



Vysoká škola
technická a ekonomická
v Českých Budějovicích

Posudek oponenta diplomové práce

„2,4,6-Trimethyl-*s*-triazin jako stavební jednotka pro tvorbu kovalentních organických sítí (COF)“

Diplomant: Bc. Kateřina Štursová
Vedoucí práce: Ing. Milan Klikar, Ph.D.
Oponent: Ing. Jan Podlesný, Ph.D.

Diplomová práce Bc. Kateřiny Štursové je zaměřena na problematiku kovalentních organických sítí (COF) s akcentem na 2,4,6-trimethyl-*s*-triazin (TMT) představující klíčovou základní stavební jednotku výše zmíněných polymerních látek. V materiálových vědách se jedná o velmi aktuální tematiku s vysokým vědecko-výzkumným potenciálem. Diplomová práce je rozčleněna do logických, vzájemně na sebe navazujících celků, z nichž páteř tvoří teoretická část, experimentální část a část věnující se dosaženým výsledkům a jejich diskusi.

Teoretická část sestává z literární rešerše, která v sobě zahrnuje zevrubný popis kovalentních organických sítí počínaje jejich obecným popisem a konče příklady konkrétních sítí rozdělených v závislosti na jejich strukturním motivu. V teoretické části jsou dále obsaženy kapitoly popisující historický vývoj COFs, jejich vlastnosti, kladené požadavky, syntetické metody, analytické techniky a rovněž využití COFs v praxi. Kapitoly, které následně udávají příklady specifických sítí, jsou rozděleny podle druhu chemické vazby vytvářené mezi základními stavebními jednotkami. Teoretická část je poté završena detailní kapitolou, která předkládá sérii příkladů COFs obsahující TMT stavební blok.

V experimentální části diplomantka popisuje přípravu výchozího TMT a mono- resp. dialdehydů tvořených jedním až třemi fenyl(en)ovými resp. thienyl(en)ovými (hetero)cykly. Dále je uvedena příprava modelových nízkomolekulárních látek z výše zmíněných prekurzorů. Ke všem syntetizovaným látkám jsou uvedena standardní analytická data získaná dostupnými technikami typu hmotnostní spektrometrie, NMR spektroskopie, infračervená spektroskopie nebo elementární analýza. Na základě této charakterizace tak byla jednoznačně potvrzena struktura připravených substancí. K většině cílových nízkomolekulárních sloučenin jsou rovněž přiložena HR-MALDI spektra, ^1H a ^{13}C NMR spektra. V závěru experimentální části je popsána bazicky resp. kysele katalyzovaná příprava kovalentní organické sítě označené jako COF-22 obsahující 1,4-fenylenový π -linker.

V kapitole „Výsledky a diskuse“ diplomantka poté komentuje syntetické metody vedoucí k požadovaným nízkomolekulárním modelovým látkám a jejich prekurzorům. Následuje část, kde se diplomantka věnuje přípravě vlastních COFs. Práce je zaměřena zejména na **COF-22**, kdy je uvedeno celkem 11 optimalizačních experimentů kombinujících různé faktory syntézy. Uvedené postupy jsou rovněž diskutovány v souvislosti s dostupnou literaturou zabývající se touto tematikou. Následuje charakterizace získaných vzorků **COF-22** pomocí několika metod jako je rentgeno-strukturní analýza, infračervená spektroskopie, diferenční skenovací kalorimetrie nebo UV-VIS absorpční a emisní spektroskopie.

K předložené diplomové práci mám následující komentáře:

- str. 31: termín „Suzukiho-Miyaurova *křížová* reakce“ - V tomto případě bych raději použil původní označení *cross-couplingová* reakce bez explicitního překladu do českého jazyka.
- str. 41: příprava kovalentní triazinové sítě prostřednictvím Friedelovy-Craftsovy alkylace - Pro lepší představu čtenáře o dané reakci by bylo vhodné uvést reakční schéma stejně jako u předešlých popsanych metod. Dále je zde použit termín *alkylace*. Jelikož uvedený kyanurchlorid je heteroaromatický halogenderivát reagující s různými (hetero)aromáty a žádný *alkylový* zbytek zde není přítomen, termín *alkylace* bych v tomto případě nepoužil, byť jej literární zdroj [50] používá.
- str. 43: termín „redukce *protonů*“ – Jedná-li se o fotokatalytický vývoj vodíku z vody, použil bych označení redukce *vodíkových kationtů* místo *protonů*.
- str. 47: v poslední větě této stránky se hovoří o „analogu **COF-24**“. Pro lepší přehled by bylo dobré tento analog znázornit v reakčním schématu s jednoznačným označením. V této podobě je označení analogu mírně matoucí.
- str. 56: v zápisu experimentálních dat pro látku **T1** je zaměněna vypočtená a nalezená hodnota m/z $[M+H]^+$ u HR-MLADI.
- K podobě příložených MALDI spekter mám dvě připomínky. Z pravé části každého spektra bych odstranil balastní údaje generované programem popisující vlastní měření. Naopak bych do každého spektra doplnil vzorec analyzované molekuly analogicky jako u NMR spekter.
- str. 89 - příloha 8: V $^1\text{H-NMR}$ spektru sloučeniny **B2** je signifikantní pík reziduálního dichlormethanu. Ačkoli jinak je spektrum bezchybné, bylo by vhodné vzorek látky před analýzou vysušit např. ve vakuové peci.
- Pro ověření čistoty připravených polymerních sítí a jejich charakterizaci by bylo vhodné dané vzorky vysušit a uchovávat pod inertní atmosférou. Jak je uvedeno v kapitole „Výsledky a diskuse“, diplomantka si je této skutečnosti vědoma a rovněž lze v tomto kontextu přihlídnout k velkému časovému omezení způsobenému pandemickými restrikcemi.
- V rámci termální analýzy souhlasím s diplomantkou a rozhodně bych doporučil doplnit studium termálních vlastností získaných COFs o výsledky termogravimetrických měření. Tvrzení o minimální stabilitě všech vzorků do 300 °C by tak bylo jednoznačně potvrzeno a zároveň by bylo možné získat lepší představu o množství vody ve vzorcích.

Dále mám k diplomové práci několik dotazů:

- Dalo by se očekávat zlepšení krystalinity a optoelektronických vlastností kovalentních organických sítí při použití kondenzovaných π -linkerů jako jsou např. thienothiofeny namísto thiofenových monocyklů spojených jednoduchou vazbou?
- Jakým způsobem by bylo možné blíže kvantifikovat míru zesítnění resp. průměrnou velikost připravených makromolekul kromě počtu difrakcí v PXRD záznamu?
- Na str. 77 v kapitole 3.6 diplomantka zmiňuje *očekávané polymorfni přechody* modelových sloučenin. Bylo by možné tyto *přechody* více objasnit?

Na předložené diplomové práci Bc. Kateřiny Štursové oceňuji zejména systematické členění všech dat, precizní stylistickou úroveň textu s minimem překlepů a inovativní přístup k řešení dané problematiky. Výše uvedené komentáře a poznámky rozhodně nesnižují vysokou úroveň celého díla. Zadání diplomové práce bylo splněno a tuto práci

doporučuji k obhajobě

a hodnotím ji známkou

výborně.

V Českých Budějovicích, 24. 7. 2021

Ing. Jan Podlesný, Ph.D.
Environmentální výzkumné pracoviště
Vysoká škola technická a ekonomická
v Českých Budějovicích

