

Studentská vědecká konference 2006

Sekce: ORGANICKÁ CHEMIE II B

Ústav organické chemie, 24.11.2006

Zahájení v 9:00 hodin, budova A, místnost č. 250

Komise:

Doc. Ing. František Hampl, CSc. - předseda

Prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Ing. Václav Kozmík, CSc.

Ing. Miroslav Havránek, Ph.D. (Re&D VÚFB)

Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. – organizační tajemník

Přihlášeno: 8 účastníků

Buchta Michal (3.r.)

Bürglová Kristýna (3.r.)

Holan Martin (3.r.)

Holečková Eva (3.r.)

Kotyza Martin (3.r.)

Mészáros Michal (2.r.)

Seidler Arnošt (3.r.)

Šembera Filip (3.r.)

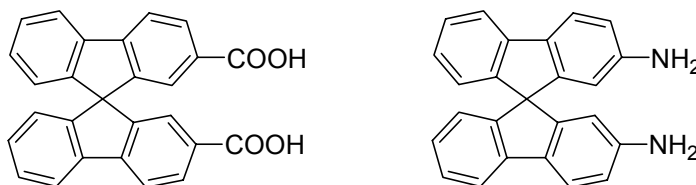
+ mimo soutěž Oldřich Hudeček (4.r. MSŠCH Praha)

Sekce : Organická chemie II B

Syntéza derivátů 9,9'-spirobis(flourenu)

Autor: Michal Buchta
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie (ÚOCHB AV ČR)
Školitel: Ing. Petr Holý, CSc.

Konstrukci kovalentních čtvercových struktur je možno uskutečnit s využitím rigidních uzlových stavebních prvků, které nesou ortogonálně orientované funkční skupiny využitelné pro kovalentní propojení uzlů ve dvou kolmých směrech. Tyto požadavky splňují deriváty 9,9'-spirobis(flourenu), jehož rigidní skelet v důsledku centrální spiroanelace orientuje aromatická jádra do dvou kolmých rovin. Úkolem práce bylo syntetizovat výchozí 9,9'-spirobis(flouren) reprodukcí známých postupů a dále ověřit regioselektivitu substitučních reakcí především při disubstituci základního skeletu. Acetylací a následnou haloformovou reakcí byla připravena 2,2'-[9,9'-spirobis(flouren)]dikarboxylová kyselina **1** a nitrací a redukcí nitroskupin 2,2'-diamino-[9,9'-spirobis(flouren)] **2**.



Ověření syntetické dostupnosti derivátů **1** a **2** v racemické formě je významné pro následné pokusy o jejich optické štěpení.

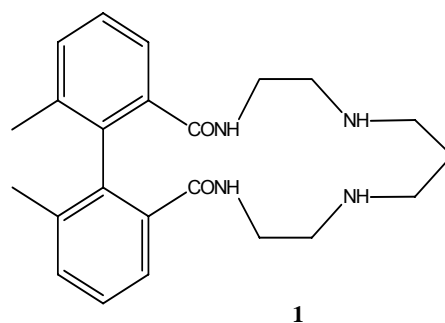
Sekce : Organická chemie II B

Axiálně chirální makrocyclické polyaminy

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

Cílem práce je syntéza nových makrocyclických polyaminů obsahujících axiálně chirální biarylovou jednotku a studium jejich komplexačních vlastností.

Jako první byl připraven makrocycklus **1** reakční sekvencí, která vychází z N,N'-bis(2-aminoethyl)propan-1,3-diaminu a kyseliny 6,6'-dimethylbifenyl-2,2'-dikarboxylové. Makrocycklus **1** byl syntetizován jak v racemické, tak opticky aktivní formě. Dále plánujeme redukci amidových skupin a studium komplexačních vlastností makrocyclického laktamu **1** a tetraaminu, který vznikne redukcí laktamu **1**.



Sekce: Organická chemie II B

Stavební bloky pro přípravu polyfluoralkylovaných tripyrazolymethanů.

