplanova16@uniba.sk

Charakteristika: Diabetické komplikácie ohrozujú život ľudí s diabetom. Inhibícia aldóza reduktázy, prvého enzýmu polyolovej dráhy je považovaná za kľúčovú pre zabránenie diabetických komplikácií ako sú katarakta, nefropatia, neuropatia, angiopatia, zápal, oxidačný stres, infarkt, mŕtvica, amputácia končatín..., ktoré vedú k významnému skráteniu života ľudí s diabetom (odhaduje sa, že je to zhruba o 20 rokov menej ako je priemerné bežné dožité u ľudí bez diabetu). Dosiaľ v západných krajinách takýto typ liečiva chýba. Naším cieľom je vyvinúť kandidáta na liečivo predstavujúce kvalitný základ pre jeho ďalšiu cestu k liečivu zohľadňujúci tak aktivitu, selektivitu, ako aj bio-dostupnosť, ktoré následnou spoluprácou s významnou farmaceutickou firmou bude ďalej rozvíjané smerom k novému typu liečiva. Jednou z metód ako to dosiahnuť je metodika *in situ* Click Chemistry, ktorá bola v roku 2022 odmenená Nobelovou cenou. Jej nositeľmi sú Carolyn R. Bertozzi, Morten Meldal a K. Barry Sharpless (jeho druhá Nobelova cena). Na to, aby sme mohli uskutočniť Click reakciu v prostredí enzýmu, potrebujeme pripraviť vhodné chemické substráty na uskutočnenie termickej Click reakcie a v prípade identifikácie úspešných biologických parametrov produktov aj *in situ* Click Chémiu, kde samotný enzým odkatalyzuje vznik svojho vlastného veľmi účinného inhibítora.

Bakalárska práca je zameraná na štúdium odbornej literatúry, selekciu vybraných poznatkov určených pre syntézu, čistenie, určenie štruktúry a stanovenie fyzikálno- chemických vlastností počítačom navrhutej zlúčeniny, ktorá bude slúžiť ako základ, pre Click Chemistry reakcie a ďalší výskum. Študent sa počas diplomovej práce stretne tak s organickou syntézou, ako aj s určením biologickej aktivity cieľového produktu (8-azido)OTI.

Kľúčové slová: syntéza, organický azid, Click Chemistry, aldóza reduktáza



Téma 13 (vhodná aj pre Biological Chemistry)

Preskúmanie alkylácie ALR2 inhibítora oxotriazolindolu OTI pomocou rôznych alkoholov v kyslom prostredí

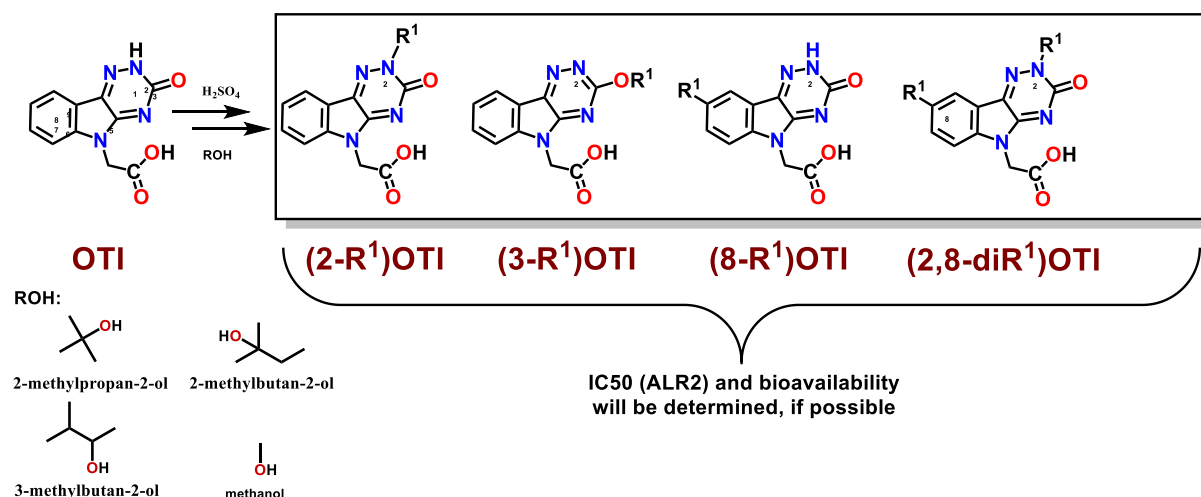
Investigation of the alkylation of the oxotriazolindole ALR2 inhibitor OTI using various alcohols in acidic media

