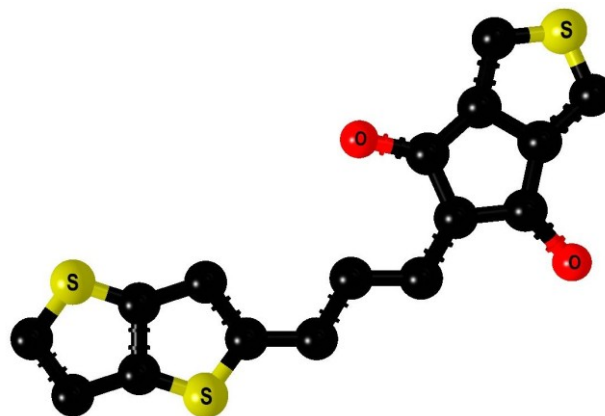


Interní grantová soutěž 2019

Vysoká škola technická a ekonomická  
v Českých Budějovicích  
Ústav technicko-technologický  
Environmentální výzkumné pracoviště



## Rozšíření aplikačního a výukového potenciálu materiálové laboratoře na VŠTE



hlavní řešitel:  
spoluřešitelé:

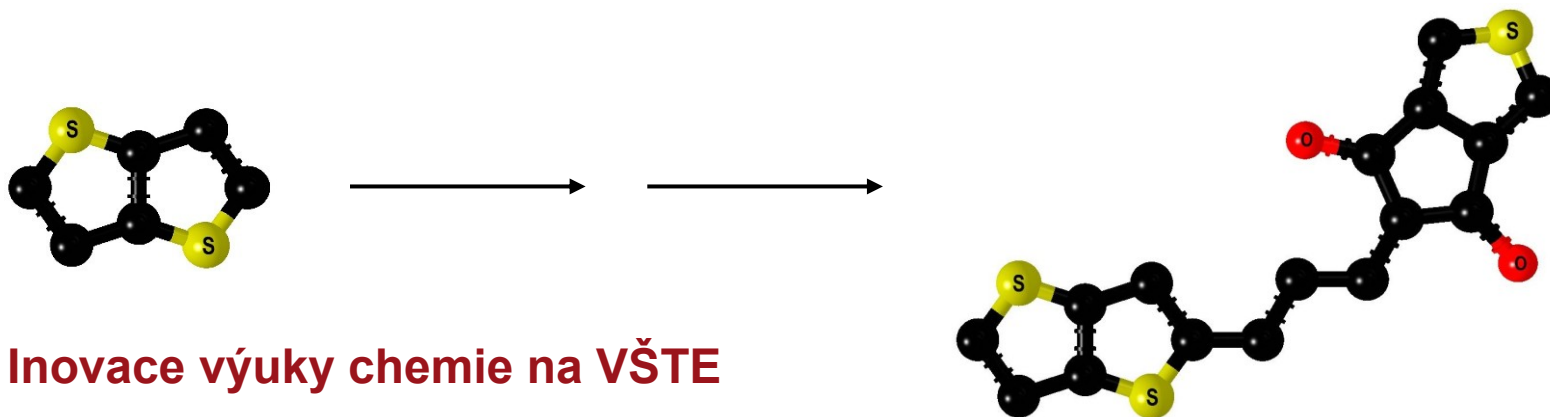
Ing. Jan Podlesný Ph.D.  
prof. Ing. Filip Bureš Ph.D.  
Ing. Veronika Jelínková

21. 11. 2019

# Cíle řešení

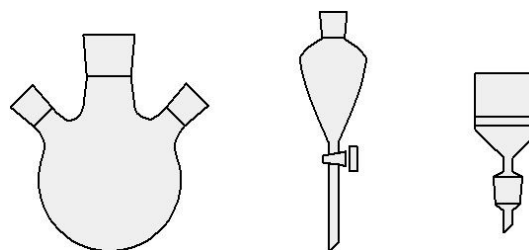
- **Podpora publikační aktivity pracovní skupiny materiálové laboratoře**

syntéza a charakterizace vybraných derivátů thieno[3,2-*b*]thiofenu a publikace této práce v mezinárodním impaktovaném periodiku



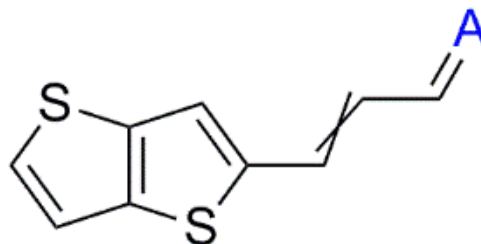
- **Inovace výuky chemie na VŠTE**

příprava vhodných experimentů určených k demonstraci učiva probíraného v rámci předmětu CHS Chemie



