

Oponentní posudek disertační práce

Ústav: Středoevropský technologický institut VUT

Akademický rok: **2023/2024**

Student (ka): **Ing. Jana Juráková**

Doktorský studijní program: **Pokročilé materiály a nanovědy**

Studijní odbor: **Pokročilé nanotechnologie a mikrotechnologie**

Vedoucí disertační práce: doc. Ing. Ivan Šalitroš, Ph.D.

Oponent disertační práce: doc. RNDr. Bohuslav Drahoš, Ph.D.

Název disertační práce: Koordinační sloučeniny vykazující magnetickou bi- a multistabilitu

Aktuálnost tématu disertační práce:

Téma molekulového magnetizmu je dlouhodobě ve středu zájmu anorganické a koordinační chemie. V současné době je téma nanejvýše aktuální, protože se pozornost soustřeďuje od pouhého pozorování pomalé relaxace magnetizace ke zkoumání a lepšímu pochopení principů jednotlivých mechanismů pomalé relaxace magnetizace a hledání způsobů jejich cíleného ovlivňování. Zároveň se práce snaží najít přesah do aplikační oblasti díky výzkumu depozice připravovaných molekul na povrchy a tvorby tenkých vrstev/filmů.

Splnění stanovených cílů:

Cíle práce jsou definovány spíše obecnějším způsobem, kdy by mohly být více doplněny o informace o chemické struktuře studovaných látek (na základě čeho byly vybrány, proč byly zvoleny konkrétní strukturní modifikace apod.). Na druhou stranu poskytují velmi jasný rámec postupu práce a použitých metod a měření potřebných k úspěšnému vyřešení a dokončení disertační práce. Objektivně vzato se na základě předložených výsledků vytyčené cíle práce naplnit podařilo.

Postup řešení problému a výsledky disertace:

Postup řešení problematiky práce je jasně daný a popsáný v kapitole cíle práce. Podle tohoto postupu bylo také při řešení práce postupováno – příprava ligandů, příprava jejich Co(II) komplexů, jejich základní charakterizace, zjištění molekulové struktury, provedení magnetochemických měření a dalších sofistikovaných měření (HF-EPR, FIRMS), výsledná zkouška depozice připravených sloučenin na povrchy. Výsledky práce jsou opět velmi jasně a

detailně popsané v kapitole 6 Výsledky a diskuze a jejich kvalita je na vysoké úrovni, o čemž svědčí i fakt, že byly publikovány ve formě prvoautorské publikace ve velmi kvalitním časopisu Inorganic Chemistry Frontiers (D1). Na druhou stranu mi chybí explicitní informace a jednoznačné označení publikací, ke kterým vedly výsledky v této práci a publikace, které jsou nad rámec či mimo téma disertační práce. Publikace, do kterých prezentované výsledky vyústily by měly být rozhodně přiloženy k práci (a tím se usnadnila orientace a případně se ušetřily některé jiné přílohy).

Význam pro praxi nebo rozvoj vědního oboru:

V rámci práce bylo připraveno velké množství nových látek, byl představen koncept zavádění dlouhých alkylových / karboxylových skupin na heterocyklické dusíkové atomy (2,6-bis(2-benzimidazolyl)pyridin a 2,6-di(1-pyrazolyl)pyridin) v souvislosti s ovlivněním rozpustnosti připravených sloučenin v nepolárních a těkavých organických rozpouštědlech nebo s tvorbou polymerních sítí, organizace a sebeuspořádání.

Získané výsledky přispěly k rozvoji vědomostí v oblasti molekulového magnetismu Co(II) komplexů především z pohledu bližší analýzy a pochopení mechanismů pomalé relaxace magnetizace a způsobu jejich následné depozice na různé typy povrchů.

Formální úprava disertační práce a její jazyková úroveň:

Práce je psána v anglickém jazyce, který je na dobré úrovni. Zde musím velmi kladně ohodnotit kapitolu Introduction, která je psána velmi přehledně a čtivě a především obsahuje přesně ty potřebné informace k pochopení problematiky dále diskutované v práci a toto vysvětlení je na adekvátní úrovni – není příliš povrchní ani nezabíhá do zbytečných detailů (zde se pravděpodobně pozitivně projevila zkušenost ze psaní přehledového článku – příloha 8.14).

Na druhou stranu, přestože práce obsahuje kapitolu Results and Discussion, tak v této kapitole lze nalézt především popis výsledků (styl je možná až příliš popisný a v každé kapitole se opakuje dokola) s malým množstvím jejich diskuze. Obsahuje sice porovnání alespoň v rámci každé studované skupiny, ale už chybí jakékoliv jiné srovnání ať už vůči dalším skupinám nebo jiným studovaným látkám. Vyvození z toho plynoucích závěrů by mohlo být formulováno jasněji. Diskuzi potom částečně nahrazuje kapitola Conclusion, která má právě takový charakter. Takže v tomto pohledu by chtělo diskuzi více rozšířit, aby byla problematika celkově shrnuta, vyvozeny závěry a případně provedeno porovnání s dříve studovanými strukturně podobnými systémy a bylo jednoznačně shrnuto, v čem je přínos předložené práce.

