



Posudek školitele diplomové práce Bc. Tomáše Dendise „**Přenos elektronové excitační energie v organických sloučeninách**“

Diplomant Bc. Tomáš Dendis se seznámil se základy molekulové fotofyziky a jejími experimentálními metodami již při vypracování své bakalářské práce a výzkumného úkolu. Posléze se ve svém studiu zaměřil na inter- a intramolekulární přenos elektronové excitační energie. Vedle tradičních přenosů energie označovaných jako „through-space“, tj. Försterova coulombického a Dexterova výměnného, byl u některých vícechromoforových molekul pozorován velmi účinný, tzv. „through-bond“ přenos excitační energie. Tento přenos probíhá na časové škále kratší než stovky femtosekund a jeho fyzikální podstata nebyla dosud uspokojivě vysvětlena. Návrh nové vícechromoforové molekuly obsahující nekomplanární donorové a akceptorové π -elektronové systémy, ve které by mohl fotoindukovaný „through-bond“ přenos probíhat, byl náplní diplomantovy práce. K tomuto účelu si zdárně osvojil základy teoretických kvantově-chemických metod a naučil se používat softwareový balík Gaussian09 a GaussView6. Zvolenou molekulou se stal symetrický N,N'-difenyldiimid kyseliny pyromellitové a navíc další tři jeho deriváty s elektron-donorovými a elektron-akceptorovými funkčními skupinami.

Provedené DFT výpočty potvrdily u všech studovaných látek původní předpoklad nezbytný pro „through-bond“ přenos, tj. nekomplanaritu π -elektronových systémů. TDDFT výpočty však ukázaly, že nejnižší excitované stavy všech molekul nejsou lokalizovány na donorových, respektive akceptorových částech, nýbrž mají charakter simultánního přenosu náboje z obou donorů na centrální akceptor. Pro experimentální část práce nebyla překážkou ani tak pandemická situace, jako dynamický nákupní systém, díky němuž se podařilo pořídit výchozí látky až v závěrečné fázi práce. Přesto se všechny molekuly podařilo syntetizovat a změřením jejich UV-Vis absorpčních spekter tak ověřit výsledky výpočtů. Ačkoli se

studované látky neukázaly jako vhodné pro studium „through-bond“ přenosu excitační energie, díky povaze jejich nejnižších excitovaných stavů jsou zajímavé pro výzkum v oblasti nelineárních optických vlastností molekul. Navíc, dva deriváty s elektron-akceptorovými substituenty na rozdíl od roztoku jeví silnou žlutooranžovou luminiscenci v pevné fázi, což je činí perspektivními pro velmi aktuální studium jevu zvaného agregací indukovaná emise.

Bc. Tomáš Dendis vyniká schopností rychle se zorientovat ve zcela nové problematice. Dokáže se snadno zapojit do týmového úsilí, ale je i velmi samostatný jak v teoretické a experimentální práci, tak ve vyhodnocování a sepisování výsledků. Jeho práce přinesla cenné nové poznatky a splňuje nároky kladené na diplomovou práci, takže ji mohu jednoznačně **doporučit k obhajobě** a navrhuji hodnotit ji stupněm **A – výborně**.

V Praze dne 27. května 2022

RNDr. Martin Michl, Ph.D.

Katedra fyzikální elektroniky

FJFI ČVUT

V Holešovičkách 2

180 00 Praha 8