

Témy pre doktorandské štúdium so začiatkom v roku 2026

Študijný odbor: 4.1.16. organická chémia

Katedra organickej chémie PRIF UK

Téma 1

Školiteľ: Prof. Mgr. Radovan Šebesta, DrSc. (e-mail: radovan.sebesta@uniba.sk)

Strojové učenie pre aplikácie v radikálovej a redox chémii a mechanochemických katalytických reakciách

Anotácia: Strojové učenie umožňuje objavovanie predtým skrytých vzťahov, ktoré môžu viesť k pokroku v mnohých oblastiach chémie. Využitie týchto poznatkov môže uľahčiť vývoj nových transformácií, čo vedie k efektívnejšej syntéze cenných produktov. V tomto projekte navrhujeme aplikovať metodiky strojového učenia na riešenie problémov v radikálovej a redoxnej chémii ako aj mechanochemických katalytických procesoch. Hlavným praktickým obmedzením je nedostupnosť relevantných parametrov a vysokokvalitných vstupných údajov potrebných pre efektívne tréningovanie modelov. Aby sme to vyriešili, zameriame sa na vývoj spoľahlivých protokolov na generovanie vhodných tréningových údajov, buď prostredníctvom paralelného experimentovania, alebo kvantovo-chemických výpočtov. Výsledné súbory údajov sa potom použijú na tréningovanie modelov strojového učenia a predpokladané výsledky budú overené prostredníctvom vybraných experimentálnych štúdií.

Machine learning for applications in radical and redox chemistry and mechanochemical catalytic reactions

Annotation: Machine learning enables the discovery of previously hidden relationships that can drive advances across many areas of chemistry. Leveraging these insights can facilitate the development of new transformations, leading to more efficient syntheses of valuable products. In this project, we propose to apply machine learning methodologies to challenges in radical and redox chemistry and mechanochemical catalytic processes. A major practical limitation is the unavailability of relevant parameters and high-quality input data required for effective model training. To address this, we will focus on developing reliable protocols for generating suitable training data, either through parallel

experimentation or quantum-chemical calculations. The resulting datasets will then be used to train machine learning models, and the predicted outcomes will be validated through selected experimental studies.

Kľúčové slová: strojové učenie, radikálové reakcie, redoxné reakcie, mechanochémia, katalýza

Téma 2

Školiteľka: doc. Ing. Mária Mečiarová, PhD.; maria.meciarova@uniba.sk)

Dizajn nových organokatalytických reakcií

(Design of novel organocatalytic reactions)

Anotácia: Organokatalýza je v súčasnosti jednou z najpoužívanějších metód stereoselektívnej syntézy chirálnych zlúčenín, ktoré vykazujú zaujímavé vlastnosti, alebo sú stavebnými blokmi v syntéze špeciálnych chemikálií, vrátane farmaceutík. Nezanedbateľnou výhodou organokatalýzy je jej kompatibilita s novými rozpúšťadlami, ktoré zodpovedajú požiadavkám udržateľného rozvoja, ako aj s účinnými aktivačnými technikami, ako je mikrovlnné žiarenie, ultrazvukové vlnenie, mechanická aktivácia v guľových mlynoch, fotochémia, elektrochémia. Dizertačná práca bude zameraná na vývoj nových organokatalyzátorov využívajúcich nové aktivačné módy a hľadanie vhodných kombinácií organokatalyzátora, rozpúšťadla a aktivačnej techniky s cieľom optimalizovať priebeh známych reakcií, resp. navrhnuť nové syntézy chirálnych produktov s praktickým využitím.

Kľúčové slová: organokatalýza, stereoselektívna syntéza, zelená chémia

Téma 3

Školiteľka: doc. Ing. Mária Mečiarová, PhD.; maria.meciarova@uniba.sk)

Mechanochemické couplingové reakcie jemných organokovových činidiel (Mechanochemical coupling reactions of mild organometallic reagents)

