

Posudek oponenta diplomové práce

Příjmení a jméno studenta: Václav Kolařík

Studijní program: N0721A210005 / Chemie potravin a bioaktivních látek

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: RNDr. Lenka Dastychová, Ph.D.

Akademický rok: 2020/2021

Název diplomové práce:

Studium geometrie cyklodextrinových komplexů ve vodných roztocích pomocí nízkoteplotní NMR

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	C - dobře
6. Interpretace získaných výsledků a jejich diskuze	C - dobře
7. Formulace závěrů práce	A - výborně

Předloženou práci **Vyberte doporučení** k obhajobě a navrhuji hodnocení

C - dobře

Komentáře k diplomové práci:

Tato diplomová práce tématicky vybočuje z tradičně volených témat na Ústavu chemie. V obecné rovině se nevěnuje syntéze sloučenin, ale měření NMR spekter za nízkých teplot a následnému zpracování naměřených dat.

Teoretická část diplomové práce je asi z poloviny věnována všeobecnému úvodu do problematiky supramolekulární chemie. Následující část popisuje obecné základy NMR spektroskopie, která byla zásadní přístrojovou metodou pro tuto práci. Celý oddíl uzavírá kapitola pojednávající stručně o β -CD a jeho supramolekulárních komplexech. Obsahově velkoryse pojatá teoretická část je již z principu omezována stránkovým rozsahem diplomové práce. Proto by kontextu celého textu lépe prospělo, kdyby byla teoretická část zaměřená na konkrétní témata související s experimentálním obsahem práce. Některé z kapitol mohly být například věnovány metodice měření NMR spekter nebo jejich vyhodnocování. Konkrétní výhradu bych pak měla ke kapitole 1.4 (Možnosti analýzy supramolekulárních komplexů), která je poněkud nerovnoměrně strukturována. Dvě její podkapitoly jsou věnovány ITC a MS, dalším hojně užívaným přístrojovým metodám (RTG strukturní analýze a NMR), o kterých se zde autor rovněž zmiňuje, však analogické podkapitoly přiděleny nejsou. NMR spektroskopii sice autor věnuje celou následující kapitolu, ne však z pohledu možností zmiňované analýzy supramolekulárních systémů.

Experimentální část je členěna obvyklým způsobem na několik kapitol. V krátkosti uvedu několik poznámek k některým podkapitolám experimentální práce:

Kapitola č. 5 s názvem „Měření“ obsahuje výčet použitých sloučenin a navážky vzorků pro jednotlivá měření. Postrádám zde ale popis metodiky měření za nízkých teplot, použité druhy NMR experimentů, metodiku zpracování naměřených spektrálních dat a způsob zjišťování integrálních intenzit vybraných signálů.

Oddílům popisujícím v diskuzní části výsledky tří zvolených strategií sledujících vliv anorganických solí v systémech hostitel-host by prospěla přítomnost přehledných tabulek s výsledky provedených integrací NMR spekter. Všechny zjištěné číselné údaje je třeba složitě vyhledávat v textu. V prezentovaných obrázcích NMR spekter bych také uvítala zobrazení integrálních křivek, které by měly výpovědní hodnotu pro posouzení kvality provedené integrace.

Závěr práce shrnuje zjištěné poznatky a nastiňuje další vize. Kromě zmíněného bych zde očekávala i kritické zhodnocení použité metodiky pro integraci signálů v NMR spektrech a vyjádření se k přesnosti této metodiky.

V souhrnu konstatuji, že autor věnoval své diplomové práci velké množství času. Zejména měření NMR spekter za nízkých teplot vyžadovalo mnoho hodin a také pečlivost při nastavování optimálních podmínek pro měření.

Práci doporučuji k obhajobě.

Otázky oponenta diplomové práce:

1. Jaký byl postup v procesu úpravy transformovaných NMR spekter před integrací? Byla například prováděná fázová korekce nebo korekce základní linie ve spektrech? Pokud ano, popište konkrétní druh prováděných korekcí.
2. Proč jsou zjištěné vzájemné poměry ploch signálů v NMR spektrech uváděny někdy na celá čísla a někdy s přesností na jednu desetinu?
3. Jak by mohly přispět experimenty NOESY k přiřazení signálů 'dvojic atomů a/a', b/b'?

4. Bylo zjišťováno, jestli jsou všechny složky připravených roztoků zcela rozpuštěny i při snížení teploty na -15°C v průběhu prováděných měření? Pokud ano, jakým způsobem? Nedocházelo při teplotách nižších než 0°C k částenému vyloučení některé látky z roztoku?

Ve Zlíně dne **03. 06. 2021**

Podpis oponenta diplomové práce