



Posudek školitele na disertační práci

Disertant: Ing. Milan Klikar

Název práce: Deriváty malonové kyseliny jako akceptorní části push-pull chromoforů

Ing. Milan Klikar pracuje pod mým vedením již od dob své bakalářské práce. Jeho disertační práce navazuje na problematiku, jejíž řešení započalo již během jeho diplomové práce, konkrétně využití derivátů kyseliny propandiové jako elektron akceptorních součástí push-pull molekul. Toto téma je v souladu s tematikou mé pracovní skupiny a rovněž jej lze z pohledu současného stavu poznání v oblasti push-pull molekul považovat za žhavé. Je až s podivem, že přes velkou popularitu malonové kyseliny a jejich derivátů v oblasti organické elektroniky jim nebyla věnována systematická pozornost.

Disertant se v teoretické části práce zaměřil na význam jednotlivých derivátů, způsobu jejich zavedení do push-pull molekul a rovněž možnostem aplikace jednotlivých derivátů. Rešeršní část je velice zevrubná a přehledná, je sepsána kultivovaným způsobem a je vhodně doplněna o schémata, obrázky a tabulky. Jako školitel jsem v ní navrhnul pouze minimum oprav a doplnění. Výše uvedené skutečnosti svědčí o disertantově výrazné vyspělosti při práci s odbornou literaturou, což jako školitel musím rovněž ocenit při sepisování společného přehledového článku uveřejněného v časopise *Chem. Rec.* **2016**, *16*, 1886-1905, kde je disertant prvním autorem a výraznou měrou se podílel na konečné podobě článku.

V praktické části disertace se Ing. Klikar věnoval nejprve zhodnocení elektron akceptorních vlastností série osmi derivátů kyseliny malonové, které připojil na vybraný elektron donor v podobě nového a moderního heterocyklického systému na bázi 2-(*N*-piperidinyl)thiofenu, tzv. PIT donor. Celkem připravil třicet dva push-pull derivátů se systematicky obměňovanou strukturou, jejichž vlastnosti studoval pomocí moderních technik RTG analýzy, DSC měření, elektrochemie, elektronových absorpčních spekter a doplnil DFT kalkulacemi. Interpretaci všech naměřených dat provedl disertant zcela samostatně, data vhodným způsobem srovnal se současným stavem poznání a školiteli prakticky předkládal své výsledky ve formě odborného vědeckého článku, který byl sepsán v jazyce anglickém. Tyto vědecké aspekty musím jako školitel dále vyzdvihnout, jelikož ze své praxe vím, že jsou více než nadstandardní pro běžného PhD studenta! Výsledky této práce byly publikovány v časopise *Eur. J. Org. Chem.* **2017**, *2017*, 2764-2779.

Vybrané deriváty kyseliny malonové, konkrétně malondinitril a kyselinu barbiturovou pak Ing. Klikar využil při studiu vlivu strukturního uspořádání chromoforu (multipodality) na jeho (ne)lineární optické vlastnosti. Připravil další řadu derivátů s lineárním, kvadrupolárním a tripodálním uspořádáním

(celkem dvacet čtyři sloučenin), které systematicky zkoumal výše uvedenými metodikami a výsledky velice kriticky a přehledně srovnal. Tato část jeho disertační práce byla publikována v časopise *New J. Chem.* **2017**, 41, 1459-1472.

Obě výše uvedené práce lze v oblasti push-pull molekul společně považovat za edukativního průvodce či jakýsi návod při výběru vhodného derivátu kyseliny malonové a rozložení chromoforu pro zamýšlenou oblast organické elektroniky.

Ing. Klikar ve své disertační práci skromně opomenul své další podstatné vědecké dílo, které vypracoval během pouze tříměsíční doktorské stáže na spolupracujícím pracovišti ve Francii, pod společným vedením s prof. S. Achellem. V tomto díle se zaměřil na přenos vnitřního náboje přes různé diazinové π -můstky. Tato práce byla publikována v prestižním časopise *J. Org. Chem.* **2017**, 82, 9435-9451.

Bylo mi více než potěšením sledovat jak se z Ing. Klikara stal během několika málo let nejzručnější syntetik, kterého jsem prozatím ve své skupině vychoval. Již během svého studia proto nastoupil na pozici vědeckého pracovníka, ve skupině se věnuje termálnímu chování organických molekul pomocí DSC a rovněž jejich elektrochemickému studiu pomocí cyklické voltametrie. Tuto činnost jasně dokládají jeho další publikační výstupy (čtyři publikace).

Vedle jeho excelentní vědecké práce však oceňuji i jeho pedagogický a přátelský přístup ke studentům, běžně školil na bakalářské úrovni a pomáhal ostatním diplomantům i doktorandům.

Na základě výše uvedeného lze zhodnotit Ing. Milana Klikara jako vyzrálou vědeckou i pedagogickou osobnost, jeho disertaci jako nadstandardní vědecké dílo a je mi potěšením konstatovat že ji vřele

DOPORUČUJI

k obhajobě na Fakultě chemicko-technologické, Univerzity Pardubice a za podmínky úspěšné obhajoby rovněž doporučuji Ing. M. Klikarovi udělit titul

„philosophiae doctor, Ph.D.“.

V Pardubicích 20. září 2017


Doc. Ing. Filip Bureš, Ph.D.

Ústav organické chemie a technologie

Fakulta chemicko-technologická

Univerzita Pardubice

Studentská 573

Pardubice

53210

<http://bures.upce.cz>

Stanovisko vedoucího školícího pracoviště k disertační práci

Ing. Milana Klikara

Konstatuji, že Ing. Milan Klikar splnil veškeré své povinnosti a náležitosti vyplývající ze studijního řádu, které se týkají doktorandského studia. K obhajobě předložil disertační práci s názvem:

„Deriváty malonové kyseliny jako akceptorní části push-pull chromoforů.“

Jeho školitelem je doc. Ing. Filip Bureš, Ph.D.

Předložená disertační práce po formální stránce odpovídá požadavkům článku 15 současně platného Studijního a zkušebního řádu Univerzity Pardubice. Disertant Ing. Milan Klikar je spoluautorem 10 prací uveřejněných v impaktovaných časopisech, přičemž 2 práce tematicky souvisejí s obsahem jeho disertační práce. Disertant přednesl, diskutoval a obhájil výsledky disertační práce na schůzi akademických pracovníků Ústavu organické chemie a technologie dne 6. října 2017.

Na základě jeho prezentace a uvedených skutečností **d o p o r u č u j i** disertační práci Ing. Milana Klikara k obhajobě, jako podklad k získání titulu Ph.D.



prof. Ing. Miloš Sedlák, DrSc.

vedoucí Ústavu organické chemie a technologie

V Pardubicích 6. října 2017