

čistých sloučenin ve vysoké čistotě, které mohou být použity k produkci léčiv, agrochemikálií a potravinových aditiv.

## LITERATURA:

1. Janssen, D.B.: *Curr. Opin. Chem. Biol.* 8, 150 (2004).

**AB INITIO VÝPOČTY OPTICKÉ OTÁČIVOSTI SACHARIDŮ**

**IVAN RAICH, JAKUB KAMINSKÝ, ŠTĚPÁN VALENTA a JAN HORNÍČEK**

*Ústav chemie přírodních látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6; Ivan.Raich@vscht.cz*

Určení absolutní konfigurace (AK) chirální molekuly představuje velice důležitý krok v asymetrické syntéze. Doposud se přiřazení AK u nově syntetizovaných produktů provádělo porovnáním ORD se strukturálně podobnými molekulami pomocí empirických pravidel pro určení znaménka optické otáčivosti nebo konverzí produktu na molekulu se známou AK<sup>1</sup>. V případě krystalických látek bylo možné AK přiřadit na základě rentgenostrukturální analýzy.

Teprve v poslední době pokroky v teoretické chemii umožnily výpočet optické otáčivosti pomocí *ab initio* metod<sup>2</sup>. Optická otáčivost závisí, kromě jiného silně na konformaci a je tudíž citlivým nástrojem pro strukturální analýzu. Na druhou stranu existuje řada vnějších faktorů (například solvatace), které mohou mít na otáčivost dramatický vliv.

Cílem této studie bylo provést výpočty optických otáčivostí pro stabilní konformery studovaných látek a na základě Boltzmannových populací spočítat výsledné hodnoty optických otáčivostí, které lze porovnávat s experimentálními hodnotami. Podle očekávání<sup>3</sup> byly značné rozdíly podle použitých metod (HF, DFT, MP2 a CC) a různě velkých a flexibilních bází. S ohledem na dobu výpočtu byla navržena úroveň s optimálním poměrem „cena/výkon“.

*Tato studie byla finančně podpořena interním grantem VŠCHT, č. 402 08 0017 a výzkumným záměrem MSM 6046137305.*

## LITERATURA

1. Polavarapu P. L.: *Chirality* 14, 768 (2002).
2. Stephens P. J., Devlin F. J., Cheeseman J. R., Frisch M. J., Bortolini O., Besse P.: *Chirality* 15, S57 (2003).
3. Wiberg K. B., Wang Y., Vaccaro P. H., Cheeseman J. R., Trucks G., Frisch M. J.: *J. Phys. Chem. A* 108, 32 (2004).

**MICROWAVE PHOTOCHEMISTRY: PREPARATION OF THE ELECTRODELESS DISCHARGE LAMPS AND THEIR PHOTOCHEMICAL APPLICATIONS**

**VLADIMÍR CÍRKVA, STANISLAV RELICH, LEONA VLKOVÁ, and MILAN HÁJEK**

*<sup>a</sup>Institute of Chemical Process Fundamentals, Academy of Sciences of the Czech Republic, Rozvojová 135, 165 02 Prague, Czech Republic; e-mail: cirkva@icpf.cas.cz*

The fact that electrodeless discharge lamp (EDL) generates ultraviolet radiation when placed into the microwave field has been known for long time. The low powered and low-pressure EDLs were utilized in spectroscopy four decades ago. However, its application for organic photochemistry has been shown only recently<sup>1,2</sup>.

We disclosed the studies of microwave photochemistry in an original photochemical reactor consisting of EDL placed into the reactor vessel of a commercial microwave oven<sup>3</sup>. The UV discharge in the lamp is generated by MW field resulting in direct simultaneous UV and MW irradiation of reaction mixture. Such a simple arrangement brings a unique possibility to study photochemical reactions under extreme thermal conditions.

The EDL consists of a glass tube (quartz or Pyrex) filled under a lower pressure with argon and an excitable substance (Hg, HgI<sub>2</sub>, Cd, I<sub>2</sub>, KI, P, Se, S) and generates UV/VIS radiation when placed into the microwave field. The utilization of other filling material than mercury is practical and environmentally safe in the EDL performance. The original apparatus for easy preparation of EDLs will be described in detail.

The spectral measurements for prepared Hg, HgI<sub>2</sub>, Cd, I<sub>2</sub>, KI, P, Se and S-EDLs were accomplished in a modified microwave oven described by us<sup>4-6</sup>. The EDL characteristics (fill material, Pyrex and quartz, temperature effect, MW output power) were measured and will be discussed.

*This work was supported by GACR (Grant No. 203/02/0879). We are grateful to Milestone (Italy) for technical supporting.*

## REFERENCES

1. Církva V., Hájek M.: *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.* 123, 21 (1999).
2. Klán P., Církva V., in: *Microwaves in Organic Synthesis, Microwave Photochemistry*, Chap. 14, p. 463. John Wiley, NY, 2002.
3. Klán P., Hájek M., Církva V.: *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.* 140, 185 (2001).
4. Müller P., Klán P., Církva V.: *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.* 158, 1 (2003).
5. Müller P., Klán P., Církva V.: *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.* 171, 51 (2005).
6. Církva V., Relich S., Vlková L., Hájek M.: *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.*, in press.

**EASY PREPARATION OF REGIOISOMERS OF MONO-O-SUBSTITUTED  $\alpha$ -,  $\gamma$ -CYCLODEXTRINS**

**MICHAL ŘEZANKA, JINDŘICH JINDŘICH, and IVA TIŠLEROVÁ**

*Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Hlavova 2030, 128 43, Praha 2  
jindrich@natur.cuni.cz*

Cyclodextrins (CDs) and their derivatives have good complexation abilities due to the rigid, cone-shaped cavity formed by  $\alpha$ -1,4-linked D-glucopyranose units. Our research is focused on the preparation of a set of exactly defined dimers