



ÚOCHB ^{AV}
^{ČR}
IOCB PRAGUE

Ústav organické chemie a biochemie
Akademie věd České republiky, v. v. i.
Institute of Organic Chemistry and Biochemistry
of the Czech Academy of Sciences

Posudek oponenta diplomové práce

Autor práce: **Bc. Jakub Štrojsa**
Téma: **Syntéza a optické vlastnosti tripodálních chromoforů na bázi trifenylaminu a karbazolu**
Vedoucí práce: **Ing. Jiří Tydlitát, Ph.D.**

Předložená diplomová práce Bc. Jakuba Štrojsy se zabývá přípravou nových aromatických chromoforů s centrálním atomem dusíku a jejich optickými a mechanochromními vlastnostmi. Agregací indukovaná emise (AIE) nabírá od přelomu tisíciletí na popularitě a díky širokému uplatnění cílových derivátů je dnes atraktivní oblastí nejen materiálové chemie. Zvolené téma proto hodnotím jako velmi aktuální.

Diplomová práce je sepsána klasickým způsobem a má logickou návaznost jednotlivých kapitol. Je členěna do čtyř standardních částí, a to na literární rešerši (26 stran), experimentální část (10 stran), výsledky a diskuzi (21 stran) a přílohu s NMR, MS a adsorpčními / emisními spektry připravených sloučenin (27 stran). Doplněna je obvyklým úvodem, závěrem, seznamem citované literatury i seznamem použitých zkratk – byť ten není seřazen podle abecedy, ale chronologicky dle výskytu v textu, což pokládám za méně vhodné. Práce obsahuje vysoký počet referencí: cituje 72 zdrojů, které jsou uvedeny správně, v jednotném stylu a podle platných norem.

V teoretické části je čtenář nejprve hlouběji seznámen s problematikou AIE, potom rešerše přechází ve výčet různorodých chromoforů (seřazených dle typu centrální jednotky) se zaměřením na jejich praktická využití, která jsou mnohdy zajímavá a nevšední. Komentovaná schémata příprav dotyčných derivátů jsou přehledná, vytvořena taktéž v jednotném stylu a korelují s popisem v textu. Na str. 18 autor uvádí „*Mechanochromní (piezochromní) luminiscenční materiály jsou schopny změnit barvu své emise na základě vyvinutí tlaku nebo jiné mechanické síly (mletí, drcení či tření).*“ Vzhledem k úzkému zaměření rešerše by zde zřejmě bylo na místě rozlišovat termíny piezoluminiscence, která se objevuje při stlačování nebo jiném nedestruktivním deformování materiálu, a triboluminiscence, která nastává (až) při jeho drcení, tříštění, lámání nebo obdobném mechanickém poškození.

Experimentální část potom popisuje přípravu cílových derivátů i klíčových meziproduktů, přičemž na základě uvedených postupů není pochyb o reprodukovatelnosti dosažených výsledků. Autor musel rutinně zvládat cross-coupligové reakce a poradit si i s jistě nelehkým zpracováním reakčních směsí či získaných spektrálních dat. Celkem bylo připraveno 7 tripodálních chromoforů, z toho 6 dosud nepopsaných, čímž bylo splněno zadání DP.

Diskuze se postupně zaměřuje na přípravu prekurzorů a finálních derivátů, kde autor komentuje jednotlivé kroky a kriticky přistupuje k dosaženým výtěžkům. Následuje kapitola 3.3 *Strukturní analýza*

finálních sloučenin, která navzdory svému názvu pojednává pouze o jediné z nich, derivátu **115**. Navíc se zde částečně duplikují údaje uvedené už v kapitole 2.1 *Obecné metody*. Za zmínku stojí, že 2D NMR technika ^1H - ^1H COSY navrhovaná pro absolutní přiřazení signálů (str. 58) patří mezi základní a rutinní NMR experimenty a domnívám se, že by v tomto případě lepší vhled do struktury molekuly nepřinesla. Poslední kapitoly diskuze se věnují analýze termálních a zejména fotofyzikálních vlastností, na které je – v souladu se zadáním práce – kladen největší důraz. Autor detailně porovnává vliv strukturálních změn chromoforů či použitého rozpouštědla na různé absorpční, emisní a AIE parametry.

Předložená práce jako celek působí po vizuální stránce na první pohled trochu nezvykle, neboť je vysázena bezpatkovým fontem Arial. Pro delší texty je obecně vhodnější volit patkové písmo klasických proporcí, které méně unavuje oko čtenáře. Nicméně, text je sepsán pečlivě a obsahuje pouze minimum stylistických pochybení či překlepů, jako např. neexistující katalyzátor $\text{Pd}(t\text{-Bu}_3)_2$ namísto $\text{Pd}(t\text{-Bu}_3\text{P})_2$ na str. 42–43 a 52. Osobně bych se také vyvaroval používání různých neformálních nebo hovorových výrazů a označení. Za nešťastnou pokládám i skutečnost, že veškeré výtěžky reakcí jsou uvedeny pouze v %, bez odpovídajícího údaje o izolovaném množství. Celkově je v experimentální části nekonzistentně pracováno s desetinnými čísly: některé údaje o navážkách jsou uvedeny na tři desetinná místa, jiná jen na dvě nebo na jedno, přičemž dochází k hrubému zaokrouhlování: např. 0,01 g $\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$ neodpovídá 0,01 mmol (str. 44). Obecně doporučuji u menších množství používat vhodnější násobící předpony (mg, μl , μmol).

V přepisu ^1H NMR spekter do textové podoby jsou chybně zapsány veškeré signály označované jako dublet. Správně se uvádí vždy střed multipletu (jediná hodnota, nikoliv rozsah) a interakční konstanta ve formátu xJ (nikoliv \mathcal{J}).

K diplomové práci mám následující otázky:

- ^1H NMR spektra všech tří prekurzorů, které obsahují atom boru (**111**, **113**, a **114**) obsahují intenzivní, avšak neoznačený ani nijak nekomentovaný signál s posunem přibližně 1.25 ppm. Vzhledem k tomu, že tento posun neodpovídá např. žádnému z běžných rozpouštědel, které by mohlo vzorek kontaminovat, rád bych se zeptal, co je to za signál – a jak byl s ohledem na jeho intenzitu (zejména v případě derivátu **111**) určen výtěžek reakce.
- V rešerši byly mnohokrát zmíněny mechanoluminiscenční vlastnosti. Pokoušel se autor u některého z připravených derivátů sledovat změnu barevné emise např. při drcení?

Závěr

Veškeré cíle diplomové práce byly splněny. Uvedené připomínky nijak neovlivňují hodnotu zjištěných výsledků ani nesnižují kvalitu předložené práce, a samotnou diplomovou práci Bc. Jakuba Štrojse

doporučuji k obhajobě

a hodnotím známkou

A

V Praze, 15. 5. 2022

Ing. Břetislav Brož, Ph. D.

Skupina syntézy radioaktivně značených sloučenin
Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.