

Posudek diplomové práce „Syntéza a luminiscenční charakterizace substituovaných difenylaminino difenyl stilbenů“

Autor: Bc. Anna Mausová

Hodnotitel: Ing. Jan Vyňuchal, Ph.D.

Diplomantka v předkládané práci zaměřuje pozornost na deriváty difenylaminino difenyl stilbenů v souvislosti se studiem syntézy, optických vlastností a případnou finální aplikací v tzv. organické elektronice, která patří do progresivně se rozvíjejícího oboru.

V teoretické části je přehledně a chronologicky popsána studovaná problematika od základních principů barevnosti, jednofotonově i dvoufotonově excitované fluorescence až po fluorescence v pevném stavu včetně možností ovlivnění/ladění fluorescence. Dále je věnována pozornost přenosu náboje s důrazem na intramolekulární přenos náboje (ICT) v tzv. „push-pull“ systému. Velmi přehledně a rozsáhle je zpracována část ohledně uspořádání elektronodorních a elektronakceptorních skupin spojených prostřednictvím π -konjugovaného systému. Diplomová práce obsahuje celkem 139 literárních odkazů. V teoretické části není opomenuto případné praktické využití popisovaných materiálů v různých oblastech, např. solární články, laserové tiskárny, optické systémy, komunikační technologie, detekce iontů. Diskutovaný design molekul uvedený v teoretické části byl základem pro návrh molekul popisovaných v experimentální části práce.

Experimentální část práce navazuje na předchozí bakalářskou práci diplomanty. Celkem bylo připraveno šest derivátů difenylaminino difenyl stilbenů u kterých byla ponechána elektronodorních část a substituce byla provedena na části elektronakceptorní. V případě látky označené č. 8 diplomantka otestovala dvě syntetické cesty. Syntetizované látky spektrálně charakterizovala a výsledky srovnala. Zajímavé spektrální chování vykazuje látka označená DPA-DPS-DCV (v tabulce č. 15 je pravděpodobně chybně očíslovaná – místo čísla 12, má být uvedeno číslo látky 14).

K diplomové práci bych si dovolil položit následující otázky a doporučení:

- 1) Zvažovala diplomantka jiné syntetické postupy poskytující základní derivát DPA-DPS-CHO? Navržený a experimentálně ověřený postup vychází z tzv. Horner-Wadsworth-Emmonsovy reakce. Bylo by možné použít také Wittig, Heck, Suzuki reakci, případně Perkinovu reakci? Jaké výhody/nevýhody by případně jednotlivé syntetické postupy přinášely?
- 2) Řada sulfonovaných derivátů stilbenu náleží do skupiny průmyslově vyráběných látek označovaných jako tzv. „Opticky zjasňující prostředky (OZP)“. Tyto deriváty jsou vzhledem ke způsobu výroby symetrické. Je možné (případně jak) využít základní reakce výroby OZP také při přípravě derivátů diskutovaných v diplomové práci?
- 3) Přítomnost dvou fenylů ve struktuře stilbenu velmi pravděpodobně zabraňuje tzv. π - π stacking a s tím souvisejícímu zabránění zhášení fluorescence. Bylo by možné využít také $-\text{SO}_3\text{H}(\text{SO}_3\text{Na})$ skupinu navázanou na stilbenové části molekuly jako prostředek zabraňující π - π stacking, resp. zabránit zhášení fluorescence pomocí kvarterní amoniové sloučeniny v podobě $-\text{SO}_3\text{N}^+(\text{R})_4$?

- 4) V práci je uvedeno, že připravené sloučeniny budou charakterizovány na externím pracovišti. O jaké charakterizace se bude jednat a případně jak ovlivní popisovaná nízká stálost zamýšlené měření/charakterizace z pohledu fotofyzikálních vlastností?
- 5) U některých derivátů (např. látka označená 8 a 13) je popsána nízká stálost. U řady organických látek je možné stálosti (tepelné, stálosti na světle atd.) zvýšit zavedením halogenu (nejčastěji chloru – halogenované organické látky jsou stálé/neodbouratelné a z tohoto důvodu také v životním prostředí důsledně sledované). Jaký navrhuje diplomantka design struktury, případně syntézu s cílem zavést halogen do studovaných derivátů?
- 6) Při syntéze látky označené 8 nebylo možné sledovat průběh reakce a čistotu produktu pomocí TLC z důvodu stejných retenčních faktorů výchozí látky i produktu. Jaké jiné účinnější analytické metody je možné pro sledování průběhu a čistoty použít?
- 7) Na str. 85 jsou uvedeny kvantové výtěžky fluorescence v pevném stavu. Jakým způsobem byly kvantové výtěžky měřeny?
- 8) Práce je věnována substituci na straně elektronakceptorní části molekuly. Je zvažovaná substituce i na straně elektrondonorní?
- 9) Bylo záměrné vložit kapitolu s názvem „Cíl práce“ mezi teoretickou a experimentální část, případně došlo k chybě při vazbě dokumentu?
- 10) Vzhledem ke skutečnosti, že diplomantka je autorkou článku v prestižním časopise, je škoda, že samotný článek netvoří přílohu diplomové práce.

Práce je napsána přehledně a srozumitelně uvedené množství literárních odkazů svědčí o důkladné rešerši k dané problematice. Pečlivost a systematickosti je patrná také v experimentální části práce. Všechny produkty jsou vždy plně charakterizovány. Diplomantka sledovala průběhy reakcí, dokumentovala krystalizace. Je zřejmé, že velkou pozornost věnovala sloupcové chromatografii při čištění intermediátů a produktů. Navržené molekuly byly spektrálně charakterizovány a diplomantka hledala vzájemné souvislosti. Některé spektrální vlastnosti připravených látek jsou opravdu zajímavé. Autorka ve své práci sama výstižně uvádí, že látek vykazující fluorescence v dlouhovlnné oblasti je jako „šafránu“. Práce diplomantky vedla právě k rozšíření této oblasti. Je patrné, že diplomová práce navazuje na zajímavý směr skupiny školitele a není v možnostech jedné diplomové práce postihnout takto široce a podrobně popisovanou problematiku a to i s ohledem na podmínky pandemie panující v průběhu vzniku práce.

Zadání práce bylo splněno. Práce zahrnuje návrh molekul, syntézy, spektrální charakterizaci a dostává se i do oblasti tzv. krystalového inženýrství a s ohledem na publikační výstup, hodnotím práci známkou

výborně.

Ing. Jan Věňuchal, Ph.D.

Vedoucí výzkumu SBÚ PaB, Synthesia, a.s.