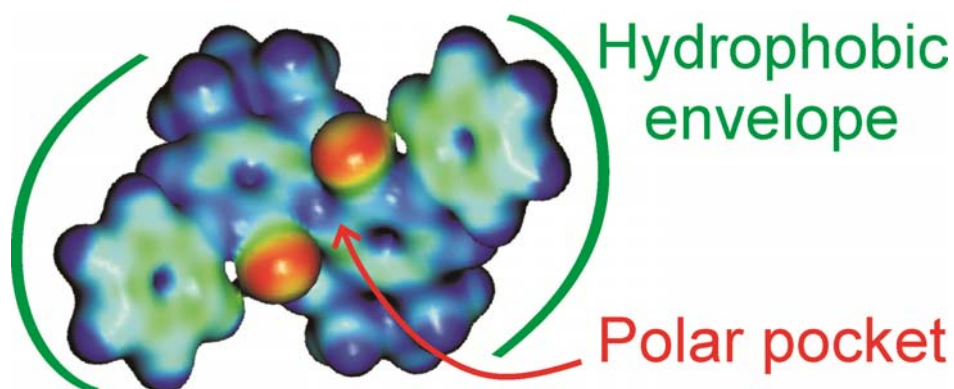


SUPERBAZICKÉ KATALYZÁTORY

Chemickou reakci se snažíme ovlivnit, abychom v co největším výtěžku získali požadované produkty. Jedním ze způsobů, které můžeme uplatnit je použití katalyzátorů. Ve skupině prof. Kotory byla vyvinuta nová třída katalyzátorů, o kterých se předpokládá, že při reakci působí jako báze. Báze se váží k protonům nebo jiným kladně nabitým částicím. Studium jejich vlastností jsme zjistili, že se jedná o extrémně bazické sloučeniny, tzv. superbáze. Většina známých superbází je založena na dusíkatých sloučeninách. Naše katalyzátory jsou první experimentálně studované kyslíkaté superbáze, což znamená, že se proton váže k atomům kyslíku. Studium mechanismů reakcí, které tyto superbáze katalyzují, přineslo další překvapivé výsledky. Kyslíkové atomy katalyzátoru se při dané reakci neváží přímo kovalentně na výchozí látku. Katalyzátor se spíše chová jako jakýsi miniaturní enzym, který má strukturně definované vysoce polární vazebné místo pro substrát a přitom hydrofóbní vnější obálku. V nepolárních rozpouštědlech mají polární výchozí látky tendenci „schovat se“ do polární kapsy katalyzátoru, čímž se jednak v roztoku dostávají reaktanty do vzájemné interakce a jednak katalyzátor ovlivňuje, jakým způsobem se k sobě reaktanty přiblíží. Výsledkem je selektivní reakce, která s vysokým výtěžkem vede k požadovaným produktům. Více se dočtete v článku: L. Ducháčková, A. Kadlčíková, M. Kotora, J. Roithová, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 12660.



Ilustrace „polární kapsy“ organokatalyzátoru. Molekula je zobrazena pomocí elektrostatického potenciálu barevně kódovaného na povrchu elektronové hustoty ($\rho = 0.02 \text{ e } \text{\AA}^{-3}$).