

## Posudek oponenta bakalářské práce

Jméno a příjmení uchazeče/uchazečky: **Jakub Obuch**

Název práce: Lanthanide complexes of DOTA-"trans"-diamide

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

Bakalářská práce Jakuba Obucha je zaměřena na dlouhodobě řešenou problematiku ve skupině bioanorganické chemie a doplňuje systematicky studovanou třídu ligandů odvozených od cyklenu o přípravu nového derivátu DOTA a zevrubné studium jeho koordinačních vlastností. Zde je využita prakticky všechna dostupná metodika - studium kinetiky komplexace a dekomplexace, studium termodynamické stability komplexů pomocí potenciometrických titrací, studium struktury připravených látek pomocí difrakce Roentgenova záření na monokrystalu, luminiscenční spektroskopie připravených sloučenin a především NMR studium připravených látek v roztoku. S výjimkou roentgenovské difrakce jsou všechny metody studia stručně představeny v úvodu a způsob, s jakým jsou dané kapitoly sepsány, svědčí o hlubokém vhledu autora do těchto metod.

#### 1. Hodnocení odborné části BP

<input checked="" type="checkbox"/>	A – metodicky přiměřená, data dobře zpracována a interpretována, rozsahem vykonané práce adekvátní
<input 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"/>	<b>N – odborně nedostatečná, neodpovídající požadavkům kladeným na BP</b>

## B. Bodové hodnocení jednotlivých částí/aspektů práce

1. Rozsah bakalářské práce (BP) a její členění	
<input checked="" type="checkbox"/>	A – přiměřený, odpovídající charakteru BP a významu jednotlivých částí
<input type="checkbox"/>	B – členění není zcela logické nebo rozsah jednotlivých částí nekoresponduje s významem
<input type="checkbox"/>	C – výrazně nevyrovnaný, rozsah některých částí zásadně nedostačuje
<input type="checkbox"/>	<b>N – nedostatečné ve více ohledech</b>

2. Odborná správnost	
<input checked="" type="checkbox"/>	A – výborná, bez závažnějších připomínek
<input type="checkbox"/>	B – velmi dobrá, s ojedinělými drobnými vadami (nejasnosti, chyby ve vzorcích nebo chemických názvech, nedokonalý popis metod nebo získaných výsledků)
<input type="checkbox"/>	C – uspokojivá, s četnějšími drobnými vadami
<input type="checkbox"/>	<b>N – nedostačující, s hrubými chybami</b>

3. Úvod do problematiky a uvedení použitých literárních či jiných zdrojů	
<input checked="" type="checkbox"/>	A – bez připomínek, všechny převzaté údaje citovány, počet citací odpovídá charakteru BP
<input type="checkbox"/>	B – uspokojivý, místy nedostatečně propracovaný nebo s celkově nižším počtem citací
<input type="checkbox"/>	C – rozsahem neadekvátní charakteru BP nebo s vážnějšími závadami (např. převažují "nestandardní" odkazy na učebnice, přednášky, webové stránky)
<input type="checkbox"/>	<b>N – nevyhovující, velmi málo citací event. rysy plagiátu</b> (časté opomíjení odkazu na zdroj převzatých dat, popř. opsání velkých částí textu)

4. Jazyk práce	
<input checked="" type="checkbox"/>	A – výborný, práce je napsána čtivě a srozumitelně, bez závažných gramatických a pravopisných chyb
<input type="checkbox"/>	B – velmi dobrý, ojedinělé stylistické neobratnosti, gramatické nebo pravopisné chyby
<input type="checkbox"/>	C – upokojivý, četnější neobratné nebo nejasné formulace, gramatické nebo pravopisné chyby
<input type="checkbox"/>	<b>N – nevyhovující; nelogické nebo nesprávné formulace, četné hrubé chyby</b>

5. Formální a grafická úroveň práce	
<input checked="" type="checkbox"/>	A – výborná, bez překlepů a chyb ve formátování
<input type="checkbox"/>	B – velmi dobrá, ojedinělé chyby formátování, překlepy, chybějící zkratky apod.
<input type="checkbox"/>	C – uspokojivá, s ojedinělými závažnějšími nebo četnějšími drobnými chybami
<input type="checkbox"/>	<b>N – nevyhovující, s četnými hrubými chybami</b>

## Případný slovní komentář k bodům B1–5.

Práce samotná je sepsána skvělou angličtinou a na cca 80 stranách přináší řadu výsledků, jejich srovnání s relevantními sloučeninami a fundovanou diskusi, a bezesporu patří mezi nejlepší bakalářské práce, které jsem kdy četl. Rozsahem a množstvím výsledků by pak jistě zastínila některé práce diplomové (možná i jejich většinu), a připomíná spíše pasáže z prací disertačních. Práce navíc obsahuje jen extrémně malé množství překlepů a typografických nedokonalostí.

## C. Obhajoba BP

### *Dotazy k obhajobě*

Syntéza látky 5 (alkylace cyklohexenu se dvěma acetamidovými pendanty pomocí tert-butyl bromacetátu) poskytla výborný výtěžek. Alkylačního činidla byl použit nadbytek. V takovém případě ale obvykle dochází ke vzniku kvartérních solí. Nebylo pozorováno?

Při NMR titraci bylo pozorováno rozštěpení signálu jedné z methylenových skupin na dva píky, zatímco dvojice vodíkových atomů ostatních methylenů zůstávají magneticky ekvivalentní. Je nějaké rozumné vysvětlení pro toto pozorování?

Na základě NMR studie Eu(III) komplexu bylo provedeno přiřazení (resp. rozdělení) signálů na dvě poloviny molekuly, avšak nešlo rozhodnout, který set signálů přísluší "acetátové" a který "acetamidové" části. Je nějaká šance (nějaký dosud nepoužitý typ experimentu), že se podaří toto rozlousknout a skelet plně přiřadit?

V <sup>1</sup>H NMR spektru Eu(III) komplexu byly pozorovány dva izomery zhruba v poměru 4:1, nicméně přiřazení bylo trochu komplikováno překryvem některých signálů a nízkou intenzitou méně zastoupeného izomeru, takže nebyly pozorovány některé krosníky. Je nějaký způsob, jak by bylo možné zvýšit zastoupení minoritního izomeru, případně více rozseparovat signály obou izomerů od sebe?

V zadní části Ln(III) série dochází k opětovnému objevení TSA isomeru, který ve střední části Ln(III) série zcela vymizel. Je pro to nějaké vysvětlení? Obsah TSA izomeru je navíc velmi malý, nemůže to být nějaká nečistota (např. částečná/úplná hydrolyza amidu)?

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: **výborně**

Datum vypracování posudku:

9. 10. 2019

Jméno a příjmení, podpis oponenta:

Jan Kotek