

# **Studentská vědecká konference 2006**

## **Sekce: ORGANICKÁ CHEMIE II A**

Ústav organické chemie, 24.11.2006

Zahájení v 9:00 hodin, budova A, posluchárna A20

**Komise:**

**Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc. - předseda**

**Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.**

**Ing. Petr Holý, CSc. (ÚOCHB AV ČR)**

**Ing. Hanuš Slavík (Hexion Sokolov)**

**Ing. Václav Kříž (Atotech – M.A.G. CZ Jablonec n.N.)**

**Ing. Bc. Michal Himl – organizační tajemník**

**Přihlášeno: 8 účastníků**

**Babuněk Mario (3.r.)**

**Hlinka Jiří (3.r.)**

**Mojr Viktor (3.r.)**

**Polívková Kateřina (3.r.)**

**Púchovský Jan (2.r.)**

**Schindler Martin (3.r.)**

**Špaček Petr (3.r.)**

**Vobecká Zuzana (3.r.)**

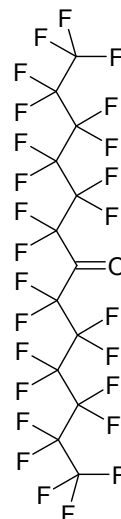
Sekce: Organická chemie II A

## Perfluorované rozvětvené stavební bloky

Autor: Mario Babuněk  
Ročník: 3.  
Ústav: Ústav organické chemie  
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Cílem mé práce je syntéza vysoce fluorovaných rozvětvených sekundárních a terciárních kyslíkatých stavebních bloků jako intermediátů pro fluorofilní ligandy. Nejprve jsem transformoval perfluorhexyljodid na klíčový meziprodukt, perfluorhexylmagnesium-jodid, stálý pouze za nízkých teplot. Jeho působením na chlortrimethylsilan jsem připravil trimethyl(perfluorhexyl)silan, reakcí s diethylkarbonátem vznikl perfluortrideka-7-on. Tento keton neposkytuje reakci s výše uvedenými fluorovanými intermediáty odpovídající terciární alkohol, pravděpodobně z důvodu jejich nízké stability a sterického bránění reakčního centra. Perfluortrideka-7-on reagoval s KF za vzniku perfluoralkoxidu, jehož alkylace v současné době studuji.

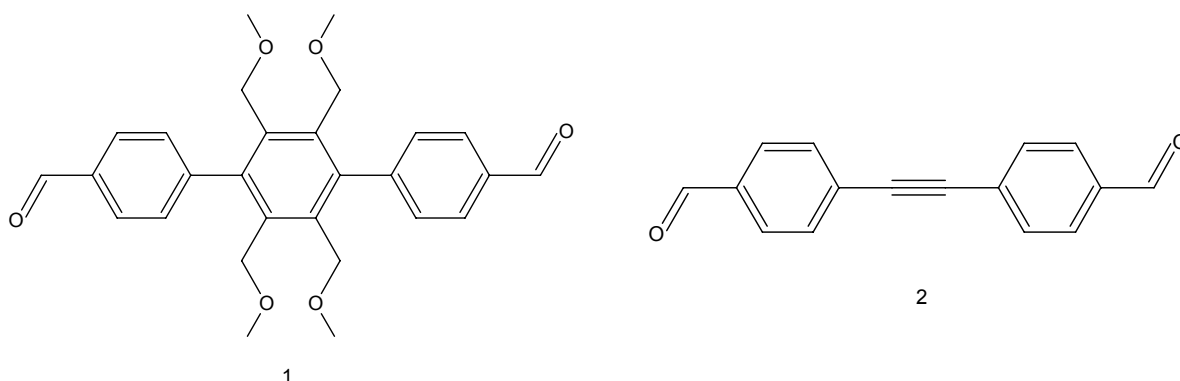
Jako první krok v teoretickém studiu reakcí různých typů vysoce fluorovaných alkoxidů jsem pomocí *ab initio* a DFT metod analyzoval rozdíly v jejich geometriích a elektronové distribuci.



## Syntéza rigidních polyaromatických dialdehydů a jejich následná [3+3]-cyklokondenzace s *trans*-1,2-diaminocyklohexanem

Autor: Jiří Hlinka  
Ročník: 3.  
Ústav: Ústav organické chemie (ÚOCHB AV ČR)  
Školitel: Dr. Ing. Jana Hodačová

V literatuře popsaná kondenzace tereftaldehydu s *trans*-1,2-diaminocyklohexanem poskytuje takřka kvantitativně makrocyclickou hexa-Schiffovu bazi trojúhelníkového tvaru. Cílem této práce je studium cyklokondenzační reakce s dalšími rigidními aromatickými dialdehydy. Pomocí Suzuki-Miyaura cross-couplingu byl připraven triaryldialdehyd **1**, jehož [3+3]-kondenzací byla získána Schiffova báze, která byla dále redukována na makrocyclický hexaamin. Jako druhý byl syntetizován diarylacetyldialdehyd **2**. Při jeho syntéze byla ověřována možnost využití Sonogashirova couplingu i klasických postupů organické syntézy.

