

LIBLICE 2005 – DODATKY



Sborník abstraktů

Konference
Pokroky v organické, bioorganické
a farmaceutické chemii

40. Konference

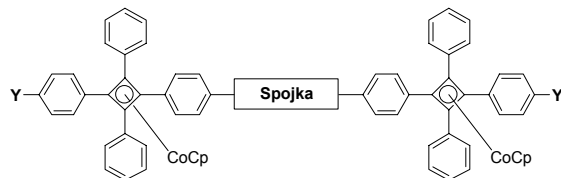
18. – 20. listopadu 2005

**KOBALTOVÉ KOMPLEXY CYKLOBUTADIENU
A JEJICH MOŽNÉ VYUŽITÍ V MOLEKULOVÉ
ELEKTRONICE**
MICHAL VALÁŠEK^a a JOSEF MICHL^b

^aKatedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030, 128 40 Praha 2, ^bDepartment of Chemistry and Biochemistry, University of Colorado, Boulder, CO80309-0215, U.S.A.
michalvalasek@hotmail.com

Dikarbonyl(η^5 -cyklopentadienyl)kobalt $[\text{CpCo}(\text{CO})_2]$ má velice široké uplatnění v chemii organokovů posledních 50-ti let¹. Jedna z možných jeho reakcí je tvorba cyklobutadienových komplexů Rauschovou dimerizací tolanových derivátů². Tyto cyklobutadienové komplexy, díky své čtvercové symetrii, nacházejí široká uplatnění například v molekulové elektronice³ nebo materiálové chemii⁴.

Bude prezentována metoda ke konstrukci kobaltových komplexů substituovaných tetrafenylcyklobutadienů. Takto připravené sendvičové komplexy, mající vhodné funkční skupiny v *para* polohách na fenylu, byly navzájem pro-

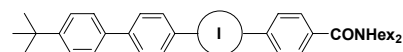


Y - H, SMe, S-*tert*-Bu, COOH,...

Spojka - Ph, bifenylyl, "molekulové izolátory", 1,10-Fenanthrolin, ...

Obr. 1.

pojeny pomocí Suzukiho kaplingu⁵ a to buď přímo, přes aktivní místa (1,10-fenanthrolin, 2,2'-bipyridyl), čímž vynikají "molekulové nanosenzory" nebo přes "molekulové izolátory" (bicyklo[1.1.1]pentany, bicyklo[2.2.2]oktan, *p*-karborany) (obr. 1). Pro studium a určení nejvhodnějšího izolátoru byla nejprve připravena série izolátorů mající na jedné straně *tert*-butylbifenylyl a na druhé straně *N,N*-dihexylbenzamid (obr. 2), které jsou podrobeny spektroskopickému studiu.



I - Ph, bicyklo[1.1.1]pentany, bicyklo[2.2.2]oktan, 10-vertex and 12-vertex *p*-karborany

Obr. 2.

Dále bude prezentována příprava samoskladného kobaltového komplexu zakončeného karboxylovými kyselinami a mající substituovaný cyklopentadienový kruh vykazující afinitu k povrchu rtuti. Bylo také využito elektronodorních vlastností cyklobutadienového komplexu pro konstrukci "molekulárních diod".

Tento projekt je financován z grantu GA UK 417/2004.

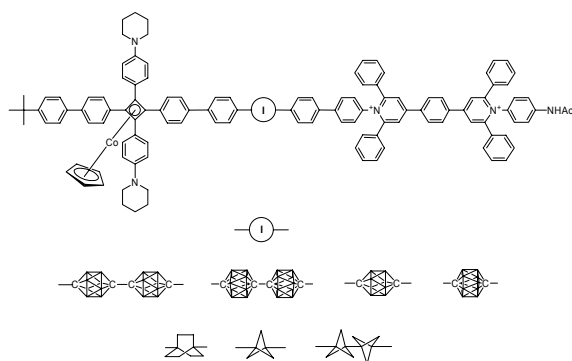
LITERATURA

- Efraty, A.: Chem. Rev. 77, 691 (1977).
- Rausch M. D., Genetti R. A.: J. Am. Chem. Soc. 89, 5502 (1967).
- Zheng X., Mulcahy M. E., Horinek D., Galeotti F., Magnera T. F., Michl J.: J. Am. Chem. Soc. 126, 4540 (2004).
- Bunz U. H. F.: Synlett 10, 1117 (1997).
- Miyaura N., Suzuki A.: Chem. Rev. 95, 2457 (1995).

**SYNTÉZA NOVÉHO TYPU „MOLEKULOVÝCH
DIOD“**
**MICHAL VALÁŠEK^{a,b}, IVANA NOUZOVÁ^a, JAROSLAV
PECKA^a, JINDŘICH JINDŘICH^a a JOSEF MICHL^b**

^aKatedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030, 128 40 Praha 2, ^bDepartment of Chemistry and Biochemistry, University of Colorado, Boulder, CO80309-0215, U.S.A.
michalvalasek@hotmail.com

Bude prezentována příprava nového typu „molekulových diod“, které se skládají z elektronově bohatého kobaltového sendviče¹ (donoru) a elektronově chudého



„pyridiniového monomeru“² (akceptoru). Při výběru „molekulových odporů“³ bylo využito alifatických molekul majících vysoký ionizační potenciál. Cyklobutadienový kruh byl vystavěn Rauschovou dimerizací¹ tolanových derivátů s $\text{CoCp}(\text{CO})_2$ a dále pomocí Suzukiho kaplinku spojen s „molekulovými odpory“⁴. Piperidinové skupiny, jako laterální substituenty cyklobutadienového kruhu, zvyšují stabilitu oxidované formy sendvičového komplexu. Dále bude ukázána syntéza série „molekulových odporů“,

ve kterých je středová jednotka tvořena bicyklo[2.2.2]oktanem, bicyklo[1.1.1]pentany (staffány), 1,10-dikarbocloso-dekaborany a 1,12-dikarbocloso-dodekaborany. Pyridiniové akceptory byly připraveny známými reakcemi přes příslušné pyryliové soli². Konečné spojení všech tří komponent bylo provedeno pomocí Suzukiho kaplinku boronového esteru kobaltového sendviče s jododerivátů „molekulových odporů“ a pyridiniového monomeru⁴. Tyto molekuly jsou studovány měřením rychlosti přenosů náboje přes „molekulové odpory“ pomocí pulzní radiolýzy.

Tento projekt je financován z grantů GA UK 417/2004 a GA ČR 203/04/0921.

LITERATURA

1. Rausch M. D., Genetti R. A.: *J. Am. Chem. Soc.* 89, 5502 (1967).
2. Valášek M., Pecka J., Jindřich J., Calleja G., Craig P. R., Michl J.: *J. Org. Chem.* 70, 405 (2005).
3. Schwab P. F. H., Levin M. D., Michl J.: *Chem. Rev.* 99, 1863 (1999).
4. Miyaura N., Suzuki A.: *Chem. Rev.* 95, 2457 (1995).