

Posudek na diplomovou práci

Název práce: Studium D-A a π - π interakcí a jejich využití při samoskladbě
 Jméno autora(ky): Bc. Blanka Rejchrtová
 Oponent RNDr. Ivo Starý, CSc

Předložená práce Bc. Bc. Blanky Rejchrtové si kladla za cíl vývoj a studium vlastností nový π -elektronových systémů a jejich využití pro přípravu nanomateriálů. V tomto ohledu byly studovány celkem tři cíle: a) syntéza nových ligandů pro zakotvení na zlaté nanočástice, b) příprava nových aromatických systémů na bázi koronenu a c) příprava zlatých nanočástic funkcionalizovaných ligandy připravenými v bodě a. Tato práce byla součástí projektů studovaných v laboratoři školitele (RNDr. Ivo Starý, CSc).

Předložená práce je zpracována obvyklým způsobem, zde bych pouze poznamenal, že cílům by měla být věnována spíše samostatná kapitola, než oddíl v kapitole 2 (Teoretická část). Kapitola 2 zabývá přehledem současného stavu problematiky v oblasti zlatých nanočástic ne vazebných interakcí (oddíly 2.1-2.3). Bohužel oddíl týkající se polyaromatických systémů na bázi koronenu je zcela nedostačující. Chybí jakákoliv zmínka o syntetických přístupech k tomuto typu látek. Rovněž bych kapitolu 2 nazval spíše „Současný stav problematiky“, což odpovídalo jejímu obsahu, než teoretická část.

V kapitole 3 jsou shrnuty výsledky experimentálního úsilí diplomatky. Prvního cíle (oddíl 3.1) se podařilo dosáhnout a bylo připraveno 6 nových ligandů. V případě druhého cíle (oddíl 3.2) byl vypracován postup pro přípravu sloučenin, jež by měly sloužit jako výchozí látky pro další transformace. Zda další navržené transformace těchto výchozích látek povedou ke kýženému cíli, tj. k syntéze polykondenzovaných aromátů, není možné za současného stavu poznání posoudit. Stejný problém se týká i přípravy hexakoronenu s SF₅ skupinami. Zde se rovněž nepodařilo dosáhnout plánovaného cíle (oddíl 3.3). U poslední části týkající se přípravy a funkcionalizace zlatých nanočástic je možné konstatovat, že cíl bylo v podstatě dosaženo.

Obecné komentáře a poznámky.

- Schématy zabírají zbytečně velký prostor a je v nich spousta prázdného místa. Větší úspornost při velkorysém rozmísťování struktur v prostotu, by z grafického hlediska rovněž prospěla přehlednosti.
- Str. 14, odst. 2, řád. 1. Píše se „van der Waals“.
- Str. 39, odst. 2, řád. 3. Nedokážu si představit jak „interferuje“ benzylová skupina.
- Str. 39, odst. 2, řád. 4. Správně se píše „benzylová skupina“ stejně jako allylová.
- V textu se často objevuje anglicismus typu „palladiem katalyzovaná reakce“ (str. 39, 42 atd.). Tento obrat naznačuje, že reakce probíhala v přítomnosti kovového palladia či jiné kovu. Což samozřejmě není pravda, neboť byly použity příslušné komplexní sloučeniny těchto kovů. Přesnější vyjadřování by rozhodně nebylo na škodu.
- Str. 41, odst. 1, řád. 9. Zde se objevuje výraz „symetricky substituovaný diiodderivát“. Ve schématu 19, na které se text odkazuje, však žádná taková sloučenina není. Nevyskytuje se tam ani žádný diiodderivát a ani symetricky substituovaná sloučenina.
- Str. 44, odst. 1, řád. 2. Není vůbec jasné, co diplomantka touto větou myslí. Buď se jedná o fragment věty, kde podstatná část chybí nebo se skutečně jedná o celou větu, která však postrádající logiku.
- Str. 44, odst. 2, řád. 8 a dále. Popis ¹H NMR spekter a závěry z nich odvozené jsou nejasné a zasloužily by si podrobnější diskuzi.
- Str. 45, odst. 1, řád. 10. Nevím, co si mám představit pod pojmem „dedikovaná laboratoř“?
- Kap. 3.4, str. 50. Asi by bylo bývalo neškodilo pro větší přehlednost vložit tabulku, jež by shrnula stabilitu připravených nanočástic modifikovaných sloučeninami **1-6**.