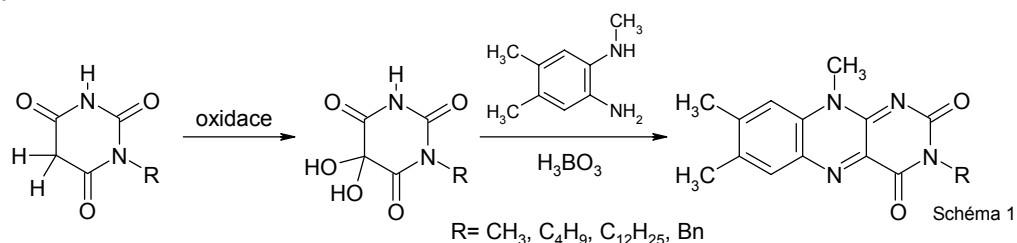


Sekce: Organická chemie II A

## Syntéza *N*-substituovaných alloxanů pro přípravu lipofilních 3-alkylflavinů

Autor: Viktor Mojr  
Ročník: 3.  
Ústav: Ústav organické chemie  
Školitel: Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Lipofilní deriváty flavinu představují potenciální oxidační činidla pro reakce v organizovaných prostředích (micely, vesikly apod.). Vhodným postupem pro syntézu flavinů s lipofilní skupinou v poloze 3- by mohla být kondenzace *N*-alkylalloxanů s příslušným benzen-1,2-diaminem (Schéma 1). Doposud však nebyla publikována obecná metoda pro přípravu monoalkylalloxanů.



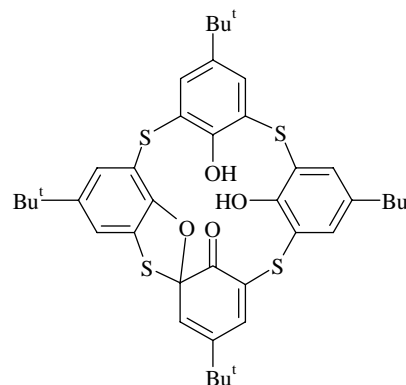
V práci byl navržen obecný postup pro přípravu *N*-alkylalloxanů založený na oxidaci *N*-alkylbarbiturové kyseliny oxidem chromovým (Schéma 1). Substituované barbiturové kyseliny byly získány kondenzací příslušné monoalkylmočoviny s kyselinou malonovou, resp. diethylmalonátem.

Sekce : Organická chemie II A

## Využití spirosloučenin v chemii thiacalix[4]arenu

Autor: Kateřina Polívková  
Ročník: 3.  
Ústav: Ústav organické chemie  
Školitel: Prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Cílem této práce je připravit spirosloučeniny thiacalixarenu, ze kterých lze následně dvoukrokovou syntézou připravit thiacalixareny s jednou hydroxylovou skupinou na spodním okraji substituovanou amino skupinou. Reakcí *p-tert*-butylthiacalix(4)arenu s chloraminem-T se nám podařilo získat nejen monospiro, ale v menším množství i dispiro sloučeniny. Proto je naší příští snahou změnit reakční podmínky tak, aby vznikala převážně dispirosloučenina. Spirosloučeniny jsme bohužel nezískali obdobnou reakcí s thiacalixarenem bez *tert*-butylových skupin na horním okraji. Při výměně hydroxy skupiny za amino skupinu bylo použito jako výchozí látky monospirothiacalixarenu. Problémem v této syntéze je mezistupeň, představovaný tvorbou hydrazonu, který se i přes stejné reakční podmínky nepodařilo vždy zopakovat.

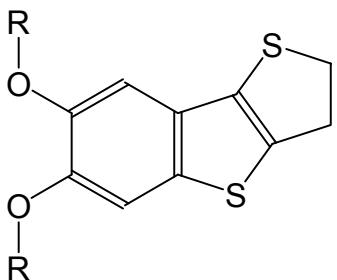


Sekce : Organická chemie II A

## Syntéza nových monomerů na bázi 6,7-dialkoxythieno-[3,2-b]benzothiofenu pro vodivé organické polymery

Autor: Jan Púchovský  
Ročník: 2.  
Ústav: Ústav organické chemie  
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

V návaznosti na dřívější výsledky studia elektropolymerace různých thienobenzothiofenů a thienoindolu jsme navrhli rozšířit uvedenou skupinu o sérii 6,7-dialkoxy substituovaných thieno[3,2-b]benzothiofenů.



Cílem této práce bylo vypracovat syntézu vhodného meziprojektu, jehož derivatizací budou získány cílové materiály.

Sekce: Organická chemie II A

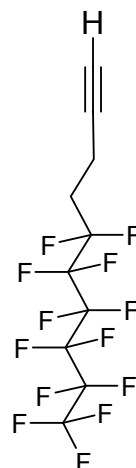
## Studium cykloadičních reakcí polyfluorovaných alkynů.

