

Posudek na diplomovou práci

Název práce: Reverzibilní interakce derivátů pyrazinu a dihydropyrazinu
s fotoluminiscenčními vlastnostmi

Jméno autora(ky): Bc. Radek Coufal

Oponent prof. Jana Roithová

Diplomová práce Bc. Radka Coufala se zabývá studiem hemiacetalizace a hydratace pyrazyl(trifluormethyl)ketonu a možnostmi využití 1,2-dihydropyrazinu. V první části věnované hemiacetalizaci a hydrataci ketonu je využito několik přístupů na popis termodynamiky a kinetiky daného procesu. Autor zjistil, že hydratace i hemiacetalizace jsou exoergické procesy a pomocí hezkých NMR experimentů s přenosem magnetizace popsal i kinetiku vzniku a zániku vybraných hemiacetalů. K této části diplomové práce mám následující otázky:

1. Proč u experimentálně zjištěných hodnot ΔH , ΔS a ΔG není udán interval spolehlivosti?
2. Str. 32: Autor spekuluje na základě experimentálně zjištěného ΔS o stabilizaci hemiacetalu vytvořeného reakcí s 2-methoxyethanolem vodíkovou vazbou. Odpovídá i teoreticky zjištěné ΔS dané spekulaci? Jaký je teoreticky spočítaný energetický rozdíl mezi strukturou s vodíkovou vazbou a bez vodíkové vazby? Jaký je vliv rozpouštědla?
3. Mechanismus hemiacetalizace: Není mi jasné, proč jsou energetické bariéry udávány při 0 K, když byl experiment prováděn při 298 K. Jaké jsou hodnoty u 298 K? Pro výpočty v rozpouštědle pomocí "single-point" výpočtu se berou termodynamické hodnoty vypočítané v plynné fázi. Uvedení hodnot bez započítání termodynamických korekcí (zejména při porovnání uvedených výsledků v plynné fázi a v ACN) zavání účelovostí. U popisu výpočtů na straně 64 není jasné, proč se autor rozhodl udat ne zcela relevantní výsledky, když provedl výpočty, které poskytují všechny korekce.
4. Chybí mi porovnání hydratace a hemiacetalizace. Co se stane, pokud by daná směs ketonu a alkoholu byla vystavena vlhkosti?

Druhá část diplomové práce je věnována možnosti využití 1,2-dihydropyrazinu ke komplexaci kationtů kovů. Autor studoval fluorescenční spektra 1,2-dihydropyrazin-3,5-dimethylkarboxylátu a ukázal, že rozpouštědlo a přítomné kationty kovů mají vliv je shášení fluorescence a také na posun vlnové délky emisního maxima. Totéž ukázal i pro dva syntetizované makrocycly obsahující 1,2-dihydropyrazin. Naprosto mi chybí srovnání s vlastnostmi nehydrogenovaných sloučenin. Jaké jsou fluorescenční spektra látek 5, 13 a 18? Jaké jsou vlastnosti těchto látek při studiu komplexace s kovy? Z textu není jasné, proč tato studie byla dělána, jestli jsou dané komplexační a spektrální vlastnosti unikátní. Úvod je napsaný dobře (až na chybějící zdůvodnění druhé části práce), experimentální část je také sepsána pečlivě, ale práce obsahuje nepříjemné množství překlepů a chyb. Autor provedl velké množství experimentů a také výpočtů a myslím, že práce ukazuje jeho velké znalosti a dovednosti.

Předloženou práci doporučuji k obhajobě:

Hodnocení: výborně

V Praze dne 5. 9. 2014

Podpis oponenta