Anotácia: Cross-couplingové reakcie sú syntetickou metódou na spájanie rôznych fragmentov prostredníctvom väzby uhlík-uhlík, prípadne uhlík-heteroatóm, ktoré vyžadujú kovové katalyzátory. Organokovové katalyzátory využívané v cross-couplingových reakciách sú často zlúčeniny paládia. Takéto reakcie majú v organickej

syntéze široké uplatnenie, vrátane syntézy mnohých liečiv. V ostatných rokoch sa kladie čoraz väčší dôraz na využívanie katalyzátorov na báze medi, kobaltu a niklu. K ich prednostiam patrí lepšia dostupnosť, nižšia cena, ako aj zdravotná a environmentálna nezávadnosť v porovnaní s katalyzátormi na báze Pd alebo Rh. Dizertačná práca bude zameraná na štúdium cross-couplingových reakcií jemných organokovových činidiel katalyzovaných katalyzátormi na báze medi, kobaltu a niklu v podmienkach mechanickej aktivácie v guľových mlynch. Optimalizované reakčné podmienky budú aplikované na syntézu nových, doposiaľ v literatúre neopísaných derivátov s potenciálne biologickými účinkami.

Kľúčové slová: couplingové reakcie, mechanická aktivácia, jemné organokovové činidlá

Téma 4 (pre projekt MSCA-DN: Mechanochemix)

Školiteľ: Prof. Mgr. Radovan Šebesta, DrSc.; konzultant: doc. Ing. Mária Mečiarová, PhD. (e-mail: radovan.sebesta@uniba.sk)

Mechanochemická asymetrická organokatalýza využívajúca kovalentne viazané intermediáty

Anotácia: Kombinácia asymetrickej organokatalýzy a mechanochemie má potenciál radikálne zlepšiť syntézu komplexných chirálnych zlúčenín. Tento projekt vyvinie nové asymetrické organokatalytické metodiky za mechanochemických podmienok, ktoré sa spoliehajú na kovalentne viazané medziprodukty. Využijeme kovalentné aktivačné režimy, ktoré doteraz neboli aplikované v mechanochemických podmienkach, ako sú procesy katalyzované NHC, izomočovinou, fosfánmi alebo sulfidmi. Počiatočným cieľom výskumu je vyvinúť dôkaz konceptu pre domino reakcie katalyzované NHC, izomočovinou a fosfánom za mechanochemických podmienok a preskúmať rozsah použitia a obmedzenia. Po vývoji vhodných protokolov budú novo vyvinuté metodiky aplikované vo vybraných domino reakciách vedúcich k biorelevantným chirálnym karbocyklickým a heterocyklickým molekulám podobným liečivám alebo prírodným produktom. Okrem toho preskúmame rozsah a obmedzenia asymetrických mechanochemických organokatalytických reakcií s použitím kovalentnej aj nekovalentnej aktivácie s izomočovinami, sulfidmi, fosfínmi, N-heterocyklickými karbénmi a chirálnymi Brønstedovými kyselinami.

Mechanochemical asymmetric organocatalysis utilising covalently bound intermediates

Annotation: Combination of asymmetric organocatalysis and mechanochemistry have potential to radically improve synthesis of complex chiral compounds. This project will develop new asymmetric organocatalytic methodologies under mechanochemical conditions that rely on covalently bound intermediates. We will utilize covalent activation

modes, which were so far not developed in mechanochemical settings such as NHC, isourea, phosphine, or sulfide - catalyzed processes. The initial goal of the research is to develop a proof of concept for NHC, isourea and phosphine-catalyzed domino reactions under mechanochemical conditions and investigate the scope and limitations. Once suitable protocols have been developed, the newly developed methodologies will be applied in selected domino reactions leading to biorelevant chiral carbocyclic and heterocyclic drug-like or natural-product-like molecules. Furthermore, we shall explore the scope and limitations of asymmetric mechanochemical organocatalytic reactions using both covalent and non-covalent activation with iso-ureas, sulfides, phosphines, N-heterocyclic carbenes, and chiral Brønsted acids.

Keywords: asymmetric organocatalysis, covalent organocatalysis, mechanochemistry

Téma 5 (pre projekt MCSA-DN: Mechanochemix)

Školiteľ: Prof. Mgr. Radovan Šebesta, DrSc.; konzultant: Ing. Péter Kisszékely, PhD. (e-mail: radovan.sebesta@uniba.sk)

