



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, 30. září 2021

Posudek oponenta na doktorskou disertační práci Ing. Víta Kremláčka

Doktorská disertační práce ing. Kremláčka se zaměřuje na sloučeniny vznikající redukcí dichlorofosfinů a dichloroarsinů s objemnými iminovými substituenty. Vznikající látky jsou nesmírně zajímavé, neboť zůstávají na půli cesty mezi fosfinideny resp. arsinideny stabilizovanými jedním či dvěma N-donorovými iminovými substituenty a odpovídajícími azafosfoly resp. azaarsoly, v nichž se jeden původně iminový dusík stává součástí pětičlenného heterocyklu. Kromě přípravy a důkladné strukturní charakterizace zmíněných sloučenin pomocí spektrálních metod a rentgenostrukturní analýzy se práce zaměřuje i na studium jejich reaktivity, která jen dále podtrhuje neobvyklé vlastnosti a chemické chování a také otevírá cestu k novým unikátním sloučeninám. I proto autor práce popis vlastností studovaných sloučenin vhodně doplnil o výsledky získané metodami výpočetní chemie.

I samotná práce je poněkud hraniční a to svou formou, neboť je koncipována jako hybrid standardní a zkrácené formy: publikované výsledky jsou prezentovány pouze stručně, zatímco výsledky dosud neuveřejněné jsou uvedeny kompletně, tj. včetně úplných experimentálních dat. Práci otevírá zdařilý úvod, který poslouží jako fundovaný přehled chemie relevantních heterocyklických molekul a obsahuje minimum chyb a překlepů. V navazující Experimentální části a Diskusi lze chyb nalézt již mnohem více, zejména překlepy a drobné chyby (např. opakovaně „aniont“ či „kationt“, str. 32 – anulovány místo anelovány, str. 35 – transmetalace místo alkylace). Za ne zcela vhodné považuji i označování lehkých atomů hlavních skupin jako „centrální atomy“ nebo dokonce „centrální kovy“. Poněkud macešsky se autor práce chová i k platným cifrám: pokud například odměří 4.1 mL 1 M roztoku, nemůže odpovídající látkové množství zapsat jako 4.100 mmol.

Jako celek však i tak působí práce velmi dobrým dojmem. Autor z rozsáhlého souboru získaných dat vybírá ta podstatná, kriticky je hodnotí a zevšeobecňuje a navíc jasně a s pochopením prezentuje a srovnává. K celkovému záměru práce a jejím výsledkům se nelze stavět jinak než kladně, neboť vše obstálo v náročném recenzním řízení a bylo publikováno ve velmi kvalitních časopisech (zde podotýkám, že práce je založena na celkem pěti publikacích, z nichž tři byly uveřejněny v Chem. Eur. J, jedna v Organometallics a jedna v Eur. J. Inorg. Chem., a které jsou součástí překládané práce). V disertační práci ale postrádám i jasné vymezení podílu disertanda na multidisciplinárním výzkumu, který je prezentován v těchto publikacích. To by měl uchazeč napravit během obhajoby. Kromě toho vznáším následující dotazy:

1. Na straně 86 disertand uvádí energetický profil konverze látky **2** na produkt cykloadice **16** a následně i jeho otevření, látku **17**. Zajímalo by mě, zda byl podobný profil počítán i pro fosforový analog látky **2**, tedy sloučeninu **1**.
2. Na straně 89 je uvedeno, že látka **21** vzniká jako jediný ze dvou možných izomerů. Je tomu skutečně tak a bylo to potvrzeno analýzou reakční směsi? Výsledek rentgenostrukturní analýzy (po krystalizaci) nelze použít jako důkaz pro takové tvrzení.
3. Zvažoval jste použít i jiné chalkogeny, například síru, v oxidacích arsaazolů i pomocí jiných chalkogenů?

Celkově práci ing. Kremláčka hodnotím velmi kladně: objem i kvalita získaných nových poznatků je úctyhodný a způsob jejich prezentace dokládá, že si disertand osvojil obecné zásady vědecké práce, poznal potřebné syntetické postupy i charakterizační metody a umí s jejich výsledky kriticky nakládat. Proto práci doporučuji k dalšímu řízení.

