

Posudek školitele na diplomovou práci:

Barbiturová kyselina jako akceptorní část v push-pull chromoforech – Bc. Milan Klikar.

Předkládaná práce se zabývá přípravou a dalším studiem C5 substituovaných derivátů kyseliny barbiturové. Tyto sloučeniny představují push-pull deriváty ve kterých barbiturová kyselina vystupuje jako akceptorní část molekuly a *N,N*-dimethylamino skupina pak slouží jako donor elektronů. Díky interakci donoru D a akceptoru A dochází k tzv. vnitřnímu přenosu náboje a D- π -A deriváty představují dipolární sloučeniny, které v dnešní době nalézají uplatnění jako aktivní sloučeniny v celé řadě optoelektronických zařízeních.

Dle zadání diplomové práce (DP), Bc. M. Klikar zpracoval rešerši na výše uvedené téma, kde pojednal o přípravách a využití obdobných derivátů. Rešerše je poměrně obsáhlá, téma je zpracováno přehledně a jednotlivé deriváty jsou řazeny systematickým způsobem.


V experimentální části DP byla provedena retrosyntetická analýza, která vedla k *N,N'*-dibutylbarbiturové kyselině a *N,N*-dimethylamino substituovaným aldehydům se systematicky prodlužovanou cestou. *N,N'*-Dibutylbarbiturová kyselina byla připravena z *N,N'*-dibutylmočoviny resp. butylisokyanátu. Benzaldehydy, skořicové aldehydy a propargylové aldehydy byly připravovány pomocí cross-coupling reakcí. Finální spojení akceptorní a donorní části pak bylo realizováno pomocí Knoevenagelovy reakce. Celkem tak bylo připraveno 12 nových push-pull chromoforů, byť zadání vyžadovalo přípravu alespoň 5 derivátů. Připravené sloučeniny tak tvoří ucelenou sérii látek vhodnou pro studium vztahů struktura-vlastnosti. V laboratoři pracoval Bc. M. Klikar samostatně s minimem zásahů školitele. Být se zpočátku příprava cílových látek zdála jednoduchá, vyskytla se celá řada problému, především při jejich čištění. Nicméně Bc. M. Klikar našel vhodný způsob přípravy a čištění všech žádaných meziproduktů i cílových sloučenin a při laboratorní práci si rutinně osvojil nakládání s organokovovými sloučeninami a práci na vakuu-inertní lince. Struktura a čistota všech připravených sloučenin byla potvrzena dostupnými analytickými metodami (NMR, MS, bt), interpretace dat byla provedena studentem samostatně.

V další části DP se Bc. M. Klikar zabýval studiem vztahů struktura-vlastnosti pomocí RTG analýzy (chromofory **CH1** a **CH5**), elektrochemií, UV/Vis spektroskopií a rovněž pomocí chemických výpočtů. Veškerá získaná data byla zpracována přehledně a byly vyvozeny základní vztahy typu struktura – pozorované vlastnosti. Po grafické stránce je DP zpracována přehledně, v členění textu tak je pro daný druh díla zvykem, s minimem gramatických chyb a překlepů. Zadání DP lze považovat sepsáním práce za více než splněné, DP práce je v podstatě připravena k publikování ve formě vědeckého článku. Kvalita této DP je pak významným příslibem dalších úspěchů Bc. M. Klikara při jeho navazujícím doktorském studiu.

Z výše uvedených důvodů **doporučuji** diplomovou práci Bc. Milana Klikara k obhajobě a hodnotím ji známkou

výborně

V Pardubicích 20. 5. 2013



doc. Ing. Filip Bureš, Ph.D.