Mechanochemicky sprostredkované katalytické reakcie s organokovovými činidlami

Anotácia: Reakcie katalyzované kovmi, ktoré používajú organokovové činidlá predstavujú všestrannú skupinu transformácií vytvárajúcich väzby C-C a C-heteroatóm, ktoré sú kľúčové pre tvorbu množstva cieľových molekúl. Cieľom tohto projektu je preskúmať nové možnosti realizácie mechanochemických reakcií katalyzovaných kovmi s použitím organokovových činidiel. Úlohou bude vyvinúť účinné a udržateľné mechanochemické protokoly na realizáciu cross-couplingových reakcií s miernymi organokovovými činidlami, ako sú enoláty kovov, organozirkoničité činidlá, organosilány alebo stannány. Organokovové činidlá sú kľúčové v mnohých organických transformáciách, ale ich vysoká reaktivita a nestabilita obmedzujú praktické aplikácie vrátane mechanochemických. Plánujeme hľadať jemnejšie organokovové činidlá odvodené od zinku, zirkónia, kremíka alebo cínu a/alebo použitím rôznych ligandov, protiiónov a aditív. Tieto miernejšie organokovové zlúčeniny budú otastované v mechanochemických cross-couplingových a iných procesoch katalyzovaných kovmi. Okrem toho sa bude skúmať kombinácia s rôznymi reakčnými partnermi, vrátane arylsulfóniových solí, za mechanochemických podmienok v rôznych zariadeniach, najmä v RAM.

Mechanochemically-enabled catalytic reactions of organometallic reagents

Annotation: Metal-catalyzed reactions with organometallic reagents are highly versatile group of C-C and C-heteroatom bond building transformations crucial for making multitude of target molecules. This project aims to explore new opportunities to realize

mechanochemical metal-catalyzed reactions using organometallic reagents. The aim will be on developing efficient and sustainable mechanochemical protocols to realize cross-coupling reactions with mild organometallic reagents such as metal enolates, organozirconium reagents, organosilanes or stannanes. Organometallic reagents are critical in many organic transformations, but their high reactivity and instability limit practical applications, including mechanochemical ones. We plan to search for more benign organometallic reagents derived from zinc, zirconium, silicon or tin and/or by employing different ligands, counterions, and additives. These milder organometallics will be assessed in mechanochemical cross-coupling and other metal-catalyzed processes. In addition, a combination with different reaction partners, including aryl sulfonium salts, will be explored under mechanochemical conditions in different equipment, in particular RAM.

Keywords: mechanochemistry, metal-catalysis, organometallics, cross-couplings

Téma 6

Školiteľ: Mgr. Henrieta Stankovičová, PhD. (e-mail: henrieta.stankovicova@uniba.sk)

Chemosenzory na báze kumarínov so zámenou atómu kyslíka

Anotácia: Deriváty kumarínov sa široko používajú ako signálne jednotky pre rôzne biologické a environmentálne ciele. Tieto malé štruktúry sú prístupné inteligentným štruktúrnym modifikáciám, ktoré umožňujú jednoduché ladenie ich absorpčných a emisných vlastností podľa potreby. Cieľom dizertačnej práce je študovať vplyv výmeny heteroatómov v kumarínovom jadre pri zachovaní základných výhod jeho skeletu, syntetizovať nové deriváty kumarínu a skúmať ich reaktivitu. Dá sa predpokladať, že táto stratégia bude viesť vo vývoji kumarínov k flexibilnejším nástrojom bunkového a molekulárneho zobrazovania.

Coumarin-Based Chemosensors with oxygen atom replacement

Annotation: Coumarin derivatives are widely used as signaling units for a variety of biological and environmental targets. These small scaffolds are amenable to smart structural modifications to easily tune their absorption and emission properties on demand. The aim of the PhD thesis is to study the effect of heteroatom replacement within the coumarin core, while preserving the fundamental benefits of its skeletal framework, to synthesize new coumarin derivatives, and to examine their reactivity. It can be envisioned that this strategy will continue the development of coumarins towards more flexible cellular and molecular imaging tools.

Kľúčové slová: kumarín, heterostóm, fluorescenčná próba, NIR próba

Téma 7

Školiteľ: doc. RNDr. Martin Putala, PhD.; konzultant: Mgr. Henrieta Stankovičová, PhD. (e-mail: martin.putala@uniba.sk)

Chromenónové deriváty pre aplikáciu v optoelektronike

Anotácia: Design, syntéza a charakterizácia nízkomolekulových organických zlúčenín pozostávajúcich z vhodne prepojeného chromenónového skeletu a elektroaktívnych (hetero)arylových substituentov pre aplikáciu v optoelektronike. Pozornosť bude venovaná rozvíjaniu syntetických metód, tradičných aj netradičných, umožňujúcich efektívnu prípravu cielenej skupiny zlúčenín. Bude sa optimalizovať využitie C–H arylácií v porovnaní s cross-couplingovými reakciami. Dôraz bude kladený na hľadanie vzťahu medzi štruktúrou a funkčnými vlastnosťami.

