

Oponentský posudek dizertační práce Ing. Jany Martinové: "Intramolekulárně koordinované organocínité a organocínaté sloučeniny jako ligandy pro přechodné kovy"

Předložená dizertační práce se zabývá syntézou a zevrubnou charakterizací komplexů cínu s Y,C,Y- ligandy a je zhruba rozdělena do dvou spolu souvisejících částí. První část se zabývá cíničitými komplexy s uvedenými ligandy, druhá část je věnována především syntéze heteroleptických stannulenů s těmito ligandy a jejich komplexacím s vybranými přechodnými kovy.

Úvodem je třeba jasně říci, že 29 nových sloučenin popsanych v této dizertační práci a již opublikovaných nebo zaslaných k publikaci v osmi člancích ve velmi kvalitních časopisech kolektivy autorů, ve kterých je autorka dizertační práce sedmkrát na prvním místě (ale ani jednou jako korespondenční autor), představuje soubor výsledků značně převyšující „výnos“ průměrné dizertační práce. Oponent nemůže jinak než hodnotit vědecký přínos tohoto souboru poznatků, a to nejen vzhledem ke kvantitě ale i kvalitě a novosti těchto poznatků, jako výrazně nadprůměrný.

S tímto vysoce pozitivním hodnocením ovšem kontrastuje kvalita vlastní předložené dizertační práce, která zůstala velmi daleko za adekvátním zpracováním tak cenných výsledků.

Teoretická část je málo přehledná a například oddíly 2.1.1 a 2.2 mají stejný název. Oddíl Teoretické části 2.4 „Současné trendy v chemii stannulenů“ je podle mého názoru naprosto samoúčelný, autorka z něj nijak nevychází v řešení stanoveného cíle, pasáž pojednávající o stannaboranových ligandech je toho nejčistším příkladem. Obrázky a schemata v tomto oddíle jsou špatně čitelné, zjevně zkopírované přímo z původní literatury. I když je na jednu stranu pochopitelné, že autorce se nechtělo překreslovat boranové klastry, uplatnění takového přístupu jinde než v dizertační práci by mohlo vést ke konfliktu s držitelem copyrightu. Uvést jako jedno ze stěžejních souhrnných sdělení těžko dostupnou zahraniční dizertační práci (str. 15, ř. 3, odkaz 28) nemá pro čtenáře valný smysl. Motivace k práci měla být formulována buď na závěr teoretické části nebo na úvod Výsledků a Cíle práce pak měly být uvedeny jasně a stručně nejlépe na jediné stránce.

V části Výsledky a diskuze na několika místech chybí postup, jakým autorka dospěla k uvedené interpretaci nebo alespoň citace, jako např. výpočet vazebných úhlů na str. 47 nebo absence Sn-N interakce ve sloučeninách **3** a **4** na konci str. 48. Chybí diskuze a vysvětlení, proč autorka vybrala k reakcím se stannulyeny právě zkoumané komplexy a ne jiné. Seznam připravených sloučenin na str. 40 - 44 je zavádějící, neboť není seznamem struktur: uvádí vlastně jen jakési molekulové vzorce s použitím struktur fragmentů, o skutečných strukturách komplexů v pevném stavu či v roztoku se čtenář poučí pouze na příslušném místě v textu Výsledků.

Formát literárních odkazů je nejednotný, a seznam obsahuje chyby a také duplicity: 35 a 39, 27 a 30 a dokonce 58 a 59 a navíc 54. V Seznamu příloh je špatné číslování a v přílohách 4 a 8 jiné pořadí autorů.

