

## Posudek oponenta diplomové práce

<b>Příjmení a jméno studenta:</b>	<b>Bc. Ščurková Adriana</b>
<b>Studijní program:</b>	Chemie a technologie potravin
<b>Studijní obor:</b>	Technologie potravin
<b>Zaměření</b> (pokud se obor dále dělí):	
<b>Ústav:</b>	Ústav technologie potravin
<b>Vedoucí diplomové práce:</b>	Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
<b>Oponent diplomové práce:</b>	Ing. Zdeňka Prucková, Ph.D.
<b>Akademický rok:</b>	2016/2017

**Název diplomové práce:**

Studium tvorby inkluzních komplexů vybraných flavonoidů s cyklodextriny

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

<b>Kritérium hodnocení</b>	<b>Hodnocení dle ECTS</b>
1. Splnění zadání diplomové práce	<b>A - výborně</b>
2. Formální úroveň práce, včetně jazykového zpracování	<b>A - výborně</b>
3. Množství, aktuálnost a relevance použitých literárních zdrojů	<b>A - výborně</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>A - výborně</b>
7. Formulace závěrů práce	<b>A - výborně</b>

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

**A - výborně**

### **Komentáře k diplomové práci:**

Diplomová práce studentky Adriany Ščurkové se zabývá tvorbou supramolekulárních komplexů dvou zástupců flavonoidů (flavon a kvercetin) s cyklodextriny. Vznikající komplexy byly sledovány pomocí hmotnostního spektrometru s iontovou pastí. Diplomová práce je standardně členěna do tří kapitol na teoretickou část, experimentální část a diskuzní část.

Teoretická část se dle zadání zabývá postupně flavonoidy, cyklodextriny a tvorbou supramolekulárních komplexů některých flavonoidů s cyklodextriny. Teoretická část je zpracována velmi srozumitelně a pečlivě bez zjevných pravopisných chyb a překlepů. Vyjma na str. 30, kde je drobná chyba v rozdělení infračervené oblasti spektra na blízkou infračervenou oblast 13000 – 500  $\text{cm}^{-1}$  (namísto 5000  $\text{cm}^{-1}$ ) a str. 32, kdy studentka píše: „Jak již bylo zmíněno výše, většina chemoterapeutik nevykazuje...“ a v předešlých řádcích nebyla žádná chemoterapeutika vůbec zmíněna. Za pozitivum teoretické části bych vyzdvihla popis některých ne tak zcela běžně používaných cyklodextrinů. Naopak postrádám podrobnější popis využití flavonoidů v potravinářství, kdy tato problematika je v celé teoretické části zmíněna pouze dvěma větami. Dále studentka popisuje chemickou strukturu cyklodextrinů v pevné a kapalné fázi, struktura ve fázi plynná uvedena není, ač je předmětem praktické části diplomové práce.

Dle mého názoru by podkapitola 2.5 Metody stanovení supramolekulárních komplexů, která je součástí kapitoly o cyklodextrinech, měla být začleněna v kapitole 3 Charakteristika supramolekulárních komplexů mezi vybranými flavonoidy a cyklodextriny.

Velice podrobně a přehledně je zpracovaná kapitola o supramolekulárních komplexech flavonoidů s cyklodextriny. Kladně hodnotím výčet vazebných konstant komplexů některých flavonoidů s cyklodextriny. Tato kapitola čerpá z 15 článků, které byly publikovány během posledních deseti let. Celkově je v teoretické části zmíněno 79 citací od českých i zahraničních autorů. Text je zpracován jasně a smysluplně.

Praktická část diplomové práce je rozdělena na experimentální část a na diskuzi výsledků. Experimentální část popisuje syntézu jednoho ze dvou používaných zástupců flavonoidů – flavonu spolu s charakteristikami jednotlivých meziproductů syntézy flavonu a flavonu samotného. Dále je v experimentální části popsán hmotnostní spektrometr spolu s přípravou vzorků používaných k analýze na hmotnostním spektrometru. Poslední částí je postup stanovení antioxidační aktivity spektrofotometricky. Celá experimentální část je napsána přehledně a smysluplně. Studentka připravila celkem tři látky, které byly charakterizovány NMR spektry, IČ spektry, GC-MS a ESI-MS spektry. K výčtu analytických metod snad jen chybí stanovení elementární analýzy, které ale přes uvedené charakteristiky nebylo nezbytně nutné.

