

Posudek oponenta diplomové práce

Jméno studenta: Kristýna Jelínková

Studijní program: N2901 Chemie a technologie potravin

Studijní obor: Chemie potravin a bioaktivních látek

Ústav: Ústav chemie

Vedoucí diplomové práce: Robert Vícha

Oponent diplomové práce: Ing. Vladimír Šindelář, Ph.D., Masarykova univerzita, Brno

Akademický rok: 2015/2016

Název diplomové práce:

Syntéza hostů pro supramolekulární systémy na bázi kubanu

Hodnocení diplomové práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:

Kritérium hodnocení	Hodnocení dle ECTS
1. Splnění zadání diplomové práce	A - výborně
2. Formální úroveň práce, včetně jazykového zpracování	B - velmi dobře
3. Množství, aktuálnost a relevance použitých literárních zdrojů	A - výborně
4. Popis experimentů a metod řešení	B - velmi dobře
5. Kvalita zpracování výsledků	B - velmi dobře
6. Interpretace získaných výsledků a jejich diskuze	B - velmi dobře
7. Formulace závěrů práce	A - výborně

Předloženou práci **doporučuji** k obhajobě a navrhuji hodnocení

B - velmi dobře

Komentáře k diplomové práci:

Předkládaná diplomová práce se zabývá syntézou derivátů kubanu. Tyto sloučeny by mohly být vhodnými hosty pro tvorbu supramolekulárních komplexů. Kubanový motiv je určitou analogií jiných uhlovodíků jako je např. adamantan a diamantan, které jsou známé svou vysokou afinitou především k cucurbit[7]urilu. Studium supramolekulárních interakcí mezi tímto makrocyklem a deriváty kubanu by tedy mohlo přinést řadu zajímavých výsledků.

Diplomová část má téměř 100 stran, což je více, než se od diplomové práce očekává. Je psána v českém jazyce s občasným výskytem překlepů a nevhodných spojení (např. aromatické CT komplexy (str. 23), diferenční kompenzační kalorimetrie na místo diferenciální skenovací kalorimetrie (str. 26), následoval záhřev (str. 70)). Práce má pěknou grafickou úpravu, je přehledná, členění kapitol se nevymyká z běžného rámce používaného v oboru.

Teoretická část je napsaná velmi čtivě. Přestože je v rozsahu 30 stran textu, její čtení mě bavilo. Autorka čerpá ze 74 literárních zdrojů, které jsou ve správném formátu uvedeny na konci práce. Vykytuje se však častý nešvar spočívající v uvádění citací až na konci odstavce, i když by měly být uváděny na místě, kde je převzatá informace poprvé v textu zmíněna.

Experimentální část práce je zpracována přehledně. Připraveny byly dvě dosud nepublikované látky a vedle toho jedenáct již popsanych látek. Většina látek je charakterizována pomocí bodu tání, ^1H a ^{13}C NMR, EI-MS a IČ. Bohužel zde chybí odkazy na literatury, podle níž byly reakce prováděny. Je také obvyklé, že jsou zjištěné body tání látek porovnávány s těmi publikovanými. Zde tomu tak není. Oponent si však dal práci, aby zjistil, že shoda zjištěných a publikovaných bodů tání je velice dobrá.

V diskuzi autorka věcně shrnuje získané výsledky. Při diskuzi syntetických postupů bych uvítal podrobnější komentáře, jako je např. to, zda byly nějaké odlišnosti od publikovaných postupů, zda a o kolik se lišily výtěžky od těch publikovaných. Srozumitelně jsou diskutovány výsledky supramolekulárních studií.

Závěrem konstatuji, že diplomová práce naplnila vytýčené cíle. Podařilo se úspěšně realizovat devíti krokovou syntézu zakončenou přípravou derivátu kubanu nesoucí dva terminální imidazoliové cykly. Popsaná tvorba velmi stabilních komplexů mezi tímto derivátem a cucurbit[7]urilem a cucurbit[8]urilem je nadějná vzhledem k přípravě složitějších supramolekulárních struktur na bázi kubanu. Autorka práce ukázala, že se dokáže orientovat v oblasti pokročilé organické syntézy a je schopna interpretovat výsledky analýz supramolekulárních interakcí. Konstatuji, že předložená diplomová práce splňuje po formální i odborné stránce všechny požadavky, které jsou na takovou práci kladeny, a práci doporučuji k obhajobě.

Otázky oponenta diplomové práce:

1. Z poděkování uvedeného na začátku práce vyplývá, že ITC a ESI MS měření neprováděla sama autorka. Jaký byl její příspěvek k části práce, která se zabývá studiem supramolekulárních interakcí finálního kubanového derivátu **9**?
2. V tabulce 9 na straně 84 jsou hodnoty asociačních konstant uváděny s chybou, jejíž hodnota je nereálně nízká. Jak byla tato chyba stanovena?
3. Z jakého důvodu byly při kompetičních experimentech použity látky, jejichž afinita k makrocyklu je minimálně o tři řády nižší ve srovnání s afinitou zkoumaného kubanového derivátu?
4. Byla již studována tvorba komplexů mezi cucurbiturily / cyklodextriny a kubanovými deriváty **4** a **6**? Pokud ne, jistě by stálo za to takové studie provést.

V Brně dne 30.5.2016

podpis oponenta diplomové práce