

## Abstrakt

Katedra farmaceutickej chémie a farmaceutickej analýzy, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova

Kandidát: Monika Janetková

Školiteľ: doc. PharmDr. Radim Kučera, Ph.D.

Konzultant: doc. Ing. Radim Vespalec, DrSc.

Názov práce: Využití HPLC v chirálních separacích III.

Bórové klastre sú kompletne syntetické anorganické štruktúry jedinečných vlastností, ktoré si razia cestu medzi organickými molekulami zvyčajne používanými v medicíne. Základná štruktúra je tvorená atómami bóru a vodíka, ktoré v priestore vytvárajú mnohosten s trojuholníkovými plochami. Väzba medzi atómami B-H-B je trojstredová a atómy spája len jeden elektrónový pár. Zdieľaný mrak elektrónov je príčinou pseudoaromatického charakteru a delokalizovaného negatívneho náboja štruktúry. Bóry neutrálnych klastrov majú tendenciu uvoľňovať protón vodíka za vzniku aniontu, a to v protických aj aprotických rozpúšťadlách. Typická je vysoká lipofilita, stabilita voči metabolickým pochodom v organizme a tepelná odolnosť. V praxi sú najvyužívanejšími *closo-*, *nido-* a *arachno-*karborány líšiace sa priestorovým usporiadaním s 11-12 vrcholmi. Bórové klastre sú vysoko symetrické molekuly, u ktorých endo- aj exoskeletálna substitúcia narušuje symetriu klastru za vzniku enantiomérov.

V súčasnosti sú využívané ako stereoselektívne kalatyzátory, rádiofarmaka, extrakčné činidlá pri odstraňovaní rádioaktívneho odpadu a tvorbe stacionárnych fází pre plynovú chromatografiu. Zúročiť charakteristické vlastnosti klastrov ako je metabolická stabilita, rigidita štruktúry, lipofilita a delokalizovaný negatívny náboj možno vo farmácii v úlohe farmakoforov, kedy v molekule liečiva zvyčajne nahradzujú fenyl alebo heterocyklus za účelom modifikácie vlastností molekuly.

Z dôvodu rastúceho záujmu o bórové klastre, ich predpokladom k vzniku enantiomérov a významu chiralít vo farmácii je preštudovanie ich správania v HPLC systéme a stanovenie vhodných podmienok pre chirálnu diskrimináciu nevyhnutnosťou. V centre záujmu tejto práce je nezrovnalosť medzi výsledkami získanými kapilárnou elektroforézou a HPLC, kedy sa kapilárna elektroforéza s použitím  $\beta$ -cyklodextrínu ako chirálneho selektoru javila ako vhodný systém pre chirálnu separáciu niektorých aniontov, avšak pomocou HPLC sa chirálna diskriminácia aniontov doposiaľ nepodarila. Ďalej sme sa zamerali na ostatné faktory ovplyvňujúce chirálnu diskrimináciu testovaných aniontov a zwitteriontu (predovšetkým modifikáciu mobilných fází a využitie ďalších chirálnych stacionárnych fází).