



Prof. RNDr. Petr Štěpnička, Ph.D.
Katedra anorganické chemie
Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze
Hlavova 2030, 128 40 Praha
E-mail: stepnic@natur.cuni.cz
Fax: +420 221 951 253

Praha, 16.5.2013

Posudek oponenta na diplomovou práci Bc. Martina Hejdy

Práce Bc. Martina Hejdy popisuje přípravu a zevrubnou charakterizaci anelovaných 1*H*-2,1-azaborolů reakcemi chloroboranů nesoucích chelatující iminoarylové substituenty s arylimidy lithnými a s organolithnými sloučeninami. Ke studiu nově získaných látek autor použil osvědčené metody, jmenovitě elementární analýzu, stanovení bodu tání, multijadernou NMR spektroskopii a monokrystalovou rentgenostrukturní analýzu. Získaná data v práci stručně interpretuje a navrhuje také mechanismus vzniku popsanych sloučenin. Veškeré nově nabyté poznatky adept vsazuje do kontextu současného poznání, které je shrnuto v úvodní části předložené práce. Předřazenou kapitolu 1.1 považuji ji za neotřelý a přívětivý způsob osvětlení motivace popsaného bádání i nenásilný úvod do problematiky.

K práci mám následující formální připomínky: I přes zjevně pečlivý přístup se autor nevyhnul neformálním formulacím jako například „konverze“ něčeho s něčím (použito opakovaně, míněna reakce). Za nešťastné považuji i označení boranů za organokovové sloučeniny (strana 14). V úvodu autor necituje zdroj dat či obrázků rentgenových struktur a neuvádí ani hladinu pravděpodobnosti elipsoidů teplotních kmitů (str. 17, 21 a 34). Za mnohem závažnější pak považuji skutečnost, že ve výčtu NMR dat nejsou povětšinou uvedeny hodnoty skalárních interakčních konstant zatímco obrázky na str. 54-56 shrnující NMR data neuvádějí ani multiplicitu signálů. Takových a podobných prohřešků by se měl diplomant napříště vyvarovat.

K obhajobě vznáším následující dotazy.

- (1) Na straně 85 autor práce zmiňuje omezenou rotaci arylaminových skupin, která se projevuje rozšířením signálů v NMR spektrech. Byl tento předpoklad potvrzen VT NMR měřeními?
- (2) K potvrzení navrženého mechanismu, struktur domnělých intermediátů a i třeba polarizace vazby C=N (str. 79) by bylo možno využít výpočetních metod. Byla taková možnost zvažována?
- (3) V práci postrádám jasné vymezení podílu autora na prezentovaných výsledcích. Příspěvek byl očekával přinejmenším v případě speciálních NMR měření a také rentgenostrukturní analýzy.

Celkově konstatuji, že objem prezentovaných výsledků i jejich kvalita jsou rozsahem adekvátní diplomové práci. Popsané výsledky tvoří ucelený soubor a otevírají pole pro další studie. I po formální stránce je práce kvalitní. Práci proto doporučuji k dalšímu řízení.