

Studentská vědecká konference 2004

Sekce: ORGANICKÁ CHEMIE I

Ústav organické chemie, 26.11.2004
Zahájení v 8.30, budova A, místnost č. 250

Komise (ústav 110):

Doc. Ing. František Hampel, CSc. (VŠCHT) - předseda
Ing. Václav Šťastný (VŠCHT) - organizační tajemník
Doc. Ing. Pavel Lhoták, CSc. (VŠCHT)
Ing. Michal Beneš (Chemopharma, a.s.)
Ing. Rudolf Smrž CSc. (Synthon, s.r.o.)
Ing. Hanuš Slavík (EASTMAN Sokolov a.s.)
Ing. Pavel Šebek, CSc. (Zentiva, a.s.)
Mgr. Miroslav Havránek, Ph.D. (Re&d VÚFB. a.s.)

Přihlášeno: 7 účastníků

Anna Kovářová *Nesymetrické banánovité kapalně krystalické na bázi substituovaných naftalen-2,7-diolů*

Michal Kohout *Lomené kapalně krystalické na bázi derivátů 7-hydroxynaftalen-2-karboxylové kyseliny*

Martin Havlík *Příprava polyfluorovaného zirkonacyklopentadienu na bázi 1,8-bis(perfluorhexyl)okt-4-ynu a jeho využití*

Petr Macháček *Příprava a teoretické studium organozinečnatých sloučenin na bázi fluorhaloethenů*

Ondřej Baszczyński *Příprava prekursorů a teoretické studium 1-heteracyklopentanů a jejich derivátů*

Jaroslav Padevět *Aminokarbenové komplexy chromu jako nukleofily při asymetrické Pd - katalyzované allylové substituci*

Václav Dekoj *Syntéza substituovaných triptycenů*

Nesymetrické banánovité kapalné krystaly na bázi substituovaných naftalen-2,7-diolů

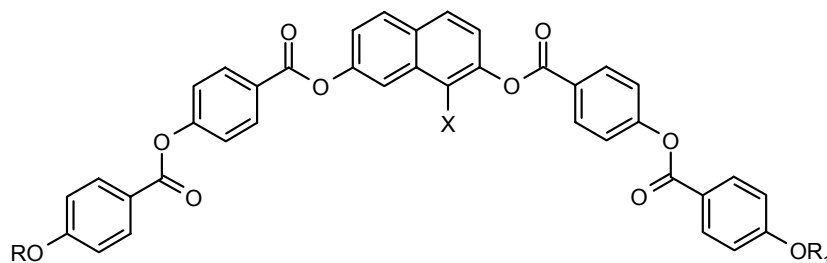
Autor : Anna Kovářová

Ročník : 5.

Ústav : Ústav organické chemie

Školitel : ing. Václav Kozmík, CSc.

V naší pracovní skupině byly syntetizovány a podrobně zkoumány symetrické kapalné krystaly s centrálním jádrem na bázi 1-substituovaných naftalen-2,7-diolů. Zjistili jsme, že vykazují zajímavé mesomorfní chování s výskytem různých typů tzv. B-fází. Mým úkolem bylo rozšířit tyto studie o nesymetrické deriváty obsahující jedno polymerizovatelné místo v koncovém alifatickém řetězci molekuly a studovat vliv substituce jádra a zavedených bočních řetězců na mesomorfní chování získaných materiálů.



X = Cl, CH₃, CN

R = C₁₀H₂₁, C₁₂H₂₅, (CH₂)₉CH=CH₂

R₁ = C₁₀H₂₁, (CH₂)₉CH=CH₂

Lomené kapalné krystaly na bázi derivátů 7-hydroxynaftalen-2-karboxylové kyseliny

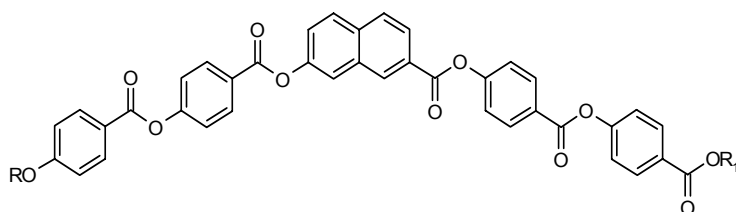
Autor: Michal Kohout

Ročník: 5.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Cílem této práce byl design a syntéza nových nesymetrických banánovitých kapalných krystalů, u nichž je jako centrálního jádra využita 7-hydroxynaftalen-2-karboxylová kyselina. Bude diskutována syntéza centrálního jádra i výstavba cílových struktur. Mesomorfní chování nových materiálů bude studováno pomocí DSC, studií textur, elektrooptickými studiemi a rentgenostrukturní analýzou. Dále bude diskutován vliv změny centrálního jádra a délky postranních řetězců, včetně řetězců obsahujících polymerizovatelné místo, na celkové změny v mesomorfním chování jednotlivých členů v připravené sérii nových látek.



