

Posudek diplomové práce Michaely Fridrichové
„Nové materiály pro generování druhé harmonické frekvence –
příprava a studium solí derivátů biguanidu“

Autorka předložené práce ve svém úvodu netradičně entuziastickým věnováním vyjadřuje respekt vůči chemii a lidskému poznání vůbec, nicméně sama přináší reprezentativní soubor dat, čísel a nových poznatků, jež nepochybně hodlá zveřejnit (a dle mne publikovatelné jsou). Tak je však zvykem v přírodních vědách, v poznání hmotného světa.

Práce programově navazuje na výzkum přípravy a studie nových materiálů, pěstovaných na katedře anorganické chemie PŘFUK, konkrétně na použití v nelineární optice (NLO), což je téma atraktivní a veskrze aktuální.

V úvodu je stručná, srozumitelná informace o NLO – materiálech a principu generování druhé harmonické frekvence, vybraných elektronově bohatých bází a zvolených kyselin pro tvorbu odpovídajících solí. V práci se dále popisuje příprava vybraných derivátů fenylobiguanidu. Získané produkty byly analyzovány a charakterizovány metodami NMR, MS, teplotou tání a zejména FTIR a FT Ramanovými spektry. U tří těchto látek (včetně chloridu) byla určena struktura z rentgenové analýzy monokrystalu.

Autorka připravila 17 nových solí, jejichž stechiometrii potvrzovala elementární analýza a charakterizovala infračervená a Ramanova spektra. Vibrační spektra guanylmočoviny byla detailně interpretována na základě kvantově-chemických výpočtů izolované molekuly jednou protonizovaného kationu guanylmočoviny. U 5 z připravených solí byla provedena rentgenová strukturní analýza. Všechny strukturní údaje byly zevrubně popsány a diskutovány.

Ze studia nelineárních optických vlastností vyplynulo, že byly získány 4 látky s vyšší SHG (generování druhé harmonické frekvence), zejména v případě fosforitanu guanylmočoviny, čímž se otevírají v tématu další možnosti zkoumání.

Závěr práce je lapidární, věcně a střídavě hodnotící dosažené výsledky v meritu aplikace v nelineární optice.

Práce je sepsána jasně, srozumitelně, po formální a technické stránce vypravena perfektně, doprovázená názornými obrázky. Pouze elektronické záznamy spekter v důsledku mnoha natěsnaných spektrálních pásů a jejich číselném označení vlnočtů ztěžují identifikaci maxim.

K práci mám následující poznámky, dotazy či připomínky:

- str. 43 – podle jakého zdroje byly ve vibračních spektrech přiřazeny pásy fosforitanu? Je nějaké vysvětlení pro nízkou intenzitu pásů ν P-H v Ramanově spektru pnH_2PO_3 a stejně tak ve spektru $(pn)_2HPO_3$ (str. 44)?
- str. 48 – v přiřazení spektrálních pásů $\nu_4 PO_4$ bych doporučil větší opatrnost, protože v částici $H_2PO_4^-$ se s největší pravděpodobností snižuje symetrie T_d a snímá tak degenerace vibračních modů,
- str. 56 – stejný dotaz ohledně přiřazení jako na str. 43. Zde je ν P-H signifikantní.
- str. 65 – schází zmínka o přípravě $(quin)_2tar_2 \cdot 2H_2O$,
- str. 73 – 74 poměrně intenzivní pás $\nu_1 NO_3$, původně zakázaný v IČ spektru svědčí o poklesu symetrie NO_3 částice z D_{3h} , jinak přiřazení dusičnanových modů je odpovídající,
- str. 81- 82 přiřazení spektrálních pásů fosforečnanu $H_2PO_4^-$ je opět poněkud zjednodušené s ohledem na pokles tetraedrické symetrie částice.
- Transmisní a reflexní IČ spektra solí guanylmočoviny jsou ve velmi dobré shodě.

Kam zařadit sloučeniny $guNO_3$ a guH_2PO_4 ? Jde o již známé nebo nové látky?

Uvedené poznámky, dotazy či připomínky nijak nesnižují úroveň a přínos oponované práce Michaely Fridrichové. Tato diplomová práce, jak jsem se již úvodem zmínil, přináší nové poznatky v aktuální problematice a svým rozsahem bohatě splňuje požadavky na ni kladené, proto ji plně doporučuji k úspěšnému oponentnímu řízení.

V Praze 7. září 2007.

Doc. RNDr. Bohuslav Strauch, CSc