

Příprava metallocenových komplexů titanu a zirkonia s pendantními nitrilovými skupinami

Miloš Večeřa

bakalářská práce

Shrnutí:

Byly připraveny dvě cyklopentadienidové soli s pendantními nitrilovými skupinami ve formě příslušných lithných solí a tyto soli byly dále využity pro přípravu metallocenových komplexů titanu a zirkonia. Jeden z ligandů již byl v literatuře popsán, druhý je nový, stejně jako všechny připravené metallocenové komplexy prvků 4. skupiny. Výchozími látkami uvedených syntéz byly 6,6-dimethylfulven a spiro[2.4]hepta-4,6-dien, které nukleofilním atakem 2-lithio-2-methylpropanitrilu poskytly příslušné substituované cyklopentadienidy lithné. Ty byly charakterizovány ^1H a ^{13}C NMR a infračervenou spektroskopií. Z těchto lithných solí byly připraveny reakcí s Cp^*TiCl_3 a Cp^*ZrCl_3 příslušné metallocen dichloridy. Rentgenostrukturní analýzou byly objasněny struktury připravených titanocen dichloridů v pevné fázi, které mohly být porovnány se známou strukturou dříve připraveného homologického derivátu. Odpovídající zirkonocen dichloridy se bohužel vykrytalizovat nepodařilo. Kromě toho byly všechny připravené metalloceny charakterizovány ^1H a ^{13}C NMR spektroskopií, infračervenou spektroskopií a hmotnostní spektrometrií. U krystalických titanocen dichloridů byly také stanoveny body tání a provedena elementární analýza. Zejména připravené lithné soli substituovaných cyklopentadienů mohou být využity pro navazující práci. Mohou sloužit jako výchozí materiály pro přípravu nových bifunkčních ligandů, případně i organometalických komplexů s jinými přechodnými kovy.

Klíčová slova: substituované cyklopentadienylové ligandy, nitril, lithná sůl, titanocen, zirkonocen, rentgenostrukturní analýza, jaderná magnetická rezonance, hmotnostní spektrometrie, infračervená spektroskopie