

## Posudek oponenta bakalářské práce

### (EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

<b>Příjmení a jméno studenta:</b>	Aneta Šteiglová
<b>Studijní program:</b>	Technologie a hodnocení potravin
<b>Studijní obor:</b>	Chemie a analýza potravin
<b>Zaměření</b> (pokud se obor dále dělí):	
<b>Ústav:</b>	Ústav chemie
<b>Vedoucí bakalářské práce:</b>	Ing. Roman Kimmel, Ph.D.
<b>Oponent bakalářské práce:</b>	doc. Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
<b>Akademický rok:</b>	2022/2023

#### Název bakalářské práce:

Příprava "magic" malonátů a studium jejich reaktivity s fenolem

#### Hodnocení bakalářské práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:

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

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

**B - velmi dobře**

### **Komentáře k bakalářské práci:**

Bakalářská práce Anety Šteiglové je svojí povahou zaměřena do oblasti syntézy derivátů na bázi 4-hydroxykumarinu, a to prostřednictvím cyklokondenzačních reakcí bis(2,4,6-trichlofenyl)-malonátů s fenolem, resp. cyklohexanonem. V okamžiku, kdy mi byl rukopis bakalářské práce doručen a já jej poprvé otevřel, objevil jsem v něm opravný lístek. V tu chvíli jsem si pomyslel: "Co budu asi tak opravovat v již opravené práci?". Tato obava se naštěstí (pro mě) ukázala jako lichá. Vezmu to ale popořádku.

V teoretické části se autorka na více než 20 stranách postupně věnuje obecné charakteristice derivátů kyseliny malonové, možnostem přípravy tzv. "magic" malonátů a cyklokondenzačním reakcím. Tato část práce je psána srozumitelně, kdy slovní komentář je vhodně doprovázen řadou reakčních schémat a vzorců komentovaných látek. K této části práce mám následující připomínky: ve Schématu 1 (str. 11) není vysvětlen význam substituentů R a X ve struktuře ofloxacinu a rufloxacinu; na str. 12 je nesprávně použit výraz "kompetentní inhibitory" (správně je kompetitivní inhibitory); v názvu kap. 1.2.1 chybí výraz "Směsný"; členění kapitol 1.1 a 1.2 do dalších podkapitol považuji za zbytečné, např. z důvodu přílišné strohosti některých podkapitol (např. 1.1.1 nebo 1.2.1); ve Schématu 10 (str. 20) je znázorněn substituent "B = C,N", který se však nevyskytuje v žádné z prezentovaných sloučenin; ve struktuře sloučeniny 30 (Schéma 13, str. 22) není v poloze 4 znázorněna OH-skupina; na str. 28 se autorka odkazuje na Schéma 26 (správně by mělo být Schéma 25); Schéma 25 - reakce znázorněna pod písmenem "c" není v textu nikterak komentována, autorka použila desetinné tečky namísto čárek a nevodnou zkratku "o. n." (pravděpodobně pro výraz overnight); první věta na str. 30 odkazuje na (v textu) neexistující popis přípravy sloučeniny 61; ve Schématu 26 (str. 31) směřuje šipka od sloučeniny 64 k látce 65, avšak bez doplnění dalších nutných údajů (takto daná reakce probíhat nemůže). V textu se lze rovněž setkat s řadou překlepů či nevhodných formulací, které na tomto místě nebudu blíže komentovat. Výtku mám také k citacím, na které se autorka v této části práce odkazuje, kdy pouze 3 z uvedených 44 odkazů na literaturu jsou mladší pěti let.

V experimentální části (umístěné až za částí diskuzní) popisuje autorka použité přístrojové vybavení a provedené syntézy. Dále u připravených sloučenin přikládá jejich základní spektrální charakteristiky, jako je IČ a  $^1\text{H}$  a  $^{13}\text{C}$  NMR. V této části práce jsem nenalezl žádné zásadní nesrovnalosti, snad vyjma skutečnosti, že by u postupů převzatých z literatury mohly být uvedeny předmětné citace a u látek již známých uvedeno, zda naměřená spektrální data souhlasí s daty literárními.

Kapitola věnovaná diskuzi získaných výsledků je členěna logicky, kdy je čtenář postupně, bez zbytečných odboček, provázen srozumitelně se vyvíjejícím příběhem, který je navíc vhodně doplněn ilustracemi v podobě reakčních schémat a NMR spekter. Přesto mám i k této části práce drobné připomínky, jako např.: nejednotné používání zkratky pro allylový substituent (Allyl a allyl), nevhodné názvy Tabulky 1 a 2 (bylo by vhodné uvést o jaké reakce se jedná, zvláště, když dané tabulky nejsou umístěny na stejné straně rukopisu jako schéma, kterého se týkají); nejednotné škálování osy x NMR spekter prezentovaných na Obr. 8 (str. 36); nejednotné používání obecného pojmenování sloučenin III (s (viz kap. 6.2), resp. bez (viz kap. 4.2) pomlčky). Také v této části práce se lze setkat

s některými překlepy a nevhodnými formulacemi, které jsou patrně dílem drobné nepozornosti autorky při sepisování rukopisu.

Přes drobné výtky se domnívám, že bakalářská práce Anety Šteiglové splňuje požadavky na práce tohoto typu kladené a že autorka odvedla velký kus poctivé práce nejen ve smyslu provedených experimentů, ale také při přípravě samotného rukopisu. Proto doporučuji bakalářskou práci Anety Šteiglové k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm **B - velmi dobře**.

#### **Otázky oponenta bakalářské práce:**

1) Na str. 12 a 13 píšete, že "díky provedeným experimentům bylo možné poznat strukturu sukcinátového aktivního centra dehydrogenázy". Přitom se odkazujete na publikaci z roku 1943. Mohla byste mi, prosím, říci, jakými metodami autoři dané práce aktivní místo tohoto receptoru popsali?

2) Na Schématu 9 (str. 19) uvádíte první publikovanou syntézu bis(2,4,6-trichlorfenyl)-malonátu. K tomuto mám následující dotazy: a) jak mám rozumět výrazu "nestechiometrické množství"?; b) v jakém výtěžku připravil T. Kappe sloučeninu 18?; c) jak ovlivňovala úprava reakční doby publikovaná v jiných pracích (jak píšete) výtěžky prováděných experimentů?

3) Prosím o objasnění významu substituenty  $R^1$  znázorněného ve Schématu 27 (str. 31).

4) Na základě čeho byly přiřazeny signály atomů vodíku  $H-1^A-H-3^A$  sloučenin **IIf** a **IIIf**?

5) Z textu není patrné, co Vás vedlo ke zkrácení reakční doby při přípravě sloučeniny **If**. Prosím o objasnění.

6) Proč nebyla u některé z reakcí poskytujících sloučeniny **III** prodloužena reakční doba a průběh reakce monitorován např. pomocí NMR?

7) V experimentální části (kap. 6.2) uvádíte, že 2,4,6-trichlorfenol a fosforylchlorid byly používány v 1,8, resp. 2,4 molárním přebytku vůči výchozí látce **II**. V Tabulce 2 (s. 38) jsou však uvedeny jiné, navíc pro jednotlivé experimenty různé, molární poměry reaktantů. Prosím o objasnění.

Ve Zlíně dne **5.6.2023**

Podpis oponenta bakalářské práce