11. Str. 60, odst. 6. Pokud existují „charakterizační“ UV-VIS spektra, tak by asi také měla existovat necharakterizační spektra. Bylo by možné definovat rozdíl mezi těmito dvěma typy spekter?

12. Používání interpunkčních znamének v experimentální části je velmi zvláštní (čárky a středníky), navíc v mnoha případech na konci věty chybí tečky. Pozor na psaní velkých písmen v názvech látek (např. str 86).

13. Vřele bych doporučoval používat znaménko „×“ místo „x“, tam kde je to vhodné.

14. V závěru je napsáno, stručně řečeno, že kdyby se podařilo připravit z fragmentů grafenu ligandy pro zlaté nanočástice, tak by vznikly monovrstvy, které by byly zajímavým studijním materiálem. Jak to může diplomatka vědět, když se to nepodařilo. Toto tvrzení je pouze její představa, pro kterou neexistuje v současné době žádné experimentální potvrzení. Tato věta rozhodně v závěru nemá co dělat, neboť ten má obsahovat shrnutí toho čeho bylo dosaženo a ne přání jak by to vypadlo, kdyby se to povedlo.

Otázky týkající syntetických postupů

1. Str. 30, schéma 7. Látka **20** byla získána v nízkém výtěžku. Co byly vedlejší produkty či látky spolu nereagovaly?

2. Str. 35. Čím si diplomatka vysvětluje „zvýšenou náchylnost pyrenového systému k desilylaci“?

3. Str. 37. Zcela chybí popis retro-syntetické analýzy a zdůvodnění výběru transformačních kroků (reakcí).

4. Str. 39, schéma 16. Borylaci **42** na **37** se nepodařilo uskutečnit. Výchozí látky spolu reagovaly či ne? Nedošlo náhodou k diborylaci trojné vazby?

5. Str. 49, odst. 3, poslední věta začínající „Protože ...“. Není jasné, co se tím míní a zároveň vyvstává i zásadní otázka, proč se k modifikaci povrchu nanočástic nepoužívaly rovnou thioly, ale jejich estery. Tedy, to se alespoň tvrdí v celé diplomové práci, jež všude popisuje reakce nanočástic se sloučeninami **1-6** a nikoliv s volnými thioly.

6. Str. 68-69, příprava sloučeniny **20**. U podmínek b není jasné, co s čím reagovalo. V uvedeném postupu práce zjevně jedna operace chybí.

7. Tamtéž, teplota tání uvedené sloučeniny má neobvykle široké rozpětí 17 °C. čím je způsobené, nestálo za to sloučeninu překrystalizovat či jinak přečistit?

8. Str. 76, příprava sloučeniny **30**. Co se myslí obratem „nepříliš stálá látka“?

9. Několikrát se v práci vyskytl obrat „produkt byl odpařen do sucha“?! Například příprava sloučenin **19**, **22** a **28**. Není jasné, co to má znamenat.

Dále v popisu přípravy sloučeniny **19** (str, 67), se vyskytuje následující věta: „Produkt byl přefiltrován přes fritu se silikagelem, který byl následně promyt dichlormethanem, a odpařen do sucha.“ Co bylo odpařeno do sucha? Produkt, silikagel nebo něco jiného?

V objemu předložené práce je zcela zřejmé, že diplomantka udělala obrovský kus práce i když se ne vždy s podařilo dosáhnout kýžených cílů. Nicméně i v těchto případech získané výsledky představují cenné informace pro další výzkum v této oblasti. Závěrem bych chtěl konstatovat, že předložená diplomová práce Bc. B. Rejchrtové obsahuje nejen řadu hodnotných výsledků, ale i zcela nové a zajímavé poznatky. Ačkoliv by, podle mého názoru, bylo možné některé pasáže nejen zpracovat a komentovat jiným způsobem či podrobněji, působí předložená práce i přes některé nedostatky celkově dobrým dojmem a bylo mi potěšením ji číst. Předloženou práci doporučuji k obhajobě.

Hodnocení: Velmi dobře

V Praze

dne 5.9. 2014

.....
podpis oponenta