Drobných chyb a nepřesností jsem našel více, než mi omezený prostor posudku dovoluje uvést. Proto jen pro ilustraci: na str. 14 struktura III je čtyřelektronový donor; na str. 16, ř. 4 chybí v obecném vzorci komplexů cínu; na str. 27 jsou ve Schematu 6 špatně nakresleny struktury produktů: popis obr. 22 na str. 39 je matoucí; na str. 49, ř. 5 zdola má zřejmě být „**3** a **4**“ místo „**5** a **6**“; na str. 85 ř. 7 má zřejmě být **14** a ne **4**; Schema 41 je zbytečné, veškeré informace jsou v textu a Schematu 42; na str. 60 ř. 3 zdola je PPh₃ popsán jako skupina, místo jako sloučenina

nebo ligand, podobně na str. 67 ř. 11 zdola je takto označen acetonitril a na str. 46 ř. 2 zdola se hovoří o „sodných solích příslušných polárních skupin 2-SPy a SIM“; na str. 54 ř. 4 zdola se hovoří o „přechodných solích“; na str. 39 ř. 3 a 4 zdola je nesprávně velké L u „Lewisovské bazicity“ (platí, že se píše Lewisova bazicita, ale lewisovská bazicita, mimochodem od použití zkratky „L.“ pro „Lewisova“ na str. 10 a dalších mělo být buď upuštěno, nebo měla být zkratka vysvětlena); ostatně zbytečná snaha o zkrácení je jen matoucí, na str. 22 ř. 5 a 6 i jinde jsou nepěkné výrazy „3-koordinované“ a „4-koordinované“, podobně na str. 29 ř. 8 je místo „dva ekvivalenty“ použito „2eq.“; na str. 21 ř. 2 je uvedena možnost η^2 koordinace Cp ligandu, o čemž je patrně v uvedené souvislosti možno pochybovat; na str. 86 ř. 5 zdola je neobratně použito výrazu „naproti tomu“ tam, kde se žádné dvě skutečnosti do protikladu nedávají.

O ledabylosti kontroly dizertační práce asi nejlépe svědčí to, že v mém výtisku zcela chybí str. 84.

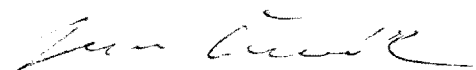
Největší problém jako oponent jsem však měl s faktickou absencí Experimentální části dizertační práce. Uvedený seznam připravených sloučenin (navíc nepřesný, viz výše) a konstatování, že všechny experimentální detaily jsou v příložených publikacích nemůže Experimentální část dizertační práce nahradit, jde-li o takzvanou kompaktní dizertační práci se strukturou analogickou odborným publikacím. Pomineme-li skutečnost, že autorka musela mít všechna primární experimentální data (popisy syntéz, spektrální data, případné detaily přípravy monokrystalů) v elektronické podobě, aby je mohla poskytnout korespondenčním autorům svých publikací, takže zpracování této části nemohlo být obtížné a dále skutečnost, že tento přístup místo aby práci oponentům usnadnil, ji značně komplikuje, zbývá otázka, je-li taková dizertační práce v souladu s univerzitními pravidly. Pokud měla mít předložená dizertační práce formu komentovaného souboru publikací, mělo to být v práci uvedeno, podle mého názoru však forma dizertační práce komentovanému souboru prací neodpovídá. Nepřísluší oponentovi, aby rozhodoval, jestli má dizertační práce formu odpovídající předpisům fakulty případně univerzity, nechávám proto tuto otázku k diskusi při obhajobě.

K dizertantce mám následující dotazy:

1. Látka **6** má různou strukturu v roztoku a v pevném stavu. Mohla by autorka komentovat příčiny ?
2. Jaké důkazy svědčí ve prospěch tranzitního stavu ve Schematu 26 ?
3. Jsou opravdu atomy Sn(II) ve sloučenině **12** prochirální ?
4. Jaké jsou důkazy pro skutečnost, že proces intramolekulární izomerace zobrazený ve Schematu 24 je rovnovážný ?

Závěrem konstatuji, že dizertační práce přináší nadstandardní množství a kvalitu nových vědeckých poznatků a tudíž splňuje potřebné podmínky, doporučuji proto přijmout ji k obhajobě.

V Praze, 20. 9. 2010


doc. Ing. Jan Čermák, CSc.
Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i.