

OPONENTSKÝ POSUDEK

na bakalářskou práci Evy Zahradníkové:

„Magneticky zajímavé komplexy manganu a železa s pyridinovými makrocyclickými ligandy“

Bakalářská práce se zabývá literární rešerší, syntézou a charakterizací dvanácti- a čtrnáctičlenných azamakrocyclů a jejich koordinačních sloučenin vybraných přechodných prvků. Práce má odpovídající rozsah 65 stran (včetně 35 obrázků, 8 tabulek a 71 literárních odkazů) a klasické členění.

V kapitolách *Úvod* a *Cíle práce* je čtenář seznámen s motivací a konkrétními cíli práce. Obsažná a informativní *Teoretická část* dostatečně podrobně popisuje témata relevantní ve vztahu ke studované problematice. V *Experimentální části* jsou popsány přípravy dvou studovaných azamakrocyclů, a to nového dvanáctičlenného L_1 a z literatury známého čtrnáctičlenného systému L_2 , a jejich Mn(II), Fe(II), Ni(II) a Co(II) komplexů. Je namístě zmínit, že syntézy sloučenin L_1 a L_2 jsou vícekrokové, navíc autorka pro mnohé mezikroky nabízí více možností syntetických postupů. Nezanedbatelné úsilí pak muselo být při těchto syntézách věnováno čištění meziproduktů a finálních produktů. V *Experimentální části* nacházíme také výsledky provedených analytických technik (elementární analýza, NMR, hmotnostní spektrometrie a magnetochemická měření) a četná reakční schémata. Provedené syntézy a dosažené analytické výsledky jsou pak vhodně okomentovány v kapitole *Diskuze*. Práce je zakončena srozumitelným *Závěrem*.

Ačkoli je práce formálně i obsahově na velmi vysoké úrovni, má k ní oponent několik připomínek (pro přehlednost budou uvedeny bodově):

- formální a jazykové nepřesnosti
 - za nevhodné považuji slangové zkracování jazykově správných forem dvanáctičlenné resp. čtrnáctičlenné na 12členné resp. 14členné
 - nesprávné chemické názvy (viz anglická verze abstraktu - pyridin, methanole)
 - je nutné dodržovat správné pořadí obrázků, podle toho, kdy jsou uvedeny v textu (viz nelogické řazení obr. 8–10)
 - "... kolik nespárovaných elektronů je v orbitalu dané látky." (str. 12)
 - "... onemocnění vyvolané prvokem roku *Leishmania* ..." (str. 21)
 - "Roztok byl obazičtěn pevným NaOH ..." (str. 37)
 - obr. 16 - nesoulad mezi popiskem a obrázkem
- práci nepřidává ani časté nahrazování vzorců studovaných komplexů výrazy jako např. "...nikelnatý komplex s L_1 ..."
- podobně by bylo vhodné také jednotlivé sloučeniny, které jsou v práci doloženy strukturními vzorci a zkratkami (např. L_1A nebo L_1B) systematicky pojmenovat jak je tomu např. u látek L_2O
- rozsah práce by mohl být menší, pokud by bylo lépe využito místa (viz časté prázdné části stran) a především pokud by se neopakovaly některé obrázky a jejich části, např.:
 - obr. 20 obsahuje strukturní vzorec uvedený v obr. 19
 - obr. 22 obsahuje strukturní vzorec uvedený v obr. 21
 - obr. 25 a 26 jsou stejné, stejně jako obr. 29 a 31, a obr. 30 a 34

- v souvislosti s předchozím bodem by práci prospělo, kdyby byla namísto uvedených obrázků zobrazena některá NMR nebo ESI-MS spektra
- tabulka 4 (str. 32)
 - nejedná se o výrobce ale dodavatele
 - je vhodné uvést čistotu chemikálií a rozpouštědel
- u některých zápisů výsledků ^1H NMR nesedí celkové teoretické a experimentální integrální intenzity (např. kapitola 6.3 na str. 36)
- u některých syntéz nejsou uvedeny navážky

Za okomentování hodné připomínky považuji následující:

- Jaké 2D NMR techniky byly při NMR analýzách použity?
- Byly alespoň u některých (mezi)produktů v ^1H NMR spektrech pozorovány vodíkové atomy přítomných N–H skupin?
- U výsledků hmotnostní spektrometrie je vhodné uvést relativní intenzitu diskutovaných signálů, nejen hodnotu m/z . Demonstrujte při obhajobě na vhodném příkladu.
- Proč mají tytéž produkty v tabulkách 6 a 7 uvedeny jiné vzorce? Jakou technikou by šlo relevantně prokázat přítomnost v tabulce 7 navrhovaných solvátomolekul?
- Jak si autorka vysvětluje nesoulad mezi výsledky monokrystalové rentgenové strukturní analýzy bezvodého komplexu $[\text{Ni}(\text{L}_1)(\text{MeOH})](\text{ClO}_4)_2$ (kapitola 11 a obr. 33) a výsledky elementární analýzy poukazujícími na vznik hemihydrátu (tabulka 7)?
- Při syntéze látky L_2 (obr. 30 a 34) dosahuje autorka při jednom mezikroku výtěžku 107,5 % - jaké pro to má vysvětlení?
- V kapitole 8.1 (str. 42-43) není uvedena žádná $\text{Cu}(\text{II})$ sůl, ačkoli zde má být popsána syntéza na $\text{Cu}(\text{II})$ templátu.
- Jaký byl příspěvek autorky při interpretaci provedených analytických technik?

Závěrem lze odpovědně konstatovat, že stanovené cíle práce byly autorkou naplněny, a že získané teoretické i experimentální poznatky jsou náležitě zpracovány do výsledné formy bakalářské práce. Předloženou práci lze, vzhledem k požadavkům pro studenty bakalářských chemických oborů PřF UP v Olomouci, považovat za nadstandartní, a to jak po formální tak i obsahové stránce. Bakalářská práce Evy Zahradníkové zcela objektivně splňuje požadavky kladené na tento typ kvalifikačních prací, a proto:

- předloženou bakalářskou práci k obhajobě: **D O P O R U Č U J I**
- navrhuji hodnocení předložené bakalářské práce známkou: **B**

V Olomouci, 10. 5. 2017

.....

doc. Mgr. Pavel Štarha, Ph.D.

“oponent”

Katedra anorganické chemie

Přírodovědecká fakulta

Univerzita Palackého v Olomouci