Vedúca BP: Mgr. Lucia Kováčiková, PhD.; lucia.kovacikova@uniba.sk)

Charakteristika: Vývoj liečiv je multidisciplinárny a komplexný proces, kde nielen aktivita a selektivita inhibítorov aldóza reduktázy, ale (okrem iných faktorov) aj ich schopnosť dostať sa na miesto určenia je rozhodujúca pre finalizáciu vývoja liečiva. Cieľom tejto bakalárskej práce bude preskúmať metódu príprav bežným spôsobom (alkyláciou s RX) ťažšie dostupných derivátov nosného skeletu OTI pomocou ich alkylácie alkoholmi v silne kyslom prostredí.

Bakalárska práca je zameraná na štúdium odbornej literatúry, selekciu vybraných poznatkov určených pre syntézu, čistenie, určenie štruktúry a stanovenie fyzikálno-chemických vlastností navrhnutých zlúčenín. Nové zlúčeniny budú slúžiť na skúmanie ich biologickej aktivity, ako aj zistenie ich bio-dostupnosti.

Kľúčové slová: alkylácia v kyslom prostredí, IC_{50} , aldóza reduktáza, bio-dostupnosť, BMC (Biomicellar Partitioning Chromatography)



Téma 14

Organické fotoprepínače ako Molekulárne Solárne Termálne (MOST) systémy

Organic photoswitches as Molecular Solar Thermal (MOST) systems

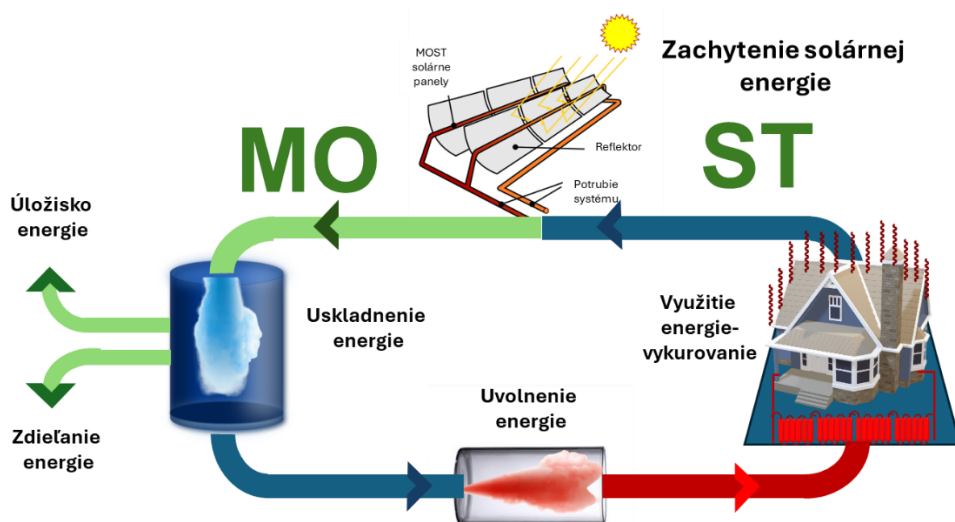
Vedúci BP: Mgr. Bernard Mravec, PhD.; mravec7@uniba.sk

Charakteristika: Fotoprepínače sú trieda organických molekúl, ktoré reagujú na svetelný impulz reverzibilnou farebnou a štrukturálnou zmenou. Implementácia fotoprepínačov do moderných chytrých materiálov a biologických makromolekúl, so zámerom meniť ich fyzikálne a biologické vlastnosti pomocou svetla predstavuje moderný a účinný spôsob rýchlej a flexibilnej kontroly. Fotoprepínače sú schopné ukladať absorbovanú energiu zo svetla a ukladať ju do svojich metastabilných foriem, pričom uvoľnenie tejto energie môže byť kontrolované. MOST materiály pracujú práve na takomto princípe úschovy slnečnej energie a sú jednou z alternatív k batériám vo fotovoltaiických systémoch. Cieľom tejto práce bude preskúmať a spracovať doterajšie poznatky o MOST systémoch, o rôznych triedach molekúl a fotoprepínačov vhodných pre MOST systémy ako aj ich syntetickú prípravu, dostupnosť a efektivitu. Študent nadobudne základné poznatky z organickej syntézy molekúl vhodných pre materiálovú chémiu a oboznámi sa s prácou v spektrálnom ako aj v syntetickom laboratóriu.

