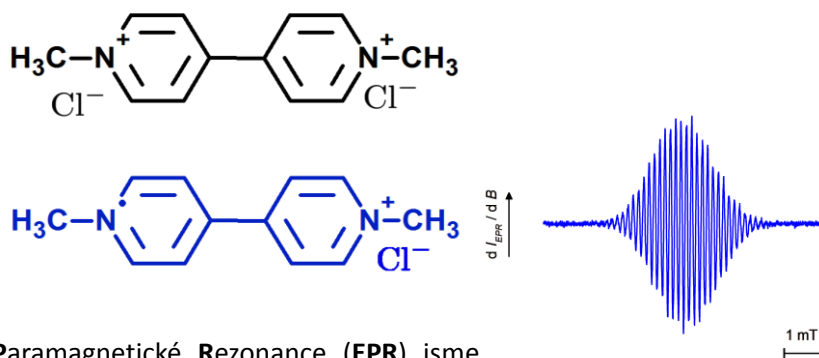


DIPLOMOVÁ PRÁCE

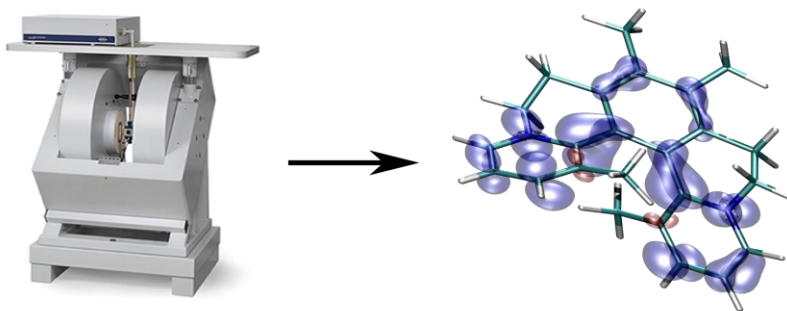
Studium oxidačně-redukčních procesů látek viologenového typu pomocí spojení EPR spektroskopie a elektrochemie.

Školitel: Ing. Ján Tarábek, PhD., Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

Viologeny jsou deriváty bipyridinia vycházející ze základní sloučeniny N,N'-dimethyl-4,4'-bipyridinium dichloridu (paraquat), které vděčí za své jméno intenzivnímu **modrému zbarvení radikálu monokationtu**, vznikajícím po jednoelektronové redukci původního paraquatu:



Pomocí Elektronové Paramagnetické Rezonance (EPR) jsme schopni dokázat, že nepárový elektron je delokalizován po celém skeletu molekuly **radikál monokationtu**. V současné době je syntetizováno a studováno mnoho nových a složitějších látek příbuzných paraquatu. Tyto látky se totiž skvěle uplatňují jako **materiály** například **pro elektrochromní displeje**, jako redoxní mediátory, nebo jako “**molekulární dráty**” pro mikro-(nano-)elektroniku. Z toho důvodu je důležité znát **chování látek (jejich chemické a optické vlastnosti) viologenového typu během elektrochemické redukce**. EPR spektroskopie napomáhá při “rozluštění” struktury radikál monokationtů a identifikaci jejich následných chemických reakcí.



Práce bude zaměřena na:

- (1) seznámení se s technikou elektronové paramagnetické rezonance a její spojení s elektrochemií
- (2) identifikaci a určení struktury radikál kationtu různých typů bipyridinia při elektrochemické redukci, a to nejen pomocí EPR spektroskopie, ale i pomocí kvantově chemických výpočtů a UV-Vis-NIR spektroskopie, popř. s použitím dalších spektroskopických technik (např. NMR, MS)
- (3) návrh reakčních mechanismů elektrochemické redukce látek viologenového typu.