

Oponentský posudek doktorské disertační práce Jana Plutnara "Polycyclic tetraazamacrocycles"

Práce je rozdělena do šesti nezávislých částí: literárního úvodu, experimentální chemie 1,4-můstkovaných ligandů, experimentální chemie 1,8-můstkovaných ligandů, literárního přehledu radionuklidů používaných v medicíně jako jejich komplexy s dusíkatými makrocycly, dále obrazových příloh a kopie publikace, na níž se autor významnou měrou podílel. Rozdělení vlastních výsledků na dvě části je neobvyklé. Jeho kladem je přehlednost a záporem opakování metodických detailů a některých literárních odkazů. Čtenář si také musí zvyknout na to, že číslování látek je v obou částech práce nezávislé, což může vést k nedorozuměním. Ukázkou je např. text pod schematem na str. 45, kde jako látky připravené v této práci jsou zmíněny jenom látky z příslušné kapitoly.

Jakmile však čtenář pochopí důvody, které autora vedly k uvedenému formálnímu rozdělení, stane se studium textu potěšením. Práce je sepsána přehledně, stručně a dobrou angličtinou se zcela ojedinělými excesy toho, čemu se říká „czenglish“. Jde hlavně o značně svobodomyšlné zacházení se členy a občasně používání neobvyklých termínů. Například označovat schopnost ligandu tvořit komplex místo běžného „ability“ či „affinity“ slovem „willingness“, což implikuje lidskou vůli, je poněkud neobvyklé. Grafická výprava textu je vyvedena na mimořádně vysoké úrovni a přispívá značnou měrou k jeho čtivosti.

Aby byl oponent hoden mzdy své, poukazuje na následující drobné nepřesnosti, které nijak nesnižují vědeckou úroveň textu. Jediná podstatná připomínka je uvedena v závěru.

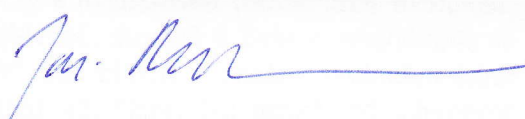
1. Str. 4: můstkujícím činidlem je 1,2-dibromoethan (jak je správně uvedeno v reakčním schematu), nikoli dibromomethan.
2. Str. 7: bipyridin a fenanthrolin jako můstky by se měly specifikovat – např. 2,2'-bipyridin se bude chovat jinak než 4,4'-isomer.
3. Str. 12: tvrzení o neschopnosti koordinace klecových polyaminů je příliš kategorické – např. hexamethylentetramin je poměrně dobrým **monodentátním** aminovým ligandem.
4. Str. 13: jak jest rozuměti tvrzení, že uvedené ligandy se koordinují **přinejmenším** přes čtyři dusíky, když kromě těchto čtyř dusíků neobsahují jiné potenciální donory?
5. Str. 23: ve strukturách na horním schematu má piperazin (na rozdíl od všech ostatních struktur v práci) židličkovou konformaci. Má tím být vyjádřen nějaký vztah ke konkrétní popisované reakci?
6. Str. 29: hodnota pK tetraprotonovaného ligandu (0.78) je na hranici měřitelnosti použitou metodou. Jaká je její směrodatná odchylka a neslušelo by se odebrat jednu platnou cifru?
7. Str. 43 a jinde: termín ethylene bridge, přestože obecně používaný, je nepřesný a zastaralý.. Přimlouvám se za postupný přechod k termínu ethane-1,2-diyl.
8. Str. 47: jakou strukturní roli hraje solvátový aceton? Je možné identifikovat nějaké intermolekulární vodíkové můstky mezi protony ligandu a kyslíkem acetonu?
9. Str. 52: rozdíl mezi čtvercovou pyramidou a „oktaedrem bez jednoho vrcholu“ je čistě formální a spočívá v hodnotě vzdálenosti centrálního atomu od střední roviny čtyř donorů. Popis pomocí torsních úhlů, použitý v práci, tuto skutečnost ostatně vyjadřuje jednoznačně.

Zmíněná podstatná připomínka se týká krystalové struktury komplexu mědi s ligandem 3 (kap. 2.2.3.1). Přesnost stanovení této struktury je podstatně nižší než u ostatních struktur v práci.

Částečně to lze akceptovat jako důsledek statické neuspořádanosti (disorder) atomu bromu. Látka však byla připravena z hydrobromidu ligandu a **chloridu** měďnatého. Neuvažoval autor o možnosti, že jde ve skutečnosti o směsný chlorid/bromid? Teplotní faktory jakožto obvyklá diagnostika tomu sice nenasvědčují, ale bylo by vhodné vzít v potaz i skutečnost, že druhé největší maximum v diferenční mapě je v blízkosti jednoho ze dvou atomů bromu. Oponent vyslovuje podezření, že s atomy „bromu“ (?) není vše v pořádku a přivítá při obhajobě všechna fakta, která ho přesvědčí, že jeho podezření je neopodstatněné.

Závěrem je třeba konstatovat, že práce má vysokou úroveň, hodnou vědeckého týmu, v němž vznikla. Její autor prokázal suverénní zvládnutí mnoha metod, jejichž výběr je pro dané téma velmi vhodný. Práce je sepsána mimořádně kvalitně a přináší nové zásadní poznatky o dosud opomíjených ligandech. Jednoznačně ji proto doporučuji jako podklad oponentního řízení.

V Mirošově dne 5.6. 2007



Prof. RNDr. Jaroslav Podlaha