

Posudek bakalářské práce Anny Havlíčkové

„Modelové organokovové sloučeniny ruthenia s 2'-hydroxychalkony: příprava a charakterizace“

Předložená bakalářská práce Anny Havlíčkové si za cíl klade vypracovat literární rešerši zaměřenou na biologicky zajímavé deriváty 2'-hydroxychalkonů a komplexních sloučenin ruthenia, syntetizovat modelové organokovové sloučeniny Ru^{II} s vybranými deriváty 2'-hydroxychalkonů a připravené látky charakterizovat vhodnými analytickými metodami. Práce byla řešena pod vedením Mgr. Jakuba Hutýry, po jeho odchodu z Katedry anorganické chemie PřF UP v Olomouci pod vedením doc. PharmDr. Jána Vanča, Ph.D.

Bakalářská práce má rozsah 50 stran a je členěna klasickým způsobem na hlavní kapitoly, *Úvod, Teoretická část, Experimentální část, Výsledky a diskuse, Závěr a Citovaná literatura*.

Kapitola *Úvod* je velmi stručná a čtenáře se základními aspekty řešené problematiky seznamuje jen velmi obecně. Již v této kapitole jsou na první pohled zřejmé problémy s volbou a zpracováním literatury. Tyto se potom prolínají celou bakalářskou prací, v níž „schází“ minimálně 40 odkazů na literaturu podporující autorčina konstatování. Formálním nedostatkem je řazení literatury, kdy po čísle jedna následují čísla 34 a 35, dále potom 65, 2, 3, 67, atd. Zásadním nedostatkem je ovšem výběr a množství použité literatury. Například v prvním odstavci *Úvodu* autorka zmiňuje biologické vlastnosti komplexů Ru, Rh, Os, Ir, Ag, Co, Zn a Cu. Tento výčet je ovšem podložen pouze jedinou prací, která je navíc věnována optimalizaci reaktivity vybraných komplexů Os^{II} a Ru^{II} . Autorka v textu celé rešeršní části intenzivně využívá slova a slovní spojení *hojně, mnoho, často, široká škála, značná pozornost*, apod. Příslušná konstatování jsou ovšem podložena jen několika málo, nezdělanými jediným zdrojem, který navíc zpravidla není původní.

Teoretická část je rozdělena do dvou podkapitol věnovaných chalkonům a jejich polosandwichovým komplexům s Ru^{II} a Ru^{III} . Charakterizace diskutovaných látek jak z hlediska chemického, tak i z hlediska jejich biologické aktivity je velmi povrchní a obecné. Sloučenin je také na první pohled docela malé množství. Souvisí tato skutečnost s faktem, že se jedná o ve světě zatím nepříliš intenzivně zkoumanou problematiku nebo si autorka k diskusi vybrala vždy jen několik zástupců. Jaká byla v druhém případě zvolena kritéria pro výběr? Kromě nedostatku zdrojové literatury se objevuje problém s odkazováním na zcela nesprávné zdroje. V kapitole 2.2.3.2 *Ru^{II} polosandwichové látky* autorka zmiňuje pozorování

protinádorové aktivity Ru komplexů z roku 2001, dokládá to ovšem publikacemi pocházejícími z let 2010, 2013 a 2015. Zmíněna je substituce na A kruhu, tento kruh však není řádně definován. V kapitole 2.2.1 *Historie* jsou syntéza a určení struktury ferrocenu pocházející z padesátých let podloženy článkem z roku 1991, navíc publikovaném v Journal of Chemical Education. Ve stejné kapitole jsou zmíněny bis-cyklopentadienidy. O jaké látky se jedná? V prvním odstavci podkapitoly 2.2.2 *Chemické složení* se uvádí, že se cyklopentadienid stal spolehlivým ligandem? Co jsou spolehlivé ligandy? A co jsou ligandy arenové? Dále se v této stati píše, že významným kovem v rámci VIII.B skupiny je osmium. V jakém slova smyslu významným? A jsou v této skupině méně významné prvky? Zmíněny jsou také polosandwichové komplexy prvků IV.B, VI.B a vanadu, citovaná práce se ovšem věnuje pouze komplexům molybdenu. Citována není ani příprava uranocenu. V podkapitole 2.2.3.4 *Polosandwichové komplexy Ru^{II} s chalkonovým ligandem* je zmíněna práce pocházející ze skupiny prof. Sadlera, příslušná citace ovšem chybí. Citace rovněž chybí v předposledním i posledním odstavci této podkapitoly i podkapitolách následujících. V *Teoretické části* se také objevují triviálně pojmenované ligandy, aniž je uveden i název systematický (Oxicam, Lapachol, melophlin, apod.). Celé *Teoretické části* chybí zhodnocení, ze kterého by vyplynuly další možnosti směřování výzkumu v této oblasti, včetně směru, kterým se vydala autorka bakalářské práce.

