

Posudek oponenta bakalářské práce

Jméno a příjmení uchazeče/uchazečky: **Jan Rys**

Název práce: Dimerní cyklamové ligandy

A. Komentář k odbornému zaměření, náplni a rozsahu bakalářské práce (BP)

V předkládané bakalářské práci se uchazeč Jan Rys zaměřil na syntézu v literatuře dříve popsaného dimerního makrocyclického ligandu odvozeného od cyklamu (1,4,8,11-tetraazacyklotetradekan), který ve své práci označuje zkratkou Plerixafor. U připraveného ligandu bylo pomocí potenciometrických titrací studováno jeho acidobazické chování, a také koordinační chování vůči vybraným iontům přechodných kovů (Cu^{2+} , Zn^{2+}). Získané protonizační konstanty i konstanty stability komplexů byly srovnány s daty získanými pro cyklam. Odvedená experimentální práce odpovídá svým rozsahem nárokům kladeným na bakalářské práce na PřF UK.

1. Hodnocení odborné části BP

- | | |
|-------------------------------------|--|
| <input type="checkbox"/> | A – metodicky přiměřená, data dobře zpracována a interpretována, rozsahem vykonané práce adekvátní |
| <input checked="" type="checkbox"/> | B – omezená rozsahem, s drobnými metodickými nedostatky nebo nejasnostmi v interpretaci dat |
| <input type="checkbox"/> | C – nedůsledná nebo s četnými metodickými nedostatky ale odpovídající požadavkům kladeným na BP |
| <input type="checkbox"/> | N – odborně nedostatečná, neodpovídající požadavkům kladeným na BP |

B. Bodové hodnocení jednotlivých částí/ aspektů práce

1. Rozsah bakalářské práce (BP) a její členění

- A – přiměřený, odpovídající charakteru BP a významu jednotlivých částí
- B – členění není zcela logické nebo rozsah jednotlivých částí nekoresponduje s významem
- C – výrazně nevyrovnaný, rozsah některých částí zásadně nedostačuje
- N – **nedostatečné ve více ohledech**

2. Odborná správnost

- A – výborná, bez závažnějších připomínek
- B – velmi dobrá, s ojedinělými drobnými vadami (nejasnosti, chyby ve vzorcích nebo chemických názvech, nedokonalý popis metod nebo získaných výsledků)
- C – uspokojivá, s čtenějšími drobnými vadami
- N – **nedostačující, s hrubými chybami**

3. Úvod do problematiky a uvedení použitých literárních či jiných zdrojů

- A – bez připomínek, všechny převzaté údaje citovány, počet citací odpovídá charakteru BP
- B – uspokojivý, místy nedostatečně propracovaný nebo s celkově nižším počtem citací
- C – rozsahem neadekvátní charakteru BP nebo s vážnějšími závadami (např. převažují "nestandardní" odkazy na učebnice, přednášky, webové stránky)
- N – **nevyhovující, velmi málo citací event. rysy plagiátu**
(časté opomíjení odkazu na zdroj převzatých dat, popř. opsání velkých částí textu)

4. Jazyk práce

- A – výborný, práce je napsána čtivě a srozumitelně, bez závažných gramatických a pravopisných chyb
- B – velmi dobrý, ojedinělé stylistické neobratnosti, gramatické nebo pravopisné chyby
- C – upokojivý, čtenější neobratné nebo nejasné formulace, gramatické nebo pravopisné chyby
- N – **nevyhovující; nelogické nebo nesprávné formulace, četné hrubé chyby**

5. Formální a grafická úroveň práce

- A – výborná, bez překlepů a chyb ve formátování
- B – velmi dobrá, ojedinělé chyby formátování, překlepy, chybějící zkratky apod.
- C – uspokojivá, s ojedinělými závažnějšími nebo čtenějšími drobnými chybami
- N – **nevyhovující, s četnými hrubými chybami**

Případný slovní komentář k bodům B1–5.

