

## Posudek oponenta diplomové práce

**Příjmení a jméno studenta:** Vít Guiglielmo Mišurec  
**Studijní program:** Chemie potravin a bioaktivních látek  
**Studijní obor:**  
**Zaměření**  
(pokud se obor dále dělí):  
**Ústav:** Ústav chemie  
**Vedoucí diplomové práce:** Michal Rouchal  
**Oponent diplomové práce:** Robert Vícha  
**Akademický rok:** 2022-2023

**Název diplomové práce:**

Supramolekulární chování ligandu na bázi Meldrumovy kyseliny s cucurbit[*n*]urily

**Hodnocení diplomové práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:**

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

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

**D - uspokojivě**

### **Komentáře k diplomové práci:**

Autor v rámci diplomové práce zpracoval pilotní studii o supramolekulárním chování donor-akceptorních Stenhouseových adukt; (DASA) zaměřenou zejména na možnosti ovlivnění chování těchto foto-přepínačů pomocí tvorby supramolekulárních komplexů s cucurbit[7/8]urilem.

V teoretické části jsou zpracované kapitoly týkající se přehledu základních vztahů v supramolekulární chemii, fotochemie, struktury používaných hostujících molekul, supramolekulární fotochemie (postrádám nějaké graficky presentované příklady), supramolekulární chemie bioaktivních látek (nerozumím zcela kontextu a důvodu pro zařazení této kapitoly) a v neposlední řadě historie a vlastností DASA. V této poslední jmenované kapitole jsou popsány tři generace látek DASA ze strukturního hlediska ale není jasné, zda tyto relativně marginální změny ve struktuře přinesly i nějaké zásadně jiné vlastnosti či změnily aplikační potenciál DASA natolik, aby se dalo hovořit o nových generacích látek.

V experimentální části autor popisuje přístroje a provádění experimentů. Vzhledem k povaze práce, autor se nezabýval syntézou, a z toho plynoucího nedostatku prostoru, bych uvítal preciznější popis postupů, některé zásadní nejasnosti uvádím v přehledu níže.

Diskuzní část je rozdělena logicky podle metod, které byly použity ke studiu chování DASA. Čtení a porozumění diskuzi velmi ztěžovalo hned několik aspektů posuzovaného textu. Celá řada obrázků dokládajících experimentální výsledky je nedostatečně označena. Autor neupozorňuje čtenáře dostatečně důsledně na konkrétní experimentální data (například, kterým píčkům ve spektru má být věnována pozornost) a omezuje komentář na obecná tvrzení, která mohou sice být správná, ale není jasné, jaké k nim má autor důvody. Celá řada pozorovaných signálů není vůbec vysvětlena (například dominantní píky v MS 381 m/z, absorpční pásy v UV-Vis spektrech, atp.). Metodicky jsou popisované experimenty, a potažmo i z nich plynoucí závěry, snadno napadnutelné. Zejména vidím problém v nedostatečně odděleném vlivu koncentrace studovaných látek a fotoisomerace na podobu experimentálních dat. Obecně je velmi obtížné sledovat nějaký racionální příběh, kdy výsledky iniciačních experimentů mají poskytovat výchozí pozice pro další experimenty atd. až k nějakým logickým závěrům.

V závěru práce autor opět používá neadekvátně obecné formulace a nedává čtenáři šanci dozvědět se konkrétní poznatky bez nutnosti detailně prostudovat diskuzní část.

Přestože práce vykazuje celou řadu nedostatků, které by se snad daly odstranit pečlivějším zpracováním výsledků, ji považuji za hodnou obhajoby zejména proto, že přináší základní představu o úskalích studia supramolekulárního chování fotospínačů DASA.

Některé konkrétní výtky:

str. 30 – Fig. 10: červené stereodeskriptory E/Z jsou použity nekorektně. Jedná se o změnu konformace na jednoduché vazbě a hodí se použít například *s-cis/s-trans*.

str. 35 – desetinné čárky namísto teček.

str. 45 – použití 0,9 amu pro jeden dílek na X-osách docela znesnadňuje čtení spekter.

str. 45+ - spektra v obrázcích jsou sice popsána písmeny, ale nikde jsem nenalezl legendu k těmto popiskám. Ergo, sledovat diskuzi nad danými spektry je téměř nemožné.

str. 50 – Fig. 20: Proč nejsou signály kompletně přiřazené?

str. 51 – Fig. 21: Proč nebyl zvolen standardní způsob přiřazení signálů například písmenky nebo čísla. Jednak se mi velmi špatně rozpoznávají barvy těch malinkých teček a jednak ve spektru jedna tečka chybí.

str. 52 – věta „The experiments were planned in order to confirm...“ odkazuje na modely v předcházející kapitole, která tam ovšem není.

str. 52 – celá diskuze nad titračním experimentem postrádá klíčové prvky jako je přiřazení signálů a posouzení CIS. Pak teprve je možno spekulovat nad mírou souladu s předpokládaným modelem.

str. 58 – Fig. 33: Popisek obrázku je stejný jako u Fig. 31 a tudíž asi nikoliv správný.

**Otázky oponenta diplomové práce:**

- 1) Teoretická část: Kromě relativně drobných obměn ve struktuře, jak se liší tři generace předmětných látek?
- 2) str. 29 – autor popisuje mechanismus přeměny oDASA na cDASA a jeden z kroků označuje jako  $4\pi$ -elektrocyclizační reakci. Takto ale obvykle vznikají čtyřčlenné kruhy. Prosím o objasnění mechanismu.
- 3) str. 34 – prostřední pasáž: „In the second part...“ není jasné, jak byly roztoky připraveny (zásobní roztok cDASA ve vodě byl ředěn chloroformem?). Prosím o objasnění.
- 4) str. 37 – střední pasáž: není jasné, jak byly připraveny roztoky („After every measurement...“)
- 5) str. 39 – věta „Although the cited research seems...“ je nejasná a nesouhlasí s obecným schématem barevných změn dle Fig. 6. Jak si vysvětlujete, že bezbarvý cDASA se po rozpuštění v MeOH zabarví díky vzniku oDASA a pak se roztok opět odbarvuje, jak píšete?
- 6) str. 42 – Fig. 13: Čemu náleží pík m/z 381.2?
- 7) str. 58 (a str. 57) – Autor použil ke kompetitivním experimentům  $Bu_4N^+I^-$  ale v Obrázku 30 je UV-Vis spektrum dopaminu. Proč?
- 8) str. 58 – Fig. 32: Z obrázku plyne, že za přístupu světla byla „rychlost“ zavírání DASA nižší (intenzita příslušného absorpčního pásu je po 80 min vyšší) než v případě bez přístupu světla. V úvodu práce ale autor tvrdí, že proces zavírání je indukován světlem. Prosím o objasnění.

Nepovažuji za racionální a nutné, aby mi odpovědi byly zaslány předem poštou.  
Prosím o zodpovězení všech otázek až během obhajoby.

Ve Zlíně, dne **31. 05. 2023**

Podpis oponenta diplomové práce