

## **Oponentský posudek diplomové práce Bc. Pavla Šimona**

### **„1,3,5-Triazin jako elektronakceptorní část push-pull systémů“**

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 výstižným způsobem s logickým řazením kapitol. V textu nebyly nalezeny žádné významné gramatické chyby, pouze pár překlepů, které se běžně v těchto pracích vyskytují.

V úvodu diplomové práce je popsán cíl diplomové práce - syntéza a studium fyzikálně chemických vlastností nových push-pull chromoforů s 1,3,5-triazinovým skeletem. V další části nazvané Push-pull chromofory diplomant detailně popisuje, jak takové molekuly vypadají a fungují. Dále informuje o diazinech v push-pull systémech a tripodálních push-pull sloučeninách 1,3,5-triazinu. Poslední část teoretické části je zaměřena na obecnou syntézu modelových sloučenin - 2,4-difenyl-1,3,5-triazinů, Crosscouplingové reakce a Knoevenagelovy kondenzace. Diplomantovi se podařilo vypracovat rešerši, která obsahuje velké množství podstatných informací a hodnotím ji jako kvalitní.

Experimentální část je rozdělena do 3 kapitol. V úvodu jsou detailně popsány přípravy meziproductů M1, M2 a M3, které byly v další fázi společně s komerčně dostupnými sloučeninami K1 a K2 použity jako vstupní látky pro jednotlivé přípravy chromoforů CH1 – CH9. Diplomant uvádí, že připravené sloučeniny měly různé konjugované systémy (1,4-fenyl, ethynylfenyl, bifenyl, fenylethynylfenyl, styryl, styrylfenyl, styrylethynylfenyl a ethenylstyryl) zakončené dimethylamino skupinou jako elektrondonorní částí, a současně všechny připravené sloučeniny byly charakterizovány všemi dostupnými analytickými metodami a jejich fyzikálně chemické vlastnosti byly dále studovány UV/VIS spektroskopií, DSC analýzou, cyklickou voltametrií a výpočetními semiempirickými metodami.

K Experimentální části mám následující připomínky a otázky:

- V jednotlivých kapitolách popisujete přípravu jednotlivých sloučenin a výsledky strukturní 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?

V kapitole Výsledky a diskuse jsou přehledně zhodnoceny jednotlivé syntézy a strukturní analýzy studovaných látek, jejich elektrochemické vlastnosti, výsledky UV/VIS spektroskopie a srovnání elektronakceptorních vlastností připravených látek. Uvedené výsledky jsou diskutovány a zhodnoceny správně.

Ke kapitole Výsledky a diskuse mám tyto připomínky a otázky:

- V kap. 3.1 uvádíte možné vysvětlení nízkého výtěžku sloučeniny M1 oproti literárním údajům, kde uvádíte, že bylo použito 25x větší množství. Z vašeho popisu není jednoznačné, kdo použil větší množství, jestli vy nebo literární zdroj.

- V kap. 3.2 shrnujete výsledky NMR analýzy. U analýzy  $^{13}\text{C}$  NMR spektra sloučeniny CH 6 (přiřazení jednotlivých signálů konkrétním uhlíkům) uvádíte, že se jedná o hrubý odhad. Pomocí jaké NMR techniky by šlo jednoznačně toto přiřazení provést?
- Jednou z vlastností, která podmiňuje využitelnost připravených chromoforů v praxi je rozpustnost v organických rozpouštědlech. Jaký vliv mělo prodlužování konjugovaného řetězce právě na rozpustnost studovaných struktur.

V kapitole Závěr diplomant shrnuje dosažené výsledky během svého výzkumu, kde uvádí, že se mu podařilo připravit 9 chromoforů, z toho 8 dosud v literatuře nepopsaných, kde 1,3,5-triazin vystupoval jako elektronakceptorní část push-pull systémů. U připravených push-pull molekul popisuje vliv konjugovaného systému na optické a elektrochemické vlastnosti. Bylo zjištěno, že  $\pi$ -systém mezi elektronakceptorem a elektrondonorem má významný vliv na fyzikálně chemické vlastnosti chromoforů. Závěrem diplomant konstatuje, že z dosažených výsledků lze připravené chromofory označit jako slibné kandidáty pro optoelektronické aplikace.

Diplomant splnil zadání diplomové práce v plném rozsahu (připravit alespoň 7 derivátů 1,3,5-triazinu jako elektronakceptorní části). Diplomantem předkládaná diplomová práce se zabývá velice zajímavou oblastí organické chemie a 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 výborně.**

V Pardubicích 29. 5. 2017

Ing. Kamil Dudek, Ph.D.

