



Posudek na disertační práci Ing. Víta Kremláčka s názvem
„*Studium reaktivity latentních heterocyklických dienů obsahující fosfor a arsen*“

Předložená disertační práce o rozsahu 128 stran textu, obrázků, schémat, tabulek, seznamu použité literatury, seznamu zkratk, a dále pak 54 stran příloh byla vypracována na Katedře obecné a anorganické chemie, Fakulty chemicko-technologické, Univerzity Pardubice pod odborným vedením doc. Ing. Libora Dostála, Ph.D. Z vlastního členění a rozsahu dizertační práce je pak zřejmé, že autor zkombinoval obě možnosti nabízené Studijním a zkušebním řádem Univerzity Pardubice ze dne 7.12.2020, konkrétně Článkem 15, kdy poněkud nezvykle zvolil formu rozsáhlejší práce kombinovanou se souborem již zveřejněných a tematicky jednotných publikací. Je dle mého názoru jen na škodu, že autor, a to právě vzhledem k 5-ti publikačním výstupům této dizertační práce, nevyužil zkrácené možnosti, při které mohl být soubor tematicky jednotných publikací pouze doplněn o komentáře (úvod a závěr), jak je definováno ve zmíněném studijním řádu. Výsledkem druhé z nabízených možností by totiž bylo to, že práce by byla rozsahově/textově výrazně kratší při současném zachování podstatného obsahu, a nedocházelo by k duplicitě informací uvedených v práci, jak je tomu v případě předložené dizertační práce.

V obecné rovině se disertační práce zabývá studiem reaktivity C,N a N,C,N chelatovaných pniktinidenů (konkrétně fosfinidenů a arsinidenů), kdy je pak podrobněji studován „duální“ charakter těchto sloučenin ve vztahu k přesunu elektronových hustot. Tato vlastnost pak v důsledku ovlivňuje reakční možnosti těchto molekul, které tak mohou vystupovat jako ligandy přechodných kovů a současně se účastnit Diels-Alderových cykloadicí. Tématika práce zapadá do oblasti základního výzkumu, ale současně je z výsledků nepřímo zřejmý i možný aplikační potenciál v oblasti katalýzy, který však nebyl nijak studován. Práce je sice formálně rozčleněna do jednotlivých kapitol vcelku standardním způsobem, nicméně rozsah i obsah některých kapitol lze pokládat za zcela nestandardní, když např. kapitola *Úvod* má rozsah pouze 6-ti vět a jednoho schématu, a čtenáře tak rozhodně neuvádí do problematiky a v obecné rovině nijak neseznamuje se současným poznáním v oblasti studovaných sloučenin. Uvedené je pak z velké části napraveno v kapitolách 3 *Pniktinideny*, 4 *Výsledky předchozí práce* a 5 *Heteropniktoly*. Cíle práce jsou pak definovány až na straně 38, a to poněkud vágním způsobem, ze kterého není zřejmá přidaná hodnota, která by měla vzniknout při zdárné realizaci této dizertační práce ve vztahu k současnému poznání v dané oblasti vědy. Cíle práce jsou definovány modelem vhodným spíše pro diplomovou než dizertační práci, přičemž tímto konstatováním vůbec nepolemizují a nepochybují tématiku práce, kterou pokládám za vysoce smysluplnou a aktuální, jak je ostatně zřejmé z vlastních publikačních výstupů. Kapitola 7 *Diskuze* je psána příliš rozvláčným způsobem (rozsah 50 stran) a spíše duplicitně memoruje získané výsledky ve vztahu k vlastním publikačním výstupům (přílohám 1–5), než výsledky podrobně diskutuje. Je skutečně na škodu, že autor nebyl při sepisování vlastní práce důslednější a pečlivější, jak je možno doložit i gramatickou chybou v názvu dizertační práce samotné či používáním nepřesných chemických výrazů jako je např. „bod tání“.

Výše uvedené výhrady ke zvolenému způsobu a formě prezentace výsledků v předložené dizertační práci jsou pak v přímém rozporu s vlastními výsledky a publikačními výstupy, jejichž rozsah i kvalitu pokládám za neoddiskutovatelnou. Podstatná část výsledků práce již byla publikována v renomovaných mezinárodních vědeckých časopisech, a to *Organometallics* **2018**, *37*, 2481 (IF₂₀₂₀ = 3,876, kvartil Q1 dle WoS), *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 1 (IF₂₀₂₀ = 5,236, kvartil Q2 dle WoS), *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 5668, *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 1144, a *Eur. J. Inorg. Chem.* **2021**, *1* (IF₂₀₂₀ = 2,524, kvartil Q2 dle WoS). Tato skutečnost pak oponentovi jednoznačně usnadňuje jeho činnost, neboť vlastní vědecké výstupy realizované v průběhu dizertační práce již prošly důkladnou a nezávislou recenzí.

K disertační práci mám následující dotazy a komentáře:

1/ V experimentální části jsou zmíněny hodnoty teplot tání připravených sloučenin. Hodnoty byly získány na bodotávku. Můžete nějak experimentálně prokázat a při obhajobě prezentovat, že jde skutečně o teploty tání, a nikoliv teploty rozkladu?

2/ V práci není nijak explicitně specifikován podíl dizertanta na předmětném studiu. Lze se domnívat, že podíl ležel dominantně v oblasti syntéz. Můžete tento podíl blíže specifikovat, a to hlavně vzhledem k faktu, že na publikačních výstupech se podílel tým 7 až 9 spoluautorů? Jaký byl konkrétní podíl dizertanta při přípravách a revizích rukopisů?

Závěrem lze konstatovat, že vědecké výsledky a výstupy předložené disertační práce, a to i přes připomínky vztahené k vlastní disertační práci a uvedené výše, jednoznačně splňují podmínky kladené na disertační práce v oboru anorganická chemie a bezpochyby pak rozšiřují poznání v této vědní oblasti. Práci **doporučuji** k obhajobě.



