

Posudek oponenta bakalářské práce

(EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta:	Ludmila Mudráková
Studijní program:	Chemie a technologie materiálů
Studijní obor:	Polymerní materiály a technologie
Zaměření (pokud se obor dále dělí):	
Ústav:	Ústav inženýrství polymerů
Vedoucí bakalářské práce:	doc. Mgr. Robert Vícha, Ph.D.
Oponent bakalářské práce:	Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
Akademický rok:	2020/2021

Název bakalářské práce:

Studium pomalých reorganizací supramolekulárních systémů pomocí NMR

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	A - výborně
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

A - výborně

Komentáře k bakalářské práci:

Lída Murdráková se ve své bakalářské práci věnovala studiu reorganizací supramolekulárních komplexů typu hostitel–host pomocí nukleární magnetické rezonance, kdy navržené experimenty vycházejí z práce publikované v roce 2015 v časopise Chemistry – A European Journal.

Předložená bakalářská práce ve své teoretické části, která je zpracována na 22 stranách, pojednává o kineticky a termodynamicky řízeném vzniku komplexů hostitel–host, dělení reorganizací dle jejich rychlosti, dále je věnována pozornost hostitelským molekulám, a sice cucurbit[*n*]urilům a cyklodextrinům. Ve třetí kapitole teoretické části se pak Lída věnuje popisu zajímavých, v odborné literatuře uvedených, samo se neorganizujících supramolekulárních systémů, jakož i možnostem využití cucurbit[*n*]urilů a cyklodextrinů v praxi. Poslední kapitola této části práce je věnována popisu ligandů, které byly použity pro studium reorganizace supramolekulárních komplexů typu hostitel–host v předložené bakalářské práci.

V praktické části se čtenář, po stručném seznámení se s použitým přístrojem a základními parametry nastavení experimentů, může začít pročitat výsledky, kterých Lída v průběhu práce v laboratoři dosáhla. Tato část práce, popisující celkem 10 provedených experimentů, je sepsána přehledně, kdy vyjma navážek a molárních poměrů uvádí autorka ke každému experimentu graf znázorňující koncentraci příslušných komplexů v čase a dále pak výpočet počáteční rychlosti dané reakce. Dosažené výsledky jsou pak přehledně sumarizovány v Tabulce 13 na str. 44.

Bakalářská práce je sepsána velmi čtivou formou, bez zásadních chyb a překlepů. Text je vhodně doprovázen pěknou a přehlednou grafikou, která mi, jako čtenáři, usnadňovala orientaci v popisované problematice.

Přesto se lze v rukopisu setkat s několika nedostatky, které si dovoluji na tomto místě uvést. Na straně 12 je použit anglický výraz „peak“, který bych doporučoval nahradit českým ekvivalentem „pík“. Na straně 11 následuje po citaci č. 3 citace č. 5, nikoliv 4. Kapitola 2.3 (str. 17) je na můj vkus zbytečně stručná. Na straně 19 se dopustila autorka překlepu, když uvádí „kyvety“ namísto „kavity“. Ve Schématech 3 a 4 (str. 20) bych volil místo hranatých závorek, závorky kulaté. Na Obrázku 16 (str. 24) je u prostřední struktury v popisku uvedeno „podání léku: orálně, kožně“, kdy by bylo vhodnější uvést „podání léku: orálně, transdermálně“. Za nešťastné pak považuji absenci kapitoly věnované přípravě vzorků pro jednotlivé experimenty a popis provedených experimentů. Ne snad, že by se tyto informace v rukopisu nenacházely, ale jsou uvedeny v diskuzní části (kap. 6.1 a 6.2), nikoliv v části experimentální.

Přes výše uvedené výtky považuji Lídinu bakalářskou práci za velice zdařilou, čtivou, přehlednou a srozumitelnou. Lída se popasovala s tématem, kterému se neměla možnost věnovat v rámci kteréhokoliv z doposud absolvovaných předmětů, nebojím se říci, výborně. Závěrem je mojí milou povinností konstatovat, že bakalářskou práci Lídy Murdrákové doporučuji k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm „A – výborně“.