# Úvod

**D** : thieno[3,2-*b*]thiofen



**push-pull** chromofor

**3a - f**



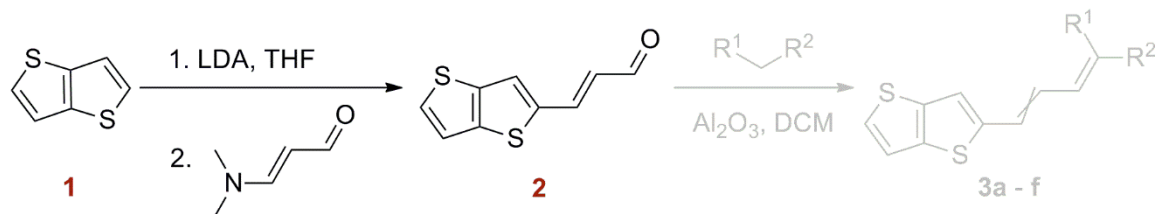
**D** = donor

**A** = akceptor

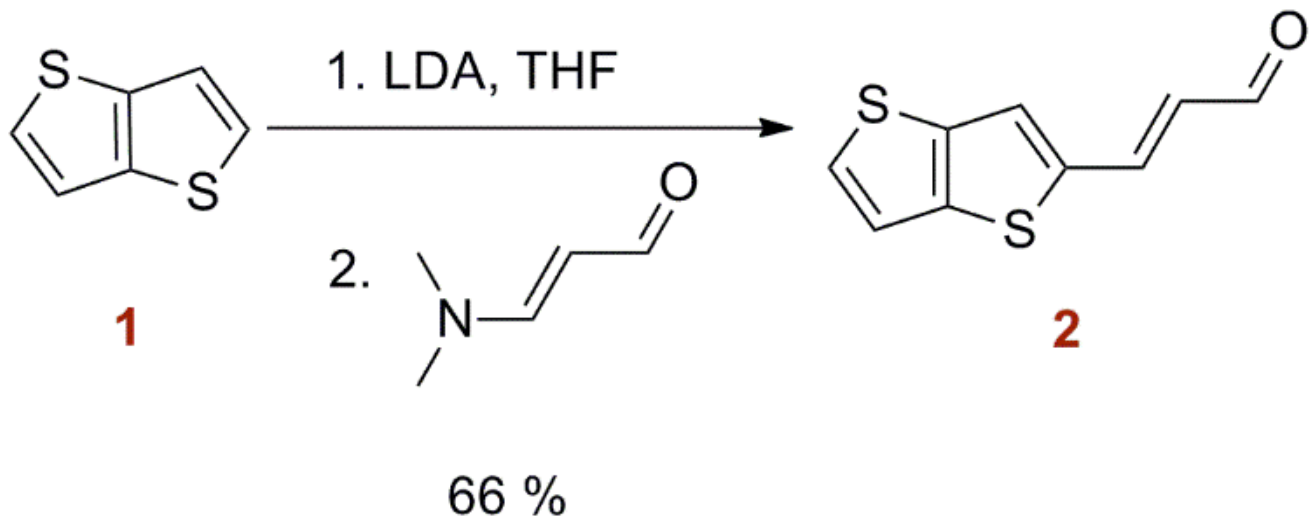
$\pi$  = konjugovaný systém elektronů

ICT = intramolekulární přenos náboje

## Syntéza cílových chromoforů **3a - f**

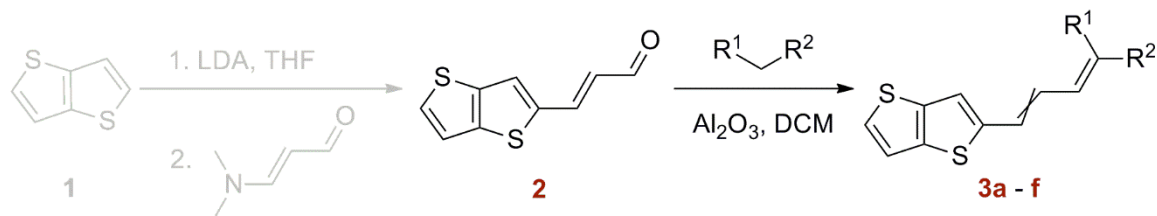


## lithiace / substitute

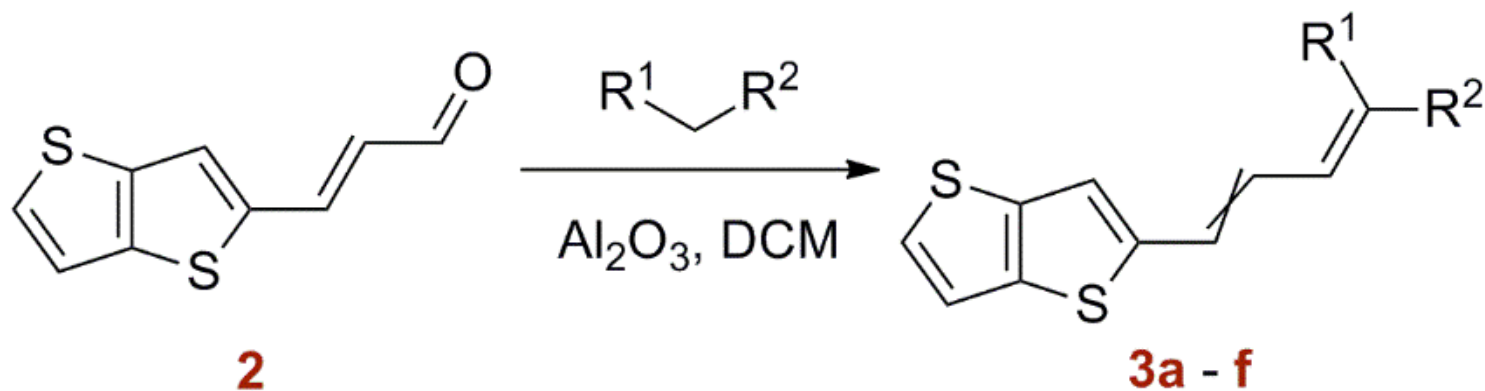


[1] M. Klikar, V. Jelínková, Z. Růžičková, T. Mikysek, O. Pytela, M. Ludwig, F. Bureš, *Eur. J. Org. Chem.* **2017**, 2764–2779.

