

Posudek oponenta diplomové práce

Příjmení a jméno studenta:	Adéla Bagová
Studijní program:	Chemie potravin a bioaktivních látek
Ústav:	Ústav chemie
Vedoucí diplomové práce:	Ing. Zdeňka Prucková, Ph.D.
Oponent diplomové práce:	doc. Mgr. Robert Vícha, Ph.D.
Akademický rok:	2024/2025
Název diplomové práce:	Studium přípravy a supramolekulárního chování ligandů s adamantylacetylenovým motivem

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	C - dobře
3. Množství 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 a diskuze výsledků	A - výborně
7. Formulace závěrů práce	B - velmi dobře

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

B - velmi dobře

Komentáře k diplomové práci:

Adéla Bagová (dále jen autorka) navázala ve své diplomové práci na problém již nějakou dobu ve výzkumné skupině řešený a pokusila se připravit nový vazebný motiv pro cucurbiturilové a cykloextrinové makrocikly na bázi 2-(1-adamantyl)ethynyl imidazoliových solí. Práce tradičně začíná teoretickou částí, pak následuje část experimentální, kde je poněkud proti zvyklostem, mezi popis přístrojového vybavení a metod a popis vlastních experimentů, zařazena pasáž (str. 43–45) vysvětlující kontext prováděné práce. Tento text bych čekal spíše jako úvod do diskuze. Pak následuje již obvyklým způsobem zpracovaná diskuze výsledků a závěr.

V teoretickém úvodu zpracovala autorka přehled lineárních stavebních motivů pro supramolekulární ligandy a přehled cross-couplingových reakcí vedoucích ke vzniku vazeb C—C a C—N. V první části poněkud postrádám odkaz na celoživotní práci profesora Michla, který se lineárním nekonjugovaným motivům (například 1,3-disubstituovaným bicyklo[1.1.1]pentanům) dlouhodobě věnoval. Ve druhé části by bylo logičtější, vzhledem k tématu autorčiny práce, více akcentovat oblast tvorby C—N vazeb. Obě části jsou ale po textové stránce zpracovány velmi čtivě a zejména pasáž o cross-couplingových reakcích by mohla sloužit jako učební text. Co ale jinak pozitivní dojem výrazně snižuje je řada stylistických neobratností (zde uvádím i příklady z dalších částí práce: postup katalyzovaný mědí, reakce dostala Nobelovu cenu, pokud je Goldbergová žena, pak je správný tvar tento: Ullmannova–Goldbergové reakce, organoalkylická činidla, objevy prokázaly základní předpoklad, vystavení proudu plynu na ložisko palladia, méně toxická cesta, ethylacetát, reakce byla zahřívána, produkt **7** a nikoliv produkt (7), signál je odstíněn, dvě syntetické strategie pro tuto syntézu) a ne zcela korektní citace sekundárních zdrojů na konci odstavce.

Z experimentální práce autorky oceňuji pečlivě a cíleně provedenou optimalizaci přípravy intermediátu **7**. Dále se autorka detailně věnovala popisu nežádoucích transformací získaných imidazoliových derivátů, což přináší velmi cenné poznatky o chemii těchto neobvyklých *N*-alkynyl imidazolií. Přestože autorka musela čelit relativně nízké stabilitě finálního ligandu **8**, dokázala provést a interpretovat orientační experimenty popisující supramolekulární chování. V této části bych byl ale trochu upřímnější a opatrnější, uváděné hodnoty asociačních konstant budou zatížené obrovskou chybou, zejména díky rozpadu studovaného ligandu během titračních experimentů. V závěru ale správně autorka navrhuje možný způsob stabilizace ligandu výměnou aniontu.

Kromě již výše uvedených mám ještě dvě kritické poznámky: látka **7** se správně jmenuje 1-(2-(1-adamantyl)ethynyl)-1*H*-imidazol a není mi jasné, proč v literárních odkazech autorka neuvádí autory prací.

Celkově ale považuji práci za zdařilou, oceňuji, že se autorka vyrovnala se značnými obtížemi a naznačila tak možné cesty dalšího studia *N*-alkynylimidazoliového vazebného motivu.

Otázky oponenta diplomové práce:

V rámci obhajoby prosím o zodpovězení následujících otázek:

- 1) Na straně 52 je uvedeno, že TEA je báze komplexační. Jaké typy komplexů má autorka na mysli?
- 2) Na Schématu 12 je uvedena Krönkeho metoda pro syntézu bipyridinů. Schéma je ale neúplné a nejasné. Prosím o uvedení a komentář mechanismu této reakce.
- 3) Na straně 81 navrhuje autorka stabilizaci imidazoliových solí výměnou aniontu. Prosím o nastínění způsobu, jak takovou výměnu prakticky provést.
- 4) V podrobné diskuzi k optimalizaci syntézy látky **7** na straně 53 a dále, není jasné, o jakých výtěžcích autorka píše. V Tabulce 1 je uvedeno sedm reakcí s výtěžky 2–62 % látky **7**, později je uvedeno, že reakce byla provedena pětkrát s průměrným výtěžkem 17 % a ještě kousek dál je psáno, že výtěžky se pohybovaly v rozmezí 20–61 %. Prosím o objasnění těchto údajů.