Uchazeč v úvodu své bakalářské práce poskytuje stručný úvod do chemie dusíkatých makrocyclických ligandů a zdůvodňuje motivaci pro jejich studium. Použité experimentální techniky a metody charakterizace látek jsou přiměřeným způsobem popsány v experimentální části práce. V části věnované NMR spektroskopii mi však chybí jednoznačně uvedené rezonanční frekvence jednotlivých měřených jader a použité standardy pro chemický posun. V bakalářské práci lze nalézt několik překlepů, nejasných formulací či formálních nedostatků. Jako příklad lze uvést část 3.1 věnovanou diskuzi vlastní syntézy ligandu - číslování jednotlivých látek v uvedeném reakčním schématu (Obrázek 8) nekorresponduje s číslováním použitým v komentáři, nebo překlepy v abstraktu psaném v anglickém jazyce. U obrázků 9 a 10 znázorňujících molekulu ligandu Plex a jeho měďnatého komplexu potom postrádám zevrubnější popis (v legendě by mělo být například uvedeno, že byly zobrazeny pouze vodíky aminoskupin). Vzhledem k tomu, že byla struktura měďnatého komplexu $[\text{Cu}_2(\text{Plex})](\text{ClO}_4)_4$ stanovena pomocí rentgenostrukturní analýzy, zasloužil by dle mého názoru tento komplex kompletní experimentální charakterizaci. V textu by rovněž měly být uvedeny reference na software použitý při analýze a upřesnění rentgenostrukturních dat, ačkoliv nebyla pravděpodobně provedena samotným autorem bakalářské práce. Přes uvedené nedostatky navrhuji přijmout předloženou práci jako práci bakalářskou. Klasifikace se pohybuje mezi stupněm velmi dobře a dobře.

C. Obhajoba BP

Dotazy k obhajobě

- 1) Připravené meziproducty byly charakterizovány pomocí ^1H NMR spektroskopie. Z jakého důvodu byla zrovna látka **6** charakterizována pouze ^{13}C NMR spektroskopii. Jedná se o dekaplovaná spektra? Z jakého důvodu nebyly signály v ^1H NMR spektrech kvantifikovány pomocí integrace?
- 2) V experimentální části zmiňujete, že byly studovány komplexy měďnaté, zinečnaté, nikelnaté a kobaltnaté. Komplex kobaltnatý je nestálý a podléhá snadno oxidaci, proto nebyl dále studován. V práci jsem však nenašel žádnou další zmínku o vlastnostech nikelnatého komplexu. Byl studován obdobným způsobem jako komplexy Cu^{2+} a Zn^{2+} ?
- 3) Podařilo se Vám získat monokrystal komplexu $[\text{Cu}_2(\text{Plex})](\text{ClO}_4)_4$ vhodný pro rentgenostrukturní analýzu. Lze nalézt ve struktuře látky vodíkové vazby (intra- nebo intermolekulární)? Z Obrázku 10 se zdá, že koordinační okolí měďnatého iontu je značně deformované - konkrétně donorové atomy v axiálních polohách se zdají být vychýlené z ideálního lineárního uspořádání - jaký je úhel O-Cu-O? Lze případnou deformaci vysvětlit intramolekulární vodíkovou vazbou, která je zřejmě přítomna?
- 4) Na základě elementární analýzy jste určil, že ligand Plex byl Vámi popsáním způsobem získán ve formě heptahydrátu. Později se Vám strukturu ligandu podařilo potvrdit pomocí rentgenostrukturní analýzy. Krystalizuje Vámi připravená látka z vodního prostředí rovněž jako heptahydrát?

Stanovisko k opravě chyb: opravný lístek/oprava v textu **NENÍ** podmínkou přijetí práce

D. Celkový návrh

Práci doporučuji k přijetí k dalšímu řízení: **ANO**

Navrhovaná celková klasifikace: **dobře**

Datum vypracování posudku:

3. 6. 2019

Jméno a příjmení, podpis oponenta:

RNDr. Jiří Schulz, Ph.D.