

Oponentský posudek diplomové práce Bc. Jakuba Opršala

„Syntéza push-pull systémů na bázi ferrocenu“

Oponent: Ing. Kamil Dudek, Ph.D.
Explosia, a.s.
Výzkumný ústav průmyslové chemie
Semtín 107
530 50 Pardubice

Předložená diplomová práce je sepsána přehledně a obsahuje všechny náležitosti, které diplomová práce má obsahovat. Práce je napsána jednoduchým, ale výstižným způsobem. V textu nebyly nalezeny žádné gramatické chyby, pouze pár drobných překlepů, které se běžně v těchto pracích vyskytují.

V úvodu diplomové práce je popsán cíl diplomové práce a výběr sloučenin a také záměr, s jakým byly uvedené sloučeniny syntetizovány.

Teoretická část diplomové práce obsahuje literární rešerši, která v první části popisuje struktury nelineárních optických chromoforů. V druhé části diplomant popisuje přípravu metallocenů a hlavně se zaměřuje na ferrocen a jeho deriváty. U těchto sloučenin diplomant popisuje strukturu a vaznost ferrocenu, reakce s elektrofilny a jeho aplikace v průmyslu, medicíně a farmacii. V poslední části teoretické části diplomant popisuje obecné metody cross-couplingu. Diplomantovi se podařilo vypracovat rešerši, která obsahuje velké množství podstatných informací a hodnotím ji jako kvalitní. K vypracované rešerši mám pouze jednu drobnou připomínku:

- V textu se vyskytuje spousta zkratk (hlavně ve schématech), které nejsou nikde v diplomové práci vysvětleny. Pro lepší přehlednost bývá v publikacích na úvod uveden seznam zkratk, který v této diplomové práci chybí.

Experimentální část je rozdělena do 2 kapitol. V úvodu jsou detailně popsány použité chemikálie a jejich úpravy před vlastním použitím. Dále jsou zde popsány použité analytické a spektrometrické metody včetně popisu jednotlivých přístrojů. V druhé kapitole diplomant popisuje syntézu meziproductů a finálních chromoforů. Diplomant syntetizoval 6 meziproductů: 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-jodfenyl)-1,3,2-dioxaborolan, 4-bromfenylferrocen, 4-jodfenylferrocen, jodferrocen, 4,4,5,5-tetramethyl-2-[2-(4-nitrofenyl)]ethenyl-1,3,2-dioxaborolan, 4,4,5,5-tetramethyl-2-[4-(4-nitrofenyl)ethynylfenyl]-1,3,2-dioxaborolan a 6 finálních derivátů ferrocenu propojených konjugovaným systémem dvojných a trojných vazeb s nitroskupinou: 4-nitrofenylferrocen, 4-nitrobifenylferrocen, 4-nitrostyrylferrocen, 4-[2-(4'-nitrofenyl)ethenyl]fenylferrocen, 4-nitrofenylethynylferrocen, 4-[(4'-nitrofenyl)ethynyl]-fenylferrocen. K experimentální části mám následující otázky a připomínky:

- V kap. 3.2.1. a 3.2.2 postrádám srovnání teplot tání vámi připravených sloučenin s literárními údaji.
- V kap. 3.2.3 až 3.2.6. neuvádíte žádné hodnoty (např. teplota tání, ESI-MS), které by potvrzovaly vámi připravenou sloučeninu a srovnání s literárními údaji. V kap. 3.2.4 také postrádám hodnotu výtěžku reakce.
- Z jakého důvodu byly připraveny podobné meziproducty – bromfenylferrocen a jodfenylferrocen? Nebyl u reakce 3.2.5 pozorován vznik dalšího produktu? Jakého?
- V kap. 3.2.9. jste ve schématu 22 mylně uvedl jako výchozí látku bromferrocen.

- V kap. 3.2.11. neuvádíte výsledek elementární analýzy produktu. Proč?

V kapitole Výsledky a diskuse jsou zhodnoceny jednotlivé výsledky jednotlivých syntéz jak meziproductů, tak i finálních derivátů ferrocenů. Ke kapitole Výsledky a diskuse mám následující připomínky:

- Při diskusi ohledně syntézy 4-nitrofenylferrocenu, 4-nitrobifenylylferrocenu a 4-[(4'-nitrofenyl)ethynyl]fenylferrocenu popisujete přípravu monokrystalu pro rentgenostrukturní analýzu. Myslím, že tomuto popisu jste se mohl věnovat více detailněji, ale v kapitole experimentální část.
- Uvádíte, že 4-nitrofenylferrocen jste zkoušel syntetizovat také s použitím 4-bromnitrobenzenu, ale žádaný produkt jste nezískal. Myslím, že když uvádíte tuto informaci v kap. Výsledky a diskuse, bylo by dobré v kap. Experimentální část uvést postup, jakým jste reakci prováděl, i když jste nedosáhl očekávaného výsledku.
- Při číslování příloh jste omylem 2x uvedl přílohu č.1, tím pádem jsou v textu některé odkazy na přílohy posunuty.

V předložené práci postrádám kapitolu Závěr, kde měl diplomant zhodnotit a vyzdvihnout dosažené výsledky během svého výzkumu a hlavně zdůraznit, že splnil zadání diplomové práce. Závěrem bych měl ještě následující dotaz:

- Můžete uvést, zdali vámi připravené deriváty ferrocenu propojených konjugovaným systémem dvojných a trojných vazeb s nitroskupinou nebyly doposud v literatuře publikovány?

Závěrem lze konstatovat, že diplomantem předkládaná diplomová práce se zabývá velice zajímavou oblastí organokovových sloučenin, které jsou v současné době intenzivně zkoumány pro jejich využití v elektrooptických zařízeních. Výsledky této diplomové práce budou velkým přínosem pro tuto oblast do budoucna. Diplomová práce je sepsána přehledně a obsahuje všechny náležitosti, které diplomová práce má obsahovat. Diplomant prokázal znalost studované problematiky, je schopen se dobře orientovat v studované problematice a hlavně je schopen provést vyhodnocení získaných výsledků s výstižnou diskusí.

Doporučuji předloženou diplomovou práci přijmout k obhajobě a hodnotím ji velmi dobře.

V Pardubicích 27. 5. 2011

Ing. Kamil Dudek, Ph.D.

