

OD RADIKÁLOVÝCH A FOTOCHEMICKÝCH REAKCÍ K BIOKOMPATIBILNÍM LÁTKÁM

VLADIMÍR CÍRKVA

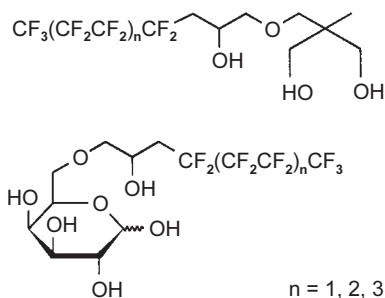
Ústav chemických procesů, Akademie věd České republiky, Rozvojová 135, 165 02, Praha 6, e-mail: cirkva@icpf.cas.cz

Přednáška nositele Baderovy ceny za rok 2000

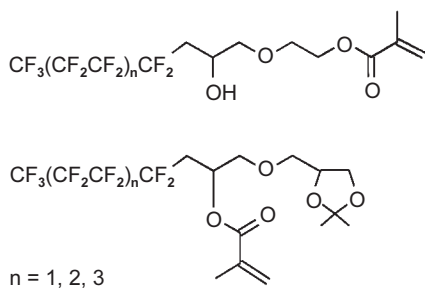
Výzkum biokompatibilních látek¹ se v poslední době stal hlavním a progresivním směrem na poli organické i bioorganické chemie. Snahou je připravit výhodným způsobem nové syntetické látky, které budou mít podobné či srovnatelné vlastnosti v porovnání s přírodními materiály, případně vlastnosti výhodnější. Zvýšená pozornost je věnována materiálům s dobrou propustností kyslíku, které se mohou stát vhodnými náhradami pro cévy, tkáně, srdeční chlopně a v nejspodnější řadě také materiály pro nové kontaktní čočky. Do této oblasti patří i příprava nových krevních náhrad ve spojitosti s nedostatkem krve ve světě pro náročné operace.

Použití fluoru jako modifikujícího substituentu v biologicky aktivních molekulách je dobře známo². U sloučenin s delším fluorovaným řetězcem se projevuje zvýšená propustnost pro plyny či celkové snížení povrchového napětí. Těchto fyzikálně-chemických vlastností bylo využito při přípravě několika nových biokompatibilních látek a materiálů³.

Výzkum s cílem připravit nové biokompatibilní látky začal studiem radikálových a fotochemických adicí na fluorované olefiny v systémech s alkanoly⁴, THF⁵ a 1,3-dioxolany⁶. Vedle nových příprav byla studována také regioselektivita reakce, nově bylo objeveno několik efektů^{7,8} (sterický vliv, délka a typ fluorovaného řetězce či silný vliv terminálního



Obr. 1. Příklady nových fluorovaných biotenzidů pro krevní náhrady



Obr. 2. Nové fluorované monomery pro kontaktní čočky

atomu chloru u chlorfluorpropenů). Požadovaný fluoralkylový řetězec byl do molekuly zaveden také pomocí epoxidů, které byly připraveny novou selektivní metodou^{9,10}. Reaktivita¹¹ těchto epoxidů byla využita při syntéze nových biokompatibilních tenzidů pro krevní náhrady (obr. 1) a amfifilních monomerů pro kontaktní čočky s vysokým transportem kyslíku (obr. 2).

LITERATURA

1. Církva V.: *Disertační práce*. VŠCHT, Praha 1997.
2. Banks R. E., Smart B. E., Tatlow J. C.: *Organofluorine Chemistry, Principles and Commercial Applications*. Plenum Press, New York 1994.
3. Lowe K. C.: *Artif. Cells, Blood Substitutes, Immob. Biotechnol.* 28, 25 (2000).
4. Církva V., Polák R., Paleta O.: *J. Fluor. Chem.* 80, 135 (1996).
5. Paleta O., Církva V., Kvičala J.: *J. Fluor. Chem.* 80, 125 (1996).
6. Církva V., Paleta O.: *J. Fluor. Chem.* 94, 141 (1999).
7. Církva V., Böhm S., Paleta O.: *J. Fluor. Chem.* 102, 159 (2000).
8. Paleta O., Církva V., Budková Z., Böhm S.: *J. Fluor. Chem.* 86, 155 (1997).
9. Církva V., Améduri B., Boutevin B., Kvičala J., Paleta O.: *J. Fluor. Chem.* 74, 97 (1995).
10. Církva V., Améduri B., Boutevin B., Paleta O.: *J. Fluor. Chem.* 83, 151 (1997).
11. Církva V., Améduri B., Boutevin B., Paleta O.: *J. Fluor. Chem.* 84, 53 (1997).

KVANTOVÁ CHEMIE II; VOLBA METOD PRO URČENÍ STRUKTURY A VÝPOČTY REAKTIVITY

ZDENĚK HAVLAS, MARTIN LEPŠÍK a JIŘÍ VONDRÁŠEK

Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky, Výzkumné centrum struktury a dynamiky komplexních molekulových systémů a biomolekul, Flemingovo n. 2, 166 10 Praha 6

Hledání speciálních bodů na energetických hyperplochách poskytuje informaci o struktuře a energii stabilních struktur a o reaktivitě. Vzhledem k množství kvantově chemických metod je nutné znát jak jednotlivé aproximace ovlivňují kvalitu předpovědi a jak jsou počítačově náročné.

Přednáška bude ilustrovat použití nejdůležitějších metod včetně těch, které zahrnují korelační energii, a výběr báze na kvalitu výsledků u dimeru vody. Tento model zahrnuje jak silné, tak i slabé vazby a je dostatečně malý na to, aby bylo možné použít i velice přesných metod a velkýchází. Výsledkem bude ukázat, jaké metody jsou vhodné pro určení struktury s ohledem na požadovanou přesnost. Zároveň bude ukázáno, jak rychle roste výpočetní náročnost se zvyšující se kvalitou výpočtů. Výpočty metodami DFT, HF, MP2, MP4, CCSD a CCSD(T) s bázemi od malých až po náročné (aug-cc-pVTZ) budou porovnány s přesnými experimentálními hodnotami.

V přednášce budou zrekapitulovány použité základní pojmy z kvantové chemie. Výpočty reaktivity jsou mnohem ná-