

Posudek oponenta diplomové práce

Univerzita Pardubice	
Fakulta chemicko-technologická	
Megisterský studijní obor	Organická chemie
Student	Bc. Veronika Jandová
Diplomová práce	Světlem indukované transformace v organické chemii
Oponent	Mgr. Lenka Štacková, Ph.D.
Pracoviště oponenta	Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, RECETOX

Předkládaná diplomová práce Bc. Veroniky Jandové je zaměřena na „Světlem indukované transformace v organické syntéze“ zabývající se fotoredoxní katalýzou.

V první části jsou shrnuty obecné pojmy týkající se fotochemických reakcí, experimentálního uspořádání a základní mechanismy fotoredoxní katalýzy. V následující části jsou přehledně popsány vybrané reakce využívající fotoredoxní katalýzu. Práce je psána srozumitelně, avšak některé pasáže jsou mírně matoucí, např. odstavec 1.6. popisující kvantový výtěžek. Autorka nejprve zmiňuje faktory ovlivňující kvantový výtěžek, avšak samotná definice je až na konci odstavce, což na čtenáře může působit zmatečně.

Experimentální část obsahuje velmi dobře popsané syntézy jednotlivých sloučenin a jejich charakterizaci (^1H a ^{13}C NMR, HR-MS). U některých látek chybějí signály v ^{13}C NMR, což autorka sama uvádí, avšak struktury jsou podpořeny další dostatečnou analýzou a odpovídají dříve publikovaným charakterizacím v příložených referencích. Velmi oceňuji také uvedené retenční faktory (R_f) v daných mobilních fázích.

Hlavní část výsledky a diskuze zahrnuje syntézu vchozích látek, dvě testované fotoredoxní reakce – oxidativní anelaci a světlem indukovanou tvorbu C–C vazeb a její mechanistickou studii. Jako hlavní katalyzátor je použita sloučenina **59**, v práci však není její schéma a název je uveden pouze na konci obecných metod experimentální části na str. 39, kde lze snadno přehlédnout. Dle mého názoru by bylo pro čtenáře pochopitelnější strukturu uvést. Autorka rovněž uvádí, že je tento katalyzátor **59** patentován, ovšem na daný patent chybí reference. I přes tyto detaily je však práce psána čtivě, experimenty na sebe logicky navazují

od základních reakcí, optimalizací reakčních podmínek až po mechanistickou studii. Jako velmi pozitivní hodnotím také úspěšnou záměnu pětičlenného akceptoru **57** za šestičlenný **54** v oxidativní anelaci, jež do té doby nebyla uskutečněna. Také následující reakce tvorba C–C vazeb je logicky uspořádána od modelové reakce na 4-jodpyridinu **65**, až po testování vlivu polohy a typu halogenu a návrhu mechanismu této reakce. Velmi oceňuji také neúspěšné experimenty uvedené na konci této kapitoly, které bohužel nebývají ve většině závěrečných prací uvedeny. Z mého pohledu jsou ale nedílnou a velmi důležitou součástí výzkumu, a to zejména k pochopení a znalosti daných molekul a reakcí.

V závěru práce jsou shrnuty dosažené výsledky, uvedeny citované reference a přiloženy charakterizace jednotlivých látek. Velmi oceňuji přiložená ^1H a ^{13}C NMR spektra, což bohužel v organické chemii stále není standardem. Avšak intenzita jednotlivých signálů, zejména v ^1H NMR spektrech, je velmi malá, spektra proto nejsou dobře čitelná a je tedy těžké na první pohled určit čistotu výsledných látek. Přestože je 61 referencí formálně dostačujících, v některých pasážích by jich z mého pohledu mohlo být použito více. Např. v částech 1.5.–1.7. se nachází pouze 1 reference na konci každé kapitoly. Rovněž by se reference měly uvádět za první větou citovaného textu. V práci jsou však reference uváděny až na konci kapitol, což je pro čitatele značně matoucí.

Níže jsou sepsány dotazy k diskusi samotné práce:

- V celé práci je jako zdroj světla využita Royal Blue LED. Jaké je její emisní maximum, resp. emisní spektrum? Jaké je absorpční spektrum ozařované látky, dochází k překryvu těchto dvou spekter?
- Jaké mohou být možné příčiny neúspěchu oxidativní anelace s jinými než pětičlennými akceptory? Jaká je role Lewisových kyselin v této reakci?
- V mechanistické studii v kapitole 2.4.4. je uvedeno, že dochází k excitaci kat. **59** za vzniku barevného radikál aniontu **59**⁻. Byl tento radikál experimentálně potvrzen? Dále je uvedeno, že hodnota excitační energie $E_{0,0}$ je odhadnuta na 1,5 eV. Máte představu, jak byste tuto hodnotu experimentálně stanovila?

I přes pár výše zmíněných výtek je celá práce psána čtivě a srozumitelně. Autorka prokázala schopnost samostatné laboratorní práce od modelových reakcí, přes optimalizace jednotlivých kroků až po návrh mechanismu. Je dokonce spoluautorkou publikace v *RSC Advances*, což v rámci magisterského studia rozhodně není běžné. Diplomová práce splňuje požadavky kladené na závěrečné práce magisterského studia a proto předkládanou diplomovou práci doporučuji k obhajobě s hodnocením A.

V Brně dne 3.8.2020



Mgr. Lenka Šťacková, Ph.D.