Ve Zlíně, dne 28. května 2025

Podpis oponenta diplomové práce

Posudek oponenta diplomové práce

Příjmení a jméno studenta:	Adéla Bagová
Studijní program:	Chemie potravin a bioaktivních látek
Ústav:	Ústav chemie
Vedoucí diplomové práce:	Ing. Zdeňka Prucková, Ph.D.
Oponent diplomové práce:	doc. Mgr. Robert Vícha, Ph.D.
Akademický rok:	2024/2025
Název diplomové práce:	Studium přípravy a supramolekulárního chování ligandů s adamantylacetylenovým motivem

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	C - dobře
3. Množství 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 a diskuze výsledků	A - výborně
7. Formulace závěrů práce	B - velmi dobře

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

B - velmi dobře

Komentáře k diplomové práci:

Adéla Bagová (dále jen autorka) navázala ve své diplomové práci na problém již nějakou dobu ve výzkumné skupině řešený a pokusila se připravit nový vazebný motiv pro cucurbiturilové a cykloextrinové makrocikly na bázi 2-(1-adamantyl)ethynyl imidazoliových solí. Práce tradičně začíná teoretickou částí, pak následuje část experimentální, kde je poněkud proti zvyklostem, mezi popis přístrojového vybavení a metod a popis vlastních experimentů, zařazena pasáž (str. 43–45) vysvětlující kontext prováděné práce. Tento text bych čekal spíše jako úvod do diskuze. Pak následuje již obvyklým způsobem zpracovaná diskuze výsledků a závěr.

V teoretickém úvodu zpracovala autorka přehled lineárních stavebních motivů pro supramolekulární ligandy a přehled cross-couplingových reakcí vedoucích ke vzniku vazeb C—C a C—N. V první části poněkud postrádám odkaz na celoživotní práci profesora Michla, který se lineárním nekonjugovaným motivům (například 1,3-disubstituovaným bicyklo[1.1.1]pentanům) dlouhodobě věnoval. Ve druhé části by bylo logičtější, vzhledem k tématu autorčiny práce, více akcentovat oblast tvorby C—N vazeb. Obě části jsou ale po textové stránce zpracovány velmi čtivě a zejména pasáž o cross-couplingových reakcích by mohla sloužit jako učební text. Co ale jinak pozitivní dojem výrazně snižuje je řada stylistických neobratností (zde uvádím i příklady z dalších částí práce: postup katalyzovaný mědí, reakce dostala Nobelovu cenu, pokud je Goldbergová žena, pak je správný tvar tento: Ullmannova–Goldbergové reakce, organoalkylická činidla, objevy prokázaly základní předpoklad, vystavení proudu plynu na ložisko palladia, méně toxická cesta, ethylacetát, reakce byla zahřívána, produkt **7** a nikoliv produkt (7), signál je odstíněn, dvě syntetické strategie pro tuto syntézu) a ne zcela korektní citace sekundárních zdrojů na konci odstavce.

Z experimentální práce autorky oceňuji pečlivě a cíleně provedenou optimalizaci přípravy intermediátu **7**. Dále se autorka detailně věnovala popisu nežádoucích transformací získaných imidazoliových derivátů, což přináší velmi cenné poznatky o chemii těchto neobvyklých *N*-alkynyl imidazolií. Přestože autorka musela čelit relativně nízké stabilitě finálního ligandu **8**, dokázala provést a interpretovat orientační experimenty popisující supramolekulární chování. V této části bych byl ale trochu upřímnější a opatrnější, uváděné hodnoty asociačních konstant budou zatížené obrovskou chybou, zejména díky rozpadu studovaného ligandu během titračních experimentů. V závěru ale správně autorka navrhuje možný způsob stabilizace ligandu výměnou aniontu.

Kromě již výše uvedených mám ještě dvě kritické poznámky: látka **7** se správně jmenuje 1-(2-(1-adamantyl)ethynyl)-1*H*-imidazol a není mi jasné, proč v literárních odkazech autorka neuvádí autory prací.

Celkově ale považuji práci za zdařilou, oceňuji, že se autorka vyrovnala se značnými obtížemi a naznačila tak možné cesty dalšího studia *N*-alkynylimidazoliového vazebného motivu.

Otázky oponenta diplomové práce:

V rámci obhajoby prosím o zodpovězení následujících otázek:

- 1) Na straně 52 je uvedeno, že TEA je báze komplexační. Jaké typy komplexů má autorka na mysli?
- 2) Na Schématu 12 je uvedena Krönkeho metoda pro syntézu bipyridinů. Schéma je ale neúplné a nejasné. Prosím o uvedení a komentář mechanismu této reakce.
- 3) Na straně 81 navrhuje autorka stabilizaci imidazoliových solí výměnou aniontu. Prosím o nastínění způsobu, jak takovou výměnu prakticky provést.
- 4) V podrobné diskuzi k optimalizaci syntézy látky **7** na straně 53 a dále, není jasné, o jakých výtěžcích autorka píše. V Tabulce 1 je uvedeno sedm reakcí s výtěžky 2–62 % látky **7**, později je uvedeno, že reakce byla provedena pětkrát s průměrným výtěžkem 17 % a ještě kousek dál je psáno, že výtěžky se pohybovaly v rozmezí 20–61 %. Prosím o objasnění těchto údajů.

Ve Zlíně, dne 28. května 2025

Podpis oponenta diplomové práce