



**UNIVERZITA KARLOVA**  
**PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA**  
KATEDRA FYZIKÁLNÍ A MAKROMOLEKULÁRNÍ CHEMIE  
**ALBERTOV 6, 128 43 PRAHA 2**

TEL.: +420 221 95 1 297

Předkládaná diplomová práce Bc. Tomáše Dendise je zaměřena na návrh vícechromoforových molekul umožňujících přenos excitační energie mezi donorovou a akceptorovou část TBET (Through-bond energy transfer) mechanismem. Pro navržené molekuly byly provedeny základní kvantově-chemické výpočty. Navržené molekuly byly rovněž synteticky připravené podle v literatuře publikovaných postupů a rovněž byla proměřena jejich absorpční spektra.

Diplomová práce má standardní délku (68 stran včetně citací). Teoretický úvod (25 stran) tvoří více než třetinu práce a je zaměřený na vysvětlení základů kvantově chemických výpočtů, principů absorpční a zejména fluorescenční spektroskopie. Následuje výpočtová část (28 stran včetně obrázků) a experimentální část (5 stran). Celkem byly navrženy 4 molekuly na bázi N, N'-difenyldiimidu kyseliny pyromellitové (1,2,4,5-benzentetrakarboxylové kyseliny) – vlastní diimid a rovněž 3 molekuly s elektron-akceptorovými a elektron-donorovými skupinami v para poloze. Všechny molekuly splňovaly primární požadavek na umožnění TBET mechanismu, tj. nenulový dihedralní úhel mezi donorovou a akceptorovou částí molekuly. Kvantově-chemické výpočty byly provedeny pomocí programu Gaussian a výsledky zobrazeny v programu GaussView. Konkrétně bylo pro všechny molekuly provedeno na upřesnění geometrie základního elektronového stavu, výpočet hraničních molekulových orbitalů, přirozených přechodových orbitalů (NTOs, natural transition orbitals) a teoretických absorpčních spekter. V experimentální části je stručně popsána příprava sloučenin, jejich čištění tenkovrstevnou chromatografií a změření UV/vis absorpčních spekter spolu s porovnáním spekter získaných výpočtem.

Z formálního hlediska je práce sepsána věcně a srozumitelně s dobrou grafickou úpravou. Vzhledem k tomu, že je práce sepsána ve slovenském jazyce, nejsem schopna zhodnotit jazykovou stránku práce.

Práce je, nicméně, provázena některými formálními nedostatky:

1. Některé zavedené zkratky nejsou v textu definovány – např. OLED na str. 15 (tato zkratka není ani dále použita), MeOH na str. 57. Seznam zkratek rovněž chybí.
2. Ve vzorcích není správně typograficky používána kurzíva – diferenciál by měl být bez kurzívy, kurzívou pouze veličiny.
3. Kromě obrázku č. 2 jsem v textu nenalezla na žádný z dalších 56 obrázků odkaz. Podobně je tomu i u tabulek – odkaz se v textu vyskytuje pouze na 2 tabulky z celkového počtu 11.
4. Vzorec 18 udává výpočet oscilátorové síly, která se uvádí bezrozměrná, což je správně použito i v tabulkách shrnující výpočty excitovaných stavů. Nicméně, domnívám se, že tento vzorec není správně, neboť z něj vyplývající hodnota není bezrozměrná.

K odborné části práce mám následující připomínky a dotazy:

1. Na str. 42 v obrázku 24 je pravděpodobně zaměněn NTO HOMO a NTO LUMO orbital.
2. Jaké byly iso hodnoty pro zobrazené hraniční a NTO orbitály?

3. Autor uvádí, že elektronová spektra DPPDI jsou ve vynikajícím souhlasu s teoreticky vypočtenými. Čím je ale způsobena nenulová absorpce experimentálních spektrch v průběhu celého zobrazovaného rozsahu?
4. Byla napočítaná elektronová spektra škálována?
5. V práci je konstatováno, že z teoretických výpočtů se, bohužel, nepotvrdila vhodnost studovaných molekul pro umožnění TBET mechanismu. Protože však fluorescenční spektroskopii byla věnována značná část úvodu, je škoda, že se autor alespoň nepokusil studované molekuly charakterizovat pomocí některé z fluorescenčních metod.
6. V práci mi rovněž trochu chyběla podrobnější diskuze rozdílů hraničních a NTO orbitalů jednotlivých molekul mezi sebou. Diskuze výsledků v práci, srovnání s konkrétními molekulami z literatury, pro něž byl TBET přenos prokázán jsem postrádala.

Závěrem konstatuji, že cíle práce formulované v pokynech pro vypracování byly splněny. Práce svou formou splňuje požadavky kladené na diplomovou práci na ČVUT. Z těchto důvodů doporučuji přijetí diplomové práce Bc. Tomáše Dendise k obhajobě a navrhuji klasifikaci stupněm B-velmi dobře.

V Praze, dne 15.5.2022

RNDr. Ivana Šloufová, Ph.D.