



Posudek oponenta na bakalářskou práci

Oponent: RNDr. Jan Blahut, Ph.D.

Autor práce: Andrej Šmelko

Školitel: prof. RNDr. Petr Hermann, Ph.D.

Název: Fluórované makrocykly pro ^{19}F MRI

Navrhované hodnocení: výborně

V předložené bakalářské práci se Andrej Šmelko zabývá syntézou *N*-substituovaných derivátů cyclamu určených jako ligandy pro přechodné kovy s plánovaným využitím v podobě kontrastních látek v ^{19}F -MRI.

Tématu jaderné magnetické resonance, a to především v přítomnosti paramagnetických center, je věnována první část úvodu. Ve druhé pak autor shrnuje některá specifika ^{19}F -MRI a požadavky kladené na kontrastní látky. Úvod, ač relativně krátký, je napsán čtivým jazykem a dokazuje poměrně hluboké porozumění autora této ne vždy zcela jednoduché problematice.

Samotným experimentálním cílem práce je pak reprodukování dříve publikované syntézy ligandu s fosfonátovou koordinující skupinou a příprava nového ligandu s hydroxymethylfosfinátovou skupinou vycházející z podobných prekurzorů. Od tohoto nového ligandu je následně připraven nikelnatý komplex. Veškeré syntetické postupy jsou přehledně a jasně popsány v experimentální části, včetně charakterizace a několika užitečných technických detailů. Jmenovitě například způsob odlišení různých derivátů kyseliny fosforené při vyvolávání TLC.

Diskuze, ač přehledně a jasně napsaná, pak ovšem poukazuje na hlavní problém práce a tím je nízká míra optimalizace nově popsaných syntéz. Fráze typu: „Po neuspokojivém odstranění pyridinu na RVO se přistoupilo k přečištění na slabém kationtovém iontoměnič“ (str. 25). Ukazují, že nově popsané syntézy byly provedeny pravděpodobně jen jednou. Věřím ale, že budou optimalizována během dalšího výzkumu.

V poslední části diskuze pak autor analyzuje strukturní parametry získaného nikelnatého komplexu, jeho základní charakteristiky z pohledu ^{19}F -NMR a zběžně je porovnává s analogickými systémy z literatury. Zde postrádám diskuzi druhého cíle práce, kterým byla příprava železnatého komplexu. Závěr práce pouze uvádí, že tento cíl nebylo možné z objektivních důvodů naplnit, bez jakékoli specifikace o jaké, chemické či jiné, důvody se jednalo. Nešlo-li o chemické problém nevidím důvod tento cíl v práci vůbec uvádět.

I přes tyto drobné nedostatky a spíše kratší rozsah, hodnotím předloženou práci jako velmi kvalitní a svým obsahem i formou plně dostačující pro získání bakalářského titulu. Budou-li uspokojivě zodpovězeny následující dotazy navrhuji hodnocení **výborně**.

K uvedené práci si dovoluji položit tyto otázky:

- Na straně 2, odstavec 4 autor tvrdí, že jaderný spin v blízkosti nepárového elektronu pociťuje silnější magnetické pole, než by pociťoval volný jaderný spin a je tudíž posunuto k vyšším rezonančním frekvencím. Předpokládám, že má autor na mysli dipol-dipolární interakci mezi jaderným a elektronovým spinem. Je však obecně pravda, že tato interakce vede vždy k vyšším rezonančním frekvencím? Jakým způsobem závisí na geometrii systému?



UNIVERZITA KARLOVA
Přírodovědecká fakulta

- b) V charakterizaci připravené kyseliny hydroxymethylfosfinové uvádíte také její ^{31}P -NMR spektrum měřené v D_2O při vysokém pH. Nedochozí za těchto podmínek k výměně ^1H v P-H vazbě za ^2H ? Jak by se taková výměna projevila ve ^{31}P -NMR spektru.
- c) V diskuzi autor uvádí, že analogický komplex kobaltnatého iontu by mohl mít výhodnější NMR-relaxační charakteristiky pro ^{19}F -MRI, ale jeho syntéza je náročnější. Z jakého důvodu je náročnější, a jaký postup by autor navrhoval?

Jan Blahut
V Praze 7.7.2021

Přírodovědecká fakulta UK
Laboratoř NMR spektroskopie

RNDr. Jan Blahut, Ph.D.

e-mail: blahutj@natur.cuni.cz

adresa: Hlavova 8, 128 00 Praha 2

telefon: +420 221 951 323