

doc. PharmDr. Ján Vančo, Ph.D., Oddělení biologicky aktivních komplexů a molekulových magnetů RCPTM, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci,

17.listopadu 12, 771 46 Olomouc

V Olomouci, 16. mája 2018

POSUDOK OPONENTA

na **diplomovú prácu** študenta **Bc. Kamila Kotrleho** „Magnetické vlastnosti vícejaderných a polymerních koordinačních sloučenin lanthanoidů“ vypracovanú na Katedre anorganické chémie, Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého v Olomouci pod vedením doc. Ing. Radovana Herchela, PhD. v rámci študijného odboru 1401T002 Anorganická chemie.

Študent predložil ako diplomovú prácu text pozostávajúci z 79 číslovaných strán rozdelený do kapitol obvyklých pre podobný typ prác. Je len na škodu, že pritom nedodrжал formálny rámec, ktorý stanovuje záväzný predpis „Směrnice děkana A-14/5/SD ze dne 18.6.2014, kterou se provádí některá ustanovení Studijního a zkušebního řádu UP (dále jen „SZŘ“) (I. úplné znění účinné dnem 1 9. 2017)“, článok VII, ods. 1, písmená a, b. Toto považujem za vážny formálny nedostatok, ktorý by sa mal vo fyzických výtlačkoch prác opraviť vlepéním požadovaných strán s bibliografickými informáciami a v prípade elektronickej formy zvážiť jej náhradu za opravený súbor v čo najkratšom termíne.

Práca samotná pozostáva z 36 strán teoretickej časti, kde sa diplomant zamerail na všeobecný popis základných magnetochemických vzťahov a efektov, popisu vlastností jednomolekulových magnetov a metód ich štúdia, popisu magnetokalorického javu a rešerše v oblasti komplexov dysprózia a gadolína so zameraním na štruktúrne a magnetochemické parametre. Ďalej autor pokračuje 24 stranami praktickej časti, kde sa venuje popisu syntéz šiestich finálnych komplexov Dy(III) a jedného komplexu Gd(III). Táto časť je doplnená o popis fyzikálno-chemickej charakteristiky pripravených komplexov, štruktúrnej analýzy komplexov, magnetometrických meraní troch komplexov Dy(III) a jedného komplexu Gd(III) v statickom i dynamickom experimente a popisom realizovaných teoretických výpočtov. Je potreba konštatovať, že praktická časť diplomovej práce plne kopíruje hlavné ciele práce stanovené zadáním.

Predložená diplomová práca pôsobí celkovo ako vedecké dielo nadpriemernej úrovne. Je napísaná zrozumiteľne a dosiahnuté výsledky sú primeranou formou i interpretované.

K predloženej práci mám niekoľko pripomienok a otázok:

1. Str. 10 – Vo vzorcoch (17) a (18) nie je definovaná konštanta C_0 . Aký význam a hodnotu má?
2. Str. 19, r. 5; str. 37, r.9; Tab.1, r.1 – vzorce uvedených zlúčenín nerešpektujú princípy chemickej nomenklatúry
3. Kapitola „Teoretické výpočty“: ak tvrdíte s odkazom na lit. 60, že magnetické správanie komplexov lantanoidov je citlivé i voči drobným zmenám v štruktúre (cit. na str. 21), prečo ste pri modelovaní východiskových častíc pre kvantovo-chemické výpočty použil len monoméne jednotky, aj napriek tomu, že v realite sa jednalo o dimér (príklad komplexu 3) či polymér (príklad komplexu 2). Nemôže nesúlad medzi výpočtom a realitou súvisieť práve s touto hrubou aproximáciou?
4. Vysvetlivky k Tab. 2 a 3 – chyby v aplikácii organického názvoslovía
5. Str. 45, r. 2 od konca – „...pomocí difuze diethyletheru“, skutočne difundoval dietyléter, ktorý je za normálnych podmienok kvapalina?
6. V kapitole 4.3. uvádzate, že boli zmerané IR spektrá len komplexov 1, 2 s 3, no v Tab.6 prezentujete výsledky pre 5 zo siedmich komplexov, prečo?
7. V praktickej časti uvádzate u každej techniky charakterizácie, že analýzy boli vykonané na danom prístroji. Kto ale interpretoval získané dáta? Napr. u väzbových dĺžok a uhlov a rozmerov elementárnej bunky nie sú uvedené odchýlky. Tieto dáta ste dostal v takejto podobe? Vyjadrite sa prosím k Vášmu konkrétnemu príspevku v rámci obhajoby práce.
8. Citácie literárnych zdrojov nevyhovujú zvyklostiam odboru ani norme ISO 690:2011 (prakticky všetky klasické informačné zdroje sú citované ako zdroje elektronické či internetové).

Celkovo možno konštatovať, že autor očividne venoval práci veľké úsilie a pozornosť, čo možno dokumentovať malým množstvom formálnych a gramatických chýb v texte, a aj preto **odporúčam** predloženú diplomovú prácu prijať k obhajobe s klasifikáciou stupňom **B**.

doc. PharmDr. Ján Vančo, Ph.D.