

Na diplomovou práci Bc. Natálie Farbárové
Strukturní studie koordinačních sloučenin nepřechodných prvků
obsahujících monoanionické guanidináty

Předložená diplomová práce se zabývá možnostmi přípravy a strukturního uspořádání koordinačních sloučenin prvků lithia, hořčíku, zinku, hliníku, cínu a fosforu obsahujících monoanionický guanidinát DippNC(Net2)NDipp . Práce je sepsána v klasickém formátu v délce 108 stran, přehledně rozdělena na teoretický úvod, experimentální část obsahující přípravy jednotlivých sloučenin včetně popisu experimentálních metod použitých pro charakterizaci připravených sloučenin. Práce je zakončena přehledem výsledků a jejich diskuzí, a na závěr stručným shrnutím a úplným přehledem citované literatury.

Teoretický úvod je přehledně členěn do logických celků popisujících chemii jednotlivých prvků s guanidinátovými ligandy, jejich syntézu a strukturu popsanou v literatuře a rovněž doposud známý aplikační potenciál. Rozsah teoretického úvodu, který je dosti obsáhlý s značným množstvím citované literatury, ukazuje na pečlivě provedenou rešerši k tématu diplomové práce.

Experimentální část popisuje jednotlivé provedené reakce a NMR data pro charakterizaci jednotlivých látek. V části věnované výsledkům a diskuzi se diplomantka věnuje shrnutí a komentování všech reakcí popsaných v experimentální části. Jelikož všechny připravené sloučeniny byly charakterizovány multinukleární NMR spektroskopií jsou tyto výsledky přehledně diskutovány podle měřených prvků včetně jejich srovnání s literaturou. Podstatná část této části diplomové práce je věnována také popisu molekulových struktur připravených látek, neboť se diplomantce podařilo získat monokrystalický materiál všech nově připravených sloučenin. Strukturní parametry jsou diskutovány a srovnávány navzájem i se strukturami popsanými v literatuře. Velmi se mi líbily pasáže ukazující a srovnávající trendy v molekulových strukturách podobných látek, lišících se pouze výměnou jednoho ligandu. Závěr ukazuje celkový rozsah a ucelený koncept diplomové práce a shrnutí cílů a očekávání, které se podařilo naplnit. Celkově je práce napsána bez výrazných překlepů a chyb. Ocenil bych velmi dobrou češtinu, neboť se nejedná o rodný jazyk diplomantky. Drobnou výhradu bych měl k obrázkům molekulových struktur. Kombinace ORTEP zobrazení se zobrazením pomocí čar byla pro mě trochu nepřehledná (sterické uspořádání), stejně jako malá velikost jednotlivých obrázků. Na druhou stranu chápu snahu diplomantky vložit do jednoho obrázku molekulové struktury podobných sloučenin, délky podobných vazeb a velikosti vazebných úhlů.

Závěrem musím přiznat, že jsem byl po přečtení předložené diplomové práce mile překvapen strukturou i obsahem. Diplomantka provedla značné množství experimentů vyžadující pečlivé provedení, podařilo se jí sloučeniny dostatečně charakterizovat pomocí spektroskopických metod. V plné kráse se ukázalo, jak užitečným nástrojem je stanovení molekulové struktury pomocí rentgenové difrakce, neboť právě na krystalových strukturách je většina získaných výsledků postavena. Ocenil bych rovněž množství nově připravených a charakterizovaných sloučenin, kterých je v diplomové práci celkem 13. 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 dvě otázky:

- 1) V závěru diplomové práce se hovoří o aplikačním potenciálu hlinitých sloučenin a možnosti jejich modulace zaváděním substituentů s rozdílnými substitučními efekty. Můžete, prosím podrobněji okomentovat o jaké typy polymerizačních reakcí se jedná, jaké jsou možnosti aktivace těchto sloučenin pro jednotlivé katalytické aplikace? Jak se tyto substituenty podílejí na tvorbě katalyticky aktivní částice?
- 2) Na straně 80 se hovoří o možnosti dimerního uspořádání sloučeniny **8**. Jak toto uspořádání vypadá? Byl tento dimer pozorován v NMR spektrech?

Předem děkuji za odpovědi.

V Praze dne 27. 8. 2020



Mgr. Michal Horáček, Ph.D.