

Posudek školitele na diplomovou práci

Název: Organické push-pull chromofory pro fotoredox katalýzu

Autor: Bc. Zuzana Hloušková

Předkládaná diplomová práce (DP) je z oboru organické materiálové chemie a zabývá se přípravou a studiem D- π -A push-pull derivátů nesoucích pyrazin-2,3-dikarbonitril (DCP) jako akceptorní (A) část. Jako elektron donory (D) byly využity deriváty thiofenu. Push-pull molekuly jsou v současnosti široce studovanou třídou organických sloučenin vzhledem ke svým unikátním vlastnostem a aplikacím v moderních odvětvích materiálové chemie jako je optoelektronika. V současné době je pozornost komunity rovněž směřována k využití analogických organických substancí jako fotoredox katalyzátorů. Tyto sloučeniny jsou schopné absorpce slunečního záření a jeho následné transformace do podoby chemických vazeb. Tento unikátní způsob přípravy organických sloučenin představuje moderní nástroj organické syntézy, kdy lze reagovat neaktivované sloučeniny za velice mírných podmínek, s téměř nevyčerpatelným energetickým zdrojem (slunce), provést „one-pot“ kaskádové reakce a připravit tak celou řadu nových substancí s dalším potenciálním využitím.

V teoretické části DP Bc. Hloušková zpracovala literární rešerši mapující současný stav poznání ve fotoredox katalýze. Vedle známých barviv jako jsou organokovové deriváty typu Ru(bpy)₃²⁺ či deriváty fluoresceinu, zaměřila svoji pozornost především na syntetické katalyzátory, u nichž lze strukturními obměnami ladit fundamentální vlastnosti pro daný fotoredox proces. Literární rešerše je zpracována přehledně, je logicky členěna do podkapitol, velice pěkně ilustrována vhodnými chemickými strukturami a schémata a doplněna tabulkami. V práci je rovněž příkladně demonstrován katalytický potenciál každé diskutované substance ve vybrané fotoredox reakci.

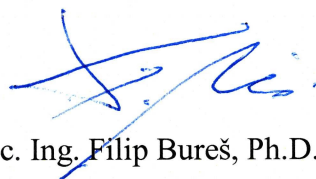
V experimentální části DP jsou přehledně popsány obecné metody, přípravy prekurzorů jakožto cílových sloučenin včetně plné spektrální charakterizace. V dalších odstavcích je podrobně diskutována syntéza jednotlivých sloučenin. Celkem bylo připraveno osm derivátů z celkově zamýšlených dvanácti. Dva deriváty byly již připraveny na našem pracovišti dříve (**32** a **33**), Bc. Hloušková tak připravila šest zcela nových derivátů (**30–31** a **34–37**), byť zadání vyžadovalo přípravu pouze pěti derivátů. Byly provedeny pokusy o přípravu všech dvanácti cílových sloučenin, bohužel některé se vzhledem k nízké reaktivitě výchozích sloučenin připravit nepodařilo. Připravené deriváty mají systematicky obměňovanou strukturu, což umožňuje studium vztahů typu struktura-vlastnosti/katalytická aktivita. Strukturní analýza byla provedena pomocí ¹H/¹³C NMR a HR-MALDI-MS spekter. Termická odolnost připravených derivátů byla studována pomocí diferenční skenovací kalorimetrie (DSC) a základní optické vlastnosti pak pomocí UV-Vis

spektroskopie. Katalytická aktivita všech připravených derivátů byla předběžně testována ve zkříženém dehydrogenativním kaplingu (CDC), což je moderní způsob přípravy deriváty tetrahydroischinolinu (THIQ). THIQ představují širokou třídu bioaktivních sloučenin s prokázanou cytostatickou, anitihypertenzní či protikřečovou aktivitou.

Diplomantka během řešení zadaného tématu prokázala své syntetické schopnosti, samostatnost při řešení výzkumných úkolů a rutinně zvládla práci s organokovými činidly a metodiku práce na vakuum-inertní lince. Velice oceňuji její samostatný, precizní, entuziastický a nezlomný přístup k laboratorní práci, která nebyla jednoduchá a ne vždy vedla k vytouženému cíli. Rovněž oceňuji pokus o vyvození základních vztahů mezi optickými vlastnostmi připravených fotokatalyzátorů a výsledky fotoredox CDC reakce. DP Bc. Hlouškové představuje velice povedené vědecké dílo, které je po doplnění elektrochemických výsledků a DFT kalkulací prakticky připraveno k publikování ve formě vědeckého článku. Kvalita této DP je pak významným příslibem dalších úspěchů diplomantky v jejím navazující doktorské studiu.

Vzhledem k výše uvedenému, diplomovou práci Bc. Z. Hlouškové bez výhrad **doporučuji** k obhajobě na Ústavu organické chemie a technologie a hodnotím ji známkou **výborně**.

V Pardubicích 19. 5. 2016



doc. Ing. Filip Bureš, Ph.D.

Ústav organické chemie a technologie

Fakulta chemicko-technologická

Univerzita Pardubice

Studentská 573

Pardubice, 532 10