

POSUDOK VEDÚCEHO PRÁCE

na diplomovú prácu Bc. Vladimíra Cesneka s názvom:

„Príprava dvojjadrových biologicky aktívnych komplexov makrocyclického ligandu“

Predložená diplomová práca má rozsah 75 strán a je členená na kapitoly *Úvod, Ciele práce, Teoretická časť, Experimentálna časť, Výsledky a diskusia, Záver, Zoznam použitých skratiek a značiek, Zoznam použitej literatúry*. Na konci práce sa nachádza časť *Prílohy* s celkovým rozsahom 4 strany, ktorá sa v obsahu neuvádza. V práci je uvedených celkovo 34 obrázkov a 115 literárnych odkazov.

V prvej kapitole „*Úvod*“ je veľmi stručný úvod do študovanej problematiky, pričom je zadefinovaný pojem makrocyclický ligand, sú uvedené niektoré zaujímavosti týkajúce sa pyridínových makrocyclických ligandov a ich komplexov s prechodnými kovmi a lantanoidmi. Kapitola je zakončená definovaním jedného z cieľov práce, ktorým bola príprava pyridínového makrocyclického ligandu vhodného pre prípravu dvojjadrových komplexov vybraných prechodných kovov a lantanoidov.

V kapitole „*Ciele práce*“ sú uvedené ciele práce, ktorými boli okrem vypracovania literárnej rešerše aj príprava a charakterizácia navrhnutého makrocyclického ligandu a štúdium možností prípravy komplexov s vybranými prechodnými kovmi (Fe^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} a Pt^{2+}) resp. lantanoidmi.

Kapitola „*Teoretická časť*“ je rozdelená na päť podkapitol, ktoré sa venujú pyridínovým makrocyclickým ligandom. Postupne sú diskutované 12-, 14- a 15-členné ligandy a ich komplexy s vybranými prechodnými kovmi a lantanoidmi. Pri jednotlivých komplexoch je uvedené ich potenciálne využitie v biologických vedách alebo medicíne.

V praktickej časti je popísaný postup prípravy a charakterizácia 19-členného makrocyclického ligandu ($19\text{-pyN}_3\text{O}_2$) a jeho troch derivátov s dvoma pendentnými ramenami ($19\text{-pyN}_3\text{O}_2(\text{NH}_2\text{hex})_2$, $19\text{-pyN}_3\text{O}_2(\text{sald}(\text{N})\text{hex})_2$ a $19\text{-pyN}_3\text{O}_2(\text{van}(\text{N})\text{hex})_2$).

Príprava 19-členného ligandu bola autorom práce študovaná a optimalizovaná už vrámci jeho bakalárskej práce. Deriváty tohto ligandu sú novými ligandmi, ktoré ešte doteraz neboli študované a mohli by byť vhodné pre prípravu viacjadrových komplexov. Úpravou postupu prípravy 19-členného ligandu bol získaný 38-členný makrocyclický ligand (38-pyN₆O₄). V rámci experimentálnej práce boli ešte vykonané pokusy o prípravu ligandu obsahujúceho dve 19-členné makrocyclické jednotky navzájom viazané alifatickým reťazcom (19-pyN₃O₂(Mepy)₂). V tomto prípade boli pri pokusoch získané len zmesi produktov, ktoré z dôvodu malého celkového množstva a časovej tiesne neboli ďalej spracované.

Prípravené ligandy (19-pyN₃O₂, 19-pyN₃O₂(NH₂hex)₂, 19-pyN₃O₂(sald(N)hex)₂ a 19-pyN₃O₂(van(N)hex)₂) boli použité na štúdium možností prípravy viacjadrových homo- i heterobimetalických komplexov vybraných prechodných kovov. Bolo získaných viacero kryštalických látok, pričom dve z nich boli charakterizované aj pomocou RTG monokryštálovej štruktúrnej analýzy.

