

Posudek na bakalářskou práci Jana Staňka “Manifestation of polar effects in bifunctional carboranyl moieties“

Předložená bakalářská práce se zabývá vlivem –SH a –COOH substituentů na elektronovou strukturu karboranových klastrů a jejich vzájemnou „komunikaci“. Ukazatelem těchto efektů jsou změny v NMR spektrech, pK_a konstantách a meziatomových vzdálenostech. Práce bezprostředně navazuje na tematiku dlouhodobě studovanou na ÚACH AV, v.v.i.

Po poměrně obsáhlém úvodu věnovaném klastrovým sloučeninám bóru student podrobně rozebírá experimentální a výpočetní data získaná jednak z literatury a pak zejména ta stanovená pro vlastnoručně připravené sloučeniny. Výsledkem je text s nadstandardně kvalitním sdělením, což však bohužel nelze říct o jeho formě. Vzhledem ke složitosti studované problematiky, je však třeba studenta za odvedenou práci pochválit. Dále je pozitivní, že student uvádí témata, na která bude moci v budoucím výzkumu navázat, např. příprava a charakterizace dalších isomerů karboranu.

Práce je psána anglicky, má 32 stran, 88 citací a osmistránkovou přílohu. Předloženou práci hodnotím celkově pozitivně, i když obsahuje negativa, která jsou spíše formálního rázu, což však nesnižuje jejich význam.

Abstrakt je příliš obecný a neobsahuje příliš mnoho konkrétních výsledků. Nesouhlasím s tvrzením, že text obsahuje všechny klíčové reference. Postrádám odkazy na práce od E. D. Jemmis a F. Teixidor o elektronové struktuře bórových klastrů, syntetické práce Ruských boranářů a pak zejména nedávné práce zabývající se medicínou využitím karboranů. Největší slabinou je struktura a formátování vlastního textu i referencí, což je u bakalářské práce sice pochopitelné, ale velmi to degraduje kvalitu sdělení. Je zde několik chyb v číslování obrázků a zejména pak referencí, které navíc mají nevyhovující a nejednotný formát. Presentované struktury nemají jednotnou grafickou podobu. U tabulek s chemickými posuny chybí popisky, že čísla jsou uvedena v ppm. V textu mi vadí použití termínu „klec“ namísto správnějšího „klastř“.

Z textu plyne pouze nepřímě, že veškeré syntetické práce, výpočty a měření student provedl samostatně. Toto by však mělo být v textu jednoznačně uvedeno a případným pomocníkům by mělo být náležitě poděkováno.

Mé dotazy a připomínky jsou následující:

- 1) Jsou studované látky rozpustné ve vodě?
- 2) Jaký vliv má disociace navázaných skupin na celkovou elektronovou strukturu a dipólový moment molekul? Jak ovlivní vlastní disociace první skupiny chování té druhé?
- 3) Lze využít studované molekuly i jinde než pro přípravu SAM?

Závěrem konstatuji, že předložená bakalářská práce Jana Staňka splňuje požadavky. Doporučuji ji k obhajobě.

V Praze 8. června 2015

RNDr. Pavel Matějček, PhD.