R₁ = C₈H₁₇, C₁₀H₂₁, C₁₂H₂₅, C₁₄H₂₉, C₁₁H₂₁

R₂ = C₈H₁₇, C₁₀H₂₁, C₁₂H₂₅, C₁₄H₂₉, C₁₁H₂₁

Příprava polyfluorovaného zirkonacyklopentadienu na bázi 1,8-bis(perfluorhexyl)okt-4-ynu a jeho využití

Autor: Martin Havlík

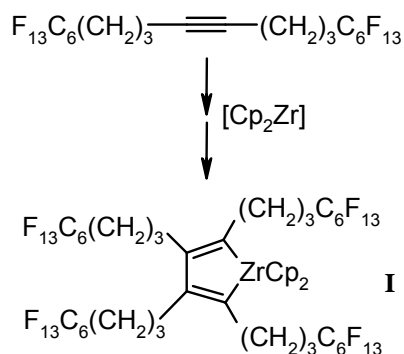
Ročník: 5.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Polyfluorované acetyleny s dvěma perfluoralkylovými řetězci izolovanými od trojné vazby ethylenovou nebo trimethylenovou spojkou jsou perspektivní stavební bloky v organické syntéze. Klíčovými intermediáty těchto reakcí jsou polyfluorované trifláty. S pomocí 1,8-bis(perfluorhexyl)okt-4-ynu jsem tak připravil modifikované cyklopentadieny, butadien a benzen se čtyřmi polyfluoralkylovými řetězci. Syntéza využívá zirkonacyklopentadienový komplex I jako klíčový intermediát.

Práce byla provedena za podpory GA AV ČR (grant č. A407220361)



Příprava a teoretické studium organozinečnatých sloučenin na bázi fluorhaloethenů

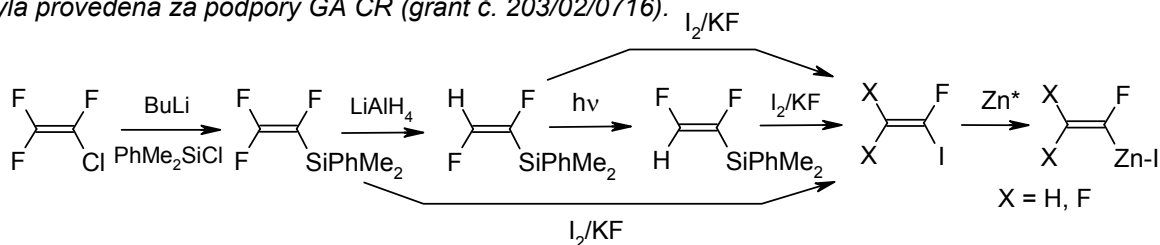
Autor: Petr Macháček

Ročník: 5.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Organozinečnaté sloučeniny odvozené od fluor(halo)ethenů jsou vhodné jako selektivní činidla pro zavedení trifluorethenylové, (Z)- nebo (E)-1,2-difluorethenylové skupiny do organických substrátů. Připravil jsem 3 výchozí fluorjodetheny (Schéma 1) a podrobil je reakcím s aktivním zinkem za vzniku odpovídajících fluorovaných organozinečnatých sloučenin. Tyto sloučeniny jsem nechal reagovat s modelovými elektrofilními činidly. Zároveň jsem pro tyto tři organokovy vypočetl pomocí DFT metod ^{19}F NMR posuny a F-F interakční konstanty izolovaných molekul i molekul v přítomnosti simulovaného rozpouštědla. Vypočtené hodnoty jsem porovnal s naměřenými experimentálními hodnotami. *Práce byla provedena za podpory GA ČR (grant č. 203/02/0716).*



