

Posudek oponenta diplomové práce

Autorka: **Bc. Veronika Jelínková**

Téma: **„Tetrathienylthiofen jako základní elektronově bohatý skelet π -konjugovaných systémů“**

Školitel: Prof. Ing. Filip Bureš, Ph.D.

Předložená diplomová práce Bc. Veroniky Jelínkové se zabývá syntézou tetrathienylthiofenu (TTT) a jeho následnými modifikacemi, které mají za účel ladění elektronických vlastností TTT skeletu. Nově připravené sloučeniny jsou tak slibnými kandidáty pro uplatnění ve velice aktuálním oboru, organické elektronice. Práce je členěna do čtyř přibližně stejně velkých částí, kterými jsou literární rešerše (13 stran), experimentální část (9 stran), výsledky a diskuse (9 stran), a je rozšířena přílohou s NMR a MS spektry (9 stran). Kromě obvyklého úvodu, závěru a seznamu literatury je práce navíc vhodně doplněna seznamem použitých zkratek, obrázků, schémat a příloh.

Samotná práce je psána klasickým způsobem a má logickou návaznost jednotlivých kapitol. Vizuální stránka působí hladce, veškerá grafika je řádně označena a koreluje s popisem v textu. Také reakční schémata jsou kreslena s pečlivostí a jednotným stylem.

V teoretické části je čtenář hlouběji seznámen s problematikou derivátů TTT – jejich syntézou, vlastnostmi, reaktivitou, a možnými modifikacemi, které zejména v uspořádání čtyř periferních větví s akceptorními substituenty je možné využít na poli organické elektroniky (OSC, OLED, OFET).

Experimentální část podrobně popisuje přípravu jednotlivých derivátů, přičemž na základě uvedených postupů není pochyb o reprodukovatelnosti výsledků. Veškeré syntetizované sloučeniny jsou plně charakterizovány pomocí NMR, (HR)MS a případných dalších metod.

V diskuzi je pak pozornost věnována dvěma reakčním cestám vedoucím z perbromthiofenu k základnímu TTT skeletu, přičemž optimální Stilleho cross-coupling poskytl výrazně vyšší výtěžek, než uvádí literatura (86 % vs 40 %). Úspěšná syntéza je pak výchozím krokem pro funkcionalizaci TTT derivátu různými akceptorními i donorními skupinami. Autorka práce tak musela rutinně zvládnout práci s organokovovými činidly, poradit si s obtížnou izolací kýžených produktů od parciálně zreagovaných, i s interpretací analytických dat. V souladu se zadáním práce tak byl připraven základní TTT i jeho další čtyři dosud nepublikované modifikace. Oceňuji, že nad rámec zadání bylo provedeno základní stanovení elektronických vlastností připravených derivátů pomocí semi-empirické metody PM7.

Diplomová práce cituje 24 literárních zdrojů převážně z poslední dekády, což znovu dokládá aktuálnost dané tematiky. Počet citací je spíše u dolní hranice pro takovýto typ práce; vzhledem k poměrně úzce zaměřené problematice je takovýto rozsah akceptovatelný.

Literární odkazy jsou citované jednotně a v souladu s příslušnou normou, vzhledem k jejich počtu ale mohla být kladena větší pečlivost při uvádění jmen autorů. Považuji za velmi nestandardní zejména následující skutečnosti:

- V citaci [22] chybí první autor (A. Dessi)
- V citaci [14] chybí 3 autoři (první dva a poslední: S. J. Roberts-Bleming, G. L. Davies, F. Ponticelli)
- V citaci [23] chybí posledních pět autorů, nebo alespoň et al. (O. Pytela, G. Wei, H. Liu, F. Bureš, Z. Jiang); zarážející je právě chybějící jméno vedoucího práce
- Citaci [19] nelze dohledat, neboť je uvedena jako „J. Perkinson, No Title, 2007“

V práci se v obvyklé míře vyskytují drobné stylistické překlepy, které však nijak nesnižují její kvalitu či přehlednost a srozumitelnost textu. Jedná se např. o procentuální zastoupení složek ve směsi celkově přesahujícím 100% (Schéma 17, str. 40), nechtěné automatické opravy („gas chromatography – mass spektroskopie“ na str. 13) či záměna „metoxy“ místo methoxy u sloučenin **50**, **59** a **60**. Největším prohřeškem jsou ale zjevně chybně uvedené frekvence u *veškerých* ^{13}C a ^{119}Sn NMR spekter, ať už v experimentální části nebo v příloze; je vždy uvedena frekvence odpovídající ^1H .

K práci mám následující otázky a náměty k diskusi:

- 1) V obecných metodách není specifikováno ^{119}Sn NMR. Byla naměřená spektra kalibrována?
- 2) Při chromatografické izolaci sloučeniny **47** je uvedená hodnota $R_F = 0,01$ v DCM. Byla sloučenina s tímto R_F izolována opravdu použitím pouze čistého DCM jako mobilní fáze, nebo došlo k použití gradientové eluce?
- 3) Při měření bodů tání se obvykle udává jejich rozsah. Zde je u všech sloučenin tvořen jedinou hodnotou, což zřejmě znamená, že teplota tání byla měřena pomocí DSC. Tato metoda ale není nikde zmíněna. U derivátu **47** údaj o teplotě tání chybí.
- 4) Pokus o halogenaci derivátu **1** (TTT) popisuje Schéma 18, nicméně podrobnější podmínky (ekvivalenty činidel, reakční doba) nejsou diskutovány. Mohl by se podíl tetrabromovaného derivátu zvýšit např. použitím THF jako rozpouštědla? Z rešerše vyplývá, že strukturně obdobný derivát **7c** byl tetrabromován v THF ve výtěžku 96 %.

Závěr:

Cíle diplomové práce byly naplněny beze zbytku. Uvedené připomínky nijak neovlivňují hodnotu zjištěných výsledků ani nesnižují množství vykonané práce, a samotnou diplomovou práci Bc. Veroniky Jelínkové

doporučuji k obhajobě

a hodnotím jí známkou

výborně-m.

V Praze, 23. 5. 2018

Ing. Břetislav Brož, Ph. D.

Brož