Chromenone derivatives for application in optoelectronics

Annotation: Design, synthesis, and characterization of low-molecular-weight organic compounds consisting of a suitably linked chromenone skeleton and electroactive (hetero)aryl substituents for application in optoelectronics. Attention will be paid to the development of synthetic methods, both traditional and non-traditional, enabling the efficient preparation of a targeted group of compounds. The use of C–H arylation will be optimized in comparison with cross-coupling reactions. Emphasis will be placed on elucidation the relationship between structure and functional properties.

Kľúčové slová: chromenón, polovodič, (hetero)arylácia

Téma 8

Školiteľ: RNDr. Marek Cigáň, PhD. (e-mail: marek.cigan@uniba.sk)

Cielený dizajn nových molekulových fotoprepínačov pre optiku a mikroskopiú

Anotácia: Záujem o vývoj inteligentných molekúl, ktoré vykazujú vratnú zmenu svojich fyzikálno-chemických vlastností vplyvom vonkajších podnetov, je jedným z ústredných cieľov modernej materiálovej chémie. Možnosť kontrolovanej zmeny týchto vlastností pomocou svetelného stimulu predstavuje obrovský aplikačný potenciál v rôznych v oblasti optiky (ako sú plne optické obvody, holografické optické prvky, nelineárne optické materiály a vysokohustotné ukladanie dát), optoelektroniky (vrátane opticky riadených tranzistorov a modulátorov signálu), pokročilého boja proti falšovaniu (vylepšené bezpečnostné prvky v dôverných dokumentoch), šifrovania informácií (vymazateľné atramenty a papiere), ale aj vo fotofarmakológii (fotoregulácii biochemických procesov)

a mikroskopii s ultravysokým rozlíšením (fluorescenčná a Ramanovská mikroskopia pre zobrazovanie živých buniek). Zatiaľ čo mnohé organické fotoprepínače vykazujú fotochromatickú odozvu, kvantitatívne fotoprepínanie potrebné pre mnohé praktické aplikácie je zriedkavé a predstavuje výzvu pre súčasnú fotochémiu. Cieľom dizertačnej práce je racionálny dizajn, príprava a detailné štúdium fotochemických charakteristík nových hydrazónových a diaryleténových fotoprepínačov pre aplikácie v oblasti optiky/optoelektroniky a mikroskopie s ultravysokým rozlíšením. Výstupom práce by malo byť porozumenie vzťahu medzi štruktúrou a požadovanými výstupnými charakteristikami nových fotoprepínačov.

Téma 9

Školiteľ: Ing. Michal Májek, PhD. (e-mail: michal.majek@uniba.sk)

Organické reakcie založené na elektrochemickej oxidácii heteroatómov.

Anotácia: Väčšina organických látok obsahuje heteroatómy ako N, O, P, S a iné. Takéto heteroatómy majú voľné elektrónové páry, ktoré sú len slabo pútané k molekulám. Odtrhnutie elektrónov z heteroatómov možno dosiahnuť pomocou chemických reagentov, ale aj pomocou elektrického prúdu – reagentu, ktorý nezanecháva stopy. Takýto proces možno dosiahnuť pomocou organickej elektrochémiie. Kation radikály na heteroatómoch sú potom využiteľné na rôzne transformácie ako reakcie s nukleofilmi, deprotonácie a prešmyky. Cieľom práce je preskúmať syntetický potenciál elektrochemickej oxidácie heteroatómov za účelom objavenia nových syntetických procesov. Syntetická elektrochémia bude v tomto projekte kombinovaná s dátami z elektroanalytických meraní, ktoré nám umožnia navrhovať nové reakcie ako aj vysvetliť reakčné mechanizmy. Kvantovo-chemické výpočty budú využité pri mechanistických štúdiách na predpovedanie redoxných vlastností krátkožijúcich intermediátov. Pripravené látky budú analyzované pomocou spektroskopických techník na štúdium ich potenciálu v materiállovej chémii, napríklad v optoelektronike.