## Syntéza cílových chromoforů **3a - f**

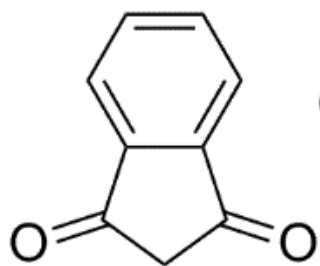
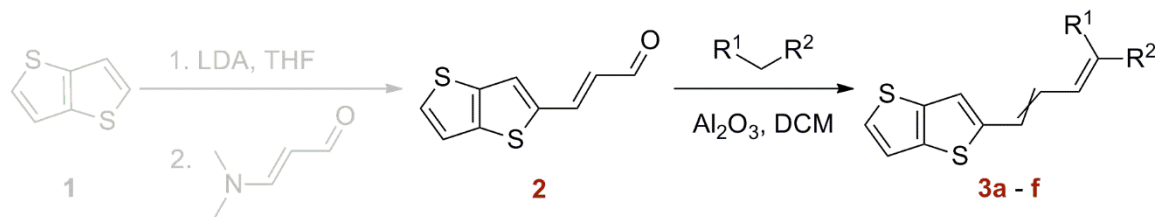


## Knoevenagelova kondenzace

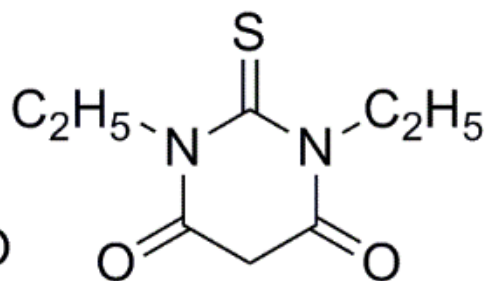


- [1] M. Klikar, V. Jelínková, Z. Růžičková, T. Mikysek, O. Pytela, M. Ludwig, F. Bureš, *Eur. J. Org. Chem.* **2017**, 2764–2779.

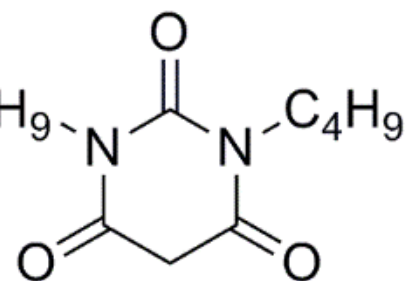
## Syntéza cílových chromoforů **3a - f**



**a** (71 %)

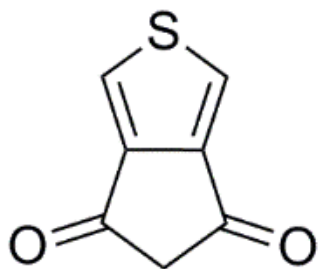


**b** (63 %)

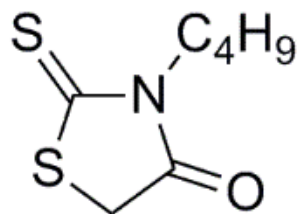


**c** (82 %)

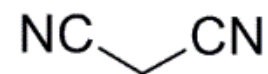
$\text{R}^1\text{-CH=CH-R}^2 =$



**d** (99 %)

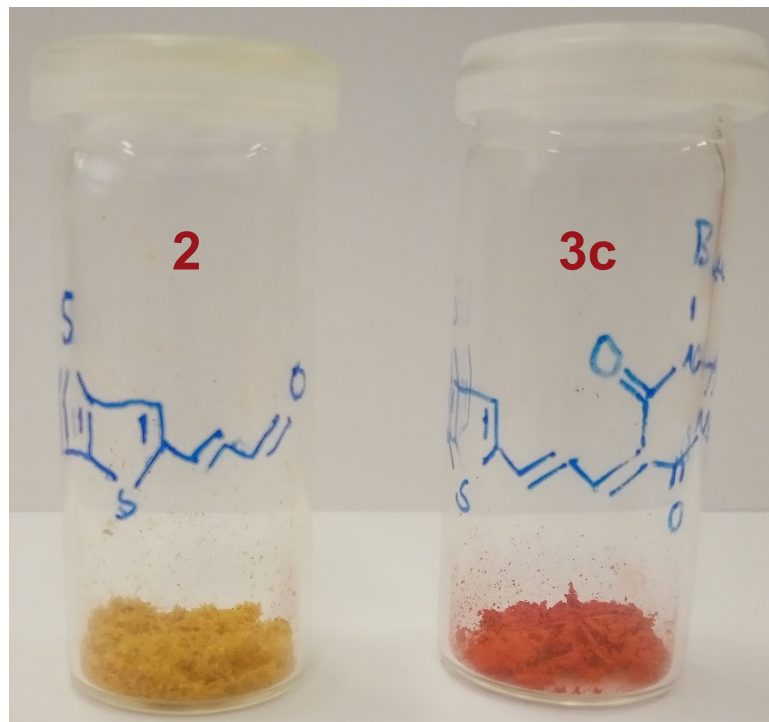
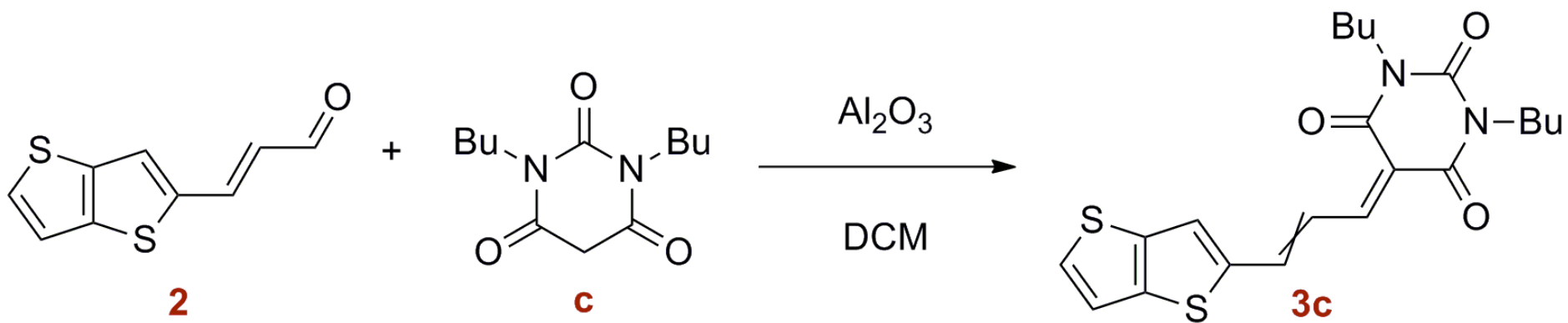


