

Oponentský posudek diplomové práce Bc. Jaromíra Vargy

„Elektronové vlastnosti imidazolu a imidazolia v push-pull systémech“

Oponent: Ing. Kamil Dudek, Ph.D.
Explosia, a.s.
Výzkumný ústav průmyslové chemie
Semtín 107
530 02 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 překlepů, které se běžně v těchto pracích vyskytují.

V úvodu diplomové práce je popsán cíl diplomové práce zabývající se problematikou přípravy a fyzikálně-chemickými vlastnostmi substituovaných 1-alkyl-1H-imidazolů a 1,3-dialkyl-1H-imidazolií obsahujících substituenty s π -konjugovaným systémem. V další části nazvané Obecná příprava a vlastnosti substituovaných 1-alkyl-1H-imidazolů diplomant detailně popisuje všechny možné metody přípravy 1-Alkyl-1H-imidazolů substituovaných v polohách C2, C4 a C5 a jejich kombinací. Poslední část rešerše je zaměřena na obecnou přípravu a vlastnosti substituovaných 1,3-dialkyl-1H-imidazolií. Diplomantovi se podařilo vypracovat rešerši, která obsahuje velké množství podstatných informací a hodnotím ji jako kvalitní.

Experimentální část je rozdělena do několika kapitol. V úvodu jsou detailně popsány **přípravy 1H-imidazolového skeletu ve 3 modifikacích**, které byly v další fázi použity jako vstupní látky pro jednotlivé reakce. První syntetická část spočívala v přípravě a intenzifikaci reakčních podmínek organokovových a halogenovaných prekurzorů. Následující etapa pojednává o vlastní cross couplingové reakci za vzniku C-C vazeb. Poslední syntetická sekvence byla zaměřena na kvarternizaci připravených 1-methyl-4,5-difenyl-2-substituovaných 1H-imidazolových chromoforů **Ic; IVa; Va,b; VIa,b** na odpovídající deriváty 4,5-difenyl-1-methyl-2-substituovaných 1H-imidazoliových chromoforů **VIIa-VIIg**.

K experimentální části mám následující připomínky a otázky:

- V jednotlivých kapitolách popisujete přípravu jednotlivých sloučenin a výsledky strukturální analýzy připravených sloučenin. V některých případech jste sloučeninu analyzoval „celou“ škálou metod a některé nikoliv, např. občas nemáte uvedené výsledky elementární analýzy. Můžete vysvětlit proč?
- Některé sloučeniny charakterizujete pomocí bodu tání, ale v některých případech nemáte uveden odkaz na literární hodnotu (např. kap. 3.6.1 – 3.6.3). Znamená to tedy, že daná sloučenina nemá popsanou literární hodnotu bodu tání nebo se jedná o novou sloučeninu?

V kapitole Výsledky a diskuse jsou přehledně zhodnoceny jednotlivé syntézy a strukturální analýzy studovaných látek a uvedené výsledky jsou diskutovány a zhodnoceny správně. K této části mám tyto připomínky:

- V kap. 4.1.2 shrnujete výsledky přípravy sloučeniny IIa. Pro přípravu jste použil 2 různé halogenační činidla, jejich množství a různé reakční teploty. V případě použití N-bromsukcinimidu a při teplotě 25°C jste nezískal ani v jednom případě žádaný produkt. Můžete vysvětlit příčiny tohoto neúspěchu?
- V kap. 4.1.3 jste použil stejné číslování jak pro terminální acetyly ve schématu 44, tak pro deriváty boronových kyselin ve schématu 45.

V kapitole Závěr diplomant shrnuje dosažené výsledky během svého výzkumu, kde uvádí, že se mu podařilo připravit dvě série push-pull chromoforů s centrálním 1*H*-imidazolovým a 1*H*-imidazoliovým motivem. Celkem bylo připraveno osm 2- π -substituovaných 4,5-difenyl-1-methyl-1*H*-imidazolů. Rovněž se mu podařilo připravit šest odpovídajících kvarternizovaných sloučenin na bázi 1*H*-imidazolium-jodidů.

Také zde hodnotí strukturní závislost délky π -systému a druhu donorního substituentu na změnu vlnové délky nejdouhovlnějších pásů absorpčního maxima. S odkazem na zjištěné skutečnosti v rámci UV-Vis absorpční spektroskopie konstatuje, že připravené chromofory vytváří základní předpoklady pro budoucí užití jako materiály v oblasti elektrotechnického průmyslu.

Diplomant splnil zadání diplomové práce v plném rozsahu (připravit alespoň 6 2-substituovaných 4,5-difenyl-1-methylimidazolů a odpovídající 1,3-dimethylimidazolia). Diplomantem předkládaná diplomová práce se zabývá velice zajímavou oblastí organické chemie, je velmi dobře vypracovaná. Diplomant prokázal znalost studované problematiky, je schopen dobře popsat vlastní procesy a hlavně provést vyhodnocení získaných výsledků s výstižnou diskusí.

Doporučuji předloženou diplomovou práci přijmout k obhajobě a hodnotím ji **v ý b o r n ě.**

V Pardubicích 26. 5. 2017

Ing. Kamil Dudek, Ph.D.

