

## Stanovisko oponenta k disertační práci doktorandky

Oponent: prof. Ing. Vladimír Šindelář, Ph.D.

Studentka: Ing. Kristýna Jelínková

Téma disertační práce: Syntéza a supramolekulární chování multitopických ligandů na bázi kubanu

Disertační práce Ing. Kristýny Jelínkové se zabývá supramolekulární chemií mezi hosty (ligandy) a hostiteli. Studentka připravila řadu hostů obsahujících kubanový, imidazoliový a / nebo adamantanový motiv a prozkoumala jejich interakce s komerčně dostupnými hosty jako jsou cyklohextriny a cucurbiturily. Vzájemné interakce byly studovány pomocí NMR, izotermální titrační kalorimetrie (ITC) a hmotnostní spektroskopie (MS).

Práce je dělená standardním způsobem. Teoretická část (22 stran) přehledně shrnuje supramolekulární chemii cucurbiturilů a cyklohextrinů, dále pak klecové uhlíky v čele s kubanem a zmiňuje také známé komplexy, kde jsou na multitopický ligand vázány alespoň dva různé typy makrocyklů. Kapitola Výsledky a diskuse (75 stran) je rozdělená na několik celků. Nejprve jsou rozpracovány ligandy s jedním vazebným místem a je zkoumána jejich afinita k makrocyklům. Následně studentka připravila multitopické ligandy a zkoumala možnost vázání jednoho typu makrocyklu a pak i kombinaci různých makrocyklů. Experimentální část (12 stran) obsahuje podrobné informace o použitých přístrojích, a především uvádí syntetické postupy a charakterizace všech připravených látek. Nutno ocenit, že charakterizace je provedena důkladně, vedle popisu NMR a MS spekter jsou uvedeny dnes ne už tak běžná IČ spektra a výsledky elementární analýzy. Záznamy  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  NMR a MS spekter jakož i záznamy měření supramolekulárních interakcí látek jsou uvedeny v rozsáhlé příloze (68 stran), bohužel chybí záznamy z ITC.

Jako celek působí práce velice dobrým dojmem. Je zřejmé, že studentka musela zvládnout ne vždy triviální syntézu supramolekulárních ligandů. Vedle toho prokázala znalost studia supramolekulárních komplexů hned třemi metodami, tedy NMR, ITC a MS. V práci ale není uvedeno, které z experimentů byly provedeny samotnou studentkou a které spolupracovníky, což by studentka měla upřesnit během obhajoby. Množství získaných výsledků je obdivuhodné. Práce je jasně vymezena od ostatních supramolekulárních studií tím, že v ní byl poprvé zkoumán kubanový a spiro[3.3]heptanový motiv jako místo pro vázání hosta. Práce přinesla řadu zajímavých výsledků, např. pomalé vázání CB7 na ligandy 23a-c, vysoce stabilní komplex mezi  $\gamma$ -CD a ligandem 23, či překvapivé vázání CB7 okolo kubanového místa v ligandu 23a indukované přítomností  $\beta$ -CD. Z mála nejasností, které jsem v textu našel, pramení následující otázky:

Otázky:

1) Úvodní věta na str. 41 konstatuje, že „PC=58 % pro kubanovou klec a CB6“, ale chybí další vysvětlení či citace. Uveďte, jak byl tento údaj získán a pro jaký kuban.

- 2) Jak víte, že ITC titrace diskutovaná na str. 43 není ovlivněna nečistotami přítomnými v látce 14?
- 3) Byla změřena asociační konstanta pro komplex mezi GLY6 a 9?
- 4) Máte vysvětlení pro endotermní vázání ukázané na obrázku 33b?
- 5) Komplexy mezi  $\beta$ -CD a ligandy 23a-c mají stechiometrii 2:1. Čemu tedy odpovídá asociační konstanta udávaná v tabulce 8?

Závěrem konstatuji, že Ing. Kristýna Jelínková předložila přehlednou disertační práci plnou zajímavých výsledků, z nichž některé již byly publikovány v 4 kvalitních časopisech, ve dvou je uvedena jako první autorka. Konstatuji, že studentka prokázala patřičné tvůrčí schopnosti v daném směru výzkumu a předložená práce splňuje požadavky standardně kladené na disertační práce v daném oboru.

V Brně, 3. září 2020



Vladimír Šindelář