**e** (72 %)

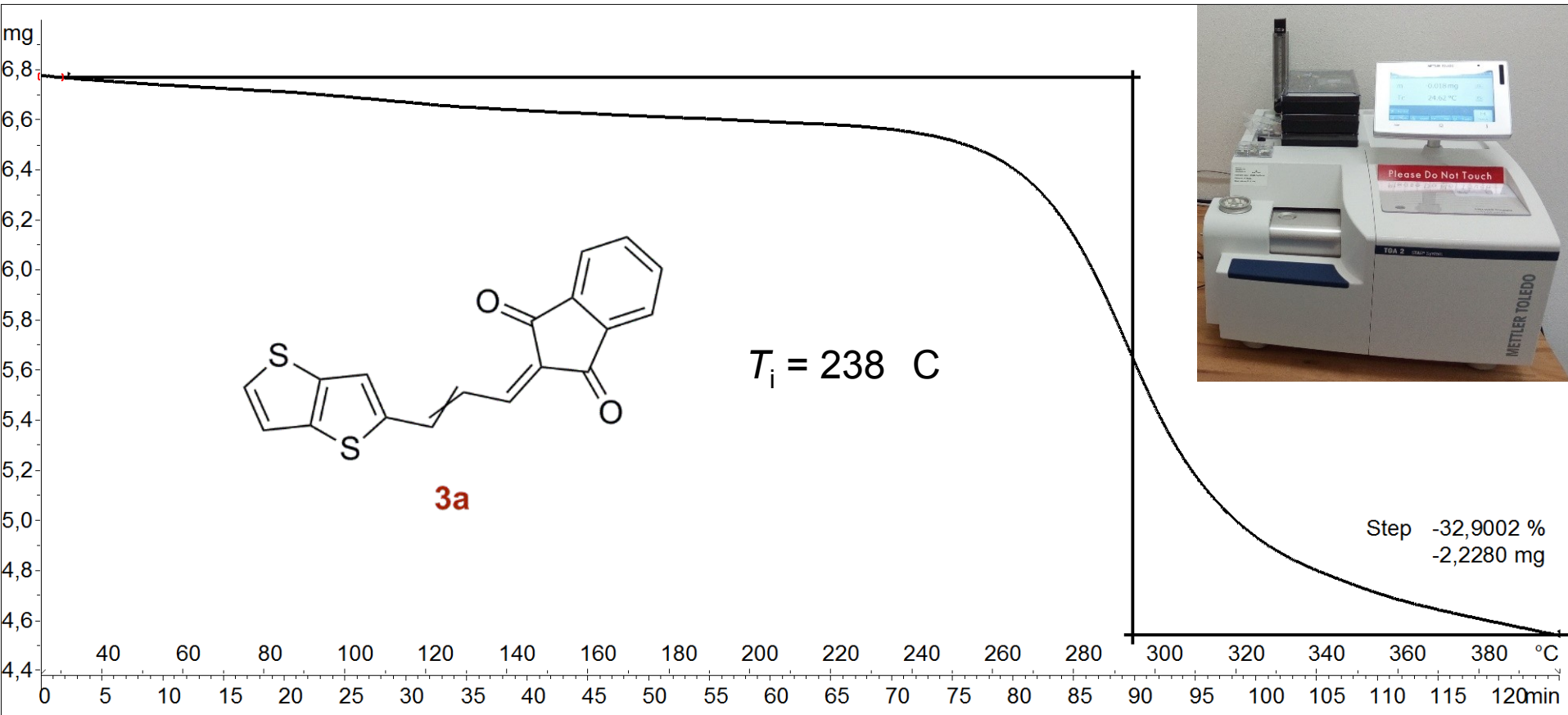


**f** (65 %)

# Knoevenagelova kondenzace

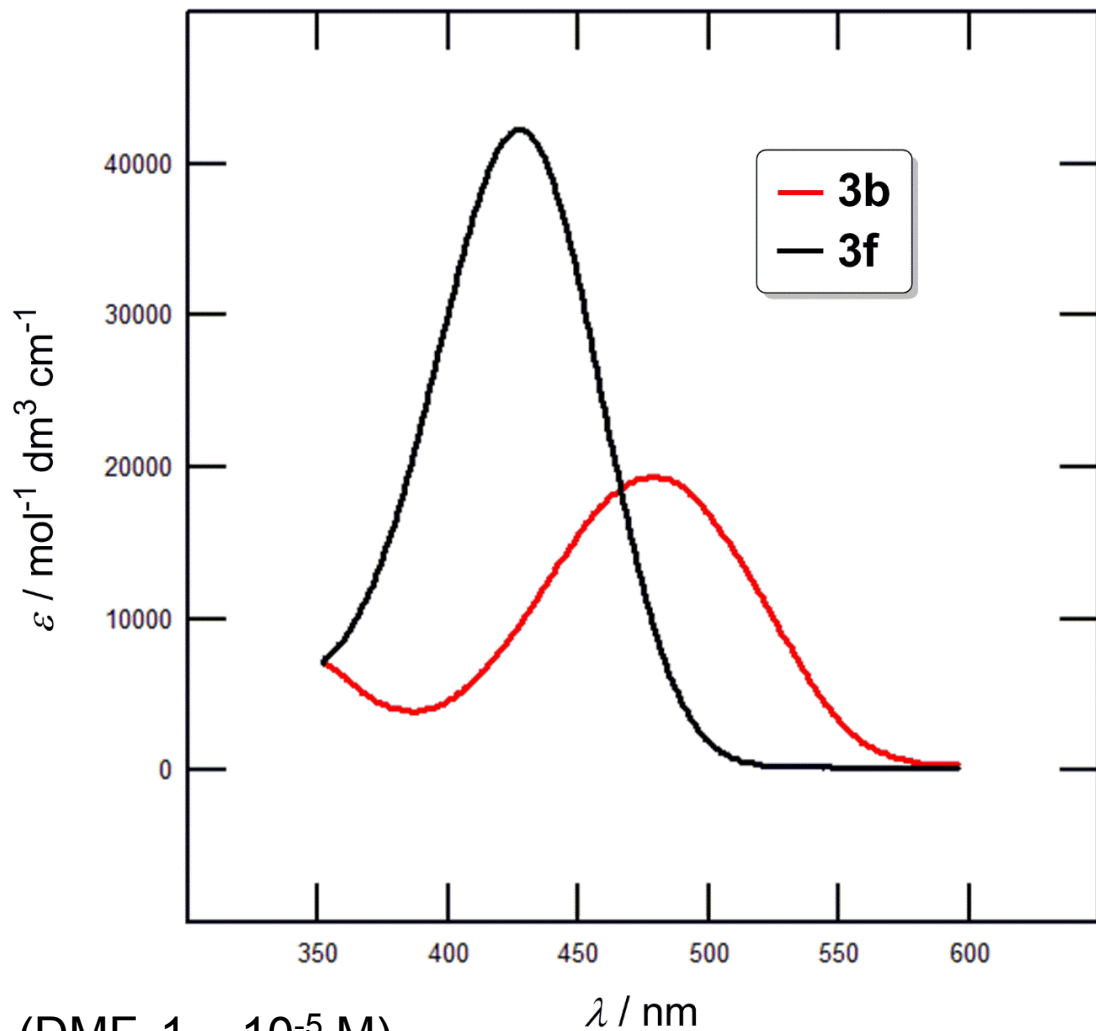


# Termogravimetrická analýza (TGA)

