

Oponentský posudek disertační práce

ing. Zdeňka Eliáše

„Funkční organické koloranty“

Doktorská disertační práce ing. Zdeňka Eliáše se zabývá funkčními organickými koloranty na bázi rozpustných derivátů pyrrolinonového esteru a zkoumáním schopnosti fluorescence, především v tuhé fázi. Modifikace struktury, vedoucí ke změnám této schopnosti, byly pak ještě rozšířeny na podobné skupiny látek, a to methylydenpyrrolinony a isoindigoidní systémy.

Téma práce je aktuální, práce je vypracována na soudobé úrovni studia syntéz a vlastností příslušné skupiny funkčních organických kolorantů. Vedle důležitých teoretických poznatků, z nichž lze vyzdvihnout především popis dosud málo prozkoumané *O*-alkylace diketopyrrolo-pyrrolů je nutno zvláště ocenit praktický význam celé práce, směřující jasně k potenciálnímu využívání studovaných látek v optoelektronických zařízeních. V závěru jsou naznačeny možnosti dalšího studia předmětné oblasti, kde zvláště isoindigoidní struktury se zdají být velmi nadějně pro nové objevy.

Disertant připravil celkem 45 látek, z toho 10 bylo dříve popsanych, 35 byly originální sloučeniny.

Vysoce lze ocenit skutečnost, že dílčí výsledky byly průběžně publikovány a prezentovány na konferencích, takže v podstatě prošly „recenzním řízením“. Vlastní disertace je postavena na šesti kvalitních publikacích v impaktovaných časopisech, sedmá, vzniklá zřejmě během pobytu disertanta na University of Antwerp, je obsahově tématu disertace trochu vzdálenější. Všechny tvoří přílohu disertační práce a doprovodný text je s nimi vhodně propojen. Oponentovi disertace obvykle v takových případech nezbyvá mnoho prostoru ke kritice, neboť ke zpřesňování a vylepšování diskuse výsledků a vytváření závěrů došlo v průběhu publikačního procesu. Práce je napsána dobře a po obsahové ani formální stránce jí není mnoho co vytknout.

Drobné připomínky k disertační práci:

1. Překlepů, jazykových prohřešků resp. nepřesností není v práci mnoho, našel jsem je např. na stránkách 15, 26, 27, 30, 39 – nepovažuji ale za nutné je komentovat.
2. Na mnoha místech (str. 17, 22, 23, 27, 29 a j.) je odkaz na literaturu umístěn do textu nevhodně.
3. Analog fenylu není thiofen, ale thiofenyl (str. 15) !
4. Nedobře působí nejednotné psaní některých alkylů (etyl vs. ethyl), str. 49,50.

Další připomínky resp. náměty do diskuse:

1. Na str. 18 se uvádí, že výtěžku 95% bylo dosaženo při práci v malém měřítku a že je otázkou, zda bude výtěžek zachován i při převodu do většího měřítka. Proč? V důsledku možných ztrát při preparaci bych očekával spíše opak!

2. Při vlastních přípravách jednotlivých látek v předložené práci se preparativní výtěžky pohybovaly v širokém rozmezí (12,5 – 90,2%). Zajímala by mne alespoň přibližná reprodukovatelnost výtěžků jednotlivých syntéz a příp. možnost vytipování z hlediska výtěžků nejproblematictějších kroků (ev. i možnost určitého zobecnění takového rozboru). Toto by mohlo být hlavním bodem diskuse k tomuto posudku při obhajobě.

Závěr:

Disertační práce Ing. Zdeňka Eliáše splňuje všechny požadavky kladené na doktorské disertace. Autor prokázal schopnost samostatně vědecky pracovat a prezentovat výsledky vědecké veřejnosti. Práce vysoce překračuje obvyklou publikační činnost a jednoznačně ji doporučuji k obhajobě.

Praha, 28. března 2014


Prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

VŠCHT Praha



Posudek disertační práce „**Funkční organické koloranty**“ vypracovanou ing. Zdeňkem Eliášem.

Předložená disertační práce se zabývá funkčními organickými koloranty na bázi rozpustných derivátů pyrrolinonového esteru a zkoumáním jejich schopnosti fluorescence zejména v tuhé fázi. Práce má 85 stran + přílohy (tvořeny 7 publikací doktoranda týkající se tématu disertační práce) a skládá se z 5 kapitol : Úvodu, Teoretické části, Experimentální části, Diskuse výsledků a Závěru. Lze říci, že rozbor současného stavu problematiky disertační práce je na velmi dobré úrovni a použité metody řešení se jeví jako odpovídající z hlediska získání nových poznatků v oboru. Po obsahové ani formální stránce práci nelze mnoho co vytknout. Snad jen to, že by i přílohy mohly mít číslované stránky. Tyto by mohly být pak uvedeny v tabulce na str. 86, což by výrazně pomohlo při rychlé orientaci v disertační práci.

Téma práce je aktuální, práce je vypracována na soudobé úrovni studia syntéz a vlastností příslušné skupiny funkčních organických kolorantů. Disertant připravil velké množství látek, z nichž většina jsou originální sloučeniny. Ocenění zasluhuje skutečnost, že dílčí výsledky byly průběžně publikovány a prezentovány na konferencích. Disertace je tak postavena na sedmi publikacích v impaktovaných časopisech. Všechny tvoří přílohu disertační práce a doprovodný text je s nimi vhodně propojen. Díky tomu lze říci, že celá disertace již prošla připomínkovým řízením spojeným s přijetím jednotlivých částí k publikaci v příslušných časopisech.

