

Posudek diplomové práce „Synthesis and Characterization of Substituted Diphenylamine Distyrylstilbenes“

Autor: Bc. Lina Straihorodska

Hodnotitel: Ing. Jan Vyňuchal, Ph.D.

Předkládaná diplomová práce je zaměřena na syntézu a hledání vztahu mezi strukturou vybraných derivátů difenylaminostilbenů a jejich fluorescencí v pevné fázi. Design sloučenin by zaměřen na push-pull substituci základní stilbenové jednotky a současně a/nebo následně na substituci zabraňující nadmolekulárním interakcím.

V teoretické části je přehledně popsána základní problematika absorbance, princip fluorescence v roztoku a v pevném stavu v souvislosti s přítomností tzv. H a J agregátů. Dále se autorka práce v teoretické části věnuje push-pull systémům, přenosům náboje a především strategii vedoucí k zabránění diskutovaných nadmolekulárních interakcí (π - π stacking, další) s cílem zvýšit intenzitu fluorescence v pevném stavu pro zvolené sloučeniny.

Experimentální část práce je uvedena koncepcí řešení s představením cílených sloučenin. Pro syntézu zvolila diplomanta ověřený postup založený na Horner-Wadsworth-Emmons (HWE) reakci. Novým úkolem bylo zavedení substituentu, který zabráni diskutovaným nadmolekulárním interakcím. Během experimentální práce zaměřila diplomantka pozornost na přípravu 16 látek. Z uvedeného počtu je 12 látek nových a dosud nepopsaných. 6 látek představuje finální struktury (v práci jsou tyto sloučeniny logicky a přehledně označeny DPA-D35XS-CHO, DPA-D35XS-V, DPA-D35XS-DCV, DPA-D35XS-DBV, DPA-D35XS-IOO a DPA-DPS-IOO). Při syntéze intermediátu č. 4, se diplomantka potýkala s náročným čištěním. Následně otestovala alternativní syntetické cesty vedoucí k finálním produktům (nejen DPA-DPS-CHO).

Ve výsledkové části jsou diskutovány spektrální vlastnosti připravených látek v roztoku a z pohledu fluorescence v pevném stavu. Srovnáním analogických derivátů obsahujících fenyl, resp. xylyl v centrální části molekuly, se potvrdil předpoklad o zanedbatelném vlivu této substituce na spektrální chování látek v roztoku, ale naopak o znatelném vlivu na fluorescenci v pevném stavu u derivátů obsahujících xylyl.

K práci mám následující dotazy:

- 1) V tabulce 3 je na straně 52 pro derivát DPA-DPS-DCV uvedena excitační vlnová délka 675 nm a emisní vlnová délka 672 nm. Pravděpodobně se jedná o překlep. Jaké byly skutečné hodnoty excitace a emise?
- 2) V práci je použita obecká zkratka DPA-D35XS-EWG (např. str. 50). Jaké sloučeniny tato zkratka zahrnuje?
- 3) Na základě jakého předpokladu se autorka rozhodla pro 3,5-xylyl substituent, jako dostatečně objemnou skupinu bránící diskutovaným interakcím?
- 4) U sloučeniny DPA-D35XS-IOO je na straně 54 uvedeno, že sloučenina byla izolována ve dvou modifikacích. Na základě jakého měření je uvedené tvrzení? Bylo provedeno XRPD (prášková rentgenová difrakce) měření?
- 5) Na str. 54 je odkaz na obrázek 35. Ten se v práci nevyskytuje.
- 6) Jak byly na externím pracovišti připraveny vzorky na měření kvantového výtěžku fluorescence v pevném stavu? Jak ovlivní příprava vzorku (velikost částic) kvantový výtěžek fluorescence?
- 7) Jaký je rozdíl pro π - π interakce a C-H- π interakce, jaká z diskutovaných interakcí byla vložení 3,5-xylylu ovlivněna?

Diplomová práce je sepsána přehledně. Z textu je patrné, že diplomantka rozumí problematice a umí pracovat s literaturou. Při experimentální práci byla použita řada laboratorních a analytických technik. Oceňuji také schopnost diplomantky optimalizovat syntetické postupy.

Zadání práce bylo splněno. Samotnou práci považuji za velmi zdařilou a hodnotím známkou

A.

Ing. Jan Vyňuchal, Ph.D.
Vedoucí výzkumu SBU PaB, Synthesia, a.s.