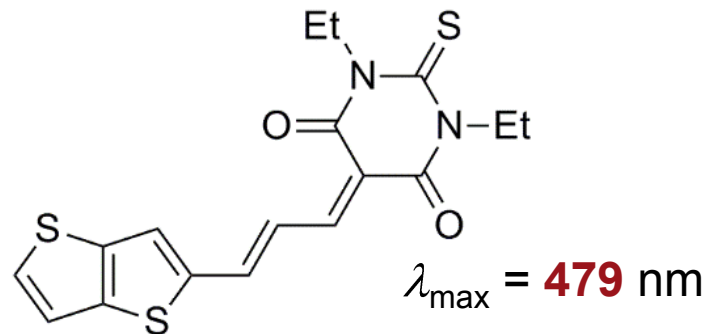




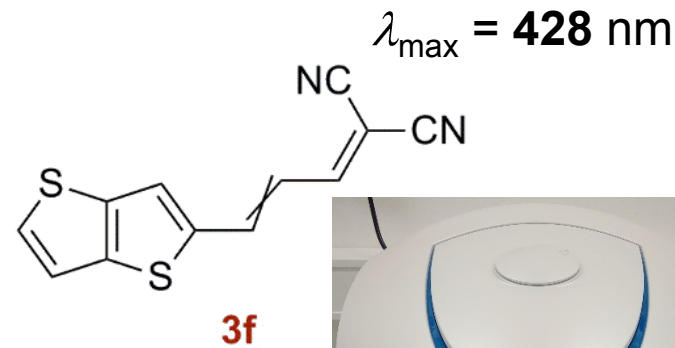
# UV-VIS absorpční spektroskopie



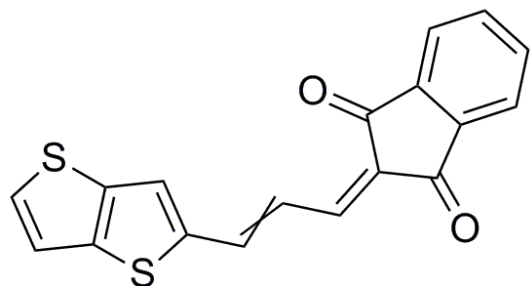
(DMF,  $1 \cdot 10^{-5}$  M)



