

UNIVERZITA KARLOVA V PRAZE
FARMACEUTICKÁ FAKULTA V HRADCI KRÁLOVÉ

Katedra biofyziky a fyzikální chemie

Studijní program: Farmacie

Posudek oponenta diplomové práce

Oponent/ka: **Mgr. Jan Švec, Ph.D.**

Rok obhajoby: 2015

Autor/ka práce: Zuzana Paušimová

Název práce:

**Vliv objemnosti neperiferně vázaných substituentů ftalocyaninů na jejich
absorpční a fotofyzikální vlastnosti**

Rozsah práce: počet stran: 60, počet grafů: 0, počet obrázků: 16,

počet tabulek: 4, počet citací: 37, počet příloh: 0

Práce je: experimentální

- a) Cíl práce je: splněn neúplně
- b) Jazyková a grafická úroveň: výborná
- c) Zpracování teoretické části: velmi dobré
- d) Popis metod: výborný
- e) Presentace výsledků: výborná
- f) Diskuse, závěry: velmi dobré
- g) Teoretický či praktický přínos práce: výborný

Případné poznámky k hodnocení:

Práce se zabývá syntézou a fotofyzikálními vlastnostmi série neperiferně substituovaných ftalocyaninů nesoucí v neperiferiferních polohách objemné skupiny: adamantylsulfanyl, fenylsulfanyl a 2,6-dimethylfenylsulfanyl. Cíl práce je v textu přehledně popsán.

V teoretické části autorka zpracovala základní poznatky o fluorescenci, o zhášení fluorescence a o fluoroforech. Metodická část se zabývá strukturou a syntézou ftalocyaninů. Navazuje experimentální část, kde je zpracován postup příprav a charakterizace látek a stručný popis fotofyzikálních měření. Z další kapitoly výsledky a diskuze je patrná logická návaznost jednotlivých kroků. Práce odpovídá rozsahu diplomové práce a z počtu reakcí a měření lze usoudit, že autorka uskutečnila i velké množství práce v laboratoři.

Připraveny byly tři prekurzory s vysokými výtěžky, z toho jeden byl optimalizován. Neperiferní ftalocyaniny byly připraveny jako hořečnaté a zinečnaté komplexy a jako bezkovový derivát a to v případě substituce fenylsulfanylu a 2,6-dimethylfenylsulfanylu. Z cílových molekul se substitucí adamantylsulfanylu byl detekován pouze bezkovový derivát, nebyl však izolován a dostatečně potvrzen. Jak je uvedeno v práci, přípravu většího výtěžku zřejmě neumožňuje objemnost skupiny. Autorka prokázala, že neperiferní objemné skupiny vliv na fotofyzikální vlastnosti ftalocyaninu mají, avšak autorka v závěru práce neuvedla, je-li vliv závislost nebo vliv je nahodilý.

Dotazy a připomínky:

V seznamu zkratk chybí Ac (použito např st. 24) a Oct (st. např. 30), což není obvyklá zkratka.

Na str. 13 píšete, cituji: "U fluorescence je záření emitováno atomem, jenž energii pohltí." Je zde na místě použít slovo atom?

Dále na stejné straně, cituji: "V případě fosforescence je emitované záření vyzařované z jiného atomu, než který energii pohltí." Můžete popsat jak vypadá emise z jiného atomu? Z posledního odstavce st. 13 cituji: "Zpožděná fluorescence je zářivý přechod ze stejného singletového stavu (S1) jako při fluorescenci, ale dochází k delší době dohasínání dané časem, po který je molekula v metastabilním tripletovém stavu." Tedy i zde je molekula v tripletovém stavu jako při fosforescenci a v tom případě, jaký je rozdíl zpožděné fluorescence od fosforescence?

St. 18: " Kvantový výtěžek (Φ) je poměr počtu vyzářených a absorbovaných světelných kvant za sekundu. Je to poměr pozorované střední doby dohasínání fluorescence a vnitřní doby života vybuzeného stavu bez zhášecích mechanismů." Proč za sekundu respektive jakou má jednotku? Citace k tomuto tématu uvádíte učebnice a skripta (stejná jako v jiných kapitolách), četla jste původní publikace věnující se dané problematice?

Na st. 52 uvádíte UV-Vis spektrum bezkovového Pc s adamantylsulfanyly. Přitom Q pás obecně bývá u bezkovových derivátů Pc štěpen z důvodu snížení symetrie přítomností vodíků v centru. Platí to i pro neperiferně substituované Pc?

V obr. č. 14 jsou spektra hořečnatých komplexů nebo bezkovových derivátů (není popsáno)?

Na str. 55 uvádíte struktury predikované výpočtově, ale neuvádíte jakou metodou byla struktura počítána. V obr. 16 není patrné jestli prostřední struktura je počítaná nebo je to krystalová struktura.

Odpovídá počítaná struktura struktura získané z krystalu z obr. 16?

Celkové hodnocení: výborně, k obhajobě: doporučuji

V Hradci Králové dne 24.5. 2015

.....
podpis oponentky / oponenta