

Posudek bakalářské práce Evy Máčalové

„Biologicky aktivní komplexy vybraných kovů VIII. B skupiny“

Předložená bakalářská práce Evy Máčalové je věnována problematice biologicky aktivních komplexních sloučenin iridia, kdy hlavními cíli práce jsou jednak vypracování literární rešerše mapující současný stav výzkumu v dané oblasti, a jednak příprava nových sloučenin tohoto typu a jejich základní charakterizace. Vzhledem k prakticky výhradnímu zaměření na iridium je tedy název bakalářské práce příliš obecný a poněkud zavádějící.

Bakalářská práce rozsah 47 stran a je členěna klasickým způsobem na hlavní kapitoly *Úvod*, *Teoretická část*, *Experimentální část*, *Výsledky a diskuze*, *Závěr* a *Použitá literatura*. V kapitole *Úvod* autorka pokouší stručně navodit problematiku, kterou hodlá řešit. Text je ovšem obsahově velmi obecný, a i když jsou zmíněny cíle práce, není čtenáři příliš jasné, čím a proč se práce zabývá, a co od ní může čekat.

Teoretická část je věnována iridiu, jeho komplexním sloučeninám a derivátům 7-azaindolu, což by ligandům využitým v experimentální části bakalářské práce. K *Teoretické části* mám následující dotazy a připomínky:

Kapitola 2.1 se má věnovat biologicky aktivním komplexům VIII.B skupiny. Ve skutečnosti je diskutováno pouze několik „notoricky“ známých sloučenin platiny a ruthenia. Znamená to, že ostatní prvky této skupiny na výzkum v oblasti biologické aktivity komplexů teprve čekají?

Začátek kapitoly 2.2 přináší výčet některých fyzikálních charakteristik iridia. Protonové číslo, které je zcela základní charakteristikou prvku, je uvedeno až na posledním místě. Jméno objevitele iridia by mohlo být uvedeno celé. Také konstatování o malém technickém významu iridia (strana 10) je vzhledem k jeho katalytickým vlastnostem zavádějící. Tabulka na straně 10 je spíše obrázkem.

V kapitole 2.3 na straně 11 autorka píše o iriditě iontu, užívá ale notaci pro oxidační stav. Dále srovnává stabilitu komplexů Ir(III) s arenovými a cyklopentadienylovými ligandy. Co je příčinou rozdílného chování? Co má autorka na mysli pojmem „bohatý na elektrony“? Proč má Obrázek 4 popisky v angličtině (tento problém se týká i dalších obrázků uvedených v práci).

Na straně 12 autorka uvádí, že záměna elektroneutrálního N,N-ligandu záporně nabitým C,N-ligandem vede ke zvýšení hydrofobicity. Co je příčinou tohoto efektu? Přítomnost nenulového elektrického náboje by měla mít opačný efekt.

Proč náhradou chloridového iontu pyridinem dochází ke zvýšené tvorbě reaktivních forem kyslíku?

Tabulka 2 na straně 13 je grafem. Ten navíc není řádně popsán.

Autorka opakovaně používá pojem fenylový kruh. Správněji by měla používat termín benzenové jádro (kruh).

V kapitole 2.3.1 autorka zmiňuje „životnost“ molekuly. Co chce tímto termínem říci? Jakým způsobem byl tento parametr stanoven?

Dále autorka uvádí, že přítomnost methylových skupin na ligandu vede ke snadnějšímu odštěpení chloridového ligandu. Existuje pro toto tvrzení experimentální důkaz, například studium vlivu počtu a typu substituentů na cyklopentadienylovém aniontu?

V kapitole 2.4 na straně 20 autorka zmiňuje asymetrické ligandy (Obrázek 11). V čem spočívá asymetrie jejich struktury?

V kapitole 2.5 jsou na obrázku prezentovány strukturní vzorce komplexů $[Zn(\text{pyaza})R_2]$. Jaký je rozdíl mezi strukturami A a B? Je si autorka jistá, že vzorce naznačují prostorové uspořádání molekul správně?

Kapitola *Experimentální část* předkládá popis přípravy a výsledky fyzikálně chemické charakterizace tří derivátů 7-azaindolu, jednoho derivátu cyklopentadienu, šesti komplexů Ir(III) a jednoho komplexu Rh(III). Deriváty 7-azaindolu byly připraveny v poměrně nízkých výtěžcích. Byl učiněn pokus o optimalizaci reakčních podmínek? U některých komplexů je uvedeno, že byly připraveny monokrystaly vhodné pro monokrystalovou difrakční analýzu. Byla tato provedena? Autorka by rovněž měla v rámci obhajoby práce vysvětlit podstatu metody kvantifikace hydrofobicity použité v práci.

Kapitola *Výsledky a diskuze* podrobněji rozebírá jednak syntézu připravených látek, jednak se také pokouší o zevrubnější interpretaci naměřených fyzikálně chemických dat. V rámci obhajoby by měla být detailněji diskutována NMR spektra možných diastereomerních forem komplexu 4. Strukturní vzorce na Obrázku 29 opět nejsou zcela v pořádku. V čem spočívá diastereomerní vztah prezentovaných forem? Velmi stručně je diskutována hydrofobicita připravených komplexů. Jak lze strukturně vysvětlit pozorované trendy v hodnotách této veličiny?

Kapitola *Závěr* stručně a přehledně sumarizuje experimentální výsledky práce.

Závěrem chci konstatovat, že po experimentální stránce studentka odvedla nezanedbatelný kus práce. Literární rešerše mohla být poněkud detailnější. Po jazykové stránce je práce napsána dobře a neobsahuje příliš velké množství chyb a překlepů. Slabinou je grafická stránka. Řada obrázků je pouze nekvalitně okopírována z jiných zdrojů. Jejich přepracování by přitom nevyžadovalo příliš velké úsilí. Vzorce mají nejednotný formát, často podávají zavádějící nebo špatné informace.

Přes výše uvedené kritické připomínky práce dle mého názoru splňuje kritéria kladená na bakalářské práce na PřF UP v Olomouci. Proto ji **doporučuji** k obhajobě a navrhuji hodnocení

V Olomouci 12. 5. 2016

doc. RNDr. Michal Čajan, Ph.D.