$\Delta\lambda_{\text{max}} = 51$  nm

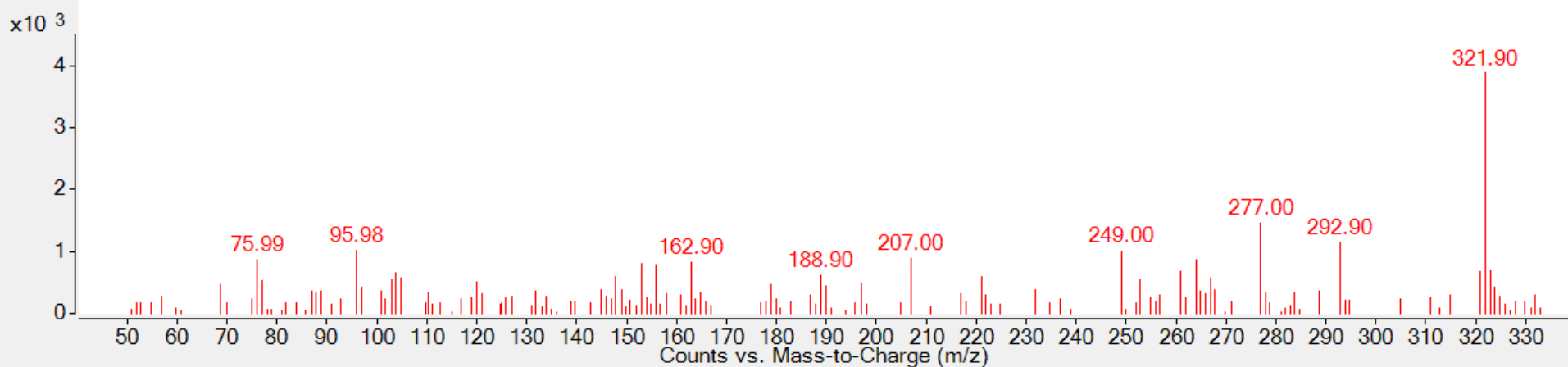
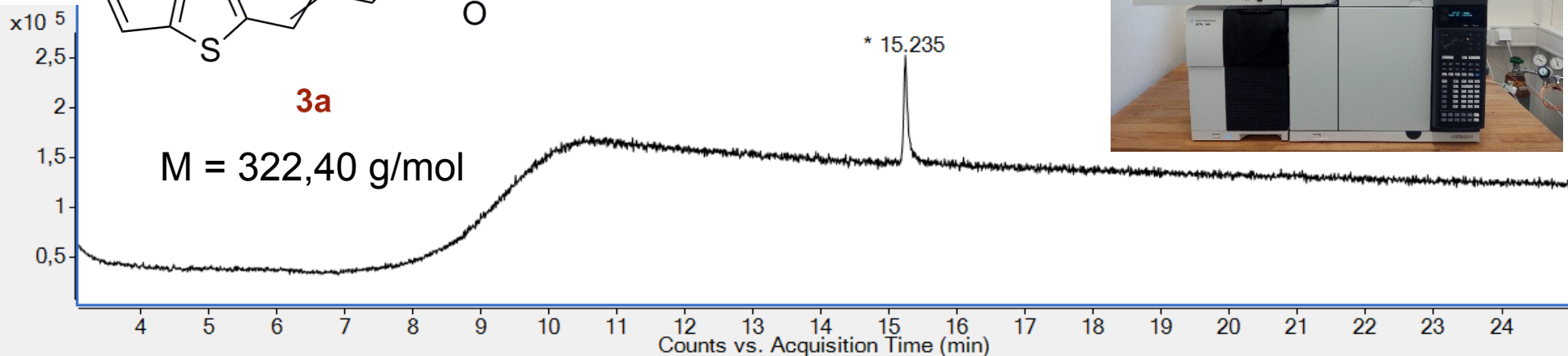
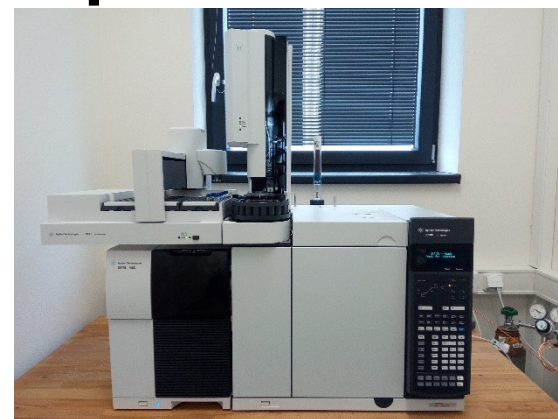


