

Posudek školitele disertační práce

**Andrei Čablové**

na téma

**“Syntéza a studium fyzikálně-chemických vlastností 1-adamantylimidazoliových ligandů pro supramolekulární komplexy s cucurbit[*n*]urily a cyklodextriny”**

Andrea Čablová rozpracovala ve své disertační práci tři relativně nezávislé kapitoly, které spojuje společný motiv syntézy zajímavých hostujících komponent pro supramolekulární systémy.

V první části se autorka věnuje syntéze deuteriem selektivně značených bisimidazoliových solí, které byly následně použity pro detailní studium fragmentace těchto látek a jejich komplexů s cucurbit[7]urilem (CB7) v plynné fázi. Tyto výsledky byly zpracovány do publikace vydané v časopise *Rapid Communications in Mass Spectrometry*.

Ve druhé části práce autorka připravila šest imidazoliových ligandů s různě dlouhými postranními řetězci zakončenými karboxylovou funkční skupinou. Kombinace adamantylimidazoliového místa s velmi vysokou afinitou k CB7 a alifatického vazebného místa se skupinou, jejíž náboj se dá měnit změnou pH, dávala šanci vzniknout novému typu ligandů, které mohly sloužit například jako sondy pro měření interakcí mezi různými makrocykly vázanými na ligand. Bohužel se ukázalo, že předpokládaná vazba menších makrocyclů na alifatická vazebná místa byla velmi slabá. V současné době se ovšem těmito ligandy opět zabýváme a předpokládáme publikaci autorkou dosažených výsledků. Kromě supramolekulárního chování, v této části autorka popsala zajímavá uspořádání molekul ligandů v pevné fázi kde všechny imidazolivé soli mají molekuly uspořádány víceméně lineárně, zatímco molekuly benzimidazoliových solí jsou zahnuté do tvaru písmene „U“. Zajímavé je, že tyto poznatky korespondují s výsledky pro jiné typy imidazoliových a benzimidazoliových solí připravených v naší výzkumné skupině a doplňují tak představy o konformačním chování těchto látek.

Ve třetí části práce autorka připravila první ligand s adamantylfenylovým vazebným motivem, který vykazoval nečekaně vysokou afinitu k  $\beta$ -cyklodextrinu. Tato práce položila základy pro rozsáhlejší studii podobných sloučenin, která aktuálně vyústila v publikaci v časopise *The Journal of Organic Chemistry*, kde popisujeme, na příkladu autorčina ligandu, první přímé pozorování dvou vazebných módů cyklodextrinového komplexu pomocí NMR v 30% roztoku  $\text{CaCl}_2$  při 0°C. Tato oblast supramolekulární chemie je v naší skupině aktuálně velmi podrobně studována a získáváme velmi zajímavé poznatky například o vlivu iontů kovů na zastoupení jednotlivých forem komplexů. V rámci této třetí části doktorské práce dále autorka optimalizovala a v naší skupině etablovala syntézu diamantanu. Tato byla sice známa, ale ne všechny kroky popsané v literatuře bylo snadné reprodukovat a bylo zapotřebí řady zásahů do původních protokolů, než se podařilo autorce připravit požadovaný diamantan v uspokojivých

výtěžcích a otevřít tak naší výzkumné skupině cestu k další nové skupině ligandů, na nichž právě pracujeme.

Popis vlastních výzkumných aktivit uvedla autorka, dle mého soudu zdařilým, stručným, ale všemi relevantními referencemi podloženým přehledem aktuálních poznatků o cucurbiturilech, cyklodextrinech, pH citlivých ligandech a základní chemii diamantanu.

Během experimentální práce na svěřených projektech prokázala autorka schopnost samostatně plánovat a provádět experimenty v oblasti organické syntézy, které mnohdy vyžadovaly aplikaci v naší výzkumné skupině do té doby nepoužívaných postupů a technik. Domnívám se, že by se autorka mohla odhodlat k sebevědomějšímu presentování svých výsledků adekvátně k jejich kvalitě a pečlivosti s jakou vykonávala laboratorní práci.

Závěrem si dovoluji konstatovat, že předložená práce splňuje všechny formální náležitosti a obsahuje bezesporu nové a originální poznatky. Vzhledem k jistému časovému odstupu lze s jistotou tvrdit, že například autorkou poprvé rozpracovaný koncept 1-adamantylfenylového vazebného motivu nalezne uplatnění při konstrukci zajímavých supramolekulárních systémů.

Pro výše uvedené důvody považuji práci za **velmi zdařilou** a **doporučuji** ji přijmout jako podklad pro řízení k udělení titulu *Philosophiae Doctor*.

Ve Zlíně, 8. března 2021