

Prof. Mgr. Martin Vala, Ph.D.
Fakulta chemická, VUT v Brně
Purkyňova 118
612 00 Brno

Posudek diplomové práce

Student: **Bc. Judita Pallová**

Název práce: **Stericky bráněné diketopyrrolopyrroly: syntéza a spektrální vlastnosti derivátů difenyl a di-o-tolyl diketopyrrolopyrrolů**

Stdiijní program: Organická chemie a technologie

Celkové hodnocení: A

Slovní zhodnocení:

Diplomová práce studentky Bc. Judity Pallové se zabývá perspektivním tématem návrhu a přípravy stericky bráněných luminoforů s cílem dosažení intenzivní pevnolátkové fluorescence. Téma je výzvou pro mnohé vědecké týmy a zvolený přístup je v souladu s aktuálním děním v této oblasti.

Teoretická část je logicky členěná. Autorka postupuje od popisu struktury, syntézy a reaktivity až po fotofyzikální vlastnosti studované skupiny látek. Práce je psána čtivě, s minimem typografických prohřešků, viz níže. Teoretická část v rozsahu 13 stran využívá 30 literárních zdrojů a dalších 8 zdrojů je použito při diskusi výsledků což je bezpochyby adekvátní požadavkům kladeným na tento typ VŠKP.

V experimentální části, v souladu se zavedenými zvyklostmi, autorka popisuje syntézu studovaných látek a použité metody při jejich charakterizaci. Kapitoly s výsledky a diskusí zahrnují fotofyzikální vlastnosti, rentgenostrukturní analýzu, a termickou analýzu. Rozsahem 19 stran a širší diskuse odpovídá požadavkům kladeným na diplomové práce. Z textu je patrné autorčino porozumění problematice umožňující jí vést bohatou diskusi.

Z výše uvedeného vyplývá, že bylo splněno zadání práce, kdy byly připraveny nové, v literatuře doposud nepopsané, látky, byly proměřeny a diskutovány jejich spektrální a fotofyzikální vlastnosti. Dle mého názoru se jedná o velice zdařilou práci, hodnotím ji známkou „A“ a doporučuji k obhajobě.

Formální prohřešky:

- Str. 15: Tečka místo krát v jednotce, veličiny se píšou kurzívou (správně: $\epsilon_{\max} \sim 76000 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$). Vyskytuje se i jinde v textu.
- Str. 16 Tabulka 1 nemá uveden zdroj, ze kterého čerpá a stejně tak i řada dalších tabulek a obrázků.

- Str. 18 Není skloňováno návěští Obrázku 1. Taktéž na str. 37 (Obrázek 3) a dále v textu.
- Str. 20 Tabulka 3 uvádí stejné hodnoty maxim luminiscence (537 nm) jak pro roztok, tak pro tuhou fázi. V textu je ale diskutován posun o 15 nm.
- Str. 41 Nejednotné psaní pomlčky a spojovníku ve výrazech od–do, viz rozsah vlnových délek vs. kvantové výtěžky.
- Str. 43 Obrázek 7 obsahuje vlevo i vpravo identické obrázky. Přičemž pravý má být pohled shora.

Otázky k obhajobě:

1. V textu na str. 16 a v Tabulce 1 uvádíte, že rozšířením pi-konjugovaného systému dochází k bathochromnímu posunu, který je spojen s hyperchromním posunem molárního absorpčního koeficientu. Z Tabulky 1 je ale patrné, že tomu tak není vždy. Můžete tuto skutečnost komentovat/vysvětlit?
2. Na straně 21 hovoříte o polymorfech DPP vykazujících různou barvu fluorescence. Konkrétně uvádíte „Červený a zelený polymorf jsou látky krystalické, zatímco žlutý polymorf je amorfní.“ Je ale v případě amorfní látky možné hovořit o polymorfu?
3. Kvantové výtěžky byly měřeny srovnávací metodou vůči chininsulfátu. Ten emituje v jiné (modré) oblasti než vaše látky. Některé zdroje doporučují standard vybírat tak aby jeho excitační i emisní spektra byla co možná nejbližší studované látce. Nemohl tento fakt způsobit vyšší nejistotu stanovených kvantových výtěžků?
4. V Tabulce 7 jsou uvedeny výsledky pro dvě varianty látky 3c. Co tyto varianty značí? Dominantní časová konstanta je v obou případech okolo 14 ns (v roztoku), což je ve srovnání s ostatními látkami neobvykle vysoká hodnota. Můžete to okomentovat?
5. Při diskusi fotofyzikálních vlastností látek v roztoku docházíte na str. 39 k zajímavému závěru, že nejvyšších kvantových výtěžků dosahují látky nejméně planární. To není obvyklé (ale ani extrémně neobvyklé). Můžete komentovat proč tomu tak ve vašem případě je?

V Brně 28. 5. 2025.