

Na diplomovou práci Bc. Jany Nevoralové
Hybridní amidinátové a guanidinátové komplexy kovů hlavních skupin

Předložená diplomová práce je zaměřena na přípravu a studium reaktivity amidinátových a guanidinátových komplexů lithia. Práce je sepsána v klasickém formátu v délce 115 stran, přehledně rozdělena na teoretický úvod, experimentální část obsahující přípravy jednotlivých sloučenin, popis jejich reaktivity a užití experimentální metody pro charakterizaci připravených sloučenin. Práce je zakončena přehledem výsledků a jejich diskuzí a na závěr stručným shrnutím a přehledem citované literatury. Za přínosné pro přehlednost diplomové práce považuji přehled obrázků, tabulek a schémat umístěný za obsah diplomové práce.

Teoretická část je sepsána velmi čtivě a poskytuje dobrý přehled o již dosažených výsledcích, vlastnostech a metodách přípravy sloučenin, které mají vztah k tématu diplomové práce. Experimentální část popisuje jednotlivé provedené reakce a v řadě případů i spektroskopická data pro charakterizaci jednotlivých látek. V části věnované výsledkům a diskuzi se diplomantka věnuje shrnutí reakcí popsanych v experimentální části a převážně popisu molekulových struktur získaných měřeními monokrystalů připravených sloučenin. Závěr ukazuje celkový rozsah a ucelený koncept diplomové práce a shrnutí cílů a očekávání, které se podařilo naplnit.

Pro diskuzi a zamyšlení bych měl následující poznámky a otázky.

1. Na straně 51 v kapitole 2.4.2 se uvádí, že reakce (9) probíhala v THF. Při čtení experimentálního postupu je však vidno, že reakce byla prováděna v hexanu, eventuálně v toluenu a THF byl přidán pouze k produktu reakce za účelem získání monokrystalického materiálu. Proč nebyla reakce prováděna v THF od začátku? NMR spektra produktu **9** obsahujícího koordinované molekuly THF nejsou uvedena. Pokud jsou naprosto stejná, jako u produktu **8** reakce probíhající v diethyletheru mohli se uvést alespoň chemické posuny koordinované molekuly THF, které v dříve uvedených spektrech sloučeniny **8** nejsou. Stejně jako jsou uvedené odlišné teploty tání obou látek.
2. Liší se nějak sloučeniny **17A** a **17B**? Proč nejsou označeny jen jako **17**.
3. Na straně 63 v kapitole 2.7.3 je uvedeno, že guanidinát lithný nevzniká. Jaký je podle Vás důvod, že tato reakce nevede k požadovanému produktu? V diskuzi k výsledkům není toto diskutováno.
4. Na straně 81 na obrázku 3.6 je molekula v takové pozici, že atom Cl1b je vázán na uhlíkový atom dimethyl aminové skupiny. Odpovídá taková molekulová struktura skutečnosti?
5. Na straně 97 v kapitole 3.5.1 se uvádí, že během reakce došlo k migraci vodíkových atomů původně se nacházejících na L^{NN} ligandu na karbodiimidový skelet. Je pro tuto migraci nějaké vysvětlení? Myslíte si, že ke stejné migraci dochází i v případě karbodiimidového skeletu obsahujícího L^{Dipp} ligandy? Šlo by tuto migraci nějakým způsobem dokázat i přesto, že všechny tři L^{Dipp} skupiny jsou v tomto případě stejné? Možné vodítko pro diskuzi o tomto jevu, jenž v shrnutí výsledků postrádám, je možné nalézt na straně 103, kde stejná migrace atomu vodíku probíhá i v případě reakcí

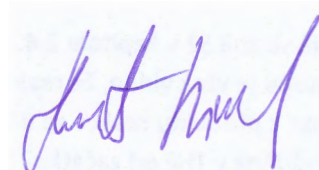
vycházejících z $L^{NN}NHLi$ a to v obou případech pro oba karbodiimidové reaktanty K^{i-Pr} a K^{Dipp} . Při přípravě sloučeniny **35** je možné pozorovat dokonce migraci celé skupiny $SiMe_3$.

6. Na straně 108 v kapitole 3.6.2 je nesmyslná věta, jenž se sem dostala zřejmě kopírováním textu pojednávající o migraci vodíkových atomů H1 a H5 z ligandu L^{NN} . Reaktantem v této kapitole je sloučenina $L^{NN}N(SiMe_3)Li$, kde je právě vodíkový atom nahrazen trimethylsilylovou skupinou a kde migrující skupinou je právě již zmíněná skupina $SiMe_3$.

Závěrem musím přiznat, že jsem byl po přečtení předložené diplomové práce Jany Nevoralové mile překvapen strukturou i obsahem. Diplomantka provedla značné množství experimentů vyžadující pečlivé provedení, podařilo se jí skloubit několik experimentálních technik a díky jejich využití získat a charakterizovat řadu nových sloučenin. V plné kráse se ukázalo jak užitečným nástrojem je stanovení molekulové struktury pomocí rentgenové difrakce, neboť právě na krystalových strukturách je většina získaných výsledků postavena. Na druhé straně získání molekulové struktury produktu či produktů reakce, u nichž se podařilo vypěstovat monokrystal, neříká nic o celkovém průběhu reakce, kde vzniká směs produktů. To se ukázalo v řadě případů, kdy se nepodařilo získat reprezentativní NMR spektra připravených sloučenin díky nemožnosti izolovat čisté látky. Jinak práce působí uceleným dojmem a bylo mi potěšením oponovat tuto diplomovou práci. Stálo by snad za zmínku v práci uvést, budou-li dosažené výsledky podkladem pro publikaci v odborném časopise, aby byla zřejmá kvalita a kvantita dosažených výsledků.

Svým rozsahem a množstvím výsledků tato práce podle mého názoru převyšuje požadavky kladené na diplomovou práci, doporučuji ji k obhajobě a navrhuji hodnotit klasifikačním stupněm VÝBORNĚ.

V Praze dne 28. 5. 2013



Mgr. Michal Horáček, Ph.D.