

Oponentský posudek

na disertační práci RNDr. Pavly Štenclové

Synthesis and properties of conjugated metallo-supramolecular polymers

Předložená disertační práce se zabývá syntézou a charakterizací série unimerů schopných tvořit metallo-supramolekulární polymery (MSP). Přes dvacet připravených finálních unimerů, z nichž většina jsou nové látky připravené několikasupňovou syntézou, jsou oligomery thiofenu zakončené terpyridinovými ligandy. Některé thiofenové jednotky jsou navíc regiospecificky substituovány skupinami, které mají zvýšit rozpustnost unimeru. Kromě syntézy jsou součástí práce experimenty charakterizující vlastnosti unimerů (absorpční, emisní spektra) a supramolekulárních polymerů s vybranými kovovými kationty.

Práce je psána v anglickém jazyce, čtivě a srozumitelně. Po formální stránce dodržuje obvyklou strukturu a kromě samotného textu (70 stránek) obsahuje jako přílohy plná znění čtyř publikací, které z práce vzešly. Úvodní přehled problematiky popisuje stručně (na 7 stranách) ale jasně konjugované polymery, supramolekulární polymery a jejich kombinací vzniklý obor metallo-supramolekulárních polymerů. Ač je úvod stručný, cituje více než 140 prací, a jako úvod do dané problematiky postačuje. V kapitole o výsledcích je pak popsána syntéza všech nových unimerů obsahujících jednu až čtyři thiofenové jednotky a obsahující hexylové, bromhexylové, trimethylammoniohexyloové nebo triethylfosfoniohexylové skupiny. Namísto obvyklého pořadového číslování sloučenin je v práci zvoleno popisování sloučenin jejich kódy odvozených ze struktury, což přispívá k přehlednosti práce. Také díky tomu, že v práci samotné jsou v experimentální části uvedeny jen obecné postupy a na syntézy a strukturální charakterizace konkrétních sloučenin je odkazováno do příloh. V dalších podkapitolách je pak popisována rozpustnost připravených sloučenin, jejich absorpční a emisní spektra v roztoku a ve formě tenkého filmu. Zde jsou také diskutovány spektrální vlastnosti MSP připravených z unimerů a Zn^{2+} nebo Fe^{2+} a jejich závislost na struktuře unimeru a vzájemném poměru unimerů a kationtů. Vlastnosti MSP byly dále sledovány pomocí SEC a viskozimetrie. Zajímavá je obzvláště značná stabilita MSP s Fe^{2+} , která umožňuje SEC měření, při němž se obvykle podobné SP rozpadají.

Doktorandka je spoluautorkou pěti publikací v impaktovaných časopisech, z nichž čtyři se týkají doktorské práce (a jsou přiloženy) a ve třech z nich je první autorkou. Objem práce, kterou odvedla, lze jistě považovat za dostatečný.

Několik nedostatků, převážně formálního charakteru, bych ale chtěl vytknout. V seznamu zkratk jich řada chybí (jako např. NMP, DMSO, Me, Et, Ph, ACN). V reakčních schématech nejsou uvedeny výtěžky reakcí, což jsou nepochybně čísla pro čtenáře zajímavá. Některé anglické výrazy, které autorka použila, nepovažuji za optimální. Jako např. „preciously synthesized“ či „preciously characterized“, nebo „evidences“ a poslední věta na str. 36 mi nedává příliš smysl.

K disertační práci mám následující dotazy:

- Jakým způsobem byla kvantifikována rozpustnost látek? Jaký je praktický limit pro „dostatečně“ rozpustnou látku pro dané aplikace?
- Proč jsou Stokesovy posuvy v tabulce 1 uváděny v cm^{-1} , když maxima v absorpčním a emisním spektru jsou uváděna v nm?
- Jak byly vytvářeny CIE diagramy?

- Pro charakterizaci SP se dobře hodí i metody jako je ITC nebo NMR DOSY. Zkoušela jste některou z nich, případně byly použity na Vámi popisovaný typ MSP někým jiným? Jak vychází srovnání se spektrálními metodami?
- Byl průběh reakcí při syntézách sledován pomocí TLC?
- Kdo prováděl a interpretoval NMR EXSY?
- Na str. 61 v tabulce 7 jsou popsány zkoušené metody pro kvarternizaci. Byly zkoušeny reakce v aminech samotných bez rozpouštědla i za nižších teplot?

Závěrem lze konstatovat, že cílů disertační práce bylo dosaženo a výše uvedené připomínky zásadním způsobem nesnižují celkový přínos práce. Proto práci doporučuji k obhajobě.

V Praze, dne 9. 2. 2016

Doc. RNDr. Jindřich Jindřich, CSc.
KOCH PřF UK v Praze