K práci nemám žádné závažnější připomínky. Disertant prokázal znalosti v daném oboru a dále schopnost samostatně vědecky pracovat a prezentovat výsledky vědecké veřejnosti. Počet publikovaných prací disertanta vysoce překračuje obvyklou publikační činnost. Závěrem musím proto konstatovat, že předložená práce splňuje požadavky kladené na disertační práce a proto ji doporučuji k obhajobě.

V Praze dne 14. 4. 2014

Prof. Dr. Ing. Josef Krýsa

Oponentský posudek na doktorskou disertační práci Ing. Zdeňka Eliáše „Funkční organické koloranty“

Ve své disertační práci se Ing. Zdeněk Eliáš soustředil na modifikaci stávajících pigmentů na bázi diketopyrrolo-pyrrolů a methylyden-pyrrolinonů, se zaměřením na studium vlivu změny struktury na jejich spektrální vlastnosti (fluorescenci). Pozornost byla zaměřena především na výměnu fenylového jádra za thiofen, či alkylylaci dusíku pyrrolového jádra, případně karbonylového kyslíku. Tato alkylace se ukázala jako velice významný faktor nejen pro aplikace (zvýšení rozpustnosti), ale i pro změnu spektrálních vlastností (strukturní změny). Z naznačeného je vidět, že se jedná o velice aktuální a zajímavé téma se značným praktickým potenciálem.

Disertace obsahuje 86 značených stran a sedm kopií článků, na kterých se Ing. Eliáš autorsky podílel. Sestává z krátkého Úvodu, oproti ostatním kapitolám rozsáhlé Teoretické části, Experimentální části s popisem provedených syntéz, stručné Diskuse a krátkého Závěru. Obsahuje rovněž výčet autorových publikačních výstupů a dalších aktivit. Nepříliš šťastně zvolené číslování připravených sloučenin (směs písmen a číslic, míchání římských a arabských číslic), faktické i formální chyby, míchání vzorců a názvů či v některých případech chybné názvosloví přispělo k obtížné orientaci při čtení předložené práce. Lepší čitelnosti by také přispělo uvedení zkratk v seznamu v abecedním pořadí.

K práci mám řadu připomínek, které jsou zmíněny dále. Za hlavní nedostatek disertace považuji zestručnění diskuse a odkazování se v této části na přiložené kopie publikací. Disertace není typem práce, kde by tento postup byl obvyklý, na rozdíl např. od práce habilitační (komentovaný soubor publikací). To vše nutí čtenáře k neustálému listování a tím ke ztrátě souvislostí. Pokud by se omezila Teoretická část na kapitoly souvisejícími přímo s prací, mohl autor podrobně diskutovat veškeré zajímavé výsledky při zachování rozsahu disertace. Dále bych uvedl některé připomínky a dotazy.

Připomínky a dotazy faktického charakteru:

- názvy esterů se píše s pomlčkou
- místo EFS používat elektronakceptorní skupina (EWG) - více to odpovídá definici, obdobně pro NFS elektrondonorní skupina (EDG)
- chlorid železitý je pevná látka, proč tedy 3 ml (str. 49)
- syntéza 2.1.7 chybí alkylační činidlo

- v celé práci se neobjevilo ani jedno spektrum charakterizující syntetizované látky (Tabulka 4 má nízkou vypovídající hodnotu, lepší by bylo uvést spektra do přílohy)
- nebylo by lepší, vzhledem k reakční teplotě, dávkovat metyljodid postupně? (G-2m až G-6m)
- jaká byla použita stacionární fáze při čištění látky G-5m, G-6m? (sloupcová chromatografie nikoli kolonová)
- u kap. 2.2 Vybrané výsledky (?) postrádám jakýkoli komentář
- v kap. 3.1.1 zcela chybí kritické zhodnocení provedených syntéz, místo toho jsou diskutovány vlastnosti
- str. 62 konstatování o provedení porovnání DFT výpočtů s experimentálními daty je nedostatečné, kde jsou výsledky tohoto porovnání, graf apod.
- existují činidla, která by upřednostnila O-alkylaci?

Některé připomínky formálního charakteru:

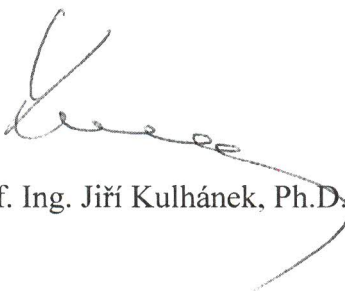
- za čísla názvů kapitol se nepíše tečka
- některé obrázky jsou schémata a měla by tak být označena
- chybně perimidin, p-metoxy, bromoacetát, kyano
- jména v odkazované literatuře bez diakritiky

Závěrem bych rád konstatoval, že autor provedl značný objem syntetické práce a prokázal schopnost samostatného řešení zadaného úkolu. Některé výsledky se jeví perspektivně pro uplatnění v praxi, jiné pak představují základ pro další výzkum. Posuzovaná práce Ing. Zdeňka Eliáše, i přes výše uvedené připomínky, splňuje požadavky kladené na tento typ prací a z tohoto důvodu ji

doporučiji

k obhajobě.

V Pardubicích 27.3.2014


prof. Ing. Jiří Kulhánek, Ph.D.