



**Oponentský posudek na diplomovou práci Bc. Adama Jaroše
„Makrocyclické komplexy s neuzavřenou koordinační sférou“**

Posuzovaná diplomová práce podává podrobný popis syntézy tří makrocyclických ligandů s různě nabitými pendantními rameny. Kromě popisu vlastní syntézy podává autor i jejich charakterizaci pomocí spektrálních metod. Studium aciodobazických vlastností ligandů bylo provedeno pomocí potenciometrických titrací a kde tato metoda nevedla k cíli, prováděl autor NMR titrace. Stabilita komplexů s gallitými, měďnatými i zinečnatými ionty byla odvozena na základě experimentálně určených distribučních diagramů, ovšem autor tyto výsledky navíc doplnil i studiem geometrie komplexů pomocí výpočtů DFT.

S potěšením konstatuje oponent skutečnost, že se jedná o práci sestavenou se značnou péčí a napsanou mimořádně čtivě. V úvodní pasáži práce je jasně vysvětlena problematika a cíle práce jsou dobře definované. Popisu vlastních výsledků věnoval autor značný prostor a velmi se mi líbil zevrubný popis různých aplikovaných syntetických postupů potřebných k přípravě ligandů, jelikož se autorovi povedlo natrefit na nepřilíš přejícnou Matku Přírodu, která se dle všeho statečně bránila snahám o izolaci ligandů v přijatelné čistotě i s přiměřeným výtěžkem. Jak ovšem práce dokládá, vhodnou modifikací syntetického postupu se podařilo i tyto nesnáze překonat a nakonec byly ligandy připraveny v potřebném výtěžku pro provedení spektrálních i potenciometrických studií.

K odborné stránce práce nelze mít žádnou kritickou připomínku a jisté drobné nepřesnosti, které jsem v práci našel, se týkají povětšinou formální stránky spisu. Níže následuje podrobný výčet nalezených nedostatků:

1. Str. 19: Analytikjena Specord 50.
2. Na straně 19 je uvedeno, že rentgenostrukturní analýza byla provedena Dr. Císařovou a doc. Kotkem. I když je takové děkování jistě šlechetné, z vědeckého hlediska je měrou vrchovatou žádoucí uvádět též podrobné detaily experimentu (kupř. vlnovou délku primárního záření, viz též Tabulka 6), či detaily upřesňování finálního modelu (zacházení s vodíky, atd.). V této souvislosti poznamenávám, že fázový problém byl s největší pravděpodobností řešen tzv. „intrinsic phasing“, přičemž sám autor programu SHELXS97 (implementující přímé metody) považuje tento svůj program dnes již za překonaný.
3. Str. 20. Jak byl stanoven obsah krystalové vody u $BnTACN \cdot 2HCl \cdot 0.5H_2O$?
4. Str. 26. Autor uvádí, že pro modelování struktur v roztoku použil vždy izomer s největší pravděpodobností výskytu. Škoda, že zde nejsou uvedeny detaily (energie). Je možno se na základě termodynamiky opravdu vyslovit pro výskyt jediného izomeru ve všech případech?!



5. Str. 30, odstavec 3.2. Pro ligand H_2L^1 se uvádí, že se nepovedlo získat potenciometrickými titracemi data v bazické oblasti pH, proto byla provedena NMR titrace při pH v rozmezí 12 až 14. Prosím o podrobnější komentář.
6. Str. 35, Obrázek 26. Existuje nějaký fyzikální důvod pro nepřiliš přesvědčivé proložení křivky přes experimentální body?
7. Str. 41, odstavec 3.4. Výsledky kvantově chemických výpočtů by si jistě zasloužily podrobnější diskuzi. Pro analýzu koordinačního okolí centrálního atomu je velmi užitečné provést korelaci meziatomových vzdáleností s příslušnými řády vazeb. Na základě těchto informací by se dalo usuzovat na přítomnost prnutí v cyklech, dokonce by se dala porovnat i stabilita komplexů. Pokud si dal autor práci s provedením výpočtů, získat Mayerovy řády vazeb je již trivialitou.
8. Str. 45, Tabulka 6. Tato tabulka snese vylepšení na více místech. Chybí úhel β u druhé látky, u hustoty je použita jednou desetinná tečka, v druhém případě čárka. Prosím o kontrolu hodnoty absorpčního koeficientu první látky (může být chybně, i když nemusí – dle použité vlnové délky). Je ověřeno, že poněkud vyšší reziduální elektronová hustota v případě druhé látky nedává chemicky smysl? Sice nejsem odborníkem na jazyk český, ale termín „Unikátní difrakce“ mi zní nezvykle.
9. Str. 46. Jelikož chybí náskres s číslováním atomů, výklad podaný v tomto odstavci se nedal dost dobře sledovat.

Do diskuze prosím autora reagovat na body uvedené výše (dle povahy jednotlivých poznámek).

Závěrem konstatuji, že recenzovaná diplomová práce Bc. Adama Jaroše představuje velmi kvalitní dílo, které přináší řadu cenných výsledků. Rozsah práce i způsob zpracování výsledků jednoznačně splňuje kritéria na diplomové práce kladené, proto její přijetí k obhajobě podporuji a navrhuji hodnotit nejlepším klasifikačním stupněm.

Komárno, 22/V/2018

doc. RNDr. Róbert Gyepes, PhD.