

Posudek oponenta bakalářské práce (EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta:	Jiří Bítomský
Studijní program:	Technologie a hodnocení potravin
Studijní obor:	Chemie a analýza potravin
Zaměření (pokud se obor dále dělí):	
Ústav:	Ústav chemie
Vedoucí bakalářské práce:	Ing. Petr Janovský
Oponent bakalářské práce:	doc. Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
Akademický rok:	2022/2023

Název bakalářské práce:

Příprava supramolekulárních ligandů na bázi 3,9-diazabicyklododekanu

Hodnocení bakalářské práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:

Kritérium hodnocení	Hodnocení dle ECTS
1. Splnění zadání bakalářské práce	A - výborně
2. Formální úroveň práce, včetně jazykového zpracování	C - 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	C - dobře
7. Formulace závěrů práce	D - uspokojivě

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

C - dobře

Komentáře k bakalářské práci:

Jiří Bítomský se ve své bakalářské práci zabývá přípravou ligandu na bázi 3,9-diazapentacyklododekanu, který by mohl představovat vhodný motiv pro tvorbu hostitel–host komplexů s makrocyclickými sloučeninami na bázi cucurbit[*n*]urilů a cyklodextrinů.

Práce je členěna klasickým způsobem do tří hlavních částí, teoretické, experimentální a diskuzní.

V teoretické části se autor nejprve věnuje stručné charakteristice supramolekulární chemie se zaměřením se na popis vybraných makrocyclických sloučenin. Následně je jeho pozornost upřena na syntézu, dimeraci a možné aplikace dihydropyridinů, jakožto klíčových prekurzorů pro syntézu uvažovaného ligandu. Tato část práce, zpracovaná na 16 stranách, je psána srozumitelnou formou a poskytuje čtenáři základní informace o oblastech, kterým je věnována pozornost. Je doprovázena celkem 22 obrázky a 52 odkazy na odbornou literaturu. K této části práce si dovoluji mít následující připomínky: a) struktura cyklodextrinu na Obr. 2 (str. 12) se mi jeví jako nadbytečná; b) číslování podkapitol do čtvrtého stupně považuji za nevhodné; c) v titulku Obr. 11 (str. 18) je použit výraz "oxaloplatin" (správně má být "oxalilplatina"); d) na str. 19 je nesprávně použit výraz "isometrických" namísto "isomerických"; e) na Obr. 14 (str. 20) je nevhodně použito dvojího způsobu znázorňování postranních alifatických řetězců; f) na str. 21 a v popisku Obr. 19 (str. 22) je použita nevhodná formulace "enantiotricky selektivní syntéza" namísto "enantioselektivní syntéza"; g) v textu se lze setkat s řadou překlepů, nesprávně formulovaných (skloňovaných) vět a dalších drobných formálních nedostatků, např. na str. 8, 13, 14, 17, 19, 23 a 24.

V experimentální části práce se autor nejprve věnuje popisu použitého přístrojového vybavení. Následně uvádí pracovní postupy vedoucí k přípravě požadovaných látek a základní spektrální charakteristiky připravených sloučenin. Pracovní postupy jsou psány způsobem umožňujícím případné opakování provedených experimentů, což oceňuji. K této části práce mám následující výtky: a) v popisu použitého přístrojového vybavení není uveden fotochemický reaktor a metody použité pro semiempirické výpočty, které, jak plyne z Obr. 24 (str. 32) a Obr. 37 (str. 41), byly realizovány, dále zde postrádám bližší popis parametrů použitých během mikrovlnami asistovaných syntéz, nebo alespoň informaci, kde tyto parametry uvedeny jsou; b) nejsou uvedeny odkazy na literaturu, z níž byly převzaty (byť modifikovány) pracovní postupy; c) není uvedeno srovnání spektrálních charakteristik připravených látek již dříve popsanych v literatuře; d) ve výpisech ¹H NMR spekter nejsou uvedeny interakční konstanty (na vhodných místech) a rovněž nejsou přiřazeny jednotlivé atomy vodíku (ačkoliv v diskuzní části tomu tak je, viz. Obr. 28, 30 a 34).

V pro čtenáře klíčové části věnující se diskuzi získaných výsledků postupuje autor chronologicky a zejména logicky, což oceňuji. Tato část práce je psaná vhodným způsobem s tím, že text je doprovázen řadou reakčních schémat a obrázků (EI-MS, NMR, GC) poskytujících čtenáři dodatečné a velmi cenné informace o čistotě, případně struktuře dané sloučeniny. Připomínky vztahující se k této části práce jsou tyto: a) na Obr. 23 (str. 31) je nesprávně znázorněn atom dusíku (vpravo dole), který se namísto za rovinou nákresny nachází před ní, stejně tak nepovažuji za správné použití přerušovaných čar pro znázornění kovalentních vazeb; b) ve schématech ilustrujících provedené syntézy není uvedeno číslování látek, což je neobvyklé; c) postrádám číslování atomů uhlíku

v některých látkách, na které se autor v diskuzi následně odkazuje (např. "na 2. a 6. uhlíku, na 3. uhlíku apod.); d) sloučeniny 3 a 4 znázorněné na Obr. 23 (str. 31) jsou totožné; e) Obr. 24 (s. 32) je ponechán bez jakéhokoliv komentáře; f) v komentářích EI-MS spekter autor opakovaně používá nesprávný termín "molekulový pík" namísto "molekulový ion".

V závěru autor poskytuje shrnutí svého snažení, naneštěstí, snad z důvodu časového presu, je v této části práce takřkajíc "na slovo skoupý", přitom jsem přesvědčen, že bylo o čem psát.

Jiří Bítomský splnil zadání práce, odvedl v tomto, nutno podotknout, pilotním projektu kus kvalitní práce a připravil rukopis splňující požadavky na práce tohoto typu kladené. Částečný, věřím že pouze dočasný, neúspěch ve smyslu neúspěšné syntézy uvažovaného klecového motivu nelze považovat za parametr významně snižující kvalitu předložené práce. Proto si dovoluji doporučit bakalářskou práci Jiřího Bítomského k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm **C - dobře**.

Otázky oponenta bakalářské práce:

1) Na str. 13 a 14 popisujete v obecné rovině oblasti, v nichž se používají cyklodextriny. Mohl byste, prosím, uvést nějaké konkrétní příklady aplikace cyklodextrinů v potravinářství?

2) Schéma znázorněné na Obr. 14 (s. 20) není v textu blíže komentované. Mohl byste, prosím, objasnit o jaké indolové deriváty na obrázku znázorněné se jedná a čím jsou významné?

3) V práci uvádíte, že nízký výtěž, v němž byl získán produkt esterifikace výchozí kyseliny nikotinové, mohl být způsoben špatnou manipulací při extrakci a promývání během zpracování reakční směsi. Prováděl jste tuto reakci více než jedenkrát? Pokud ano, jakých izolovaných výtěžků jste v jednotlivých reakcích dosáhl?

4) Mohl byste, prosím, nastínit další syntetickou strategii (včetně reakčních podmínek), která by mohla vést k doposud nepřipraveným látkám **6** a **7**?

5) Pokud by byl uvažovaný ligand **7** úspěšně připraven, následovalo by studium jeho supramolekulárních vlastností. S jakými typy makrocyclických sloučenin byste očekával tvorbu hostitel–host komplexů a proč?

Ve Zlíně dne 6. 6. 2023

Podpis oponenta bakalářské práce