



Prof. RNDr. Petr Štěpnička, Ph.D. DSc.
Katedra anorganické chemie
Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy
Hlavova 2030, 128 40 Praha
E-mail: stepnic@natur.cuni.cz
Fax: +420 221 951 253

Praha, 25.8.2021

Posudek oponenta na diplomovou práci Bc. Martina Šimka

Diplomová práce Bc. Martina Šimka popisuje přípravu a charakterizaci halogenfosfinů a arsinů nesoucích guanidinátové substituenty a výsledky předběžných pokusů o přípravu fosfeniových a arseniových solí z nich. Při jejím čtení jsem nabyl poněkud protichůdných dojmů. Velmi kupříkladu oceňuji kvalitu a množství vykonaných experimentů. Suvážením faktu, že kvůli omezením nařízeným v důsledku šíření nového koronaviru zbyla ze dvou let určených pro navazující studium pro vlastní experimentování jen malá část, je objem vykonané práce i její technická kvalita opravdu ohromující. Výsledky jsou přitom nové a přínosné. Rozhodně přispívají k rozvoji výzkumu reaktivních sloučenin prvků hlavních skupin, kterým je dnes věnována veliká pozornost. Popsané experimenty navíc nabízejí možnost dalšího rozvoje výzkumné tematiky, která jistě nezapadne v jinak vysoce konkurenčním prostředí.

Celkový dojem z práce ale kazí její formální stránka. Postrádám jasné vymezení cílů, které bývá standardní součástí podobných prací. Za vhodné nepovažuji ani odkazovat se na nedostupné informace. Na mysli mám odstavce 2.5.1 a 2.5.2 v experimentální části práce, v nichž se čtenář dozví, že syntéza výchozích guanidinů bude popsána později. Formátování literárních odkazů je nedbalé. Kromě toho text obsahuje nebyvale velké množství překlepů a gramatických chyb. Jejich výčet by byl obsáhlejší než tento posudek. Těmito neduhy je přitom postižen více úvod práce než celkem zdařilá prezentace získaných výsledků. Závažnější jsou pak chyby v chemických názvech sloučenin a ve schématech. Namátkou lze zmínit chybějící lokanty substituentů při pojmenování skupiny dipp (např. v anotaci), chybějící strukturní uspořádání D v obrázku 6, chybnou rovnici B ve schématu 9, pořadí schémat 10 a 11, která se textu nacházejí v opačném pořadí, než by se čekalo, chybějící škály v obrázku 15 atd. atp. Pikantní je nesprávný název pro sloučeniny, které jsou patrně cílovými látkami této i navazující práce: částice R_2P^+ jsou fosfeniové ionty a nikoli ionty fosfoniové, jak autor práce opakovaně uvádí.

Jak vlastní syntézy, ta i charakterizační data jsou v práci náležitě prezentovány. Autor ale neuvádí výtěžky syntéz (pouze v závěru je zmíněno, že byly „poměrně vysoké“) a chybějí i některá důležitá analytická data potvrzující čistotu a identitu makroskopických vzorků látek, konkrétně výsledky elementárních analýz nebo alespoň HR MS měření, jež bude nutné doplnit před publikováním výsledků. K formální stránce jen doplním, že strukturní parametry je třeba uvádět a diskutovat v rámci experimentálních chyb.

K práci vznáším následující dotazy:

- 1) Na str. 52 autor zmiňuje, že reakce v tetrahydrofuranu poskytují lépe oddělitelnou sraženinu vedlejšího produktu (Et_3NHCl) ovšem za cenu jeho vyšší rozpustnosti v reakční směsi. Jak se potom oddělí zbytek tohoto vedlejšího produktu od cílové sloučeniny.
- 2) Jsou látky **5** a **7** přirozeně žluté nebo se jedná o stopy jódu vznikajícího rozkladem.
- 3) Na str. 60 autor práce diskutuje hodnoty ^{31}P chemických posunů ve vztahu k polaritě vazby P-X. Tento trend je ale přesně opačný. Prosím proto o důkladnější analýzu a vysvětlení.
- 4) Co má autor práce na mysli, pokud v práci zmiňuje „heterogenní donorový substituent“ nebo „heterogenní rameno ligandu“?
- 5) Co všechno může být důvodem odlišného chemického chování aniontů odvozených od látek **1** a **2**? Na mysli mám zejména dopad vlastností pendantního donorového substituentu v nich.
- 6) Fosfeniové ionty jsou sice neběžné ale nikoli bezprecedentní a tak by mě zajímalo, zda trend v chemických posunech při přechodu od LPX k LP^+ (L = guanidinátový ligand, X = halogenid) odpovídá trendu, který bychom našli pro jednoduché částice jako např. R_2PCl a R_2P^+ .

Jakkoli může tento posudek vyznívat místy negativně, **práci doporučuji k dalšímu řízení a navrhuji klasifikaci stupněm B**. Objem popsanych originálních výsledků je úctyhodný a také zpracování práce, zejména části, která se věnuje popisu získaných výsledků, dokazuje, že uchazeč kromě syntézy reaktivních látek velmi dobře zvládl i metody jejich studia. Formální aspekty by měl mít na paměti, až bude chystat další kvalifikační práce nebo rukopisy publikací.

