



**Oponentský posudek na diplomovou práci Bc. Michala Navrátila
„Komplexy lehkých platinových kovů s ferrocenovým *N*-fosfinoamidem“**

Posuzovaná diplomová práce Bc. Michala Navrátila byla vypracována ve skupině prof. Štěpničky. Práce podává podrobný popis dvanácti nově připravených koordinačních sloučenin ferrocenového fosfinoamidu, přičemž kromě podrobného popisu jednotlivých syntéz uvádí autor i detailní charakterizaci všech komplexů pomocí spekter NMR i IR, elementární analýzou a hmotnostní spektrometrií. Ve všech případech se navíc zdařilo vypěstování vhodných monokrystalů k provedení rentgenostrukturní analýzy; jejíž výsledky jsou do práce včleněny do závěru kapitoly s diskuzí výsledků.

Práce je napsána až s ohromující péčí a dá se považovat za prakticky bezchybnou z hlediska odborného i formálního. Všechny syntetické kroky jsou popsány důkladně a práce obsahuje též všechny podstatné výsledky spektrálních metod, lze tedy konstatovat, že popis jednotlivých komplexů je proveden zcela vyčerpávajícím způsobem. Diplomant ve své práci navíc prokázal i perfektní ovládnutí diskuze výsledků rentgenostrukturní analýzy, přičemž čtenáře nezahluje nepodstatnými detaily, zato uvádí všechny relevantní strukturní charakteristiky pro úplný popis geometrie komplexů z hlediska chemického. Velmi se líbil úvod práce, který podal zevrubný přehled aktuálního stavu problematiky a jasně definoval cíle práce.

Níže následuje seznam poznámek či komentářů, které považuji za vhodné vznést v souvislosti s recenzovanou prací. Vzhledem k výrazně nadprůměrné kvalitě spisu jsou následovné připomínky povětšinou zcela triviální a oponent některé z nich uvádí spíše z důvodu, aby mohl úspěšně doložit, že si práci přečetl celou.

1. Str. 38. Pn a $P2_1/c$ nejsou bodové grupy. Je pravda, že úhel β pro **5** je dosti blízko k 90° , ovšem tato skutečnost má spíše krystalografický nežli chemický význam. Pro úplnost dodávám, že ortorombickou (či jinou) mříž nedefinuje hodnota mřížových úhlů, ale symetrie v difrakčních obrazech.
2. Str. 39. Co přesně znamená formulace „...“, velikost úhlu na atomu vodíku byla stanovena na 144° a 147° .“? Pokud byla poloha vodíku určena z fourierských map, je potřebné uvádět i směrodatnou odchylku.
3. Str. 40. Formulace „...“, pozice fenylového kruhu C(12-17) v ní však nemohla být jednoznačně určena“ navozuje dojem, že se fenylový substituent nepodařilo lokalizovat vůbec. Z obrázku 22 se ale dovídáme, že fenyl pouze zaujímá dvě polohy, které se navíc zřejmě daly úspěšně upřesnit.
4. Při diskuzi geometrie komplexů je značení atomu fosforu poněkud nekonzistentní — občas P, občas P1, v obrázku 29 dokonce P3. Naštěstí niky nebyla tato drobná závada překážkou srozumitelnosti.
5. Str. 43, věta „Délka vazby P1–N1 je v látce **7** o 0.014 \AA kratší.“ Je toto zkrácení vůbec statisticky významné?
6. Str. 44, první věta ve druhém odstavci. Předpokládám, že symbol „Cg“ označuje těžiště, pokud ano, pak je tato věta trošku neobratná.



7. Str. 58, popis rentgenostrukturní analýzy. Prosím o kontrolu, zda některý z komplexů nebyl měřen při 120 K. Domnívám se též, že dnes již značně zastaralý APEX2 nebyl použit v případě diskutovaných komplexů vůbec, stejně jako SHELXS-97, který sám autor programu považuje několik let za překonaný. Místo přímých metod v SHELXS-97 byl fázový problém s největší pravděpodobností řešen tzv. „intrinsic phasing“ (SHELXT). Je potřebné též uvádět způsob zacházení s vodíkovými atomy při upřesňování.

Do diskuze prosím autora reagovat na body uvedené výše (pokud to povaha poznámek umožňuje).

Závěrem konstatuji, že recenzovaná diplomová práce Bc. Michala Navrátila představuje mimořádně kvalitní dílo, které přináší celou řadu cenných výsledků. Rozsah práce i způsob zpracování výsledků nejenomže splňuje, ale i zřetelně převyšuje kritéria na diplomové práce kladené, proto její přijetí k obhajobě plně podporuji a navrhuji ji hodnotit nejlepším klasifikačním stupněm.

Praha, 28/V/2018

doc. RNDr. Róbert Gyepes, PhD.