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

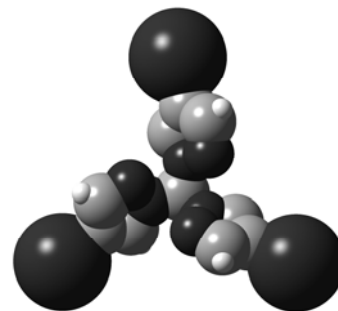
Tripyrazolymethany jsou možnou alternativou cyklopentadienylových ligandů pro komplexaci kovů. Cílem mé práce je příprava polyfluoralkylovaných analogů tripyrazolymethanů jako nového typu fluorofilních ligandů. První varianta syntézy přes perfluoralkylované β -diketony nebyla úspěšná, protože enolát připravený z acetylacetonu nereagoval ani s 2-(perfluorhexyl)ethyljodidem, ani s reaktivnějším 2-(perfluorhexyl)ethyl-triflátem.

Druhá varianta vychází z funkcionalizace tripyrazolymethanů a následného couplingu katalyzovaného přechodnými kovy.

Nejprve jsem podle publikovaných postupů připravil dva výchozí tripyrazolymethany. Jodace tripyrazolymethanu v přítomnosti $(\text{NH}_4)_2\text{Ce}(\text{NO}_3)_6$ poskytla tris(4-jodpyrazolyl)methan.

V současné době studuji Heckovu reakci toho substrátu s (perfluorhexyl)ethenem a dalšími alkeny.

Jako první krok ke studiu této reakce pomocí *ab initio* a DFT metod jsem optimalizoval struktury několika jodovaných i nejodovaných tripyrazolymethanů.

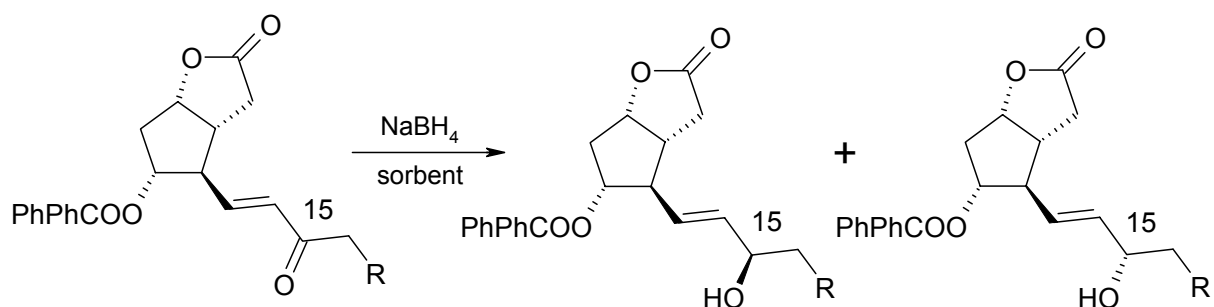


Sekce : Organická chemie II B

Studium stereoselektivní redukce v syntéze prostanoidů

Autor: Eva Holečková
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

V rámci společného projektu MPO našeho ústavu s firmou Nerapharm Neratovice na inovaci výroby prostanoidů byla studována stereoselektivní redukce C-15 oxoskupiny ve skeletu prostanoidů NaBH_4 na anorganických nosičích.



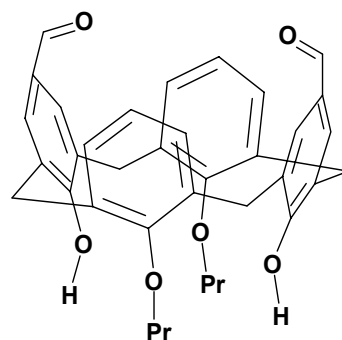
V patentové literatuře je uvedena neobvyklá stereoselektivní redukce tetrahydridoboritanem sodným v přítomnosti silikagelu. Mým úkolem bylo prověřit údaje patentovaných postupů a dále zkoumat vliv různých podmínek a nosičů na průběh této stereoselektivní redukce. Reakce byly prováděny nejen na meziproduktech synteticky vyráběných prostanoidů, ale i na ketonech připravených z výše uvedených enonů.

Sekce: Organická chemie II B

Příprava aromatických aldehydů a jejich modifikace

Autor: Martin Kotyza
Ročník: 3
Ústav: Ústav organická chemie
Školitel: Ing. Ondřej Kunderát

Tato práce je zaměřena na přípravu a modifikaci aromatických aldehydů, které jsou nepostradatelnými prekurzory pro další moderní organické syntézy (v naší laboratoři např. pro syntézy porfyrinů, jež jsou ceněny především díky svým unikátním komplexačním vlastnostem). Jedno- až několikastupňovými syntézami byly připraveny různě substituované aromatické aldehydy (včetně formylderivátů calixarenů), z nichž některé byly dále modifikovány. Změny byly s úspěchem prováděny jak na vlastní karbonylové funkci, tak i na řetězcích vázaných na aromatické jádro.



