

## Posudek oponenta diplomové práce Petry Němečkové „Koordinace substituovaných nitro- a aminokalix[4]arenu“

Předložená diplomová práce se zabývá přípravou dvou ligandů, *cone*-5,11,17,23-tetraamino-25,26,27,28-tetrakis(karboxymethoxy)-kalix[4]arenu a *cone*-5,11,17,23-tetranitro-25,26,27,28-tertakis(karboxymethoxy)-kalix[4]arenu a studiem jejich koordinačních vlastností. Autorka si v poněkud idealistické vizi představovala, že ligandy charakterizuje rentgenstrukturní analýzou, připraví komplexy s různými kationty, pokud možno také v monokrystalické formě, stanoví jejich struktury a bude diskutovat změny struktury volných a koordinovaných ligandů. I když bylo tohoto cíle dosaženo jen částečně, autorka ve svém díle jednoznačně dokázala schopnost samostatné vědecké práce, zahrnující komplikovanou organickou syntézu a celou řadu metod sloužících k identifikaci a charakterizaci připravených látek. Jde zejména o NMR spektroskopii, infračervenou a Ramanovu spektroskopii, rentgenstrukturní analýzu, hmotnostní spektroskopii, kapalinovou chromatografii a další metody. Práce je po formální stránce vhodně a přehledně upravena s minimem překlepů (ty jsem opravil tužkou přímo v textu) a má 68 stran včetně obrázků.

K práci mám jen několik formálních i věcných připomínek a dotazů:

- elementární analýza 1. ligandu (látky označené autorkou NH<sub>2</sub>kC4A) neodpovídá teoretickému složení. I když v diskusi tuto diskrepanci vysvětlujete hned dvojným možným způsobem, čtenář nabývá dojmu, že se látku vlastně nepodařilo připravit, nebo že byla podstatným způsobem znečištěná. Nemůže právě tato skutečnost za to, že Vaše pokusy o přípravu monokrystalu tohoto ligandu i jeho komplexů byly neúspěšné?
- v kapitole 3.6.2. uvádíte, že ve většině pokusů o krystalizaci komplexů s kationty kovů dochází k tvorbě různobarevných sraženin, což nevede k přípravě kýženého monokrystalu. Pokusila jste se tyto sraženiny alespoň nějakým způsobem identifikovat? Nepokusila jste se o jejich převedení do krystalické formy rekrytalizací či nějakou modifikací krystalizačního procesu?
- uvádíte-li v tabulkách meziatomových vzdáleností směrodatné odchylky (chyby), měly by být uvedeny i u délek vodíkových vazeb
- vyvarujte se v budoucnu, prosím, výrazů jako „amoniové ionty“ (správně kationty amonné) nebo „chloristá sůl“ (správně chloristan) apod.

Závěrem bych rád zdůraznil, že i když se s jedinou výjimkou nepodařilo autorce připravit žádný monokrystal, jehož strukturu by mohla řešit, předkládaná práce v sobě skrývá úctyhodný objem experimentální práce a zaslouží si bezesporu zvláštní ocenění. Práci doporučuji k obhajobě.

Doc. RNDr. David Havlíček, CSc.