V kapitole „*Výsledky, Diskusia*“ sú stručne zhrnuté výsledky práce. V rámci práce bolo vykonané systematické štúdium možností prípravy viacjadrových komplexov vybraných prechodných kovov ($M = \text{Mn}^{2+}, \text{Fe}^{2+}, \text{Co}^{2+}, \text{Ni}^{2+}, \text{Cu}^{2+}$ a Zn^{2+}) so študovanými ligandmi. Pri pokusoch s ligandom 19-pyN₃O₂ bolo pripravených viacero kryštalických produktov. Podľa výsledkov analýz sa vo všetkých prípadoch jedná o jednojadrové komplexy. Komplexy [Co(19-pyN₃O₂)Cl₂] a [Zn(19-pyN₃O₂)Cl₂] boli charakterizované aj pomocou RTG monokryštálovej štruktúrnej analýzy. Na základe výsledkov štruktúrnej analýzy bolo zistené, že na centrálné atómy sú koordinované len atómy dusíka z ligandu, pričom atómy kyslíka sa nekoordinujú.

Pokusy o prípravu heterometalických komplexov neboli úspešné a boli získané len jednojadrové komplexy.

Taktiež aj pokusy o prípravu komplexov (19-pyN₃O₂ (sald(N)Hex)₂, 19-pyN₃O₂ (van(N)Hex)₂ a 38-pyN₆O₄ nevedli k predpokladaným produktom.

Nedostatkom uvedenej kapitoly je určite to, že autor neuvádza spektrá získané pri charakterizácii produktov syntéz (okrem niekoľkých NMR spektier v prílohách) a uvádza len vybrané hodnoty nameraných veličín.

V závere práce je stručné zhrnutie dosiahnutých výsledkov. Práca je zakončená zoznamom použitých skratiek a značiek, zoznamom použitej literatúry a prílohami.

K práci by som mal niekoľko faktických poznámok:

- obrázky, ktoré sa nachádzajú v práci sú väčšinou prebraté, čo sa prejavuje v niektorých prípadoch zníženou kvalitou obrázkov (napr. obr. 4, 9, 12, 15, 16b, 19, 21 a 34) alebo chýbajúcim označením atómov (obr. 8),
- str. 31, obr. 17 - chýba časť štruktúrneho vzorca ligandu s označením L53,
- str. 40, obr. 24 - v reakčnej schéme je uvedený octan olovnatý, pričom v texte je uvádzaný jeho trihydrát,
- str. 41, obr. 25 - v reakčnej schéme je uvedený nesprávny vzorec ftalimidu draselného,
- v práci sa nachádza niekoľko nepresných resp. zmätočných vyjadrení (napr. str. 7 - *„Menšie makrocyclické ligandy obvykle tvoria jednojadrové komplexy s prechodnými kovmi, pretože ich iónové polomery sú malé. So zväčšujúcou sa kavitou ligandu je možná aj príprava komplexov prvkov s väčším iónovým polomerom,...“*; str. 18 - Pb^{2+} je ión prechodného prvku; str. 20 – „výsledok reakcie“ namiesto „produkt reakcie“; str. 32 - „Uvedené komplexy.... Ich štruktúra sa veľmi podobá enzýmu...“, atd.),
- str. 41, obr. 26 – reakčné podmienky uvedené v reakčnej schéme nie sú v zhode s textom,
- str. 48, tab. 2 – v tabuľke sú uvedené len namerané a vypočítané hmotnostné zlomky jednotlivých prvkov v analyzovaných zlúčeninách, z tabuľky však nie je jasné aké je predpokladané zloženie (predpokladaný sumárny vzorec).

Záverom možno konštatovať, že stanovené ciele predloženej diplomovej práce boli z väčšej časti naplnené. Zároveň však treba dodať aj to, že úsilie autora vynaložené pri plnení cieľov práce prispelo k tomu, že potenciál samotnej témy práce nebol dostatočne využitý.

Celkovo možno konštatovať, že predložená práca aj napriek uvedeným nedostatkom spĺňa požiadavky kladené na tento druh kvalifikačných prác.

Predloženú diplomovú prácu k obhajobe: **ODPORÚČAM**

a navrhujem hodnotenie známkou: **C**

V Olomouci, dňa 22.8.2020

.....

Mgr. Peter Antal, Ph.D.

„vedúci diplomovej práce“

Katedra anorganické chemie

Přírodovědecká fakulta

Univerzita Palackého v Olomouci