

OPONENTSKÝ POSUDEK

na diplomovou práci Bc. Vladimíra Maňase
(studijní program Anorganická a bioanorganická chemie) s názvem

„Komplexy makrocyclických ligandů použitelné pro konstrukci duálních sond pro ^{19}F MRI“

V teoretické části práce autor čtenáře seznamuje s problematikou klinicky používaných zobrazovacích metod se zaměřením na MRI a PET. Pozornost je zde také věnována fluorovaným komplexům s makrocyclickými ligandy. Tato část je zpracována kvalitně a přehledně a je relevantní vůči experimentální části předložené práce. Zde jsou popsány syntézy dvou makrocyclických sloučenin a jejich koordinačních sloučenin se zaměřením na paramagnetické ionty f-prvků. Meziprodukty a produkty jsou charakterizovány vhodnými analytickými technikami. Bylo také provedeno NMR studium T1 a T2 relaxace. Dosažené výsledky jsou podrobně diskutovány a doplněny četnými obrázky výsledků provedených analýz.

K práci mám následující připomínky:

- 1) Syntéza sloučeniny L1 a L2 již je v literatuře popsána. V diplomové práci byla vyvinuta snaha o modifikaci postupu syntézy použitím jiného halogenidového prekursoru, která ale byla neúspěšná a ve finále syntéza proběhla s chemikáliemi podle publikovaného postupu. Co bylo motivací pro změnu již publikovaného postupu?
- 2) Některé z připravovaných komplexů s L1 a L2 již byly v literatuře opublikovány. Proč byly syntézy opakovány?
- 3) V práci nejsou vhodným způsobem zapisovány vzorce připravených sloučenin. Jedná se o to, že (elektroneutrální) ligand symbolizovaný „L1“ poskytne komplex $[\text{M}(\text{L1})(\text{H}_2\text{O})]$, z jehož vzorce vychází centrální atom jako elektroneutrální. Lze toto u obhajoby uvést přesněji?
- 4) str. 63 - terbitý komplex s L1 může vystupovat v podobě dvou izomerů, jak se liší?
- 5) Do syntéz je přidáván DBU, který sice není uveden jako součást produktů, ale v hmotnostních spektrech byl identifikován jak volný tak v komplexních částicích. Obdobně i XRD analýza prokázala přítomnost uhličitánových aniontů, které v produktech (a použitých rozpouštědlech) podle uvedených vzorců přítomen není. Autor nabízí v diskuzi vysvětlení, které nicméně nemusí být, podle mého názoru, jediným možným. Lze se nad tímto v rámci obhajoby ještě jednou zamyslet?
- 6) Proč byly připravené koordinační sloučeniny analyzovány pouze hmotnostní spektrometrií resp. proč nejsou uvedeny (jen zobrazeny) výsledky NMR?
- 7) obrázek 3 - podle zakresleného vzorce se nejedná o elektroneutrální látku
- 8) Jakým způsobem byly přiřazeny jednotlivé píky IČ spekter uvedeným vibracím?
- 9) Jak byla prokázána přítomnost solvátomolekul u izolovaných makrocyclických organických sloučenin?

10)kap. 6 - je zde uvedeno, že syntéza fluoro komplexů již byla v literatuře popsána.

Ačkoli student v této části práce úspěšný nebyl, lze uvést, jaké byly reakční časy těchto syntéz a dát je do kontextu s poločasem rozpadu ^{18}F , který by pravděpodobně byl tím ligandem finálních duálních MRI/PET sond? Co možnost jiných fluoračních činidel?

Závěrem konstatuji, že teoretická část je čtivá a velmi zdařilá. Obdobně i v experimentální části student dobře popisuje provedené syntézy, které pak velmi detailně diskutuje v diskuzní části práce. Vzhledem k tomu, že mnohé ze syntéz musel student několikrát opakovat a optimalizovat, je množství odvedené experimentální práce velmi vysoké, ačkoli v mnoha případech pouze následuje již publikované postupy. Cíle práce byly naplněny, stejně tak i rozsah a kvalita podle mého názoru odpovídá odborné diplomové práci.

Hodnocení: B

V Olomouci 7. května 2024

.....

doc. Mgr. Pavel Štarha, Ph.D.

oponent

Katedra anorganické chemie

Přírodovědecká fakulta

Univerzita Palackého v Olomouci