# Plynová chromatografie / hmotnostní spektrometrie (GC/MS)

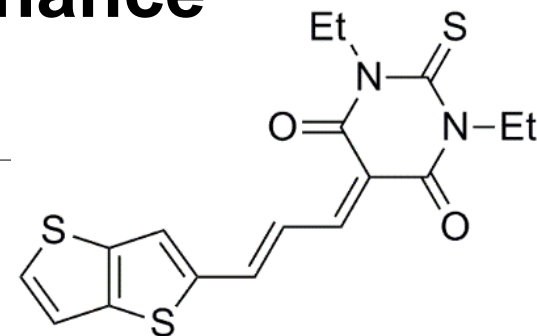


**3a**

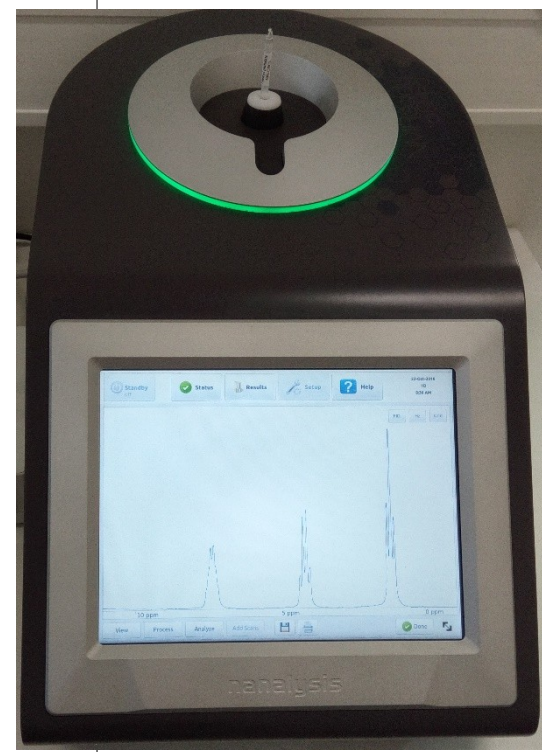
M = 322,40 g/mol



# Nukleární magnetická rezonance (NMR)



**3b**



Experimenty k demonstraci učiva Chemie

# Oxidačně-redukční reakce Důkaz přítomnosti kyslíku „Modrý cukrový chameleon“

glukosa + NaOH + methylenová modř + H<sub>2</sub>O

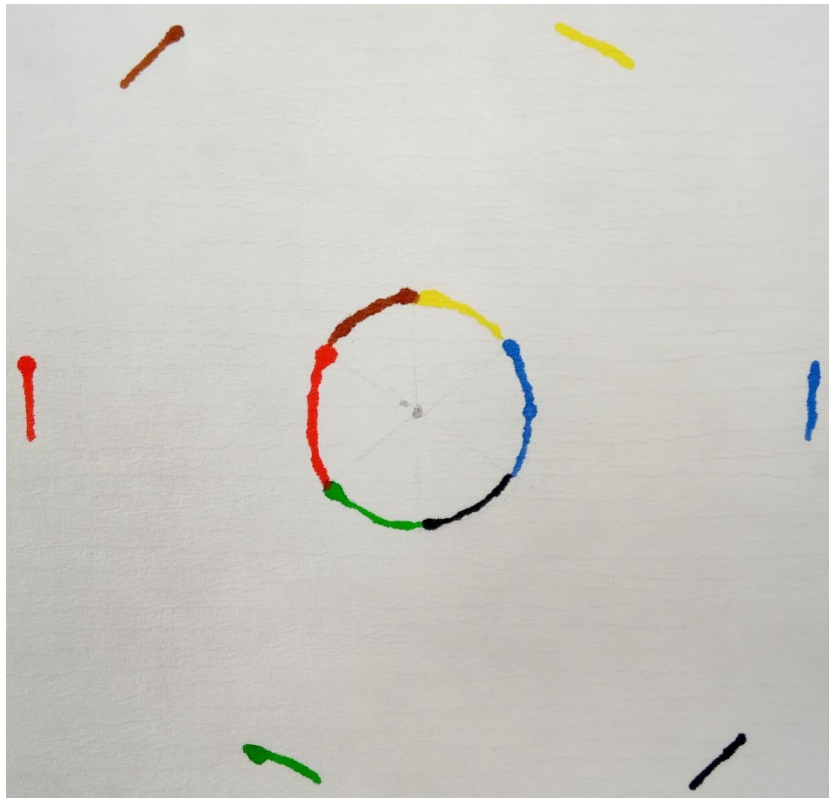


**s kyslíkem**



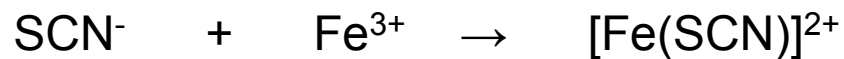
**bez kyslíku**

# Chromatografická separace barviv obsažených v barevných fixách „Tajemství barevných fixek“



Experimenty k demonstraci učiva Chemie

# Komplexotvorná chemická reakce „Neviditelná krvavá zpráva“



bez barvy

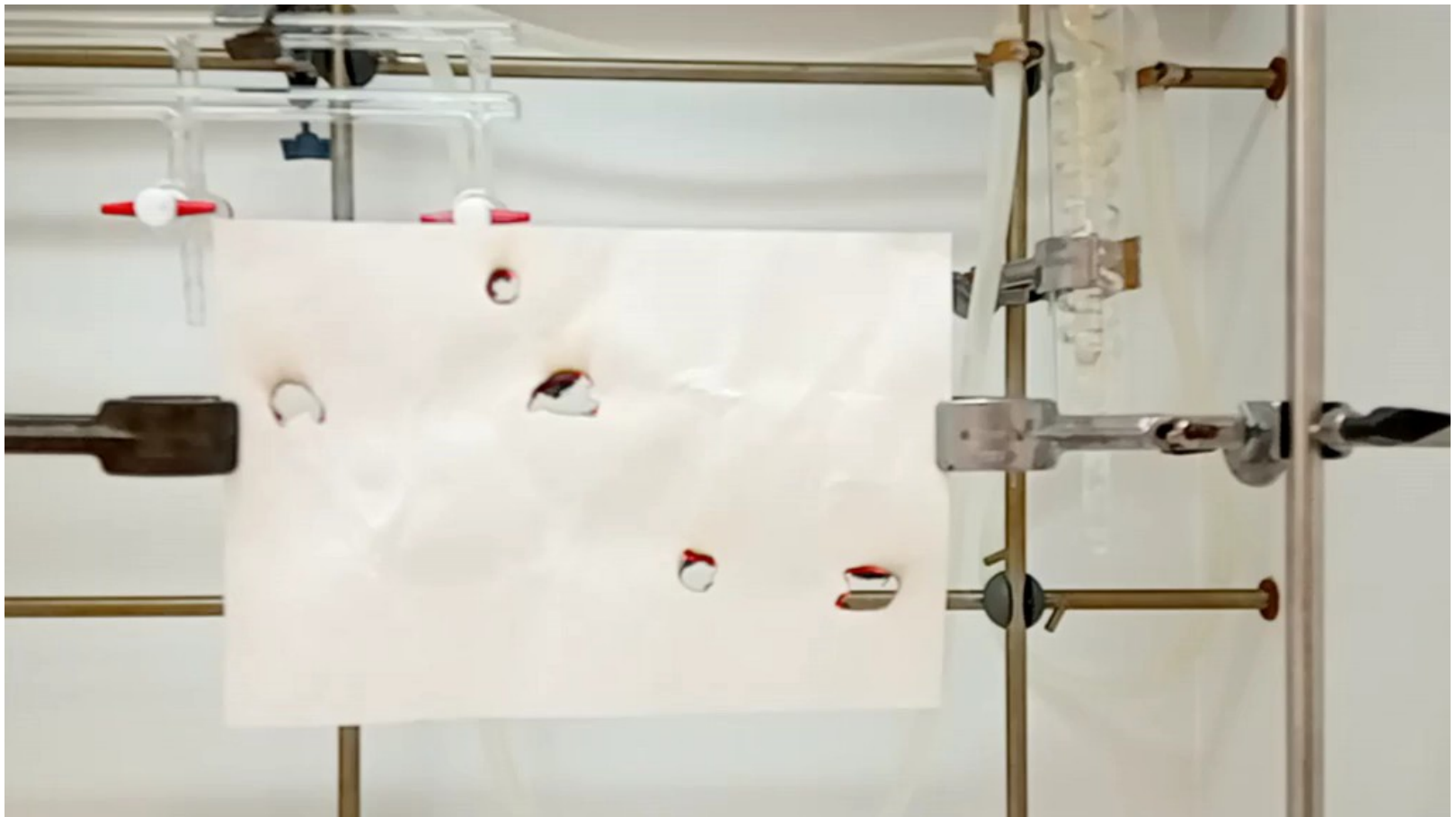
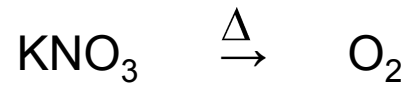
tmavě červená



