



# CHARLES UNIVERSITY

## Faculty of Pharmacy in Hradec Králové

### Posudek disertační práce Ing. Kateřiny Teichmanové

Organické materiály pro pevnolátkovou fluorescenci

Oponent: **Prof. PharmDr. Petr Zimčík, Ph.D.**, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova

Předložená disertační práce je zaměřena na vývoj nových donor-akceptorových systémů pro výzkum fluorescenčních vlastností jak v roztoku, tak v pevné fázi. Práce je logicky rozdělena na teoretickou část, experimentální část a následně jsou diskutovány získané výsledky. V teoretické části se autorka věnuje tématům, které úzce souvisí s její experimentální prací a uvádí tak čtenáře jasným a srozumitelným způsobem do oblastí základů fluorescence se zaměřením na fluorescenci v pevné fázi, fluorescenci v NIR oblasti a způsoby její zhášení. Dále přehledně zpracovává oblasti spojené se strukturami, jimž se věnuje a to stilbeny, fenaziny a obecně oblasti využití push-pull organických barviv v solárních článcích.

Ve své experimentální práci se kandidátka zaměřila na vývoj nových strukturních typů postavených na push-pull systémech s cílem získat látky emitující v červené (až blízké infračervené) oblasti a to nejen v roztoku, ale i v pevné fázi. Tato část je na základě struktur členěna na čtyři celky, kdy dochází k propojení donorových a akceptorových částí molekuly různými konjugovanými systémy (stilbeny), nebo jsou tyto části navázané přímo na sebe. Ve všech čtyřech oblastech kandidátka nejprve syntetizovala cílové sloučeniny, které následně podrobila řadě charakterizačních experimentů. Zde velmi oceňuji komplexnost experimentů, kdy je studována fotofyzikální oblast a jednotlivé výsledky vysvětleny pomocí elektrochemických měření, DFT výpočtů a pokud se povedlo, tak doplněna o RTG analýzu krystalů. Experimenty tak dávají ucelený pohled na daný problém. První dvě oblasti byly již přijaty k publikaci. Věřím, že témata druhých dvou oblastí budou brzy také sepsána a odeslána k posouzení. Jejich výsledky jsou neméně zajímavé ať již co se týče vlivu planarity donorové části obsahující difenylaminový fragment na absorpční maxima, tak  $H^+$  responsivních derivátů.

Práce je sepsána pečlivě bez výraznějších stylistických nebo gramatických chyb, vhodně doplněna o obrázky dobře vystihující danou problematiku a napomáhající čtenáři se v ní lépe orientovat. Kandidátka je také první autorkou jedné a spoluautorkou druhé práce uveřejněných v respektovaných časopisech, což považuji za důkaz kvalitní vědecké práce.

Otázky a konkrétní komentáře k předložené práci:

- Práce obsahuje pár drobných překlepů a grafických chyb, které ale nesnižují kvalitu práce. Např.
  - Ve schématu 11 je zřejmě překlep - neměl by tam být v prvním kroku 9-bromanthracen, ale anthracen-9-ylboronová kyselina.

- Obrázky 33 a 37 obsahují struktury navíc.
- Schéma 15, u látky 135 chybí jedna vazba.
- Obrázek 53 nemá označené panely.
- Schéma 1c ukazuje spíše modifikaci již hotových stilbenů (tzn. postfunkcionalizaci). Za metodu přípravy stilbenů (téma kapitoly 1.7.1.) bych spíše považoval jejich tvorbu (tzn. spojení dvou aromátů dvojnou vazbou). Existují příklady, kdy se použije couplingová reakce (např. Heck) i na tvorbu ethylenového spojení mezi dvěma aromáty?
- Čistě hypotetická otázka do diskuze k tématu stilbenů: co byste očekávali za vlastnosti, pokud by byl stilben zafixován methylenovými můstky za vzniku dihydroindeno[2,1-*a*]indenu? Pomohlo by to nějak sledovaným vlastnostem? Neuvažovali jste o této modifikaci také u vašich látek v první sérii?
- Stilbeny lze pozorovat jak v *trans*, tak *cis* konfiguraci. Předpokládám, že vzhledem k objemnosti jsou to u Vašich látek převážně izomery *trans*, ale pozorovali jste (např. na NMR) i přítomnost třeba malého množství *cis* izomeru?
- Na str. 87 předpokládáte, že disubstituce stilbenu anthracenem by mohla vést k bathochromnímu posunu. Z čeho tak usuzujete, když monosubstituce (látky 96) vedla naopak k hypsochromnímu posunu?
- Tabulka 4 (str. 88). Čemu přisuzujete, že se v sérii A objevují tak zásadní rozdíly v pevnolátkové emisi (kvantové výtěžky fluorescence v rozmezí 5-38%)? V roztoku jsou kvantové výtěžky srovnatelné.
- Str 113, 114 - Nemůže v rámci ozařování docházet ke změně izomerie na dvojnou vazbě a pozorované spektrální změny pak být jeho důsledkem (a ne rozpadem)?
- Oceňuji diskusi i neobvyklých pozorování, která mohou být sice "rutinní" pro odborníky v jiném oboru, ale pro studenty zaměřené např. převážně na syntetickou oblast je komentář ohledně pásů Ramanova rozptylu cenným upozorněním pro budoucí kolegy ve skupině, kteří budou navazovat a mohli by se s podobným pozorováním setkat také (str. 121).

Celkově hodnotím předloženou disertační práci jako velmi kvalitní podklad pro obhajobu a doporučuji k obhajobě a udělení titulu Ph.D.

Hradec Králové, 25.8.2025

prof. PharmDr. Petr Zimčík, Ph.D.

Univerzita Karlova

Farmaceutická fakulta v Hradci Králové

Katedra farmaceutické chemie a farmaceutické analýzy