



Posudek oponenta disertační práce

Autor práce: Ing. Petra Janovská

Pracoviště autora: Univerzita Tomáše Bati Zlín, Fakulta technologická

Název disertační práce: Studium vlivu struktury na stabilitu a uspořádání supramolekulárních komplexů 1-adamantylových ligandů a kavitandů na bázi cyklodextrinů a cucurbiturilů

Oponent: doc. RNDr. Miroslav Soral, Ph.D.

Pracoviště oponenta: Univerzita Palackého Olomouc, Přírodovědecká fakulta

Kontaktní e-mail: miroslav.soral@upol.cz

Disertační práce Ing. Janovské je zaměřena na oblast supramolekulární chemie. Cílem byla příprava nových derivátů adamantanu obsahujících alkyl-imidazoliniový nebo alkyl-benzimidazoliniový skelet a následné studium jejich komplexace vybranými cyklodextriny a cucurbiturily. Kromě samotné syntézy heteroditopických a heterotritopických ligandů tak práce obsahuje detailní rozbor tvorby, stechiometrie, geometrie a stability binárních nebo ternárních supramolekulárních komplexů s použitím NMR, MS a isothermické titrační kalorimetrie.

Práce je koncipována jako úvod do problematiky, následovaný stručným komentářem k dosaženým výsledkům, které tvoří součást práce ve formě publikovaných článků. Celkový rozsah je 94 stran, přičemž 39 stran tvoří originální text. Autorka zde stručně popisuje vlastnosti hostitelských molekul na bázi cyklodextrinů a cucurbiturilů, dále se věnuje sumarizaci nejdůležitějších informací týkajících se vysoce afinitních ligandů těchto dvou skupin látek a nakonec uvádí vybrané příklady zajímavých supramolekulárních systémů, které byly předmětem nedávného studia. Dle mého názoru je tato část čtivě a pečlivě sepsána, neobsahuje téměř žádné formální nedostatky a množství předložených informací je zcela dostatečné pro základní orientaci v oblasti supramolekulární chemie cyklodextrinů a cucurbiturilů. V následující části autorka stručně shrnuje výsledky dosažené v jednotlivých podprojektech. První podprojekt byl věnován přípravě 1-adamantylanilinů a jejich komplexaci β -cyklodextriny, přičemž byl mimo jiné studován efekt raménka mezi adamantanovým ligandem a anilínovou částí ligandu s lepšími výsledky dosaženými pro nepolární řetězec. Druhý podprojekt byl zaměřen na přípravu ligandů obsahujících kombinaci adamantanu a alkyl-imidazoliové nebo alkyl-benzimidazoliové soli. V případě butylových derivátů připravené sloučeniny fungovaly jako ditopické ligandy schopné vázat současně dvě hostitelské molekuly, což následně umožnilo studii kompetitivní komplexace. V třetím podprojektu byly připraveny tritopické ligandy obsahující dva alkyl-imidazoliové nebo alkyl-benzimidazoliové skelety spojené přes difenylové raménko. Tímto byla umožněna interakce s třemi hostitelskými molekulami za vzniku ternárních komplexů

v rotaxanovém, resp. pseudorotaxanovém uspořádání. Ve čtvrtém podprojektu byly připraveny ligandy obsahující jako spojnicí dvou alkyl-imidazoliových skeletů adamantanovou klec, u nichž byla zjištěna silná afinita centrální části k CB7 a CB8. V posledním podprojektu pak figuruje jako raménko mezi imidazoliovými částmi bicyklo[2.2.2]oktan, přičemž příslušný supramolekulární komplex zde byl úspěšně charakterizován i pomocí RTG. Celkově z dosažených výsledků vyplývá, že všechny vytyčené cíle byly beze zbytku splněny.

Role oponenta v hodnocení vědecké kvality předložené práce je relativně zjednodušena, neboť předložené výsledky byly u čtyř z pěti podprojektů již publikovány v renomovaných impaktovaných časopisech a klíčové pasáže disertační práce tak prošly přes pečlivou peer-review proceduru. Nikoliv překvapivě proto musím s potěšením konstatovat, že dosažené výsledky představují velice kvalitní přínos k poznání v oblasti supramolekulární chemie a zajímavý základ pro navazující studie. V rámci publikací souvisejících s předloženou disertační prací je Ing. Janovská ve dvou případech hlavní autorkou. V ostatních případech pak konkrétně specifikuje svůj přínos k dosaženým výsledkům, který lze označit ve všech případech jako významný. Autorka tak jednoznačně prokázala své kompetence v dané oblasti výzkumu. Z výše uvedených důvodů hodnotím předloženou práci velmi pozitivně a doporučuji její přijetí k obhajobě.

Otázky a náměty k diskuzi:

- 1) V Tabulkách 1 a 2 jsou uvedeny rozpustnosti jednotlivých derivátů ve vodě. V rámci skupiny CD je ve srovnání s analogy téměř nerozpustný β -CD, ve skupině cucurbiturilů se pak rovněž jednotlivá analoga ve zmíněném parametru výrazně liší. Čím jsou tyto diametrální hodnoty způsobeny?
- 2) Při katalytické hydrogenaci nitroskupiny popisujete v jednom případě vznik N-ethyl derivátu. Má podobná reakce precedens v literatuře? Můžete navrhnout její mechanismus?
- 3) Je z literatury známý vliv teploty na vlastnosti supramolekulárních komplexů cucurbiturilů, např. na jejich stabilitu? Má vyšší teplota dopad na geometrii nebo kompetici v multikomponentních systémech, tj. v případě přítomnosti více hostitelských molekul? Je možné komplexovat i ligandy zcela nerozpustné ve vodě?
- 4) Lze předpokládat, jaký efekt na afinitu a stabilitu by měla změna spojky mezi bifenylem a imidazoliem z methylenového na delší raménko?
- 5) Můžete na konkrétním příkladu demonstrovat nějakou potenciální praktickou aplikaci připravených alkyl-imidazoliových supramolekulárních komplexů?

V Olomouci 2. 9. 2018

.....
Podpis oponenta