Organic reactions induced by electrochemical oxidation of heteroatoms

Annotation: Most of organic compounds contain heteroatoms, such as N, O, P, S and others. Such heteroatoms have free electron pairs, which are bound only loosely to the molecules. Abstraction of electrons from heteroatoms can be accomplished by chemical reagents, but also using a traceless reagent – electric current. This process can be enabled by organic electrochemistry. Cation radicals on heteroatoms are susceptible to various transformations, such as reactions with nucleophiles, deprotonations and rearrangements. We plan to investigate the synthetic potential of heteroatom oxidation by electrochemistry to discover new processes. In this project, synthetic electrochemistry will be aided by data from electroanalytical measurements, which will

help us to develop new reactions as well as rationalize the reaction mechanisms. Quantum-chemical calculations will be utilized in mechanistic studies to predict the redox potentials of short-lived intermediates. Prepared materials will be analyzed via spectroscopic techniques for their potential in material chemistry applications, such as optoelectronics.

Chemický ústav SAV (Externá vzdelávacia inštitúcia)

Téma Ext1

Školiteľ: Mgr. Juraj Kóňa, PhD; konzultant: Ing. Monika Poláková, PhD. (e-mail: chemkona@savba.sk)

Syntéza iminosacharidových derivátov s antivirotickými účinkami

Anotácia: Syntéza N-substituovaných hydroxypyrolidínov na základe počítačového štruktúrneho dizajnu. Cieľom práce bude príprava nových derivátov, ako účinných antagonistov proteínov ľudského herpesvírusu.

Kľúčové slová: organická syntéza, pyrolidíny, iminosacharidy, antagonist proteínov

Synthesis of iminosaccharide derivatives with antiviral effects

Annotation: Synthesis of N-substituted hydroxypyrrolidines based on computer-aided structural design. The aim of the work will be the preparation of new derivatives as effective antagonists of human herpesvirus proteins.

Keywords: organic synthesis, pyrrolidines, iminosaccharides, protein antagonist

Téma Ext2

Školiteľ: RNDr. Marek Baráth, PhD.; (e-mail: chemmbar@savba.sk)

Syntéza a štruktúrna optimalizácia nízkomolekulových inhibítorov enzýmov s potenciálnou biologickou aktivitou

Anotácia: Nízkomolekulové inhibítory enzýmov predstavujú jednu z kľúčových tried biologicky aktívnych látok využívaných v medicínskej chémii, biotechnológiách a bioanalytických aplikáciách. Ich účinnosť je úzko spätá so štruktúrou molekuly, priestorovým usporiadaním funkčných skupín a schopnosťou selektívne interagovať s aktívnym miestom cieľového enzýmu. Cieľom dizertačnej práce bude návrh, syntéza a chemická modifikácia série organických zlúčenín s predpokladanou inhibičnou aktivitou voči vybraným triedam enzýmov (napr. hydrolázy, oxidoreduktázy alebo metaloproteázy).

Práca sa zameria na systematickú štruktúrno-aktivitnú analýzu (SAR), kde budú skúmané vplyvy elektronických, sterických a koordinačných vlastností substituentov na biologickú aktivitu syntetizovaných molekúl.

Syntetická časť práce bude zahŕňať prípravu základných skeletov inhibítorov, ich následnú derivatizáciu a optimalizáciu reakčných postupov s dôrazom na selektivitu, výťažnosť a reprodukovateľnosť. Charakterizácia pripravených zlúčenín bude realizovaná pomocou štandardných analytických metód organickej chémie (NMR, IR, MS, elementárna analýza). Biologická aktivita bude hodnotená v spolupráci s odborným pracoviskom. Výsledkom práce bude súbor nových alebo modifikovaných organických molekúl s definovanou štruktúrou a potenciálnou inhibičnou aktivitou, ako aj hlbšie pochopenie vzťahu medzi chemickou štruktúrou a biologickou funkciou.

Kľúčové slová: organická syntéza, inhibítory enzýmov, medicínna chémia, štruktúrno-aktivitné vzťahy, biologicky aktívne molekuly

Synthesis and Structural Optimization of Low-Molecular-Weight Enzyme Inhibitors with Potential Biological Activity

Annotation: Low-molecular-weight enzyme inhibitors represent an important class of biologically active compounds widely used in medicinal chemistry, biotechnology, and bioanalytical applications. Their activity is strongly dependent on molecular structure, spatial arrangement of functional groups, and the ability to selectively interact with enzyme active sites. The aim of this PhD thesis is the design, synthesis, and chemical modification of a series of organic compounds with anticipated inhibitory activity toward selected classes of enzymes (e.g., hydrolases, oxidoreductases, or metalloproteases). The work will focus on systematic structure–activity relationship (SAR) studies, investigating the influence of electronic, steric, and coordination properties of substituents on biological performance.