Experimenty k demonstraci učiva Chemie

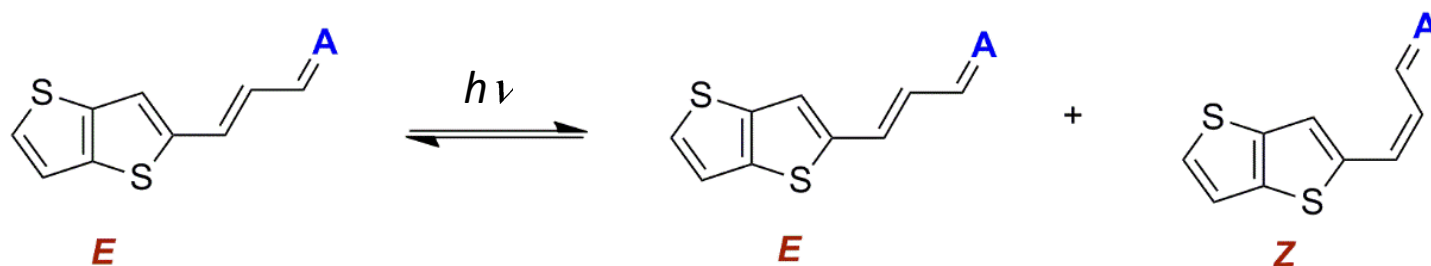
# Selektivní prohoření papíru díky přítomnosti kyslíku

## „Hořící písmo“



# Závěr

- Syntéza a charakterizace šesti nových derivátů thieno[3,2-*b*]thiofenu rozšíření předchozí studie analogických derivátů [2]
- U pěti připravených sloučenin byla pozorována fotoindukovaná *E/Z* izomerizace



„molekulární přepínač“

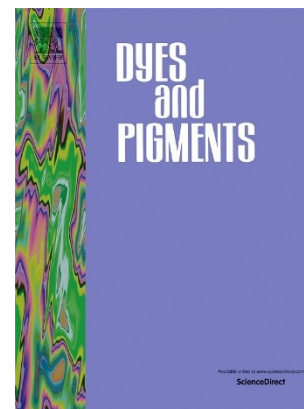
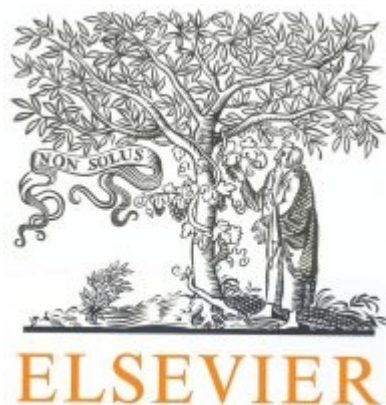
- Struktura a čistota připravených látek byla ověřena pomocí tenkovrstvé chromatografie (TLC), hmotnostní spektrometrie (GC/MS), hmotnostní MALDI spektrometrie s vysokým rozlišením (HR-MALDI) a nukleární magnetické rezonance (NMR)
- Vztahy mezi strukturou a vlastnostmi jsou studovány s využitím termogravimetrické analýzy (TGA), cyklické voltametrie (CV), UV-VIS absorpční spektroskopie a teoretických kvantově-chemických výpočtů (DFT)

[2] J. Podlesný, O. Pytela, M. Klikar, V. Jelínková, I. V. Kityk, K. Ozga, J. Jedryka, M. Rudysh, F. Bureš, *Org. Biomol. Chem.* **2019**, *17*, 3623–34.



# Závěr

- Příprava manuskriptu pro *Dyes and Pigments* (Q1, IF = 4,018)



- Příprava a optimalizace experimentů pro demonstraci učiva předmětu CHS Chemie
- Prezentace experimentů veřejnosti v areálu VSŤE v rámci akce Noc Vědců 2019

# Děkuji vám za pozornost

