

Posudek oponenta habilitační práce

Masarykova univerzita	Přírodovědecká
Fakulta	Fyzikální chemie
Obor řízení	Mgr. Dominik Heger, Ph.D.
Uchazeč	Ústav chemie
Pracoviště uchazeče	<i>Spektroskopické studie k objasnění interakcí látek na ledu a mechanismů fotochemických reakcí</i>
Habilitační práce (název)	
Oponent	Prof. Dr. Lubomír Špaňhel
Pracoviště oponenta	Masarykova univerzita, Ústav chemie

Text posudku

Předložená habilitační práce shrnuje výsledky experimentálních výzkumných aktivit v oblasti heterogenní a mechanistické fotochemie, které byly Dr. D. Hegerem získány v letech 2006-2016 a prezentovány ve dvacetipěti publikacích v respektovaných odborných periodikách (např. J. Phys. Chem. A, J. Am. Chem. Soc, J. Org. Chem., Langmuir, Atmos. Chem. Phys., aj.). Autorem deklarované podíly na jednotlivých publikacích v rámci kolektivů autorů jsou v rozmezí od 5% do 60%. Po stránce tematické jsou publikace (resp. autorovy příspěvky) zaměřené zejména na (1) heterogenní fotochemické studie na ledu a dále na (2) transientní optickou spektroskopii fotochemických chránicích skupin v homogenních organických systémech.

V úvodní části habilitační práce (ca. 40 stran odborného textu) jsou představeny základní teoretické přístupy, metodické postupy a reprezentativní výsledky výše zmíněných dvou výzkumných směrů:

(1) Optické absorpční a fluorescenční vlastnosti organických a anorganických sloučenin imobilizovaných na povrchu ledu (benzen, deriváty naftalenu, dusičnan uranylu); Zásadním přínosem autora v této relativně nové, populární tematice se jeví: (i) příspěvek k problematice tvorby excimerů benzenu a naftalenu na povrchu ledu; (ii) využití solí dusičnanu uranylu jako fluorescenční sondy ve studiu fázových strukturálních změn při tvorbě ledu; (iii) stabilizace enzymatické aktivity zmrazených proteinů založené na kontrole hodnoty pH v průběhu procesu zmrazování.

(2) Časově rozlišené pozorování fotochemického rozpadu systémů „chránicí skupina-aktivní molekula“. Zde se Dr. Heger podílel na měření a interpretaci četných kinetických studií s rozlišením několika nanosekund až subpikosekund. V rámci těchto mechanistických studií věnoval největší pozornost fotochemii p-hydroxyacetofenonu a od něj odvozené chránicí skupiny p-hydroxyfenacylové. V nejnovější autorem zmíněné publikaci se jeho výzkum taktéž orientoval směrem k objasnění fotochemického chování chromoforu bengálské červeně.

Práce není sepsána v anglickém jazyce, je ale přehledná a reflektuje autorův silný engagement a nadšení pro fotofyzikální a fotochemické vědní obory. Pokud bych měl zmínit nějaké nedostatky, tak snad týkající se stylu prezentace první části práce. Míra vynaloženého úsilí a organizační či technické problémy spojené s realizací výzkumu jakožto historická pojednání o Porterově transientní spektroskopii, to vše nepatří do textu této habilitační práce. Taktéž zde nepatří pojednání o výzkumu v rámci bakalářské, diplomové a doktorské práce, o kterých by byla bývala

stačila půlstránková zmínka. Místo toho všeho by bylo bývalo užitečnější, představit některé reprezentativní výzkumné výsledky detailněji či malinko kompletněji.

Dotazy oponenta k obhajobě habilitační práce

1. V rámci studií fotochemických vlastností naftalenu na povrchu ledu zveřejnil autor v roce 2015 (JPC A) kritický komentář ohledně tvorby naftalenových excimerů, pozorovaných v americké výzkumné skupině DJ Donaldsona. Skupina autora nepotvrdila tyto výsledky a vysvětlila je kontaminací Donaldsonových vzorků antracénem. Pokud vím, reagovala skupina Donaldsona na tento komentář a adresovala mnohá vysvětlení ve výše zmíněném časopise. Jak hodnotí Dr. Heger Donaldsonovu odpověď a závěrem, existuje definitivní odpověď na otázku tvorby naftalenových excimerů v jakékoli morfologii ledu?
2. Autor, ve své Langmuirské publikaci z roku 2014, mimo jiné poukazuje na komplexní rozpad luminescence chloristanu uranylu v ledu, který je interpretován na bázi tří různě situovaných frakcí uranylu. Neexistuje jiná interpretace neexponenciálního charakteru rozpadu luminescence? Snímky SEM sice potvrzují povrchovou akumulaci luminoforu, ale taktéž zvýšenou povrchovou, a asi i interní strukturální heterogenitu. Bylo by možné použít KWW-model (viz. S. Dai et al, JPC B, 1997, 101, 5521) nebo Klafter-Blumenovu teorii (viz. Kohls et al, APL 2002, 81, 3858) k analýze komplexní dynamiky luminescence a k následovně alternativní (možná více realistické) interpretaci výsledků?

Závěr

Závěrem lze konstatovat, že práce výstižně shrnuje výsledky výzkumu autora za více než 10 let jeho působení v oblasti homogenní a heterogenní fotochemie organických molekul. Práce má vysokou odbornou úroveň, kterou nejlépe charakterizují výše zmíněné publikace. Habilitační práce Dominika Hegera „Spektroskopické studie k objasnění interakcí látek na ledu a mechanismů fotochemických reakcí“ jasně dokládá jeho velmi dobrou připravenost a schopnost definovat a koordinovat atraktivní výzkum s důležitými výstupy pro budoucí aplikace. Práce **splňuje** požadavky standardně kladené na habilitační práce v oboru Fyzikální chemie.

V Praze dne 22.02.2017