The synthetic part of the thesis will include preparation of core inhibitor scaffolds, their subsequent derivatization, and optimization of reaction protocols with emphasis on selectivity, yield, and reproducibility. Structural characterization will be performed using standard organic chemistry techniques (NMR, IR, MS, elemental analysis). Biological evaluation will be conducted in collaboration with specialized laboratories. The outcome of this work will be a library of novel or structurally optimized organic molecules with defined chemical structures and potential enzyme inhibitory activity, together with deeper insight into structure–function relationships.

Keywords: organic synthesis, enzyme inhibitors, medicinal chemistry, structure–activity relationships, bioactive molecules

Téma Ext3

Školiteľ: RNDr. Marek Baráth, PhD.; (e-mail: chemmbar@savba.sk)

Riadená syntéza a povrchová funkcionalizácia MXénov pripravených leptaním MAX fáz rôznymi fluoridmi

Anotácia: MXény sú perspektívne dvojrozmerné materiály vznikajúce selektívnou chemickou transformáciou vrstvených MAX fáz, pričom kľúčovým krokom ich prípravy je chemické odstránenie A-prvku prostredníctvom fluoridových činidiel. Napriek rozsiahlemu výskumu MXénov zostáva mechanizmus leptania, úloha fluoridového zdroja a jeho oxidačno-redukčných vlastností nedostatočne pochopená, najmä z pohľadu molekulovej a koordinačnej chémie.

Cieľom dizertačnej práce je štúdium syntézy MXénov ako chemicky riadenej transformácie tuhých látok, so zameraním na vplyv rôznych fluoridových systémov (alkalické fluoridy, fluoridy prechodných kovov a BF_3 -komplexy) na reaktivitu MAX fáz typu Ti_3AlC_2 , Ti_2AlC a TiVAIC . Práca sa zameria na vzťah medzi chemickou povahou fluoridu, jeho Lewisovou kyslosťou, redoxným správaním a výslednou štruktúrou a povrchovou chémiou MXénov. Následne bude skúmaná postsyntetická povrchová úprava MXénov pomocou nízkomolekulových organických a biologicky aktívnych látok (napr. aminokyseliny, karboxylové kyseliny, chelatačné činidlá), pričom dôraz bude kladený na kovalentné a koordinačné interakcie medzi organickými funkčnými skupinami a terminovaným povrchom MXénov. Táto časť práce bude interpretovaná ako povrchová organická modifikácia anorganického 2D substrátu. Práca vytvorí koncepčný most medzi anorganickou chémiou tuhých látok a organickou povrchovou chémiou a prispeje k lepšiemu pochopeniu MXénov ako chemicky nastaviteľných materiálov.

Kľúčové slová: MXény, MAX fázy, fluoridová chémia, Lewisove kyseliny, povrchová organická funkcionalizácia, 2D nanomateriály

Controlled Synthesis and Surface Functionalization of MXenes Prepared by Fluoride-Based Etching of MAX Phases

Anotácia v AJ: MXenes are an emerging class of two-dimensional materials obtained via chemically driven transformation of layered MAX phases, where selective removal of the A-element is mediated by fluoride-based reagents. Despite extensive research, the chemical nature of the etching process and the role of different fluoride sources remain insufficiently understood, particularly from a molecular and coordination chemistry perspective.

This PhD thesis aims to investigate MXene synthesis as a chemically controlled solid-state transformation, focusing on the influence of various fluoride systems, including alkali metal fluorides, transition metal fluorides, and BF_3 -based complexes, on the reactivity of selected MAX phases (Ti_3AlC_2 , Ti_2AlC , TiVAIC). Emphasis will be placed on

correlating fluoride Lewis acidity, redox behavior, and coordination chemistry with the resulting MXene structure and surface termination. The second part of the work will address post-synthetic organic surface modification of MXenes using low-molecular-weight organic and biologically active molecules such as amino acids, carboxylic acids, and chelating agents. These modifications will be studied as covalent or coordinative interactions between organic functional groups and the MXene surface, treating MXenes as reactive inorganic substrates for organic surface chemistry. This research will establish a conceptual link between solid-state inorganic chemistry and organic surface functionalization, positioning MXenes as chemically tunable platforms for advanced applications.

