

Posudek oponenta diplomové práce

Příjmení a jméno studenta: Bc. Michaela Sekaninová
Studijní program: Chemie potravin a bioaktivních látek
Studijní obor:
Zaměření
(pokud se obor dále dělí):
Ústav: Ústav chemie
Vedoucí diplomové práce: Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
Oponent diplomové práce: Ing. Zdeňka Prucková, Ph.D.
Akademický rok: 2020/21

Název diplomové práce:

Syntéza a studium supramolekulárních vlastností heteroditopického ligandu bázi imidazolia

Hodnocení diplomové práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:

Kritérium hodnocení	Hodnocení dle ECTS
1. Splnění zadání diplomové práce	D - uspokojivě
2. Formální úroveň práce, včetně jazykového zpracování	C - dobře
3. Množství, aktuálnost a relevance použitých literárních zdrojů	B - velmi dobře
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	B - velmi dobře

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

B - velmi dobře

Komentáře k diplomové práci:

Úkolem studentky bylo připravit v literatuře dosud nepopsaný ligand na bázi adamntanu a imidazolia, které jsou spojeny *p*-xylylenovým linkerem. U podobných typů ligandů je na Ústavu chemie již několik let studováno supramolekulární chování a zmíněná sloučenina zatím v sérii podobných látek chybí.

Zadání diplomové práce odpovídá literární rešerši, kdy studentka na 28 stranách popisuje základní typy nekovalentních interakcí, které se uplatňují v supramolekulárních systémech, dále popisuje základní dva hostitele a to cucurbit[n]urily a cyklidextriny. Část rešerše je také věnována tritopickým ligandům. Rešeršní část je zpracována přehledně, je doplněna řadou obrázků a autorka pro sepsání této části využila 69 literárních zdrojů. Velkou výtku přikládám skutečnosti, že autorka měla dle zadání zmínit v literární rešerši i možnosti stanovení supramolekulárních komplexů, bohužel uvedené téma v diplomové práci chybí. Další výtku mám k stylisticky neobratným překladům z původních zdrojů, kdy se v práci objevily ne zcela vhodně přeložené pojmy (např. str. 13 elektronické skořápky), z čehož pak plyne dojem kopírování textu z automatických překladačů. Také bych očekávala některé novější poznatky o cyklodextrinech a cucurbiturilech. V teoretické části bylo něco málo chyb a překlepů, např.

Str. 15 – *N*-aminothiomocovina, písmeno *N* není kurzívou

Str. 20 a 21 – autorka se odkazuje na čísla kapitol, která jsou ve skutečnosti pod jinými čísly

str. 20 – chybný vazebný úhel u trojné vazby

str. 30 – asociační konstanty 16^6 M^{-1} místo 10^6 M^{-1}

str. 36 – v popisu obrázku chybí] pro CB[8]

Praktická část DP navazuje na práci bakalářskou, kde studentka připravila 1-adamantyl(methylfenyl)keton. V diplomové práci se pokusila z této sloučeniny pětikrokovou syntézu připravit chtěný ligand. Jako klíčový krok se zdála být desulfurizace dithiolanového cyklu (třetí mezistupeň syntézy), kterou studentka provedla dvěma neúspěšnými postupy. Bohužel autorka neměla možnost vyzkoušet širší škálu reakcí vedoucí k desufirizaci, neboť neměla výchozí sloučeninu (1-adamantyl(methylfenyl)keton) a její opětovaná syntéza se ukázala být nereprodukovatelná, ačkoliv ji autorka v bakalářské práci zvládla s výtěžkem 82 %. Studentka zkusila několik jiných syntetických postupů vedoucích k výchozí sloučenině, bohužel neúspěšných. Těžko říci, zda neměla studentka ono důležité štěstí, nebo tomu štěstí šla málo naproti. Tuto skutečnost nemohu pouhým přečtením práce posoudit. Nicméně experimentální část je sepsána přehledně a pečlivě, autorka doplňuje kapitoly diskuze celou řadou ^1H NMR a ^{13}C NMR spekter spolu s chromatogramy surových produktů některých syntéz. Tuto část shledávám daleko zdařileji sepsánu s několika drobnými chybami.

str. 43 – pro přípravu Raneyova niklu chybí odkaz na literaturu

str. 45 – špatný vzorec pro výpočet koncentrace Grignardova činidla, jelikož jednotka dle uvedeného vzorce nemůže být $\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$, nýbrž mol

str. 48 – špatný odkaz na obrázek (místo 25 mělo být 29)

str. 52 – nepřesnosti v ^1H NMR spektru (viz. otázka)

str. 54 – není dolní index ve sloučenině NaBH_4

str. 64 – chybný odkaz na sloučeninu v textu (místo 4 má být 5)

V této části se občas vyskytly zajímavé slovní spojení, kdy například celou kapitolou diskuzí čtenáře provází např. „hořečnaté“ hobliny.

Celá diplomová práce je sepsána po formální stránce velmi dobře, působí uceleným dojmem a nemám k této práci velkých připomínek, vyjma opomenutí části Stanovení supramolekulárních komplexů, které tedy prosím doložit k otázkám oponenta (viz. otázka č.1).

Diplomová práce Michaely Sekaninové splňuje zadání a splňuje nároky na tento typ závěrečné práce.

Diplomovou práci doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnocení B – velmi dobře.

Otázky oponenta diplomové práce:

1. V zadání je uvedeno, že se máte v literární rešerši zaměřit na možnosti stanovení supramolekulárních komplexů. Zmínku o stanovení jsem v práci nenašla. Mohla byste toto krátce doplnit.
2. Na straně 14 uvádíte, že vodíkové můstky se uplatňují například ve sloučenině bifenyly. Mohla byste tento jev právě na bifenyly vysvětlit?
3. Mohla byste se pokusit odhadnout, na které části molekuly (resp. na jaké strukturní motivy molekuly) vámi navrženého ligandu se budou vázat konkrétní makrocycly.
4. Na straně 65, obrázek 47 uvádíte GC chromatogram cross-couplingové reakce adamantan-1-karbonylchloridu s 4-methylfenylmagnesium bromidem. Požadovaný produkt vznikl v nepatrném množství, zato přes 80% zastoupení měl v reakční směsi brombenzen. Máte nějakou detailnější představu, jak ke vzniku brombenzenu mohlo dojít?
5. Na straně 52, obrázek 34 je uvedeno ^1H NMR thiolanové sloučeniny 3. Dle mého je spektrum špatně interpretované. Mohla byste spektrum látky 3 uvést ještě jednou.

Ve Zlín dne **31. 05. 2021**

Podpis oponenta diplomové práce