VŠCHT PRAHA

FCHT

Sborník anotací

Studentská vědecká konference

19. 11. 2026

Ústav chemie pevných látek

Analýza a vlastnosti léčiv

MÍSTO: A31

KOMISE

doc. Ing. Barbora Doušová, CSc. (předsedkyně)

doc. Dr. Ing. Michal Hušák

Ing. Honza Čejka, Ph.D.

Ing. Michal Šimek, Ph.D.

Ing. Eva Bedrnová, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **Zahájení**

09:05 Mařík Filip (B3, prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.)

Krystalizační optimalizace intermediátu Coreyalkoholu-A(-)

09:20 Vondrášková Karolína (B3, Ing. Eva Bedrnová, Ph.D.)

Vliv modifikace na adsorpci vybraných iontových forem ve vodném prostředí

09:35 Bc. Prausová Andrea (M1, Ing. Václav Eigner, Ph.D.)

Pevné lékové disperze dantrolenu a využití 3D tisku tablet

09:50 Bc. Fárková Nela (M1, Ing. Jan Čejka, Ph.D.)

Krystalizační screening ramiprilu

10:05 Bc. Korotkov Nikita (M1, Ing. Jan Čejka, Ph.D.)

Krystalizační screening v dávkovací stanici

10:20 Bc. Lasčáková Anežka (M2, Ing. Václav Eigner, Ph.D.)

Strukturní a fyzikálně-chemická charakterizace 2-nitro- a 3-nitrobenzylisothiouroniových chloridů a bromidů

10:35 Bc. Zakarian Anna (M2, Ing. Václav Eigner, Ph.D.)

Mechanochemická výměna aniontů 4-nitrobenzylisothiouroniových solí

Vyhlášení výsledků

SPONZOŘI - ANALÝZA A VLASTNOSTI LÉČIV





Krystalizační optimalizace intermediátu Coreyalkoholu-A(-)

Filip Mařík

Ročník studia: B3

Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Konzultant: Ing. Jiří Pokorný (Cayman Pharma)

Anotace:

Coreyalkohol A(-) je ceněným intermediátem pro výrobu prostaglandinů a potažmo i výrobu léčivých přípravků, jako je například Cloprostenol, který má využití v chovech hospodářských zvířat.

Cílem této bakalářské práce je ve spolupráci s firmou Cayman Pharma optimalizovat krystalizaci tohoto intermediátu. V rámci experimentální části se práce zabývá výběrem vhodných rozpouštědel pro přípravu nasycených roztoků při různých teplotách a studiem procesu nukleace. Výstupem je konstrukce nukleační křivky, nalezení optimální koncentrace a krystalizační teploty pro nejvhodnější zvolenou metodu krystalizace. Výstupní polykrystalický materiál je analyzován metodou XRPD pro porovnání se standardem a do budoucna pro studium polymorfního a hydratačního/solvatačního chování Coreyalkoholu A(-) a přípravu jeho monokrystalů pro strukturní studie.

Vliv modifikace na adsorpci vybraných iontových forem ve vodném prostředí

Karolína Vondrášková

Ročník studia: B3

Školitel: Ing. Eva Bedrnová, Ph.D.

Anotace:

Adsorpce ve vodné fázi je proces, při kterém dochází k záchytu rozpouštěných látek na povrch pevné látky (adsorbentu). Účinnost adsorpce je závislá na vlastnostech adsorbované látky, podmínkách prostředí i na vlastnostech adsorbentu, například na měrném povrhu, porozitě, iontově výměnné kapacitě nebo hodnotě pH nulového náboje (pH_{ZPC}), která souvisí s povrchovým nábojem v závislosti na pH prostředí. Pomocí povrchové modifikace je možné upravit hodnotu pH_{ZPC}, a tím ovlivnit sorpční chovaní adsorbentu vůči kationtům a aniontům. Cílem této práce bylo posoudit vliv modifikace ionty Fe^{2+} na adsorpci amonných (NH_4^+) a fosforečnanových (PO_4^{3-}) iontů, jejichž zvýšené koncentrace ve vodách přispívají k eutrofizaci vod. Testovány byly bentonit Kadaň (A), klinoptilolit (B) a sedlecký kaolin (C). Adsorbenty B a C byly dále povrchově modifikovány ionty Fe^{2+} za vzniku BFe a CFe, čímž byl jejich povrch obohacen o Fe. Adsorbent A byl vzhledem k přirozeně vyššímu obsahu Fe ponechán bez modifikace. Experimenty byly prováděny vsádkově s dávkami adsorbentů od 10 do 20 $g \cdot l^{-1}$. Výsledky ukázaly, že adsorbenty B a C dosahovaly při adsorpci NH_4^+ téměř 100% účinnosti, přičemž modifikací byla účinnosti adsorpce kationtu snížena. U adsorpce PO_4^{3-} byla adsorpční účinnost B a C < 25 %, zatímco u BFe a CFe bylo dosaženo skoro 100 %. Adsorbent A vykazoval vyšší účinnost adsorpce NH_4^+ (70 %) než PO_4^{3-} (40 %), a to navzdory vyššímu přirozenému obsahu Fe. Výsledky ukazují, že modifikace materiálů výrazně zvýšila účinnost adsorpce aniontů.

Pevné lékové disperze dantrolenu a využití 3D tisku tablet

Bc. Andrea Prausová

Ročník studia: M1

Školitel: Ing. Václav Eigner, Ph.D.