Keywords: MXenes, MAX phases, fluoride chemistry, Lewis acids, organic surface modifications, 2D nanomaterials.

Pracovisko: Ústav polymérov SAV (Externá vzdelávacia inštitúcia)

Téma Ext4

Školiteľ: Mgr. Jaroslav Mosnáček, DrSc.; e-mail: upolmosj@savba.sk

Syntéza funkčných polymérov a polymérnych materiálov pomocou moderných (foto)polymerizačných techník

Anotácia: V súčasnosti rastú požiadavky na vývoj nových polymérov s vlastnosťami šitými na mieru pre špeciálne aplikácie. PhD práca je zameraná na optimalizáciu podmienok kontrolovaných radikálových (foto)polymerizácií pre rôzne vinylové monoméry, vrátane monomérov z obnoviteľných zdrojov, za účelom prípravy polymérov s dobre definovanými molekulovými charakteristikami, komplexnou architektúrou, rôznymi funkčnými skupinami pre ich post-funkcionalizáciu organickými reakciami. Súčasťou práce bude i charakterizácia polymérov pomocou GPC a NMR, ako i syntéza nových typov katalyzátorov a monomérov. Predpokladá sa i zavedenie strojového učenia pre optimalizáciu reakčných podmienok a štruktúry.

Kľúčové slová: kontrolovaná polymerizácia, obnoviteľné monoméry, funkčné polyméry, strojové učenie

Synthesis of functional polymers and polymeric materials using advanced (photo)polymerization techniques

Annotation: Nowadays, the demand for the synthesis of tailored polymers for specialized applications has increased dramatically. The thesis will focus on the optimization of

reaction conditions for controlled radical (photo)polymerizations of various vinyl monomers, including renewable monomers, to prepare polymers with well-defined molecular characteristics, complex architectures, and various functional moieties, enabling post-functionalization via organic synthetic reactions. Synthesis of special monomers and/or catalysts can also be part of the thesis. Synthesized polymers will be characterized by GPC and NMR. Machine learning is expected to be involved in the optimization of the reaction conditions and polymers structures.

Keywords: controlled polymerization, renewable monomers, functional polymers, machine learning

Téma Ext5

Supervisor: Mgr. Martin Danko, PhD.; (e-mail: upoldan@savba.sk)

Polyméry s adaptovateľných presietením

Anotácia: The Ph.D. study will focus on developing an injectable dynamic polymeric hydrogel with tunable mechanical properties. The hydrogel will be designed using bioorthogonal chemistry through supramolecular crosslinks or a combination of supramolecular and dynamic covalent crosslinks. The goal is to enhance mechanical properties to mimic the extracellular matrix (ECM) of articular cartilage while maintaining biocompatibility. A promising injectable hydrogel will also be explored for 3D bioprinting applications. The performance of hydrogels will be evaluated in rabbit and sheep models for cartilage regeneration. This research will be conducted in collaboration with the University of Nantes, INSERM U1229 - Regenerative Medicine and Skeleton University of Nantes, INSERM U1229 - Regenerative Medicine and Skeleton, the Faculty of Medicine, Comenius University in Bratislava and the National Institute of Rheumatic Diseases in Piešťany.

Kľúčové slová: polyester, vitriméry, sieťovanie, vratné reakcie, dynamické siete, reológia injectable hydrogel, self-healing

Polymers with adaptable crosslinking

Annotation: The thesis will be focused on polymer synthesis (radical and anionic polyaddition, polycondensation) and physicochemical analysis of cross-linked materials. The subject will be preparation of functional polyesters, polyester-urethanes and polyamidoamines. The main aim will be production of vitrimers, i.e. a special type of polymer networks capable of reprocessing and self-healing without loss of mechanical properties after repeated cycles. Various synthetic approaches - application of

functional groups capable of reversible (dynamic) bonds, structural and molecular analysis, rheology will be developed in the thesis.