Kapitola *Experimentální část* je psána v první osobě jednotného čísla, což vyvolává dojem, že veškeré experimenty, z hlediska návrhu i realizace, provedla autorka sama. Pouze z poděkování v úvodu bakalářské práce se čtenář dozví, že některá měření byla realizována dalšími osobami. Pakliže se na návrhu experimentů či zpracování dat podíleli další lidé, mělo by toto být v rámci obhajoby specifikováno. 2'-hydroxychalkony prezentované v práci jsou autorkou zcela nově připravené sloučeniny nebo již byly připraveny dříve někým jiným? Popisy syntéz stejně jako úprav reakčních podmínek jsou velmi nestandardní. Na základě jakých pozorování autorka dospěla k závěru, že vzniku komplexů brání právě vlhkost? Tento problém měl být vyřešen použitím suchého rozpouštědla, z toho se však nepodařilo získat komplex v krystalické podobě. Byla prokázána přítomnost komplexu v roztoku? Problémy způsobovala i vlhkost používaného dusíku. Zkoušela ho autorka sušit? Za jakým účelem byl dusík použit a v čem spočívala vyšší účinnost argonu? V konečném shrnutí syntézy komplexů autorka uvádí, že vložila filtrát na jeden den do lednice, aby ho následně odpařila do sucha. Jakou roli mělo hrát zmiňované chlazení?

Kapitola *Výsledky a diskuse* rozebírá výsledky syntézy chalkonů a komplexů, i data získaná fyzikálně chemickými technikami. Při posuzování čistoty připravených chalkonů autorka porovnávala jejich TLC se standardem. Znamená to, že tyto látky již byly připraveny dříve někým jiným? Pokud ano, proč jsou jejich syntéza a NMR spektroskopie v této práci uváděny? Spektrální data (NMR, IR i MS) by si obecně zasloužila detailnější rozbor. IR spektra prezentovaná na straně 36 jsou v podstatě identická. Byl proveden pokus o identifikaci vibračních vazeb kov-ligand? Hmotnostní spektra komplexu byla měřena i ve směsi s biomolekulami. Proč byly vybrány právě cystein a glutathion? Výsledky monokrystalové difrakční analýzy jsou z celé diskusní části zpracovány nejhůře. Nejsou uvedeny podmínky, za jakých byl monokrystal připraven, podmínky difrakčního experimentu ani základní údaje o molekulové a krystalové struktuře. Data v příslušných tabulkách jsou uvedena bez chyby měření. Látka použitá pro strukturní porovnání měla být popsána podstatně podrobněji než jen odkazem v seznamu použité literatury. Proč byla pro srovnání vybrána právě ona?

Kapitola *Závěr* jen v několika větách velmi sděluje, že byla provedena rešerše, a že se podařilo připravit a částečně charakterizovat pět ligandů a jeden komplex.

Práce má průměrnou grafickou úroveň. V textu se vyskytuje větší množství pravopisných chyb. Nevhodné je také používání slangových výrazů.

Závěrem konstatuji, že se autorka v rámci svých možností pokusila realizovat teoretickou, i praktickou stránku zadaného úkolu. Celou řadu výše zmíněných pochybení lze jistě přičíst její nezkušenosti. Na druhou stranu, řadě vytýkaných nedostatků bylo možné předejít konzultacemi s oběma školiteli, v některých případech i jen krátkým nahlédnutím do některé již obhájené bakalářské či diplomové práce. To se týká jednak způsobu provedení literární rešerše, respektive výběru a množství použitých literárních zdrojů, jednak formy popisu experimentů v rámci práce provedených. Oba problémy považuji za natolik zásadní, že práce v dané podobě dle mého názoru nesplňuje kvalitativní kritéria kladená na kvalifikační práce na PřF UP v Olomouci, a proto ji **nedoporučuji** k obhajobě.

V Olomouci 22. 5. 2017

doc. RNDr. Michal Čajan, Ph.D.