

POSUDEK VEDOUCÍHO DIPLOMOVÉ PRÁCE

Oponovaná práce: Diplomová práce, Univerzita Pardubice,
Fakulta chemicko-technologická,
Katedra obecné a anorganické chemie

Název práce: Studium manganatých komplexů s polydentátními ligandy

Autor práce: **Bc. Josef Jelínek**

Vedoucí práce: prof. Ing. Jaromír Vinklárek, Dr.

Předkládaná diplomová práce Bc. Josefa Jelínka se zabývá přípravou a charakterizací komplexů manganu stabilizovaných 1,4,7-trimethyl-1,4,7-triazacyklononanem (me₃tacn).

Na základě literární rešerše obsahující 69 odkazů, student v teoretické části systematicky shrnul dosavadní poznatky o přípravě, charakterizaci a využití manganatých komplexů s polydentátními N-donorovými ligandy. Na tomto místě bych chtěl ocenit, že všechny uvedené obrázky a schémata byla převedena do jednotného formátu.

Konečné produkty byly syntetizovány Schlenkovou technikou adicí ligandu me₃tacn k dehydratované výchozí látce obsahující methansulfonát (MsO⁻), trifluormethansulfonát (TfO⁻), benzensulfonát (BsO⁻) a *p*-toluensulfonát (TsO⁻) jako kompenzující aniont. Typ těchto aniontů byl vybrán s ohledem na potenciální využití manganatých komplexů jako sikativa pro alkydové nátěrové hmoty. Dehydratované meziproducty i požadované producty byly charakterizovány pomocí EA, MS, IR, RS, EPR a XRD analýzy. Již výsledky hmotnostní spektroskopie naznačily, že se komplexy mohou vyskytovat v jednojaderné i dvoujaderné formě. Přítomnost nepárových elektronů, 100% zastoupení ⁵⁵Mn s jaderným spinem $I = 5/2$ jednoznačně směřuje manganaté sloučeniny k použití EPR spektroskopie pro jejich charakterizaci. Byla změřena isotropní i anizotropní spektra a získané výsledky detailně diskutovány. Byly nalezeny rozdíly v hodnotě parametru hyperjemného štěpení (A_{iso}) v případě roztokových izotropních spekter a počtu linií v případě anizotropních spekter vedoucí k předpovědi o přítomnosti jednojaderné, dvoujaderné nebo kombinaci obou částic. Byly zahájeny a z části i dokončeny kvantově chemické výpočty, které by popsaly změny v rozložení elektronové hustoty v okolí centrálního atomu. Protože tyto výsledky nebyly kompletní, nejsou v předkládané diplomové práci uvedeny. Nicméně predikce jednotlivých struktur byla potvrzena XRD analýzou, kdy se podařilo připravit měřitelné monokrystaly od všech konečných produktů.

Všechny odborné nesrovnalosti byly vyřešeny v rámci pravidelných konzultací s diplomantem.

Závěrem tedy mohu konstatovat, že zadání diplomové práce bylo splněno a předložená práce vyhovuje všem předpisům stanoveným FCHT Univerzity Pardubice.

Diplomovou práci doporučuji k obhajobě a hodnotím známkou A.

V Pardubicích 6.5.2024

prof. Ing. Jaromír Vinklárek, Dr.