V diskuzi a výsledcích studentka nejprve vystihuje jednotlivé kroky a meziproducty vedoucí k syntéze flavonu. Tuto syntézu cituje z časopisu European Journal of Medicinal Chemistry. Očekávala bych více „chemicky“ zaměřený časopis pro postup přípravy flavonu. Ke každému meziproductu syntézy flavonu a flavonu samotném je uveden přehledný komentář ESI-MS spekter. Pro meziproducty 3 a 4 je komentář doplněn obrázky spekter, jen pro samotný flavon obrázek ESI-MS spektra chybí. Také postrádám obrázek NMR spektra pro flavon. Toto spektrum je komentováno (str. 51), ale spektrum doloženo není. Nadto je v diskuzní části uveden v obrázku č. 21 mechanismus Bakerova-Venkataramanova přesmyku. Chybí citovaná literatura uvedeného přesmyku, nýbrž předpokládám, že studentka tento přesmyk sama nenavrhl. Za přínosný bych viděla návrh fragmentace iontu z ESI-MS spektra pro sloučeninu 4. Dále je diskutováno ESI-MS spektrum druhého z používaných flavonoidů – kvercetinu, který nebyl pro toto studium

studentkou syntetizován. Pro kvercetin je spektrum ve výsledkové části uvedeno a diskutováno. V neposlední řadě byla provedena studie ESI-MS spekter cyklodextrinů. Ve stěžejní pasáži praktické části jsou popsány komplexy kvercetinu s cyklodextriny. Tyto komplexy jsou doloženy ESI-MS spektry, které jsou přehledně a detailně diskutovány. Při všechn komplexy byla nad rámec zadání diplomové práce stanovena antioxidační kapacita. Komplexy flavonu s cyklodextriny identifikovány ve spektrech nebyly.

Diskuzní část je zpracována velmi důkladně, což dokazuje rozsah necelých dvaceti stran včetně obrázků.

Přes výše uvedené drobné výtky považuji diplomovou práci Adrianý Ščurkové za velmi kvalitní. Diplomová práce odpovídá zadání, je přehledná, obrázky i grafy jsou ucelené a jednotné. Diplomovou práci doporučuji k obhajobě.

#### **Otázky oponenta diplomové práce:**

1) Autorka uvádí, že flavonoidy se využívají v potravinářském průmyslu jako barviva a antioxidanty. Může studentka uvést příklady uplatnění některých flavonoidů pro konkrétní potraviny?

2) Na straně 21 studentka uvádí, že flavonoidy mohou snižovat tvorbu NO inhibicí enzymu cyklooxygenázy a to v souvislosti s antioxidačními účinky flavonoidů. Může toto autorka nějak blíže vysvětlit?

3) V kapitole Charakteristika supramolekulárních komplexů mezi flavonoidy a cyklodextriny studentka uvádí pro některé komplexy hodnoty vazebných konstant. Jedna z nejvyšších uvedených konstant byla stanovena řádově 10 na čtvrtou (str. 37). Jakou metodou byla tato konstanta stanovena? A bylo by také možno popsat metodu stanovení stability komplexů pomocí fázových diagramů?

4) Ve spektrech ESI-MS identifikujete sodné, resp. draselné adukty štěpení používaných látek. Kaky je zdroj iontů sodíku a draslíku?

5) Používaná koncentrace samotných ligandů flavonu a kvercetinu pro analýzu ESI-MS byla uvedena 0,5 mikrogramů/ml, koncentrace roztoků ligandů pro studium komplexace mezi cyklodextriny a ligandy byla 25 mikromolární. Proč jsou tyto hodnoty koncentrací rozdílné?

6) Popisujete stanovení antioxidační kapacity v roztoku methanolu. Je methanol standardním rozpouštědlem pro toto stanovení? Existuje metoda vyhodnocení antioxidační kapacity v destilované vodě?

V e Zlíně dne 17.5.2017

Podpis oponenta diplomové práce