Sekce : Organická chemie II B

Nukleofilní adice na stericky bráněnou karbonylovou skupinu

Autor: Michal Mészáros
Ročník: 2.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Svatava Voltrová, CSc.

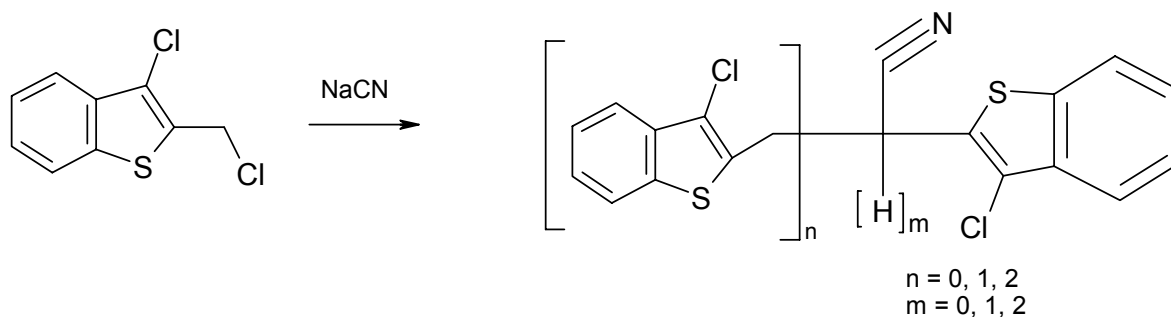
Cílem práce je ověření průběhu Deckerovy oxidace u pyridiniových solí nesoucích v para poloze substituentu vázaného na dusík elektronakceptorní skupiny a studium reaktivity stericky bráněného karbonylu produktů. Oxidací 1-aryl-2,4,6-tetrafenylpyridiniových solí byly získány příslušné 1-aryl-2-benzoyl-3,5-difenylpyrroly, které byly podrobeny reakci s primárními aminy za tvorby příslušných iminů.

Sekce : Organická chemie II B

Vliv reakčních podmínek na kyanaci 3-chlor-2-chlormethylbenzo[5]thiofenu

Autor: Arnošt Seidler
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

Při syntéze nových homologických amidů derivátů 2-(benzo[b]thiofen-2-yl)acetamidů, u nichž byl zkoumán jejich protizánětlivý popř. antiastmatický účinek v živém organismu, se vycházelo z methylesterů substituovaných benzo[b]thiofen-2-karboxylových kyselin. Při přípravě nových typů amidů byl překvapivě pozorován nestandardní průběh některých reakcí, např. reakce s kyanidovým aniontem.



Cílem této práce bylo tyto nestandardní přeměny prověřit v závislosti na reakčních podmínkách.

Nová strategie syntézy distálních dinitroderivátů calix[4]arenu

Autor: Filip Šembera
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Jan Budka, Ph.D.

V naší laboratoři se mj. zabýváme designem a syntézou receptorů aniontů na bázi calix[4]arenu. Jako velmi efektivní se ukázaly distální bis(ureido) deriváty v 1,3-alternující konformaci. Základním problémem jejich syntézy je příprava dinitroderivátu, který se redukcí převádí na odpovídající diaminoderivát. Dinitroderivát se připravuje nitrací dialkylderivátu a následnou alkylací na 1,3-alternující dinitroderivát. První reakce probíhá s nízkým výtěžkem, druhá reakce poskytuje kromě 1,3-alternujícího derivátu také více než dvojnásobné množství částečně kónického – požadovaný produkt je nutno separovat pomocí sloupcové chromatografie.

Nová strategie spočívá v přípravě distálního dibromderivátu (dvoustupňová syntéza s dobrými výtěžky, bez chromatografické separace), jeho nitraci na volných benzenových jádrech (viz obrázek) a následném odstranění bromu a redukcí nitroskupin na amin, pokud možno v jednom kroku. Tato syntéza zvýší dostupnost mnoha nových receptorů, zvláště, podaří-li se ji aplikovat i na obdobný kónický derivát.