Autor: Martin Schindler  
Ročník: 3.  
Ústav: Ústav organické chemie  
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc

Předmětem mé práce je příprava polyfluoralkylovaných alkynů a studium jejich cykloadičních reakcí, vedoucích k substituovaným benzenům a cyklopentadienům.

Nejprve jsem připravil ethyn chráněný fenyldimethylsilylovou skupinou reakcí ethynylmagnesiumbromidu s chlor(fenyl)dimethylsilanem. Tento ethyn jsem reagoval s BuLi a poté s 2-(perfluorhexyl)ethyl-triflátem za vzniku odpovídajícího chráněného polyfluorovaného alkynu. Jeho reakce s Negishiho činidlem ( $\text{Bu}_2\text{ZrCp}_2$ ) nevedla k odpovídajícímu zirkonacyklopentadienu. Deprotekcí tohoto alkynu KF jsem dále připravil odpovídající terminální polyfluoralkyn. V současné době studuji jeho alkylační reakce.

V teoretické části jsem porovnal pomocí *ab initio* a DFT výpočetních metod elektronové hustoty polyfluoralkylovaných alkynů na trojně vazbě v závislosti na délce nefluorované spojky.

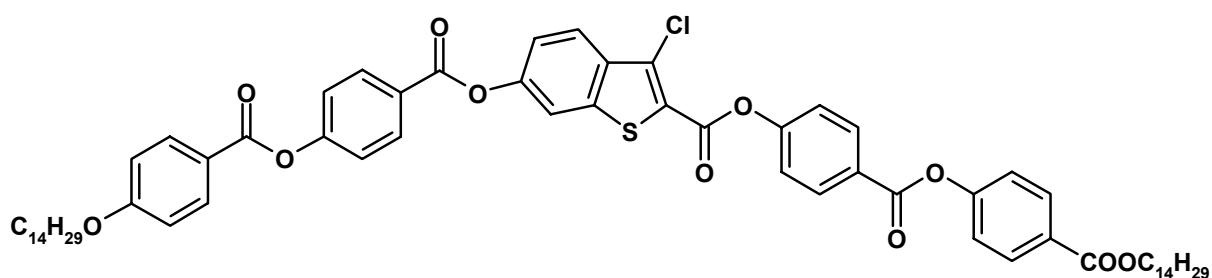


Sekce : Organická chemie II A

## Banánovitě kapalné krystaly na bázi derivátů 3-chlor-6-hydroxybenzo[b]thiofen-2-karboxylové kyseliny

Autor: Petr Špaček  
Ročník: 3.  
Ústav: Ústav organické chemie  
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Cílem této práce je design a syntéza nových nesymetrických banánovitých kapalných krystalů, u nichž je jako centrálního jádra využita 3-chlor-6-hydroxybenzo[b]thiofen-2-karboxylová kyselina. Bude diskutována syntéza centrálního jádra i výstavba cílové struktury.

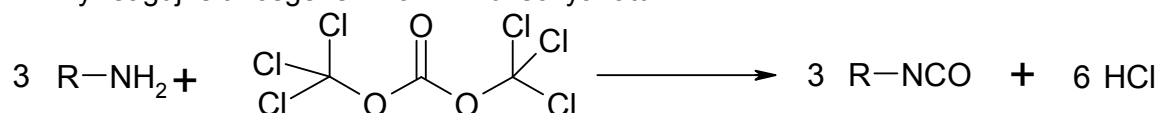




## Studium přípravy isokyanátů z aminů pomocí trifosgenu

Autor: Zuzana Vobecká  
Ročník: 3.  
Ústav: Ústav organické chemie  
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Aminy reagují s trifosgenem za vzniku isokyanátů.



Při této reakci se trifosgen rozpadá na tři molekuly fosgenu a ten pak dále reaguje s aminem. Použití samotného fosgenu ( $\text{Cl}_2\text{C}=\text{O}$ ) je nebezpečné a nepraktické, a proto se hledaly jeho náhrady. Naopak krystalická, stabilní pevná látka trifosgen ( $\text{Cl}_3\text{C}-\text{O}-\text{C}(\text{O})-\text{O}-\text{CCl}_3$ ) se přepravuje a skladuje jednoduše, díky její relativně nízké těkavosti nejsou nutná zvýšená bezpečnostní opatření a její množství se lépe odměřuje.

Vzhledem k tomu, že provedení reakce popsaná v literatuře se výrazně liší, cílem práce je optimalizovat reakční podmínky a rychlost reakce v závislosti na nich.

Reakci bychom rádi sledovali pomocí NMR spektroskopie, kterou si můžeme měřit sami, a jako alternativní způsob zjištění postupu reakce jsme zvolili IČ spektroskopii, kterou nám měří centrální laboratoře VŠCHT.

Substituent R je butyl, 2-butyl, *terc*-butyl, fenyl, benzyl, 3,5-bis(trifluormethyl). Získané poznatky budou dále využity pro přípravu isokyanátů z aminů na bázi binaftalenů, porfyrinů a calixarenů.