

Posudek oponenta diplomové práce

Příjmení a jméno studenta: Simona Káčerová
Studijní program: Chemie a technologie potravin
Studijní obor: Chemie potravin a bioaktivních látek
Zaměření
(pokud se obor dále dělí):
Ústav: Ústav chemie
Vedoucí diplomové práce: doc. Mgr. Robert Vícha, Ph.D.
Oponent diplomové práce: Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
Akademický rok: 2018/2019

Název diplomové práce:

Příprava bisimidazoliových solí odvozených od 4,9-disubstituovaného diamantanu

Hodnocení diplomové práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:

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

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

B - velmi dobře

Komentáře k diplomové práci:

Simona Káčerová se ve své diplomové práci zabývala syntézou sloučenin obsahujících diamantanový motiv, kdy cílem bylo připravit ligand s centrálním diamantanovým vazebným místem, na nějž jsou v polohách 4 a 9 napojeny, přes methylenové můstky, imidazoliové jednotky. Takto připravená bisimidazoliová sůl by následně mohla být použita jakožto ligand pro studium supramolekulárních komplexů s cyklodextriny a/nebo cucurbit[*n*]urily.

V teoretické části se Simona věnuje postupně stručné charakteristice diamantoidů a podrobnějšímu popisu samotného diamantanu, se zaměřením se na možnosti jeho syntézy a reaktivity. Poslední kapitola této části je věnována v literatuře toho času popsaným supramolekulárním komplexům, v nichž jako ligand vystupují sloučeniny na bázi diamantanu. Teoretická část je sepsána čtivou formou, s doplněním řady schémat a obrázků, jež případnému čtenáři značně ulehčí orientaci v dané problematice. Citováno je celkem 56 původních prací, což lze považovat za zcela dostačující. Přes výše uvedené mám k této části práce některé připomínky: na straně 14 je uvedena sloučenina hexamantan anglickým názvem (hexamantane); na str. 15 není zcela přesně uveden systematický název adamantanu (správně je tricyklo[3.3.1.1^{3,7}]dekan); v systematickém názvu diamantanu (str. 17) jsou mezi lokanty uvedenými horním indexem tečky namísto čárek; na též straně chybí násobící předpona „bis“ v názvu sloučeniny uvedené na Obrázku 3; na str. 21 je opět použito anglického názvosloví (phenyl namísto fenyl); dinitroxyderivát označeny na Schématu 8 (str. 24) jako látka **XI** je v textu (str. 23) uváděn jako sloučenina **XII**; na str. 26 se hovoří o diaminoderivátu **V** (správně by mělo asi být **XVIII**, viz Schéma 12); podobně na str. 27 je diaminoderivát **XXIV** v textu uveden pod číslovkou **IV**.

Následuje experimentální část s popisem použitého přístrojového vybavení, pracovních postupů vedoucích k přípravě uvažovaných sloučenin, jakož i výpisu spektrálních charakteristik získaných pomocí IČ, MS či NMR. K této části práce nemám žádné závažné připomínky. Jen bych autorce doporučil do budoucna namísto termínu „bod tání“ používat „teplota tání“, jelikož se de facto nejedná o „bod“ v pravém slova smyslu, nýbrž teplotní rozmezí. Dále bych doporučil uvádět výtěžky, v nichž byla získána dikarboxylová kyselina jakožto celá čísla, nikoliv na dvě desetinná místa.

V diskuzní části nejprve Simona seznamuje čtenáře s cíli práce, vhodně doplněnými schématem ilustrujícím syntetickou strategii, jež by měla vést k uvažované sloučenině. Následně jsou popsány provedené reakce, kdy není komentován jen samotný průběh dané syntézy, ale značný prostor je rovněž věnován komentáři výsledků získaných spektrálními metodami, pomocí nichž byla navrhována struktura připravených sloučenin. Vyjma standardně používaných schémat pro vyjádření dané reakce, se v této části práce vyskytuje řada obrázků ilustrujících výsledky provedených analýz, konkrétně se jedná o chromatogramy, hmotnostní spektra a NMR spektra, kteréžto jsou odpovídajícím způsobem v rukopisu okomentovány. Jako čtenář bych na Obrázku 13 (str. 52) uvítal dva chromatogramy, stávající, a pak další dokládající spotřebování výchozího diamantanu. Rovněž by bylo vhodné, kdyby bylo součástí rukopisu ¹H NMR spektrum, o němž se autorka zmiňuje na str. 52. Drobnou výtkou budiž rovněž absence popisku schémat uvedených na stranách 55 a 58, použití dvojího typu písma ve Schématu 18 (str. 51) či absence procentuálního zastoupení jednotlivých látek (integrální plochy píků) detekovaných pomocí GC-MS.

V neposlední řadě si neodpustím osobní postesek nad počtem kapitol, do nichž je práce rozdělena – 18 je opravdu mnoho, přičemž drobnou úpravou by bylo možné snížit počet kapitol přibližně na 7 (a z ostatních udělat „podkapitoly“).

Mám-li diplomovou práci Simony Káčerové hodnotit jako celek, pak mohu konstatovat, že se jedná o práci po stylistické i obsahové stránce zdařilou a to i přesto, že se nepodařilo dospět k uvažovanému ligandu, což ovšem není u prací tohoto typu, zvláště pak z oblasti organické syntézy, nikterak neobvyklé.

Diplomovou práci Simony Káčerové doporučuji k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm B – velmi dobře.

Otázky oponenta diplomové práce:

- 1) V kapitole 2.1 je popsána řada způsobů přípravy diamantanu. Používá se některý z nich při přípravě této sloučeniny v průmyslovém měřítku?
- 2) Rozumím-li to mu správně, pak byla dimerace 1,3,5-cykloheptatrienu prováděna za zvýšeného tlaku. Máte představu o tom, jaký tlak byl v reakční nádobě během provádění reakce? Jakým způsobem byly odebírány vzorky na GC-MS, pomocí níž byl průběh reakce monitorován?
- 3) V experimentální části uvádíte, že diamantan-1,4-dikarboxylová kyselina byla získána ve výtěžcích 65 % (str. 39), resp. 42 % (str. 40). V diskuzi se ovšem zmiňujete, že ze získaných NMR spekter nebylo strukturu těchto látek možné s jistotou určit. Co tedy představují výše uvedené hodnoty (výtěžky)?
- 4) Na straně 59 hovoříte o nutnosti optimalizace reakčních podmínek při přípravě 4-acetyldiamantanu s tím, že vznikající produkty budou odděleny pomocí sloupcové chromatografie. Jelikož tyto pravděpodobně nebudou „viditelné“ pod UV zářením, bude nezbytné jednotlivé frakce monitorovat jiným způsobem. Mohla byste se, prosím, pokusit nějaký navrhnout?

Ve Zlíně dne **04. 06. 2019**

Podpis oponenta diplomové práce