



Oponentský posudek disertační práce

Autor: Ing. Kristýna Jelínková
Školitel: doc. Mgr. Robert Vícha, Ph.D.
Název: Syntéza a supramolekulární chování multitopických ligandů na bázi kubanu

Předložená disertační práce představuje problematiku řešenou ve skupině doc. Víchy na Univerzitě Tomáše Bati ve Zlíně a zabývá se syntézou nových multitopických ligandů a studiem jejich komplexačního chování s cyklodextriny (CD) a cucurbiturily (CB).

Dizertační práce je napsána v českém jazyce a má klasickou strukturu rozdělenou na teoretickou část, diskuzi výsledků a závěrečnou experimentální část. V úvodní teoretické části nás autorka seznamuje na cca 22 stránkách se základy supramolekulární chemie CD a CB a zabývá se popisem nejčastějších klecových struktur, které se využívají pro interakce s výše zmíněnými makrocykly.

V diskuzi výsledků se autorka nejdříve zaměřuje na přípravu kubanových ligandů a studium struktur jejich komplexů s CB7, CB8 a GLY6. Dále následuje příprava derivátů spiro[3.3]heptanu substituovaných v poloze 2 a 6 a příslušná studie, zabývající se supramolekulárním chováním těchto ligandů s CB a CD. Zajímavou část představuje syntéza imidazoliových solí a studium jejich komplexačního chování kombinací NMR, MS a ITC.

Největší část diskuze výsledků je věnována přípravě tritopických kubanových ligandů a jejich následnému supramolekulárnímu využití. Je jasné, že studium molekul nesoucích adamantylové, imidazoliové a kubanové fragmenty není jednoduché. Mohu nicméně konstatovat, že Ing. Jelínková se této úlohy zhostila se ctí a využitím různých metod prokázala hlavní módy interakcí těchto ligandů jak s jednotlivými makrocykly, tak i s jejich směsmi.

Celkově dizertace představuje velmi solidní vědecké výsledky, o jejichž kvalitě svědčí i to, že jejich část již byla publikována ve třech publikacích v mezinárodních impaktovaných časopisech.

K práci samotné mám několik následujících připomínek a námětů do diskuze:

- Str. 23. „*Diamantan byl poprvé připraven v roce 1965 ve dvou krocích v pouhém 1% výtěžku.*“ Trochu nešťastné vyjádření, neuvedeme-li k tomu co je na počátku těch dvou kroků.
- Str. 42, Schéma 6 Příprava 1,4-diaminokubanu dihydrochloridu. Existuje nějaké vysvětlení pro neobvykle nízký výtěžek ochránění Boc skupiny? Pouhých 15% se zdá velmi málo.
- Str. 43. „*NMR integrace komplexu odhalila, že ligand 14 obsahuje více než 50 % neidentifikovaných nečistot, které jsou v 1H NMR spektru nepozorovatelné. Tyto nečistoty ovšem neovlivňují výsledky ITC titrací.*“ To je docela odvážné tvrzení, obzvláště když netušíte, o jako nečistoty se jedná. To opravdu nešlo vyčistit nějakou např. chromatografickou technikou? Není hodnota $n = 1.32$ v Tabulce 2 naopak důkaz toho, že to na ITC vliv má?
- Str. 76. Zaujalo mě, že jodmethyladamantan vůbec nereagoval s imidazolem, zatímco brommethyl derivát poskytl nedělitelnou směs produktů. Nalezl jsem v literatuře reakci brommethyladamantanu s 2-methylimidazolem v NMP při 200 °C. Možná hraje roli rozpouštědlo, popř. dostatečná teplota? Co třeba mikrovlny?
- Str. 93, diskuze ITC titrací. Autorka tvrdí, že nelze získaná ITC data jednoduše a správně vyhodnotit neboť neexistují odpovídající matematické modely. Já s tím naprosto souhlasím.



Potom ale příliš nerozumím tomu, co vlastně tabulka 8 obsahuje. Vzhledem k tomu, že stechiometrie je leckde jiná než jen 1:1, k čemu se tedy vztahují asociační (zdánlivé) konstanty a příslušné termodynamické veličiny? Je to tedy celková konstanta $K_1 \times K_2$ pro komplex 2:1? Jaký je její fyzikální/chemický význam a má smysl jejich velikost nějak diskutovat a porovnávat? Mimochodem, pokud je konstanta pro 2:1 komplex o velikosti 10^5 , znamenalo by to, že konstanta pro komplex 1:1 je maximálně v řádu stovek (pokud platí, že celková konstanta je součinem jednotlivých parciálních konstant), což zase není nijak moc?

- Str. 97, Obr. 46. Záznam rovnováh je trochu (dost) zmatečný: rovnováha zleva doprava dává smysl, ale rovnováha zprava doleva již nikoliv. Například struktura V by měla být vystavena působení beta-CD, aby přešla na III nebo IV, ale nic takového na obrázku není.
- Str. 113, Obr. 57. Pravá část obrázku ukazuje pořad tutéž rovnováhu. Nerozumím, co je tím míněno? Také obrázek 60 na straně 116 je zvláštní – pravý horní roh ukazuje identické struktury na obou stranách rovnováhy?

Přes uvedené připomínky mohu konstatovat, že autorka prokazatelně odvedla kus práce, vedoucí k řadě zajímavých výsledků. Závěrem lze konstatovat, že studentka prokázala patřičné tvůrčí schopnosti v daném směru výzkumu a předložená práce splňuje požadavky standardně kladené na disertační práce v oboru.

Z výše uvedených důvodů **d o p o r u č u j i** podle § 47, odst. 4, zákona č. 111/1998 Sb. přijmout předloženou disertační práci Ing. Kristýny Jelínkové k obhajobě jako podklad pro získání vědecké hodnosti **Ph.D.**

V Praze
dne 8. září 2020

prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Ústav organické chemie
VŠCHT Praha