Keywords: polyesters, vitrimers, crosslinking, dynamic networks, reversible reaction, rheology

Téma Ext6

Školiteľ: Mgr. Jozef Kollár. PhD. (e-mail: upoljkol@savba.sk)

Multikomponentné reakcie ako platforma pre syntézu pokročilých polymérnych materiálov

Anotácia: Predkladaná téma je zameraná na vývoj vysoko účinných kopolymérnych materiálov určených pre biomedicínske a katalytické aplikácie, a to s využitím princípov trvalo udržateľnej organickej a polymérnej syntézy. Kľúčovú úlohu budú zohrávať viaczložkové reakcie (MCR), najmä reakcie Passerini a Ugi, ktoré v súčasnosti priťahujú značnú pozornosť v oblasti organickej syntézy, polymérnej chémie, vývoja liečiv, syntézy prírodných produktov a kombinatorickej chémie. Osobitná pozornosť bude venovaná syntéze funkčných polymérov s presne definovanou architektúrou, kontrolovanou distribúciou molekulových hmotností a úzkou polydisperzitou. Výskum by mal prispieť k vývoju nových amfifilných polymérov so schopnosťou samousporiadania, termoresponzívnych polymérnych systémov a materiálov s emisiou vyvolanou agregáciou (AIE-aktívne materiály), ktoré nájdu uplatnenie v biozobrazovaní, transporte liečiv a katalytických aplikáciách.

Kľúčové slová: viaczložkové reakcie (MCR), polymérna syntéza, funkčné polyméry, amfifilné polyméry, termoresponzívne materiály

Multicomponent reactions as a platform for the synthesis of advanced polymeric materials

Annotation: Thesis proposal is focused development of new polymerization processes and advanced polymeric materials for biomedical and catalytic applications. One of the main goals is synthesis of functional polymers through direct Mannich, Passerini, and/or Ugi based multicomponent polymerizations (MCPs), which have recently achieved great attention in organic synthesis, polymer synthesis, drug discovery, natural product synthesis, and combinatorial chemistry. Special attention will be paid to synthesis of functional polymers with controlled and well-defined architectures, controlled molar mass distributions, and narrow dispersity. Research should contribute to development of amphiphilic polymers for self-assembly behavior, thermoresponsive, and Aggregation-induced-emission (AIE) materials for bioimaging, drug delivery, and catalyst applications.

Keywords: multicomponent reactions (MCR), polymer synthesis, functional polymers, amphiphilic polymers, thermoresponsive materials.

Téma Ext7

Supervisor: Abolfazl Heydari, Ph.D.; co-Supervisor: Ing. Igor Lacík, DrSc. (e-mail: abolfazl.heydari@savba.sk)

Vývoj biotlače v tkanivovom inžinierstve prostredníctvom dynamických bioatramentov

Anotácia: Doktorandské štúdium sa zameria na vývoj injekčného dynamického polymérneho hydrogélu s laditeľnými mechanickými vlastnosťami. Hydrogél bude navrhnutý s použitím bioortogónnej chémie prostredníctvom supramolekulárnych zosieťovaní alebo kombinácie supramolekulárnych a dynamických kovalentných zosieťovaní. Cieľom je zlepšiť mechanické vlastnosti tak, aby napodobňovali extracelulárnu maticu (ECM) kĺbovej chrupavky a zároveň zachovali biokompatibilitu. Bude sa tiež skúmať sľubný injekčný hydrogél pre aplikácie 3D biotlače. Výkonnosť hydrogélův bude hodnotená na modeloch králikov a oviec pri regenerácii chrupavky.

Kľúčové slová: Polysacharidy, supramolekulová chémia, click chémia, 3D biotlač, injekčný hydrogél, samooprava

Advancing Bioprinting in Tissue Engineering Through Dynamic Bioinks

Annotation: The Ph.D. study will focus on developing an injectable dynamic polymeric hydrogel with tunable mechanical properties. The hydrogel will be designed using bioorthogonal chemistry through supramolecular crosslinks or a combination of supramolecular and dynamic covalent crosslinks. The goal is to enhance mechanical properties to mimic the extracellular matrix (ECM) of articular cartilage while maintaining biocompatibility. A promising injectable hydrogel will also be explored for 3D bioprinting applications. The performance of hydrogels will be evaluated in rabbit and sheep models for cartilage regeneration.

Keywords: Polysaccharides, supramolecular chemistry, click chemistry, 3D bioprinting, injectable hydrogel, self-healing.