Příprava prekursorů a teoretické studium 1-heterocyklopentanů a jejich derivátů

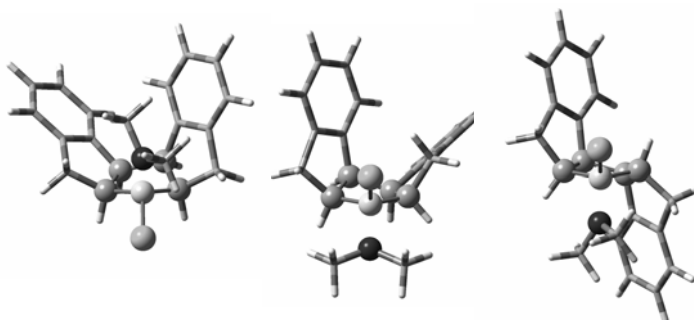
Autor: Ondřej Baszczyński

Ročník: 4.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

C₂-symetrické chirální sloučeniny jsou perspektivními chirálními činidly. Do této skupiny patří i poměrně nové látky na bázi 1-heterocyklopentanů. Klíčovým krokem pro syntézu těchto látek je reakce 1,4-bifunkčních organokovových činidel s vhodnými elektrofilů. Cílem této práce byla příprava intermediátů, diolů a dibromidů, pro tyto organokovy. Dále jsem vypočítal pomocí *ab initio* a DFT metod energie rovnovážných geometrií stereoisomerů substituovaných 1-chlor-1-boracyklopentanů. Přitom jsem simuloval rozpouštědlo přidávkem explicitní molekuly dimethyletheru a metodou self-konzistentního reakčního pole. Práce byla provedena za podpory GA ČR (grant č.203/03/0496).



Aminokarbovené komplexy chromu jako nukleofily při asymetrické Pd - katalyzované allylové substituci

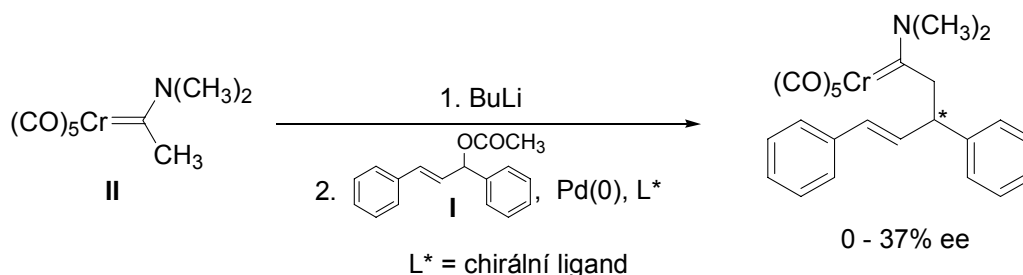
Autor: Jaroslav Padevět

Ročník: 4.

Ústav: Ústav organické chemie

Školitel: Doc. Ing. Dalimil Dvořák CSc.,

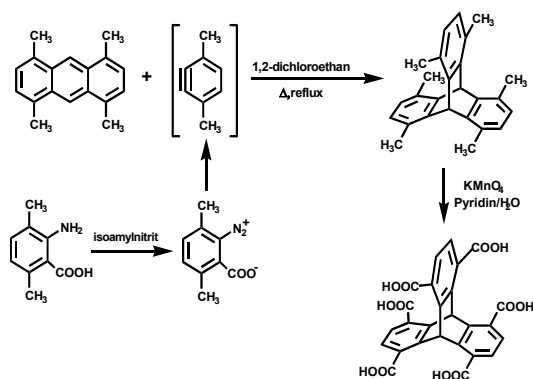
Asymetrická indukce byla studována na reakci (1,3-difenylallyl)-acetátu I s aniontem aminokarboveného komplexu II v přítomnosti Pd₂(dba)₃.CHCl₃ jako zdroje palladia a různých chirálních ligandů. Nejúčinnější se ukázal (R)-(+)-BINAP-PdCl₂ a Pfaltzův katalyzátor, zatímco bisoxazolinové ligandy byly neúčinné. Průběh reakce silně záleží na povaze rozpouštědla.



Syntéza substituovaných triptycenů

Autor: Václav Dekoj
Ročník: 5.
Ústav: ÚOCHB AV ČR
Školitel: Ing. Martin Bělohradský, CSc.

Triptycenové deriváty s různým počtem *para*-disubstituovaných aromatických jader tvoří zajímavé stavební bloky pro supramolekulární samoskladebné útvary. Syntéza těchto látek vychází



z odpovídajících methylovaných anthracenů. Adicí arynu generovaného z dimethylantranilové kyseliny na methylované anthraceny získáme methylované triptyceny, které je možné využít pro další transformace. Lze připravit triptycenkarboxylové kyseliny, snadno přístupné jsou i halogenmethyl deriváty. Uvedený postup umožňuje přípravu různé *para*-substituovaných triptycenů v gramových množstvích, což z těchto látek činí atraktivní synthony pro využití v supramolekulární chemii.

Finanční podpora: GA ČR (203/03/0087).

Literatura: Pakusch J., Ruechardt Ch.: Chem. Ber. 123 (1990) 2147