

Posudek na diplomovou práci

Název práce: Syntéza π -elektronových oligomerů a studium jejich vlastností
Jméno autora(ky): Tomáš Warzecha
Oponent Prof. RNDr. Martin Kotora, CSc

Předložená práce Bc. Tomáše Warzechy si kladla za cíl studium přípravu π -elektronových oligomerů a jejich donor-akceptorových vlastností. Tato práce byla součástí projektů studovaných v laboratoři školitele (RNDr. Ivo Starý, CSc).

V úvodu je podán přehled všech možných mezimolekulových nekovalentních interakcí. Přínosné by však bylo kdyby u každé popisované interakce byl ukázán i typický příklad.

Poněkud mlhavá je část týkající se teoretických výpočtů interakcí, kdy není jasný podíl diplomanta na výpočtech, tedy pokud vůbec nějaký byl. V rámci řešení projektu bylo nejprve nutné připravit vhodné výchozí látky, se kterými měly být prováděno samotné studium interakčních vlastností. Syntéza těchto látek byla založena na klasických postupech. Nicméně, tak jako vždy, se ukázalo, že to co funguje na papíře nemusí fungovat v baňce. To se týká zvláště případů, kdy si může konkurovat intermolekulární reakce s intramolekulární. Jinak z popisovaného postupu práce vyplývá, že reakce probíhaly podle očekávání.

Část obsahující studium interakce sloučeniny **53** a **54** ukázaná v grafu 1 jasně ukazuje, že k donor-akceptorové interakci došlo. Není však jasně popsáno, kromě vágních nic neříkajících frází, co vyplývá z teplotní závislosti uvedené v grafu 2. Podobný závěr je možné udělat z ^1H NMR studie interakcí mezi sloučeninami **53** a **54**. Ze spektrálních dat, na základě změn v posunech vybraných vodíkových signálů jasně plývá, že k interakci dochází a vznikají příslušné komplexy jak při molárním poměru 2:1, tak 1:2. Nicméně chybí jakákoliv interpretace výsledků měření. Jedná se o intermolekulární či intramolekulární komplexy? Na začátku kapitoly 3 jsou sice uvedeny teoretické výpočty vazebných energií donor-akceptorových interakcí, chybí však jejich srovnání s experimentálně získanými daty. Toto srovnání by mělo být završením diplomové práce. Vzhledem k tomu, že tyto výsledky zřejmě nejsou k dispozici je přítomnost části zabývající se teoretickými výpočty bezpředmětná.

Závěrem je možné konstatovat, že diplomant zcela jistě odvedl velký kus práce a tak otevřel cestu k syntéze skupiny látek, které mohou sloužit jako základní modelové sloučeniny pro podrobnější studium donor-akceptorových interakcí.

Dotazy a připomínky

1. Str. 45, odst. 1, Není překvapující, že redukce azidové skupiny ve sloučenině **30** vodíkem na Pd/C neprobíhala vezme-li se v úvahu, že obsahuje též trojnou vazbu. Spíš je překvapující, že diplomat nenapsal co vznikalo. Neredukovala se náhodou trojná vazba na dvojnou?
2. Proč nebyly experimentálně určena či alespoň navržena struktura donor-akceptorových komplexů?
3. Proč nebyly experimentálně změřeny interakční (komplexační) energie. Když podle teoretických výpočtů by měly dosahovat poměrně vysokých hodnot?

Předloženou práci doporučuji k obhajobě.

Hodnocení: velmi dobře

V Praze dne 30.8.2012

.....
podpis oponenta