

Na diplomovou práci Bc. Stanislavy Čiefové

Príprava ligandov na báze izoindolov a ich koordinačných zlúčenin

Predložená diplomová práca sa zaoberá možnosťami prípravy a štruktúrneho usporiadania ligandových systémov na báze izoindolov, ich spojení s guanidinátovým motívom a štúdiom možnosti deprotonácie týchto systémov pomocou rôznych deprotonačných činidiel. Práca je sepsaná v klasickom formáte v dĺžke 99 strán, prehľadne rozdelená na teoretický úvod, experimentálnu časť obsahujúcu prípravu jednotlivých zlúčenín vrátane popisu experimentálnych metód použitých na charakterizáciu pripravených zlúčenín. Práca je zakončená prehľadom výsledkov a ich diskuziou, a na záver stručným shrnutím a prehľadom citovanej literatúry.

Teoretický úvod je členený do logických celkov popisujúcich chemiu jednotlivých ligandových systémov, ich syntézu a štruktúru popísanú v literatúre, známe využitie a doposiaľ pripravené koordinačné zlúčeniny. Rozsah teoretického úvodu ukazuje na pečlivé provedenie rešerši k tématu diplomovej práce.

Experimentálna časť popisuje jednotlivé provedené reakcie a vo väčšine prípadov NMR dáta na charakterizáciu jednotlivých látok. U niekoľkých látok však naměřená NMR dáta nie sú zapsané, pretože tieto údaje sú zmiňované vo výsledkoch a diskuzii. U zlúčenín **1a** a **1b** sa čtenář teprve v ďalšej kapitole dozvedá, že tieto látky boli študované v rámci bakalárskej práce. Nicméně považujú za vhodné uviesť experimentálne naměřená dáta dříve pripravených zlúčenín i v rámci tejto diplomovej práce, zvlášť pokiaľ sa jedná o kľúčové zlúčeniny na ďalšie experimenty. Tento prístup sa opakuje i pre ďalšie pripravené zlúčeniny. U značnej časti reakcií chýba presná množstva pridávanej látky a v texte je len zmienka o pridání jedného či dvoch molárných ekvivalentov. Považujú tento údaj za dôležitý a pri písaní vedeckého experimentálneho textu za neopodstatnený. Stejně tak by experimentálna dáta mala obsahovať výtěžky, popis, ako vypadala konečná reakčná zmes a prípadne i zmienku, že reakcia neprobíha (ako je správne uvádzané vo výsledkoch a diskuzii).

V časti venovanej výsledkom a diskuzii sa diplomantka venuje shrnutiu a komentovaniu všetkých reakcií popísaných v experimentálnej časti. Výsledky sú prehľadne diskutované podľa jednotlivých reakcií. Podstatná časť tejto časti diplomovej práce je venovaná tiež popisu molekulových štruktúr pripravených látok, pretože sa diplomantke podarilo získať monokrystalický materiál všetkých nově pripravených zlúčenín. Závěr ukazuje celkový rozsah a postupný koncept diplomovej práce tak ako sa na základe experimentálnych výsledkov diplomantka vypořádávala so zadáním své práce. Celkově je, podle mého názoru, práce napsána bez výrazných překlepů a chyb ve slovenském jazyce.

Závěrem musím přiznat, že i přes nedostatky v experimentální části diplomové práce, jsem byl po jejím přečtení potěšen strukturou i obsahem. Diplomantka provedla značné množství experimentů vyžadující pečlivé provedení, podařilo se jí sloučeniny dostatečně charakterizovat pomocí spektroskopických metod. Ukázala se užitečnost stanovení molekulové struktury pomocí rentgenové difrakce, neboť získané krystalové struktury jistě pomohly objasnit mnohdy nepřehledná NMR spektra. Svým rozsahem a množstvím výsledků tato práce podle mého názoru splňuje požadavky kladené na diplomovou práci, doporučuji ji k obhajobě a navrhuji hodnotit klasifikačním stupněm VÝBORNĚ.

Pro diskuzi a zamyšlení bych měl následující otázky:

- 1) Otázka ohledně NMR dat pro všechny sloučeniny v experimentální části. Proč nejsou uvedena NMR data u sloučenin **1a**, **1b**, **3**, minoritních izomerů sloučenin **5-8** a produktů deprotonizace pomocí organolithných sloučenin? U některých produktů deprotonizačních reakcí je ve výsledcích a diskuzi uváděn výtěžek i 100 %.
- 2) Na straně 76 jsou uvedeny struktury minoritního a majoritního izomeru sloučeniny **5** v roztoku. Můžete okomentovat jejich rozdílnost v rámci NMR spekter a co způsobuje preferenci uspořádání v případě majoritního izomeru?
- 3) Proč na obrázku 3.10 nejsou zobrazeny vodíkové atomy na dusíkových atomech?
- 4) Při přípravě ligandu **7** byly získány krystaly sloučeniny **7b**. Podařilo se změřit i NMR data této sloučeniny? Proč příprava této sloučeniny není zmíněna v experimentální části?
- 5) Čím si vysvětlujete, že sloučeniny **5** a **6** mají odlišnou pozici vodíkových atomů oproti sloučeninám **7** a **8**?

Předem děkuji za odpovědi.

V Praze dne 27. 8. 2020



Mgr. Michal Horáček, Ph.D.