

Posudek oponenta diplomové práce

Jméno studenta: Bc. Alena Matelová
Studijní program: Chemie a technologie potravin
Studijní obor: Chemie potravin a bioaktivních látek
Zaměření (pokud se obor dále dělí):
Ústav: chemie
Vedoucí diplomové práce: Mgr. Robert Vícha, Ph.D.
Oponent diplomové práce: Mgr. Richard Čmelík, Ph.D.
Akademický rok: 2012/2013

Název diplomové práce:

Syntéza a studium vlastností funkčních komponent supramolekulárních systémů na bázi adamantanu

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	C - dobře
5. Kvalita zpracování výsledků	C - 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
C - dobře

Komentáře k diplomové práci:

Práce se zabývá syntézou dvou sloučenin uplatnitelných jako komponenty supramolekulárních systémů, 14-(1-adamanty)-7,8-dihydronafto[1,2-a]akridinu a bisimidazoliové soli, v druhém případě i jejím chováním v plynné fázi.

Teoretická část obsahuje kapitoly věnované stereoizomerii, stručné představení molekulárních spínačů a řešerši jednotlivých kroků dle retrosyntetické analýzy zmíněného derivátu 7,8-dihydronafto[1,2-a]akridinu. Zvláštní důraz je oprávněně věnován atropoizomerii s ohledem na strukturu jedné z cílových látek. Přehlednosti by ovšem prospěla větší strukturovanost kapitoly. Navržený postup syntézy je rozčleněn na tři cesty, opatřen přehledným popisem a doplňujícími praktickými aspekty jednotlivých reakčních kroků. Překvapivě zůstala nepovšimnuta teoretická stránka přípravy bisimidazoliové soli a zčásti i látky 11.

Praktická část zahrnuje tradičně uspořádané a podrobné popisy syntéz všech připravených látek s jejich fyzikálně-chemickými charakteristikami. Významný prostor zaujímají optimalizace reakčních podmínek vyvolané neúspěšnými postupy a rozpracované syntézy. V oddíle se dá ovšem velmi obtížně orientovat (zvláště při srovnání s teoretickou částí a diskusí), jelikož postrádá určení výchozích látek, číselné označení produktů, zřetelné přiřazení reakční cesty a variant syntéz.

V diskusi výsledků jsou rozebrány jednotlivé reakční kroky ve stejném pořadí, v jakém se vyskytují v předchozí části. Autorka obvykle uspokojivě zdůvodňuje vybrané postupy, vysvětluje jejich modifikace pro dosažení žádaných meziproductů a lze-li, tak i dovozuje mechanismus vzniku vedlejších/nežádoucích produktů. Výjimku představuje odstavec vysvětlující schéma 54, který postrádá smysl. Velká pozornost patří zaslouženě srovnání fragmentace připravené benzimidazoliové soli a jejího aduktu s cucurbit[7]urilem, byť není zřejmé jak byly struktury odvozeny. S podobným přístupem se lze setkat u ketenu z obr. 12 (str. 67), vinylnaftalenu a dinaftylhexanu (str. 57). Orientaci čtenáře by usnadnilo očíslování všech detekovaných produktů či pozornost při tvorbě tabulky I (prohozené sloupce; str. 69).

Dosažené výsledky a úskalí klíčových syntetických kroků shrnuje stručný závěr.

Seznam použité literatury na konci práce se skládá z dostatku aktuálních a jednoznačných, jenže nejednotně uváděných referencí.

Z formálního hlediska je potřeba upozornit na dosti nedbalé tvoření chemických názvů, nejčastěji z nepozornosti při psaní (obvykle překlepy; trojí pojmenování látky 6 na str. 10, 23 a 25), nerespektování názvoslovných doporučení (např. antracen a oxalyl chlorid) a naštěstí v malé míře zcela chybné názvy (např. látka 10). Ač výskyt formulací nepatřících do odborného stylu nepřesahuje únosnou úroveň, místy se objevují nešťastná vyjádření (např. vodný roztok NaOH v dichlormethanu na str. 31, chlorace karboxylových sloučenin na str. 35). Mezi méně významné prohřešky patří četné chybějící mezery mezi slovy.

Diplomantka měla za úkol provedení mnohastupňové organické syntézy, kterou si sice dobře naplánovala a promyslela, ale přes vynaložení značného úsilí a času se jí nepodařilo z objektivních důvodů práci zcela dokončit a splnit tak její zadání. Prokázala ovšem schopnost samostatné systematické práce, logického uvažování a formulování smysluplných podložených závěrů, a proto doporučuji její práci k obhajobě.

Otázky oponenta diplomové práce:

1/ Jak byste definovala chiralitu?

2/ Na str. 57 a 59 zmiňujete látku, která se projevuje v MS spektru iontem m/z 244.

Jde v obou případech u stejnou sloučeninu?

3/ Lze při GC-MS sulfoxidů pozorovat jejich molekulové ionty? Jsou pro tuto skupinu látek známy nějaké typické neutrální ztráty?

4/ Ve schématech 56 a 57 (str. 75 a 76) uvádíte několik struktur zahrnujících (di)karbeny.

Můžeme se s podobnými látkami setkat v publikovaných pracích?

5/ Pokročila jste v mezičase dále v optimalizaci syntézy látky 11, popř. dalších?

V Brně dne 5. června 2013

podpis oponenta diplomové práce