

Posudek oponenta na bakalářskou práci Kateřiny Holé „Nové ligandy pro medicínské aplikace“

Předkládaná experimentální bakalářská práce si kladla za cíl syntézu nových makrocyclických ligandů pro komplexaci iontů lanthanoidů s potenciálním využitím v medicíně. První navržený ligand je DO3A modifikovaná bočním pendantním slabě koordinujícím ramenem (L1). Tato látka byla připravena několikasupňovou syntézou, všechny meziprodukty včetně samotného produktu byly charakterizovány standardními metodami. U produktu byla stanovena rentgenová struktura v podobě hydrátu. S komplexem tohoto ligandu s ceritým iontem byla provedena spektrofotometrická studie rychlosti komplexace a dekomplexace v závislosti na pH, v druhém případě i na teplotě a výsledky byly porovnány se strukturálně blízkými ligandy či údaji z literatury. Oproti původním předpokladům bylo zjištěno, že přítomnost slabě koordinujícího bočního ramene komplexaci neurychluje, ale naopak zpomaluje. Druhý navržený ligand (L2), nesoucí v bočním rameni aminovou skupinu zajímavou z hlediska koordinace a protonizace, se navrženým postupem nepodařilo v čisté podobě připravit. Jsou diskutovány možné důvody této skutečnosti. Mohu konstatovat, že vytyčené cíle autorka splnila.

Prezentovaná práce představuje ucelenou organickou syntézu dvou navržených látek s charakterizací produktů a dvě kinetické studie koordinačních rovnováh. Interpretace získaných dat je strážlivá a odpovídá možnostem použitých metod. Z formálního hlediska bych rád ocenil vysokou úroveň psaného textu, která je ve srovnání s jinými bakalářskými pracemi nadprůměrná.

Formální připomínky:

- Zkratky látek by měly být v celé práci uvedeny jednotně (zkratky v obrázku 4.3).
- V odborném textu bych upřednostnil nepoužívat triviální názvy sloučenin (formalín, čpavek).

Věcné připomínky a otázky do diskuze:

- Proč byl jako ion ke komplexaci zvolen Ce^{3+} ? Je to typická volba obvyklá v literatuře? Z jakého důvodu?
- V grafu 5.3 a částečně v grafu 5.6 jsou přímky konstruovány z opravdu nejmenšího možného počtu bodů, ze tří. Proč nebylo naměřeno více experimentálních bodů, aby byly regrese spolehlivější? Podobně proč jsou v obr. 5.6 hodnoty pro teploty 35 °C a 45 °C uvedené pouze pro pH = 3,0?
- V obrázcích 5.2 a 5.5 ani v experimentální části není uveden časový inkrement zobrazených spekter. V případě komplexační studie není uveden celkový čas experimentu (předpokládám, že u dekomplexační studie je to čas 1800 s uvedený bez označení v obr. 5.5).

Uvedené připomínky však nejsou zásadního charakteru. Předkládaná práce splňuje nároky kladené na bakalářskou práci a proto ji doporučuji k přijetí s hodnocením výborně.

V Praze dne 11. 6. 2010



RNDr. Petr Holzhauser, Ph.D.
Ústav anorganické chemie, VŠCHT Praha