

Posudek oponenta diplomové práce

Jméno a příjmení uchazeče/uchazečky: **Bc. Hana Solařová**

Název práce: Fosfinoferrocenové amidy a hydrazidy

A. Komentář k odbornému zaměření, náplni a rozsahu diplomové práce (DP)

Předkládaná diplomová práce se zabývá amidy a hydrazidy 1'-(difenyfosfino)-1-ferrocenkarboxylové kyseliny. Tyto tzv. "hemilabilní" ligandy, kde ferrocenové jádro nese dvě donorové skupiny s odlišnými koordinacími vlastnostmi, jsou studovány jako nové ligandy pro katalýzu komplexů přechodných kovů. V rámci práce byly připraveny čtyři nové deriváty ferrocenu a osm komplexů palladia s těmito ligandy. Všechny sloučeniny byly podrobně charakterizovány pomocí NMR, MS, IR a elementární analýzy. U osmi sloučenin byla stanovena jejich struktura v pevném stavu pomocí RTG difrakce na monokrystalu.

1. Hodnocení odborné části DP

- | | |
|-------------------------------------|--|
| <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 DP |
| <input type="checkbox"/> | N – odborně nedostatečná, neodpovídající požadavkům kladeným na DP |

B. Bodové hodnocení jednotlivých částí/aspektů práce

1. Rozsah diplomové práce (DP) a její členění	
<input checked="" type="checkbox"/>	A – přiměřený, odpovídající charakteru DP 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"/>	N – nedostatečné ve více ohledech

2. Odborná správnost	
<input type="checkbox"/>	A – výborná, bez závažnějších připomínek
<input checked="" 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 čtenějšími drobnými vadami
<input type="checkbox"/>	N – nedostačující, s hrubými chybami

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 DP
<input type="checkbox"/>	B – uspokojivý, místy nedostatečně propracovaný nebo s celkově nižším počtem citací
<input type="checkbox"/>	C – rozsahem neadekvátní charakteru DP nebo s vážnějšími závadami (např. převažují "nestandardní" odkazy na učebnice, přednášky, webové stránky)
<input type="checkbox"/>	N – nevyhovující, velmi málo citací event. rysy plagiátu (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, čtenější neobratné nebo nejasné formulace, gramatické nebo pravopisné chyby
<input type="checkbox"/>	N – nevyhovující; nelogické nebo nesprávné formulace, četné hrubé chyby

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 čtenějšími drobnými chybami
<input type="checkbox"/>	N – nevyhovující, s četnými hrubými chybami

Případný slovní komentář k bodům B1–5.

- 1) Práce je sepsána velice pečlivě s minimem překlepů a chyb.
- 2) Rozsah i náplň jsou přiměřené práci diplomové.
- 3) V rámci kapitoly "Výsledky a diskuze" je rozsáhle zpracována charakterizace komplexů. Velmi detailně jsou zde formou textu a tabulek popisována spektra a struktury zkoumaných látek, což vede ke značnému rozsahu celé práce - 99 stran. Čtenář je zaplaven přívalem chemických posunů, vlnočtů, vazebných délek a úhlů. Celkovému vyznění práce by prospělo, kdyby byla diskutovány pouze "důležitá a zajímavá" data, zatímco ostatní by byla prezentována pouze formou tabulek jako příloha.
- 4) U sloučenin čištěných pomocí sloupcové chromatografie postrádám informaci o jejich retenčních faktorech v dané mobilní fázi.
- 5) Výrazy "vodíková, uhlíková a fosforová spektra" stejně jako český přepis anglického slova "krospíky" nepovažuji za vhodné.
- 6) Vzhledem k tomu, že jsou připravené sloučeniny v celé práci označovány pouze čísly, by bylo vhodné, aby se v práci objevilo přehledné schéma se strukturami cílových ligandů, popřípadě i komplexů.

C. Obhajoba DP

Dotazy k obhajobě

- 1) V kapitole "Cíle" je konstatováno, že "výzvou je také syntéza nových heterocyklických sloučenin...". Jaké výhody může přinést přítomnost heterocyklů v těchto ligandech a jaké byly důvody volby právě těchto heterocyklů?
- 2) V kapitole "Spektra NMR" je popisována teplotní závislost ^1H spekter komplexů 12 a 14. Jaké změně geometrie molekuly lze přičíst tuto závislost?
- 3) V hmotnostních spektrech získaných pomocí ESI jsou některé signály přiřazeny dvojici iontů $[\text{M}+\text{K}]^+$ nebo $[\text{M}+\text{Na}+\text{O}]^+$. Bylo možné rozhodnout o přiřazení signálů pomocí HR-MS? Pokud ano, jaký iont je přednostně v ESI generován?
- 4) Elementární analýzy některých komplexů vykazují odchylky od vypočtených hodnot (0,5 - 1 %), přičemž není udán obsah halogenů. Jakým způsobem pak byl stanoven obsah solvátových rozpouštědel (CH_2Cl_2 , CHCl_3) v komplexech 9, 10, 11 a 14? Při přípravě komplexu 15 nebyl použit pentan. Přesto je udáván jako solvátové rozpouštědlo produktu. Jaký je jeho původ?
- 5) Některé inertní techniky nejsou všeobecně známé. Jakým způsobem je realizováno "odsátí oboustranou jehlou" (str. 78)?

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: **v ý b o r n ě**

Datum vypracování posudku:

22. 5. 2011

Jméno a příjmení, podpis oponenta:

RNDr. Vojtěch Kubíček, Ph. D.