Olomouc, 22. 9. 2021

Prof. RNDr. Zdeněk Trávníček, Ph.D.
oponent

Oponentský posudek disertační práce Ing. Víta Kremláčka:
Studium reaktivity latentních heterocyklických dienu obsahující
fosfor a arsen

Disertační práce Ing. Víta Kremláčka se sestává ze 127 stran textu a kopií publikovaných pěti prací jako příloh. Disertační práce je členěná do sedmi kapitol a zahrnuje 101 literárních odkazů.

Tématem disertační práce jsou přípravy, charakterizace a reaktivita C,N a N,C,N chelatovaných fosfinidienů a arsenidienů, které mohou fungovat buď jako čtyřelektronové donory nebo jako heterodieny v [4+2] Diels-Alderových cykloadicích.

V úvodní části jsou shrnuty publikované výsledky týkající se elektronových vlastnosti prvků 15. skupiny a informace o heteropniktolech, kde prvky, které se v nich uplatňují, jsou zejména dusík, kyslík, síra, fosfor a arsen. Z přehledu je zjevné, že aspoň částečně jsou prostudovány látky obsahující fosfor, zatímco oblasti těžších pniktinidienů a zejména aromatických pniktinidienů jsou nepochybně zajímavým tématem pro další výzkum. Na straně 38 jsou velmi stručně uvedeny cíle disertační práce.

V Experimentální části (str. 37-56) jsou uvedeny informace o použitých spektrálních technikách použitých k charakterizaci látek a popsány přípravy 19 nových látek, které byly charakterizovány zejména pomocí ^1H , ^{13}C , ^{15}N a ^{31}P NMR spekter, IČ a Ramanových spekter, i pomocí ESI-MS dat. U sedmi sloučenin byla provedena rentgenostrukturní analýza.

V kapitole Diskuse (str. 57 - 120) jsou komentovány postupy při přípravě látek a výsledky NMR, IR a rentgenostrukturních analýz a DFT výpočtů. Takto byly komentovány a charakterizovány všechny nové sloučeniny včetně kinetických měření a náznaku návrhu reakčních mechanismů.

Jako NMR specialista oceňuji masivní nasazení NMR spektroskopie v její multinukleární podobě, aplikaci jednorozměrných i dvourozměrných spekter i kinetická měření s použitím NMR spekter. K formální dokonalosti chybí jen kompletní přiřazení všech signálů a jejich uvedení v tabulkách.

Všechny výsledky jsou experimentálně doloženy odpovídajícím a přesvědčivým způsobem. Práce je sepsána přehledně a logicky.

Výsledky disertační práce představují originální výsledky, které byly publikovány jako jeden článek v *Organometallics*, další tři publikace jsou v *Chem. Eur. J.* a jedna v *Eur. J. Inorg. Chem.*, kde je Ing. Kremláček prvním autorem ve čtyřech z pěti prací. Jedná se velmi kvalitní mezinárodní časopisy, kde práce prošly důkladným recenzním řízením.

K práci mám následující připomínky a komentáře:

- 1) Domnívám se, že v názvu práce *Studium reaktivity latentních heterocyklických dienů obsahující fosfor a arsen* by mělo být místo „obsahující“ slovo „obsahující**ch**“.
- 2) Str. 40: Formálně správné označení NMR spektrometrů je Bruker Avance HD III resp. NEO. Termíny *Ultrashield* a *Ascend* se týkají typů magnetů.
- 3) Str. 43: Termín „Příprava nepublikovaných sloučenin“ by mohl být nahrazen výstižnějším termínem „Příprava nových sloučenin“.
- 4) Většina sloučenin byla barevných, takže postrádám charakteristiky typické pro VIS, případně zdůvodnění, pokud byly technické problémy s měřením spekter.
- 5) Str. 66, ř. 9: Byly při syntéze použity dva ekvivalenty ethynu vzhledem tvorbě kokryystalu?
- 6) Str. 67, ř. 3 zdola: Proces možná není až tak překvapivý, protože se jedná o formu aromatizace, obvykle spojený s uvolněním stabilizační energie, jak je ostatně demonstrováno na Obr. 20.
- 7) Str. 87, Schéma 71: Jak byla realizována reakce v benzenu při 100 stupních Celsia.

Závěr:

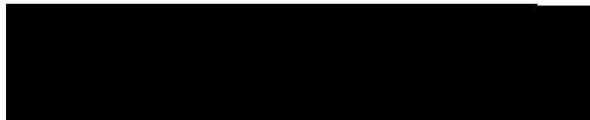
Oponovaná disertační práce obsahuje původní výsledky, které byly publikovány jako jeden článek v *Organometallics*, další tři publikace v *Chem. Eur. J.* a jedna v *Eur. J. Inorg. Chem.*, kde je Ing. Kremláček prvním autorem ve čtyřech z pěti prací. Disertant je navíc autorem dalších tří publikovaných prací ve velmi kvalitních časopisech, které nejsou zahrnuty v jeho disertační práci.

Ing. Kremláček nepochybně prokázal schopnost systematické vědecké práce a splnil cíle disertační práce vytyčených na straně 38. Na základě výše uvedených skutečností se

domnívám, že disertant vyhověl všem požadavkům kladeným na doktorské disertační práce, a proto práci Ing. Víta Kremláčka

d o p o r u č u j i

jako podklad k dalšímu řízení k udělení vědecké hodnosti Ph.D.



Prof. Ing. Antonín Lyčka, DrSc.

Výzkumný ústav organických syntéz a.s.

Rybitví 296

533 54 Rybitví

V Pardubicích 25.9.2021