

Posudek na bakalářskou práci

Název práce: Syntéza a studium vlastností thiamakrocyklů
Jméno autora: Jindřich Nejedlý
Oponent: RNDr. Jiří Kroutil, Ph.D.

Bakalářská práce Jindřicha Nejedlého má rozsah 39 stran (literární úvod 11 stran, diskuse výsledků 12 stran, experimentální část 8 stran) a je věnována přípravě makrocyklů obsahujících síru. Konečným cílem snažení výzkumného týmu na pracovišti autora práce přitom je (selektivní) komplexace fullerenu (C₆₀, C₇₀) makrocykly s využitím konceptu molekulových pinzet.

Základním principem zvoleným k realizaci záměru komplexace fullerenu je využití zesílené π - π interakce mezi elektronově bohatým sirným heteromakrocyklem a fullerenem vhodných rozměrů. V rámci bakalářské práce byla realizována příprava makrocyklů obsahujících tetrathiafulvalen jako stavební jednotku cyklických oligomerů spolu s bifenylovými a difenyloxidovými „karbospojkami“. Připravené kruhy obsahovaly obvykle mezi 28 až 56 atomy. Zvolený syntetický koncept alkylace brommethylaromátů thiolátovým aniontem se ukázal být funkční ale nepříliš vhodný z hlediska výtěžků zamýšlených makrocyklů (izolované výtěžky žádaných produktů byly do 10%) a vzniku vyšších oligomerních produktů. Na vině bude pravděpodobně vysoká nukleofilita síry i vysoká reaktivita brommethylové skupiny. Stálo by za zvážení nahradit brommethyl nějakým jiným halogenalkylem a snížit tak rychlost tvorby vyšších oligomerů.

Jindřich Nejedlý připravil v rámci své bakalářské práce mnoho nových látek. I přes relativně jednoduchý syntetický protokol příprava makrocyklů vedla k velmi náročné chromatografické separaci oligomerů, kdy autor úspěšně kombinoval sloupcovou a gelovou chromatografii. Hlavní úskalí předložené práce vidím v nedotažené charakterizaci připravených makrocyklů, kdy z různých důvodů není možné exaktně ověřit předpokládanou strukturu (chybějící ¹³C NMR spektra, neprovedené MS analýzy). V tomto bodě práce vyžaduje ještě dosti úsilí tak, aby byla přijatelná např. pro publikaci v chemickém časopise.

Níže uvádím zjištěné nedostatky. Rád bych na tomto místě zdůraznil, že považuji práci Jindřicha Nejedlého za nadstandardní co do rozsahu odvedené práce i kvality získaných výsledků. Chyby, které jsem zaregistroval: názvy látek v práci trpí jazykovou nejednoznačností - kalixaren se opravdu píše s úvodním „k“, kation, anion jsou bez

koncového „t“. Písmeno „q“ v názvech se česky píše jako „ch“ (str. 12 - tribenzotrichinacen). Nelíbí se mi pojem „kokrystal“, přestože je jinými autory používán. Pojem „krystal“ označuje typ pevného skupenství hmoty a nezáleží z kolika látek je vytvořený. „Charge-transfer“ komplexy se překládají jako komplexy s „přenosem náboje“ (str. 12). Dále bych rád věděl, co znamená zkratka CPPA (str. 8 a dále); v seznamu zkratek na straně 39 není vysvětlena.

Otázky do obhajoby:

- 1) V úvodu píšete, že dnes jsou již fullereny dobře dostupné. Mohl byste tedy detailněji popsat jejich výrobu a orientačně uvést cenu 1 mmol (720 mg) C₆₀?
- 2) Na straně 13 uvádíte rovnice redukce tetrathiafulvalenu, kde se vyskuteje síra vázaná dvojnou vazbou. Jsou tyto struktury reálné? Byly nějak prokázány?
- 3) Na straně 14 uvádíte jako energeticky výhodnější konformaci tetrathiafulvalenového derivátu jeho sevřenou konformaci. Vzhledem k velikosti atomu síry a přítomnosti d-orbitalů se atomy síry v odlehých ramenech musí ovlivňovat. Jak byla energetická výhodnost dané konformace zjištěna?
- 4) Ve Schématu 9 na straně 22 uvádíte reakci vzniku tetrathiafulvalenového derivátu **3**. Mohl byste nastínit mechanismus této reakce? Je užití triethylfosfitu jako rozpouštědla nezbytné?

Svůj oponentský posudek uzavírám formálním konstatováním, že předložená bakalářská práce splňuje požadavky kladené na tento typ práce. Doporučuji proto její přijetí k dalšímu řízení.

Předloženou práci **doporučuji** k obhajobě.

Hodnocení: **výborně**

V Praze

dne 9.6.2010



.....
podpis oponenta