

Posudek školitele na diplomovou práci

Název: Thiazol-4,5-dikarbonitril jako nová elektron akceptorní jednotka v push-pull molekulách

Autor: Bc. Šárka Švecová

Předkládaná diplomová práce (DP) z oboru organické chemie se zaměřuje na přípravu push-pull derivátů na bázi thiazol-4,5-dikarbonitrilu. Tato práce navazuje na problematiku aktuálně řešenou na ÚOChT, kdy byly v nedávné době vyvinuty analogické chromofory nesoucí imidazol-4,5-dikarbonitril jako akceptorní jednotku. Tyto chromofory s vnitřním přenosem náboje jsou cíleny především jako materiály vykazující nelineární optické (NLO) vlastnosti.

Diplomantka v teoretické části práce zpracovala literární rešerši příprav a využití pětičlenných heteroaromátů v push-pull molekulách, kde se především zaměřila na deriváty thiazolu, oxazolu a imidazolu. V další části teoretické části je provedeno srovnání fundamentálních vlastností takovýchto chromoforů, především z pohledu efektivity vnitřního přenosu náboje. V poslední kapitole je shrnuta navržená syntetická cesta vedoucí ke klíčovému intermediátu: 2-bromthiazol-4,5-dikarbonitrilu **60**. Teoretická část je logicky členěna, přehledně zpracována a doplněna vhodnými obrázky, schémata a tabulkami ilustrujícími diskutovanou problematiku, citace jsou vhodně umístěny a jsou aktuální.

V experimentální části DP jsou přehledně popsány obecné metody, přípravy prekurzorů (thiazolu **60** a π -můstků) jakožto cílových sloučenin **2a–g** včetně plné spektrální charakterizace. Ve výsledcích a diskuzi je podrobně diskutována syntéza vedoucí k intermediátům a cílovým chromoforům. Celkem bylo připraveno sedm derivátů, byť zadání vyžadovalo přípravu pouze pěti derivátů. Strukturní analýza byla provedena pomocí $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ 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. Efektivita přenosu náboje byla studována prostřednictvím UV/Vis absorpčních spekter a výsledky thiazolových derivátů **2a–g** byly kriticky srovnány s imidazolovou sérií **1a–f**. Ze získaných výsledků byly vyvozeny vztahy typu struktura-vlastnosti.

Bc. Š. Švecová zpracovala téma své DP na vysoké úrovni, v rámci prováděné laboratorní činnosti prokázala své syntetické schopnosti, samostatnost při řešení výzkumných úkolů a rutinně zvládla práci s organokovými činidly (především cross-coupling reakce), metodiku práce na vakuu-inertní lince a další pokročilé čistící a analytické operace. Interpretace získaných dat byla provedena samostatně. Její DP představuje povedené vědecké dílo, které je po doplnění elektrochemických výsledků a DFT kalkulací prakticky připraveno k publikování ve formě

vědeckého článku. Velice oceňuji provedené kritické srovnání obou typů pětičlenných heterocyklických akceptorních jednotek na bázi thiazolu a imidazolu.

Vzhledem k výše uvedenému, diplomovou práci Bc. Š. Švecové 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