

Posudek oponenta habilitační práce

Masarykova univerzita	Přírodovědecká
Fakulta	Organická chemie
Obor řízení	<i>Mgr. Robert Vícha, Ph.D.</i>
Uchazeč	Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Pracoviště uchazeče	<i>Supramolekulární chemie vícevazebných hostujících molekul</i>
Habilitační práce (název)	Doc. RNDr. Přemysl Lubal, Ph.D.
Oponent	Masarykova univerzita, Ústav chemie
Pracoviště oponenta	

Text posudku

Předkládaná habilitační práce je komentovaným souborem devíti publikovaných prací v rozmezí 2011-2017, z nichž všechny jsou publikovány ve vědeckých časopisech s impaktním faktorem větším než jedna (5 z nich však mají impaktní faktor větší než 3), což vedlo k souhrnnému počtu nezávislých citací kolem 100. Je škoda, že autor prezentuje pouze výsledky za toto kratší období, jelikož i starší práce jsou relevantní ke kontextu jeho výzkumu. Na začátku habilitační práce je uvedena správná filozofická poznámka někdy k chybně používané terminologii v supramolekulární chemii týkající se pojmů hostitel/host v případě většího počtu molekul obou typů, dále k pojmům binární/ternární/kvartérní komplex. Pozitivem práce je stručný komentář k výzkumu v Laboratoři včetně „slepých“ a „odbočujících“ uliček, což je cenným pedagogickým dokladem o postupu ve výzkumu, který se v publikacích nebo jiných formách výzkumných zpráv neuvádí.

Robert Vícha již ve své diplomové práci na MU na konci 90. let minulého století započal studium chemické přípravy nových adamantanových sloučenin, v tomto tématu syntézy nových potenciálních virostatických léčiv pokračoval ve své dizertační práci. Po svém přechodu na nynější pracoviště tyto zkušenosti zúročil a začal se zabývat návrhem nových supramolekulárních systémů nejprve s hostujícími molekulami adamantanového typu, později jeho strukturních analogů, které mají široké potenciální využití (např. polymery, léčiva, apod.). Za tímto účelem kandidát se svým týmem připravil nové chemické sloučeniny (>100 jenom podle mého odhadu v předložené habilitační práci), z nichž mnohé vyžadovaly speciální přístup (např. příprava deuteriem značených látek), což je již samo o sobě velký intelektuální výkon zejména z hlediska návrhu jejich syntézy. Tyto nové sloučeniny pak byly charakterizovány a pro některé z nich pak byly studovány supramolekulární interakce s vybranými hostitelskými molekulami (např. cyclodextrin, kukurbituril, aj.) o různé velikosti dutiny pomocí jak dostupných nejmodernějších experimentálních technik (např. izotermická kalorimetrie, 1D/2D-NMR spektroskopie, RTG-strukturní analýza krystalů, aj.), tak teoretických kvantově-chemických výpočtů. Jeho velice inovativní výzkum vykazuje interdisciplinární charakter, jelikož musel zvládnout odlišné oblasti chemie, syntézu nových látek-hostů následovanou studiem a vyhodnocením jejich supramolekulárního chování v přítomnosti hostitelských molekul pomocí různých analytických technik. Díky tomuto interdisciplinárnímu přístupu bylo možné publikovat tyto zajímavé a někdy i překvapivé kontra-intuitivní výsledky v renomovaných zahraničních chemických časopisech.

Uchazeč vybudoval Laboratoř supramolekulární chemie na UTB Zlín jednak po stránce vědeckého zaměření, tak z hlediska instrumentálního vybavení. Kolega Vícha je také vedoucím většího badatelského týmu složeného z kolegů a zejména doktorských studentů, což dokazuje pedagogické schopnosti kandidáta.



Dotazy oponenta k obhajobě habilitační práce

1. V publikacích č. 1 a 2 se zabýváte možností syntézy adamantanových derivátů 6-aminopurinu. Jak předpokládáte, že se změní jejich fyzikálně-chemické, ev. biologické vlastnosti zavedením adamantanového skeletu? Budou tyto změny výraznější než v případě analogických 6-aminopurinů nesoucí benzylový nebo jiný heterocyklický skelet, které již byly testovány v minulosti? Byly také Vaše sloučeniny v minulosti zkoumány z fyzikálně-chemického hlediska? Můžete lépe specifikovat výsledky biologických testů připravovaných pro publikaci – viz poznámka na str. 19?
2. V publikacích č. 3 a 4 se zabýváte využitím hmotnostní spektrometrie pro studium supramolekulárních komplexů nově připravených adamantanových derivátů s kukurbiturily. Jaký je Váš názor na použití MS pro stanovení rovnovážných konstant těchto supramolekulárních komplexů v plynném stavu, ev. v roztoku, jak bylo publikováno v několika článcích v minulosti.
3. Vaše studované supramolekulární systémy jsou poměrně robustní. Jak rychlá je formace/disociace těchto supramolekulárních systémů? Studoval jste alespoň pro některé systémy jejich kinetiku?
4. Některé Vaše supramolekulární systémy vykazují kooperativní vlastnosti. Uvažoval jste o teoretické predikci stability supramolekulárních systémů tritopických ligandů ze znalosti termodynamických parametrů analogických systémů ditopických ligandů?
5. Nejnovější příspěvek č. 9 se zabývá syntézou nových sloučenin s kubanovým skeletem. Ukazuje se, že tyto látky stejně jako látky s diamantanovým skeletem jsou lepší alternativou k adamantanovým hostujícím molekulám díky své schopnosti tvořit stabilnější komplexy. Očekáváte rozvoj studia těchto sloučenin a jejich supramolekulárních systémů z hlediska fyzikálně-chemického nebo biologického?

Závěr

Habilitační práce Roberta Víchy „Supramolekulární chemie vícevazebných hostujících molekul“ *splňuje* požadavky standardně kladené na habilitační práce v oboru Organická chemie. Jím vybudovaná Laboratoř supramolekulární chemie se pod jeho vedením na Fakultě technologické Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně stala jedním z významných center výzkumu v této oblasti v České republice, proto doporučuji uchazeči udělit titul Docent na základě předložené práce.

V Brně, dne 23.11. 2017