



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 Valuš**
Téma: Syntéza a vlastnosti 1,2-diheteroarylbenzenů
Vedoucí práce: Ing. Jiří Tydlitát, Ph.D.

Předložená diplomová práce Bc. Jakuba Valuše se zabývá syntézou a studiem fotochromních vlastností série 1,2-diheteroarylsubstituovaných aromátů. Samotný koncept fotochromismu je znám již od konce 19. století, avšak teprve od přelomu tisíciletí lze pozorovat prudký nárůst vědeckého zájmu o tuto oblast. Výrazné množství publikací za poslední dvě dekády odráží nejen zlepšené pochopení samotných mechanismů, ale také intenzivní vývoj praktických aplikací v oblastech, jako jsou např. optické datové paměti, fotokatalýza, ochrana proti padělení nebo radiační dozimetrie. Není pochyb o tom, že zvolené téma je vysoce aktuální a dynamicky se rozvíjející, s interdisciplinárním přesahem.

Diplomová práce je členěna do čtyř standardních částí, a to na literární rešerši (25 stran), experimentální část (17 stran), výsledky a diskuzi (30 stran) a přílohu s naměřenými spektry, zahrnující NMR, hmotnostní a termickou analýzu (52 stran). Doplněna je obvyklým úvodem, závěrem, seznamem použitých zkratk a citované literatury. Práce obsahuje poměrně vysoký počet referencí (82), které jsou všechny uvedeny v jednotném stylu, správně, přehledně a korelují s textem.

V teoretické části je čtenář seznámen s jednotlivými typy chromických jevů, jejich mechanistickým pozadím, a také se syntetickými přístupy vedoucími k cílovým derivátům. Tato kapitola je zpracována velmi pečlivě a čtivě; text je vhodně doplněn přehlednými obrázky a schémata, která jsou opět zpracována kvalitně a ve sjednoceném stylu. Experimentální část detailně popisuje přípravu jednotlivých derivátů. Autor práce musel rutinně zvládnout nejen laboratorní techniky, jako je práce s vakuem-inertní linkou nebo chromatografické separace, ale následnou charakterizaci sloučenin pomocí řady analytických metod. Diskuzní část se nejprve věnuje syntéze a strukturální analýze produktů, přičemž největší důraz je poté kladen na studium fotofyzikálních vlastností připravených cílových látek. Přestože se v textu místy objevují mírně neformální jazykové obraty, je celkově diskuze vedena přehledně a logicky, s oporou o kvalitní schémata a naměřené údaje.

Autor zvolil méně obvyklý formát prepisu NMR spekter do textové podoby, od nejnižších hodnot ppm k nejvyšším, to však není důvod k výhradě. Za ten považuji zápis ^{13}C signálů. Pokud jsou chemické posuny blízko sebe, ale přesto je ještě lze ve spektru rozlišit (jak je patrné z příložených

spekter, s přesností na setinu ppm), je nanejvýš vhodné toto rozlišení zachovat i v přeepsané formě namísto jinak běžného zaokrouhlení na desetinu ppm. Navíc, pokud jsou desetinná místa oddělena čárkou, pro větší přehlednost se hodnoty oddělují středníkem. Uvádím konkrétní příklad pro trojici hodnot ppm u sloučeniny **96**: místo současného, lehce matoucího zápisu 131,5, 131,5 131,5 doporučuji použít vhodnější formu 131,48; 131,51; 131,54. Při uvádění rozsahu multipletů u ^1H NMR je také obecně doporučeno používat pomlčku (6,86–6,87) namísto zde užitého spojovníku (6,86-6,87). Drobná výtka na závěr: některé použité zkratky v seznamu referencí se liší od oficiálně používaných, jako např. *Angew. Chemie (Angew. Chem.)* nebo *Chem. – An Asian J. (Chem. Asian J.)*.

K diplomové práci mám následující otázky a náměty k diskusi:

- Při syntéze derivátů **81**, **91** a **92** pomocí Sonogashirovy reakce bylo – na rozdíl od ostatních prekurzorů – dosaženo pouze průměrných výtěžků (~ 50 %). Nebylo v těchto případech uvažováno o přidavku báze pro podporu neutralizování vznikajícího hydrogen halidu, nebo např. kombinovat tento přídavek se změnou zdroje Pd, jako $\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$?
- Pro syntézu derivátu **80** pomocí Diels-Alderovy reakce byl zvolen poměrně netradiční katalyzátor HfCl_4 . V diskusi však není blíže rozvedeno, jaké konkrétní výhody při koordinaci k dienofilu tato Lewisova kyselina poskytuje oproti některým běžněji používaným alternativám, jako je např. AlCl_3 , ZnCl_2 nebo TiCl_4 .
- Při pokusu o syntézu derivátu **81** je na str. 60 uvedeno: „*Nejvyšší konverzi vykazovala reakce po dobu 3 dní v THF při 90 °C, (...)*“ přičemž není jasné, zda se jedná o teplotu reakční směsi v uzavřené aparatuře (standardní bod varu THF je 66 °C) nebo teplotu zahřívacího bloku / lázně.

Závěr

Předložená diplomová práce je zpracována na velmi vysoké úrovni, a to jak po stránce odborné, tak i jazykové a formální. Text vykazuje naprosté minimum překlepů, což svědčí o pečlivém přístupu autora. Stanovené cíle diplomové práce byly beze zbytku splněny. Veškeré připomínky uvedené v posudku mají pouze stylistický charakter a v žádném případě nesnižují kvalitu či hodnotu práce jako celku.

Diplomová práce Bc. Jakuba Valuše přináší relevantní a přehledně prezentovaný příspěvek do oblasti výzkumu fotochromních materiálů, práci samotnou

doporučuji k obhajobě

a hodnotím známkou

A

V Praze, 20. 5. 2025

Ing. Břetislav Broz, Ph. D.

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