

Posudek školitele na diplomovou práci:

**Organické chromofory s vnitřním přenosem náboje ve tvaru písmene X
– Bc. Lenka Dokládálová.**

Předkládaná práce se zabývá organickými push-pull chromofory v uspořádání písmene X s vnitřním přenosem náboje z periferních dvou donorů do dvou akceptorů prostřednictvím π -konjugovaného systému na bázi benzenu. Tento typ push-pull sloučenin je v dnešní době intenzivně studován pro jejich lineárně i nelineárně optické vlastnosti.

V souladu se zadáním diplomové práce se Bc. L. Dokládálová nejprve zaměřila na rešeršní práci pojednávající o tomto typu D- π -A systému. V teoretické části je proto na dvaceti stranách pojednáno o možné orientaci donorů a akceptorů kolem centrální π -konjugované jednotky a následně je každá skupina sloučenin podrobně rozebrána a byly rovněž diskutovány základní vlastnosti a možnosti konjugace chromoforu ve tvaru písmene X.

Experimentální práce Bc. L. Dokládálové navazuje na práci prováděnou na našem pracovišti, kdy byly připraveny chromofory ve tvaru písmene X na bázi pyrazinu. Bc. L. Dokládálová se zaměřila na strukturní analogy, kdy centrální jednotkou je benzen. Práce rovněž navazuje na její bakalářskou práci, ve které se zabývala přípravou vhodného dihalogen derivátu benzen-1,2-dikarbonitrilu. Žádaný diiodderivát se během diplomové práce nakonec podařilo syntetizovat a v závěrečném kroku pak modifikovat dvojnásobnými cross-coupling reakcemi s donor-substituovaný π -systémy na bázi 1,4-fenylenových a acetylenových jednotek. Tímto způsobem bylo připraveno 10 nových push-pull sloučenin, byť zadání práce vyžadovalo syntézu sloučenin pěti. V cílových sloučeninách se podařilo systematicky modifikovat a prodlužovat π -systém a tak umožnit zevrubné studium vztahů struktura-vlastnosti. V laboratoři pracovala Bc. L. Dokládálová více či méně samostatně a byla schopna řešit zadané téma invenčním přístupem. Jako nejobtížnější se ukázala finální dvojnásobná Suzukiova-Miyaurova nebo Sonogashirova reakce, kdy cílové produkty bylo nutno čistit

opakovanou sloupcovou chromatografií nebo krystalizací. Struktura a čistota všech připravených sloučenin byla potvrzena dostupnými analytickými metodami (NMR, MS, bt), interpretace dat byla provedena studentkou samostatně.

V oddílu Výsledky a diskuze se Bc. L. Dokládalová věnovala zhodnocení provedených syntéz vedoucí k cílovým látkám a následnému zevrubnému studiu jejich vlastností pomocí RTG analýzy, elektrochemie, UV/Vis spekter, chemickými výpočty a předběžnými SHG experimenty. Získaná data byla vyhodnocena jednak v rámci nové série sloučenin a rovněž srovnána s předchozí sérií chromoforů na bázi pyrazinu. Toto srovnání se jeví jako nejzajímavější. Diplomová práce je zpracována v logickém členění, výsledky a zpracování dat jsou jasně formulovány. Zadané cíle lze považovat za více než splněné, diplomová práce je v podstatě připravena pro publikování ve formě vědeckého článku ve vybraném impaktovaném časopise. Bc. L. Dokládalová si během magisterského studia rutinně osvojila práci s organokovovými sloučeninami, práci na vakuu inertní lince a cross-coupling reakce a prokázala velice dobrou laboratorní zručnost.

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

výborně

V Pardubicích 20. 5. 2013


doc. Ing. Filip Bureš, Ph.D.