Kapitola Conclusion pro mě nepochopitelně na str. 80/81 obsahuje znovu rozdělení práce na jednotlivé kapitoly a popisuje, co tyto kapitoly obsahují (kopíruje tak část kapitoly Introduction).

Nelze jednoduše poznat, které výsledky patří do kterých publikací a také patřičné publikace nejsou přiloženy v přílohách.

Označení sloučenin čísla C1-C21 je při čtení textu poměrně těžko sledovatelné, pokud před sebou čtenář nemá po celou dobu tabulku s legendou.

Volili bych jiné číslování ligandů studovaných v rámci práce, začínat číslování vlastního ligandu jako L30 pak v textu působí zvláště.

Že v závěru není nalezena korelace mezi strukturními parametry a parametry relaxace magnetizace není překvapující, ale nemělo by to odradit od dalšího výzkumu s přihlédnutím k dalším parametrům více popisujícím krystalovou než molekulovou strukturu (pro případ komplexů s $D > 0$, kdy se z principu nejedná o Orbachův mechanismus).

Zda dizertační práce splňuje podmínky uvedené v § 47 odst. 4 zákona:

(4) Studium se řádně ukončuje státní doktorskou zkouškou a obhajobou disertační práce, kterými se prokazuje schopnost a připravenost k samostatné činnosti v oblasti výzkumu nebo vývoje nebo k samostatné teoretické a tvůrčí umělecké činnosti. Disertační práce musí obsahovat původní a uveřejněné výsledky nebo výsledky přijaté k uveřejnění.¹⁾

Disertační práce splňuje výše uvedené podmínky.

Připomínky a dotazy:

1. V přílohách se objevila nezřazovaná NMR a FTIR spektra, Fig. A1 – b a Fig. A4 - f, g, i. Prosím o jejich správné zřazování a dodání opravy během obhajoby.
2. Pokuste se objasnit přítomnost ferromagnetické interakce u komplexu C2? Ostatní strukturně podobné komplexy toto chování totiž nevykazují. Jaká je nejkratší meziatomová vzdálenost Co(II)-Co(II)? Může v tom hrát roli fakt, že např. acetátový anion by mohl fungovat jako můstkující ligand mezi dvěma atomy kobaltu (přítomnost jiného komplexu jako nečistoty)?
3. Proč byly vybrány zrovna C8, pak C12 a C6 alkylové zbytky a jaké to mělo konsekvence hlavně na výsledné magnetické vlastnosti, především z pohledu pomalé relaxace magnetizace? Jaký má být přínos přípravy derivátu s C6 (ligand L32) oproti dvěma dříve studovaným (L30 a K31)?
4. V případě komplexů s $[\text{CoX}_4]^{2-}$ anionty, jakým způsobem byl odstraněn vliv aniontu na magnetické vlastnosti (DC i AC data)? Bylo by možné použít nějaký jiný diamagnetický aniont (vycházet při přípravě komplexů typu $[\text{CoL}_2]$ např. z chloristanu kobaltnatého, jak bylo uděláno pro další komplexy C5, C6, C14-C18)? Proč nebyla fitována DC data pro komplexy C5-C7 a C12-C21? Pokuste se vysvětlit nebo doplnit. Ocenil bych přidání sloupce s hodnotami parametrů D a E do tabulky A3, obdobně jak je to uděláno v tabulce A1.
5. Pokuste se blíže vysvětlit význam parametru α v Debyeově modelu.
6. Proč nebyl připraven komplex typu $[\text{Co}(\text{L32})\text{Cl}_2]$, aby byly jeho magnetické vlastnosti porovnány s bromidovým analogem?
7. U studovaných komplexů C1-C21 prosím uveďte, které z nich již byly publikovány a v jakých publikacích. A také uveďte, které zatím publikovány nebyly, případně jaké publikace jsou v přípravě.

¹⁾ § 10 zákona č. 35/1965 Sb., o dílech literárních, vědeckých a uměleckých (autorský zákon).

Celkové zhodnocení disertační práce:

Celkově je disertační práce na velmi dobré úrovni a přináší nové poznatky z oblasti jednomolekulového magnetizmu kobaltnatých komplexů a otevírá možnosti pro jejich následné praktické využití.

Disertační práci Ing. Jany Jurákové tedy doporučuji k obhajobě pro udělení akademického titulu “doktor“ (Ph.D.).

V Olomouci dne 05. 05. 2024

.....

doc. RNDr. Bohuslav Drahoš, Ph.D.