



Prof. RNDr. Petr Štěpnička, Ph.D., DSc.
Katedra anorganické chemie
Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy
Hlavova 2030, 128 40 Praha 2
E-mail: stepnic@natur.cuni.cz
Fax: +420 221 951 253

Praha, 28. května 2024

Posudek oponenta na doktorskou disertační práci Ing. Pavla Kozáčka

Disertační práce Ing. Pavla Kozáčka, kterou uchazeč vypracoval pod vedením doc. Ing. Milana Erbena, Ph.D., na Katedře obecné a anorganické chemie Fakulty chemickotechnologické Univerzity Pardubice, se zaměřuje na syntézu, strukturu a reaktivitu jednoduchých a anulovaných 1,2,3-diazapniktolů, ve kterých jako „třetí“ heteroatom vystupuje fosfor a arzén.

Po formální stránce je práce křížencem tradiční úplné disertace a zkrácené formy, která poskytuje shrnutí publikovaných výsledků disertanda. Tento přístup nepovažuji za zcela vhodný, neboť text práce je potom nevyrovnaný. Po stránce odborné však nenacházím, co bych vytkl. Práce obsahuje veliký a konzistentní soubor původních výsledků, které byly již z velké části publikovány, a tudíž i ověřeny odborníky. Práce má obvyklé členění a přiměřený rozsah.

V první části diskuse jakožto klíčové části předložené disertační práce autor shrnuje výzkum, který byl již publikován. Jedná se především o syntézu 1,2,3-diazafosfolů, bis(1,2,3-diazafosfol-2-yl)silanů, obdobných 1,2,3-diazaarsolů a sloučenin tohoto typu nesoucích ferrocenový substituent, podrobnou charakterizaci těchto látek a jejich koordinační chování. Text je věcně správný, ale poměrně monotónní. Jistě by jej oživily obrázky struktur připravených sloučenin, na něž autor práce odkazuje do příloh. Podobné lze říci i o cyklických voltamogramech, které jsou v první části práce rovněž diskutovány, aniž by byly prezentovány. Po formální stránce se autor dopustil řady názvoslovných chyb, a to zejména ve vzorcích koordinačních sloučenin. V textu často chybějí hranaté závorky ve vzorcích komplexních sloučenin a nesprávně je použita notace κ používaná ke specifikaci donorových atomů polydentálních ligandů. Donorové atomu a symbol κ se správně zařazují až za názvem ligandu, popř. části názvu, pokud je ligand strukturně složitější, a donorové atomy se uvádí kurzívou.

Druhá část diskuse je věnována obtížnější chemii 1,2,3-triazolů, 1,2,3-diazafosfolů a arsolů anulovaným pětičlennými organickými kruhy, někdy v podobě dihydroindenového skeletu. V tomto případě autor popisuje výsledku úplně. A zde také vznáším jediné dotazy. (1) Jak byly určeny počty elektronů vyměňovaných při redoxních dějích pozorovaných v cyklických voltamogramech. Mohl by autor práce v rámci obhajoby prezentovat reprezentativní voltamogram získaný na rotující diskové elektrodě? (2) V této části práce jsou zmíněny teoretické výpočty zaměřené na hraniční orbitály připravených látek. Prosím disertanda, aby v rámci obhajoby prezentoval některé výsledky a také trendy při přechodu od mateřské sloučeniny k aniontu.

Dále zmíním ještě některé formální nedostatky, které uvádím jen jako návod, čeho se vyvarovat v dalších textech. (1) Obrázky struktur uvedené v úvodní části disertace jsou nepřehledné. (2) Sloučeniny **19** a **20** uvedené na straně 13 nejsou jen geometrické izomery. (3) Nad rovnicí reakce ferrocenového iminu s allyl bromidem pravděpodobně chybí další reaktant. (4) Vzorec látky, uvedené ve schématu 18 na straně 30 jako výchozí, je chybný. (5) V oddíle 2.4.2.2 autor práce zcela opominul chirální ferrocenové oxazoliny, které přitom představují jedny z nejčastěji studovaných látek tohoto typu. (5) V popisu NMR dat by bylo vhodné odlišit kvartérní uhlík a methylové skupiny *tert*-butylového substituentu. Obdobné platí i pro skupinu acetylovou (např. na str. 57). (6) Sloučenina uvedená na straně 69 by měl být methyl-trichlorsilan a nikoli trimethyl-chlorsilan. (7) V diskusi dat by bylo vhodné uvádět kromě hodnotícího komentáře i konkrétní údaje (např. přijatelný výtěžek, signál je více stíněný oproti signálu ..., apod.). (8) Hodnoty z UV-vis spekter uvedené v závorkách za absorpčními maximy nejsou specifikovány. Patrně se jedná o logaritmy molárních absorpčních koeficientů.

V závěru musím konstatovat, že disertační práci Ing. Pavla Kozáčka považuji za kvalitní. Přináší značné množství originálních výsledků a prokazuje, že si její autor osvojil zásady vědecké práce, naučil se používat moderní syntetické postupy i analytické metody a umí získané výsledky náležitě interpretovat a přehledně formulovat. Práci proto doporučuji k obhajobě.