

## Formulár ZK - Záverečná karta projektu

Riešiteľ: Doc. Ing. Viktor MILATA, CSc	Evidenčné číslo projektu: APVV-20-007304
Názov projektu: SYNTÉZA A VLASTNOSTI NOVÝCH POTENCIÁLNE BIOLOGICKY AKTÍVNYCH HETEROCYKlickÝCH ZLÚČENÍN VYUŽITEĽNÝCH V SUPRAMOLEKULÁRNEJ CHÉMII A NANOTECHNOLÓGIÁCH	
Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený:	Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU
Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát):	Institute of Applied Chemistry, Vienna, Austria
	University of Distantional Study, Madrid, Spain
	University of Paris-Sud, Orsay, France
Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu:	žiadne
Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uved'te i publikácie prijaté do tlače alebo pripravované):  <i>Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.</i>	Milata V., Segľa P.: Vybrané metódy molekulovej spektroskopie. STU Bratislava 2007. 420 s. (vydanie podporené agenciou SAVOL)
	Lukes V, Matis M, Vegh D, Stefko M, Hrdlovic P, Laurinc V: Structure, electronic and optical characterization of oligothiophenes terminated with (9H-fluoren-9-ylidene)methyl chromophores. Synthetic Metals 157 (17-18) 779-783.
	Milata V., Rádl S., Voltrová S.: 32.5.3. Product class Enol Ethers (acyclic, cyclic, i.e. endocyclic C=C-O- unit), Science of Synthesis, Houben-Weyl Methods of Molecular Transformations, Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 260 strán.
	Vargova, Andrea; Hrnčarikova, Katarina; Vegh, Daniel; Lukes, Vladimír; Fedorko, Pavol; Rapta, Peter: Intermolecular and intramolecular coupling in charged monosubstituted hexapyrrolylbenzenes. Electrochimica Acta (2007), 52(28), 7885-7894.
	Jantová S., Letašiová S., Brezová V., Čipák Ľ., Lábaj J.: Photochemical and phototoxic activity of berberine on murine fibroblast NIH-3T3 and Ehrlich ascites carcinoma cells. J. Photochem. Photobiol. 85, 163-176, 2006.
V čom vidíte uplatnenie výsledkov tohto projektu:	Nájdenie spôsobu prípravy nových, neznámych heterocyklických zlúčenín, preštudovanie ich fyzikálno-chemických a biologických vlastností pre možné aplikácie

Podpisom záverečnej karty riešiteľ vyjadruje svoj súhlas ku zverejneniu údajov v nej uvedených.

Podpis riešiteľa: .....

Dátum: ..24.januára 2008.....

# Charakteristika výsledkov

Evidenčné číslo: APVV-20-007304

## Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - slovensky:

Boli vypracované nové metódy prípravy východiskových amino- a nitrozlúčenín, pričom bola kvantovo-chemickými výpočtami vysvetlená nitrácia benzazolov. Pripravené zlúčeniny boli sledom reakcií využité v aplikáciách Gouldovej-Jacobsovej reakcie za účelom prípravy analógov chinolónových liečiv.

Boli študované nové typy funkčne substituovaných enoléterov na prípravu nových typov päť- a šesťčlánkových mono- až tricyklických heterocyklických zlúčenín s jedným až tromi heteroátomami typu chinolínov, pyrazolov, pyrimidínov, dihydropyridínov a pod. zabudovaním trojuhľikového fragmentu, pričom sme prvýkrát preštudovali aj mechanizmus nukleofilnej substitúcie vinylového typu enoléterov tohto typu s amínmi.

Cielené syntézy nových  $\pi$ -konjugovaných heterocyklov z rady tiofénových, furánových, pyrrolových, derivátov a ich kondenzačných produktov s opto-elektronickými vlastnosťami a biologickou aktivitou. Štúdium ich štruktúry, reaktivity a biologickej aktivity.

Testovanie novej koncepcie syntézy nových štruktúrne definovaných  $\pi$ -konjugovaných heterocyklických zlúčenín pre prípravu biologicky aktívnych látok a nových opto-elektronických materiálov. Vypracovanie originálneho postupu na prípravu nových oligoheterocyklov a pentafluórbenaldehydu a tetrafluortereftálaldehydu ako potenciálne biologicky aktívnych zlúčenín využiteľných v predmetnej oblasti ako nových herbicídov a pesticídov antibakteriálne, antifungálne, protikvasinkovo, antiproliferačne aktívnych látok a látok vyvolajúcich apoptózu - programovanú smrť buniek.

V súlade s cieľmi projektu sa pripravila séria vybraných typov polyazaheterocyklických zlúčenín a uskutočnil sa základný screening na antibakteriálnu aktivitu na G-pozitívne a G-negatívne baktérie, fungicídnu aktivitu na kvasinky a vlákňité huby, a tiež cytotoxickú aktivitu na transformovanú bunkovú líniu HeLa.

## Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - anglicky:

We developed new methods of the preparation of starting amino- and nitrocompounds. Based on quantum-chemical calculations we exploited nitration of benzazole. Prepared compounds were used after such a reaction steps in application of Gould-Jacobs reaction for synthesis of analogues of quinolone drugs.

New types of functionally substituted enolethers were studied for preparation of new types five- and sixmembered mono- to polycyclic heterocyclic compounds with one to three heteroatoms of the quinoline, pyrazole, pyrimidine, dihydropyridine, etc. types by fusing with three-carbon fragment. First time we studied mechanism of the nucleophilic vinylic type substitution of enolethers of this type with amines.

Novel syntheses of  $\pi$ -conjugated heterocycles of thiophene, furane pyrrole series and its condensed analogs leading to compounds with optoelectronic and bioactive properties. Study of structure, reactivity and biological activity.

Examination of novel synthetic paradigm for novel  $\pi$ -conjugated heterocycles and its oligomers - starting materials for novel opto-electronic materials and bioactive compounds.

Syntheses of selected oligoheterocycles and pentafluorobenzaldehyde derivatives as potential new heterocyclic pesticides, herbicides, antibacterial, antifungal and antiyeast agents and derivatives started apoptosis.

In agreement with the scope of the project we prepared a serie of selected types of polyazaheterocyclic compounds and realize basic screening for antibacterial activity for G-positive and G-negative bacteria, fungicidal activity for yeasts and filamentous fungi and also cytotoxic ctivity into transformed cell line HeLa.

Podpis riešiteľa: .....