Anotace:

Dantrolen sodný je svalový relaxant používaný při maligní hypertermii a spasticitě, jeho využití však komplikuje špatná rozpustnost a riziko hepatotoxicity. Cílem práce je zlepšit rozpustnost dantrolenu přípravou pevných lékových disperzí. Disperze jsou připravovány metodami odpařování rozpouštědla s polyvinylpyrrolidonem (PVP) a horkou taveninovou extruzí (HME). Extruderní směs, která kromě API zahrnuje kopovidon (Kollidon VA 64), Soluplus a pomocné látky usnadňující zpracování, slouží k přípravě farmaceutického filamentu pro 3D tisk tablet. Tablety o hmotnosti 250–260 mg a dávce 25 mg dantrolenu jsou navrženy ve variantách s různou perforací, které se liší počtem a průměrem otvorů pro rychlejší rozpouštění. Výsledky budou charakterizovány metodou XRPD a bude sledováno disoluční chování výsledných tablet, aby bylo možné posoudit vliv perforace, složení filamentu a převedení dantrolenu na pevnou disperzi na uvolňování léčiva.

Krystalizační screening ramiprilu

Bc. Nela Fárková

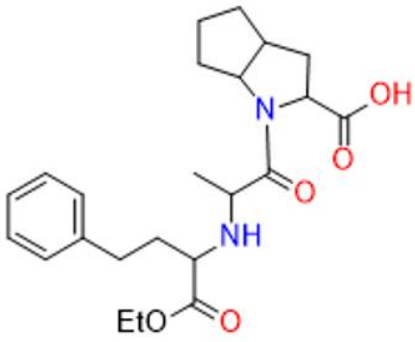
Ročník studia: M1

Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Anotace:

Ramipril je významné léčivo ze skupiny ACE inhibitorů, které představuje jedno z léčiv první volby při terapii hypertenze. V organismu se metabolizuje na svou aktivní formu, ramiprilát. Toto proléčivo je charakteristické svou špatnou rozpustností ve vodě, a je proto řazené do třídy II biofarmaceutického klasifikačního systému (BCS). Přípravou nových forem, jako jsou polymorfy, soli či solváty, lze vylepšit fyzikálně-chemické vlastnosti této látky. To může být velkým přínosem jak při jejím zpracování, tak z hlediska biologické dostupnosti. Cílem práce je připravit nové formy, porovnat je se známou formou ramiprilu uvedenou v databázi CSD a charakterizovat je pomocí rentgenové strukturní analýzy monokrystalu a prášku, případně dalších metod.

Obrázek:



Obr. 1 Vzorec ramiprilu

Krystalizační screening v dávkovací stanici

Bc. Nikita Korotkov

Ročník studia: M1

Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Anotace:

Tato práce se zaměřuje na vývoj a aplikaci metodiky robotického krystalizačního screeningu. Jako modelové látky byly zvoleny izomery nikotinamid a isonikotinamid. Po stanovení jejich zdánlivé rozpustnosti v 11 rozpouštědlech byly provedeny referenční krystalizace pomalým odpařováním a samotný robotický screening, v jehož rámci byl systematicky studován vliv množství rozpouštědla, antisolventu a rychlosti chlazení. Krystalické produkty byly analyzovány metodou rentgenové difrakce na monokrystalu. Výsledky prokázaly, že nikotinamid krystalizoval výhradně jako stabilní forma I, zatímco isonikotinamid vykazoval bohatou polymorfní diverzitu. Zhodnocení reprodukovatelnosti potvrdilo, že kineticky řízené odpařování je nespolehlivé: u isonikotinamidu tvoří polymorfní směsi a u nikotinamidu sráží prášek. Získaná data prokazují, že spolehlivá reprodukovatelnost je možná pouze za podmínek preferujících termodynamickou formu. Aplikace řízeného chlazení vrací systém pod termodynamickou kontrolu a umožňuje selektivní růst stabilní formy.

Strukturní a fyzikálně-chemická charakterizace 2-nitro- a 3-nitrobenzylisothiouroniových chloridů a bromidů

Bc. Anežka Laščáková

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Václav Eigner, Ph.D.

Anotace:

Práce se zabývá studiem strukturních a fyzikálně-chemických vlastností substituovaných 2-nitro- a 3-nitrobenzylisothiouroniových solí. Pozornost je zaměřena na posouzení vlivu jednotlivých strukturních faktorů na vlastnosti studovaných sloučenin, zejména polohy nitroskupiny na benzenovém jádře, substituce na isothiouroniové skupině a přítomnosti chloridového nebo bromidového aniontu.

Mechanochemická výměna aniontů 4-nitrobenzylisothiouroniových solí

Bc. Anna Zakarian

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Václav Eigner, Ph.D.

Anotace:

Isothiouroniové soli představují významnou skupinu látek s potenciálním farmaceutickým využitím, zejména díky svým cytostatickým účinkům. Jejich fyzikálně-chemické vlastnosti výrazně závisí na typu přítomného aniontu, proto je žádoucí vyvinout postupy umožňující efektivní a kontrolovanou výměnu aniontů.
Cílem této práce bylo provést aniontovou výměnu u 4-nitrobenzylisothiouroniových solí pomocí mechanochemických postupů a vyhodnotit vliv experimentálních podmínek na účinnost tohoto procesu. Bylo zjištěno, že účinnost procesu závisí na formě výchozí soli a významně ji ovlivňuje také volba vlhčiva použitého při mletí. Výsledky ukázaly, že některá vlhčiva výrazně podporovala aniontovou výměnu, zatímco jiná ji naopak inhibovala, přičemž jejich použití vedlo k horším výsledkům než při suchém mletí.