

Posudek vedoucího bakalářské práce (EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta: Aneta Hromádková
Studijní program: B2901 Chemie a technologie potravin
Studijní obor: Chemie a technologie potravin
Zaměření
(pokud se obor dále dělí):
Ústav: Ústav chemie
Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Robert Vícha, Ph.D.
Oponent bakalářské práce: Ing. Roman Kimmel, Ph.D.
Akademický rok: 2017/2018

Název bakalářské práce:

Syntéza a studium supramolekulárních vlastností homoditopických ligandů na bázi adamantylovaných bipyridiniových solí.

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	C - dobře
4. Popis experimentů a metod řešení	D – uspokojivě
5. Kvalita zpracování výsledků	E – dostatečně
6. Interpretace získaných výsledků a jejich diskuze	D – uspokojivě
7. Formulace závěrů práce	C – dobře

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

D – uspokojivě

Komentáře k bakalářské práci:

Studentka Aneta Hromádková v rámci své bakalářské práce měla za úkol připravit homoditopické ligandy na bázi adamantylovaných bipyridiniových solí a prozkoumat jejich afinitu ke dvěma vybraným makrocyclickým sloučeninám, β -cyklodextrinu a cucurbit[7]urilu.

V teoretické části, jež má rozsah 10 stran, stručně a přehledně charakterizuje přípravu, vlastnosti a využití adamantanu, cyklodextrinů a cucurbiturilů. V poslední kapitole krátce popisuje podstatu vzniku komplexů typu hostitel-host. Je pro mne záhadou, proč zde nejsou prezentovány příklady syntéz zaměřených na kvarternizaci atomu dusíku pyridinu a na Zinckeho reakci. Nicméně text v tomto oddílu práce je napsán hezky, bez výrazných chyb. Snad jen bych upozornil, že na str. 12 v textu vztahujícím se ke **Schématu 3** je uvedeno, že pro hydrogenaci dicyklopentadienu byl použit jako katalyzátor oxid platnatý v ethanolickém prostředí, ovšem ve **Schématu 3** je katalyzátor PtO_2 v prostředí Et_2O . Na str. 20 v nepříliš vydařené **Tabulce 3** chybí u čtyřvázného atomu dusíku amonného kationtu a u bis-imidazoliové sloučeniny znaménko „+“. Vyskytuje se zde také řada typografických chyb typu nedodržování mezer mezi číslicí a jednotkou resp. procenty.

Na následujících 12-ti stranách autorka po deskripci přístrojového vybavení, kde je mimo jiné uveden dávno nepoužívaný IČ spektrometr, popisuje syntetické přístupy směřující k přípravě požadovaných sloučenin a výpisy jejich spektrálních charakteristik. Dále jsou rozebírány provedené experimenty směřované k přípravě ligandů a výsledky měření získaných z NMR a titračního kalorimetru při tvoření inkluzních komplexů. Tato část je graficky výrazně zdařilejší než část rešeršní, ovšem dojem z textového obsahu mám právě opačný. Vyskytuje se zde nespočetné množství drobných i velmi hrubých chyb! Pro představu o jejich vážnosti jich několik uvedu, a to:

- Na str. 23 je napsáno, že byl do aparatury zakomponován chlorkalciový nástavec pro zabránění srážení vodní páry uvnitř aparatury. Tato skleněná trubice naplněná CaCl_2 slouží k zabránění vstupu vzdušné vlhkosti do reakční aparatury. A navíc rozpouštědlem výchozích látek byl acetonitril, který je neomezeně mísitelný s vodou, tak mi není jasné, o jakém srážení byla řeč.
- Na str. 23 je špatně vypsáno ^1H NMR spektrum a v ESI-MS je u dvou rozdílných hodnot m/z uvedeno M^+ .
- Na str. 24 chybí teplota tání slouč. **2**. Dále je uveden výtěžek reakce 66 %, ale v diskusi (na str. 27) se píše, že výtěžek reakce 2,4-dinitrochlorbenzenu s bipyridinem byl velmi malý. Vypsané ESI-MS spektrum sloučeniny **2** jí nenáleží.
- Na str. 25 uvedené ESI-MS spektrum taktéž nepatří slouč. **3**. V uvedeném ^1H NMR spektru je příliš mnoho signálů, není u nich uveden počet atomů vodíků, ani interakční konstanty.
- Na str. 28 v nadpisu „Příprava 1-(2,4-dinitro)-pyridinium chloridu“ chybí „fenyl“.

V obecné rovině:

- V seznamu literatury je uvedeno celkem 21 literárních zdrojů, z nichž dva (lit. 18 a 20) nemají v textové části patřičný odkaz. Mimo jiné jsou reference nahodile do textu vkládány. Seznam použité literatury byl nejspíše vytvořen pomocí nějakého generátoru citací, je přehnaně podrobný a není jednotně zformátován.
- S grafickým vyobrazením molekulárních struktur a popisovaných reakcí jsem hrubě nespokojen. Působí na mne až rušivým dojmem, když se neustále střídají délky a tloušťky vazeb a velikost písma (jen tak pro představu - adamantanová klec na

str. 11 má 3,3 cm, zatímco na str. 31 má pouhých 7 mm). Několik schémat či obrázků bylo pravděpodobně odněkud (lit. není uvedena) zkopírována, což způsobilo jejich nehezky vzhled.

- Od str. 26 nejsou číslovány nadpisy.

Na základě uvedených výtek a mého celkového dojmu z přečtené bakalářské práce musím, bohužel, konstatovat, že studentka nezvládla interpretovat data získané z NMR a ESI-MS analýz a že text praktické části byl takzvaně šitý horkou jehlou. Ale i přes tyto skutečnosti dávám studentce šanci zlepšit si, alespoň u mě, svou reputaci a práci doporučuji k obhajobě.

Otázky oponenta bakalářské práce:

1. Na str. 15 v **Tabulce 2** jsou napsány rozměry vybraných cucurbiturilů. Proč, jakožto jediný, CB[10] má tyto hodnoty uvedené v rozmezí?
2. Na str. 16 uvádíte, že v roce 1905 Behrend a jeho kolektiv v r. 1905 poprvé popsali cucurbiturily jako produkty kondenzačních reakcí glykourilu a formaldehydu. Mohla byste dohledat, jaké produkty izolovali a jak je charakterizovali?
3. Mohla byste ukázat pravé ESI-MS spektrum sloučeniny **2** a současně se pokusit popsat její fragmentaci v ESI-MS spektrometru?
4. Na str. 29 ve **Schématu 10** znázorňujete zajímavou reakci. Dokázala byste vysvětlit její mechanismus?

Ve Zlíně dne 31. 5. 2018

podpis oponenta bakalářské práce