Kľúčové slová: fotoprepínače, metastabilný izomér, norbornandiény, diantracény, azobenzény, molekulárne-solárne termálne systémy.

Characteristic: Photoswitches are a class of organic molecules that respond to a light stimulus by a reversible color and structural change. The incorporation of photoswitches into modern smart materials and biological macromolecules, with the aim of modifying their physical and biological properties using light, represents a modern and efficient approach to rapid and flexible control. Photoswitches are capable of absorbing energy from light and storing it in their metastable forms, while the release of this energy can be controlled. MOST materials operate precisely on this principle of solar energy storage and represent one of the alternatives to batteries in photovoltaic systems. The aim of this work is to investigate and summarize the current state of knowledge on MOST systems, various classes of molecules and photoswitches suitable for MOST applications, as well as their synthetic preparation, availability, and efficiency. The student will acquire fundamental knowledge in this field as well as in the organic synthesis of molecules suitable for materials chemistry. They will also become familiar with work in spectral and synthetic laboratories.

Keywords: photoswitches, metastable isomer, norbornadienes, diantracene, azobenzenes, molecular solar thermal systems.



VÝSKUMNÁ SKUPINA: Ing. Michal Májek, Dr. rer. nat.

Téma 15

Syntéza azobenzénových fotoprepínačov: korelácia medzi syntetickou metódou a E/Z izomérom pomerom.

Synthesis of azobenzene photoswitches: correlation between the synthetic method and E/Z isomeric ratio.

Vedúca BP: Mgr. Lea Hegedúsová, PhD.; hegedusova37@uniba.sk

Konzultant BP: Ing. Michal Májek, Dr.rer.nat.; michal.majek@uniba.sk

Charakteristika: Azobenzény predstavujú jednu z najvýznamnejších a najštudovanejších tried molekulových fotoprepínačov založených na svetlom indukovanej E/Z fotoizomerizácii. Vyznačujú sa širokým aplikačným potenciálom s možnosťou uplatnenia v mnohých biologických a technologických aplikáciách. Pre väčšinu azobenzénov je však typická nízka termická stabilita metastabilného Z-izoméru. Ukázalo sa však, že vhodná substitúcia v *orto* polohách môže túto stabilitu výrazne zvýšiť, čím sa otvárajú nové možnosti ich praktického využitia. Prípravu takto modifikovaných derivátov možno realizovať rôznymi syntetickými metódami, ktoré sa líšia typom použitých reagentov, katalyzátorov, reakčným prostredím, ako aj zastúpením izomérom foriem vo finálnych produktoch. Samotnému izoméromu zloženiu produktov sa však doposiaľ nevenovala dostatočná pozornosť.

Cieľom bakalárskej práce je preto príprava fotochromných azobenzénov s termicky stabilným Z-izomérom pomocou rôznych syntetických prístupov, následné štúdium izomérom zloženia a mechanizmov týchto procesov. Teoretická časť sa zameria na prehľad substitučných efektov ovplyvňujúcich fotochromné vlastnosti azobenzénových fotoprepínačov a na dostupné syntetické stratégie pre ich prípravu. Experimentálna časť bude venovaná syntéze vybraných derivátov, ich purifikácii, analýze zastúpenia oboch izomérom v konečných produktoch v závislosti od zvolenej metódy a mechanizmov týchto procesov.-izomérom pomocou rôznych syntetických

prístupov, následné štúdium izoméneho zloženia a mechanizmov týchto procesov. Teoretická časť sa zameria na prehľad substitučných efektov ovplyvňujúcich

Kľúčové slová: azobenzény, *orto*-substitúcia, izoména rovnováha, štúdium priebehu reakcií