Otázky oponenta bakalářské práce:

- 1) Na str. 16 uvádíte, že CDs mohou být tvořeny nekonečným množstvím D-glukopyranosových jednotek. Mohla byste mi, prosím, říci, jaký největší derivát CD je znám a dále pak u jakého největšího CD je popsána jeho schopnost vytvářet supramolekulární komplexy typu hostitel–host?
- 2) Na str. 17 uvádíte, že mezi makrocikly může docházet k vzájemnému „přitahování“. Mohla byste, prosím, uvést nějaké konkrétní příklady takových interakcí?
- 3) V kap. 3.1.3 a 3.1.4 popisujete samovolnou reorganizaci hostitel–host systémů. Nikde však není uvedeno, v jakém čase k daným reorganizacím dochází. Mohla byste, prosím, toto upřesnit?
- 4) Na Obrázku 21 (str. 35) je schematicky znázorněna reorganizace Vámi studovaných systémů. Domníváte se, že by v daných systémech mohlo během reorganizace docházet také ke vzniku komplexů typu $D_1/D_2@β\text{-CD}_2$?
- 5) Máte nějaké vysvětlení pro skutečnost, že v případě použití (2-hydroxypropyl)- $β\text{-CD}$ reorganizace neprobíhala?

Ve Zlíně dne **08. 06. 2021**

Podpis oponenta bakalářské práce

Posudek oponenta bakalářské práce

(EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta:	Ludmila Mudráková
Studijní program:	Chemie a technologie materiálů
Studijní obor:	Polymerní materiály a technologie
Zaměření (pokud se obor dále dělí):	
Ústav:	Ústav inženýrství polymerů
Vedoucí bakalářské práce:	doc. Mgr. Robert Vícha, Ph.D.
Oponent bakalářské práce:	Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
Akademický rok:	2020/2021

Název bakalářské práce:

Studium pomalých reorganizací supramolekulárních systémů pomocí NMR

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	A - výborně
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

A - výborně

Komentáře k bakalářské práci:

Lída Murdráková se ve své bakalářské práci věnovala studiu reorganizací supramolekulárních komplexů typu hostitel–host pomocí nukleární magnetické rezonance, kdy navržené experimenty vycházejí z práce publikované v roce 2015 v časopise Chemistry – A European Journal.

Předložená bakalářská práce ve své teoretické části, která je zpracována na 22 stranách, pojednává o kineticky a termodynamicky řízeném vzniku komplexů hostitel–host, dělení reorganizací dle jejich rychlosti, dále je věnována pozornost hostitelským molekulám, a sice cucurbit[*n*]urilům a cyklodextrinům. Ve třetí kapitole teoretické části se pak Lída věnuje popisu zajímavých, v odborné literatuře uvedených, samo se neorganizujících supramolekulárních systémů, jakož i možnostem využití cucurbit[*n*]urilů a cyklodextrinů v praxi. Poslední kapitola této části práce je věnována popisu ligandů, které byly použity pro studium reorganizace supramolekulárních komplexů typu hostitel–host v předložené bakalářské práci.

V praktické části se čtenář, po stručném seznámení se s použitým přístrojem a základními parametry nastavení experimentů, může začít pročitat výsledky, kterých Lída v průběhu práce v laboratoři dosáhla. Tato část práce, popisující celkem 10 provedených experimentů, je sepsána přehledně, kdy vyjma navážek a molárních poměrů uvádí autorka ke každému experimentu graf znázorňující koncentraci příslušných komplexů v čase a dále pak výpočet počáteční rychlosti dané reakce. Dosažené výsledky jsou pak přehledně sumarizovány v Tabulce 13 na str. 44.

Bakalářská práce je sepsána velmi čtivou formou, bez zásadních chyb a překlepů. Text je vhodně doprovázen pěknou a přehlednou grafikou, která mi, jako čtenáři, usnadňovala orientaci v popisované problematice.

Přesto se lze v rukopisu setkat s několika nedostatky, které si dovoluji na tomto místě uvést. Na straně 12 je použit anglický výraz „peak“, který bych doporučoval nahradit českým ekvivalentem „pík“. Na straně 11 následuje po citaci č. 3 citace č. 5, nikoliv 4. Kapitola 2.3 (str. 17) je na můj vkus zbytečně stručná. Na straně 19 se dopustila autorka překlepu, když uvádí „kyvety“ namísto „kavity“. Ve Schématech 3 a 4 (str. 20) bych volil místo hranatých závorek, závorky kulaté. Na Obrázku 16 (str. 24) je u prostřední struktury v popisku uvedeno „podání léku: orálně, kožně“, kdy by bylo vhodnější uvést „podání léku: orálně, transdermálně“. Za nešťastné pak považuji absenci kapitoly věnované přípravě vzorků pro jednotlivé experimenty a popis provedených experimentů. Ne snad, že by se tyto informace v rukopisu nenacházely, ale jsou uvedeny v diskuzní části (kap. 6.1 a 6.2), nikoliv v části experimentální.

Přes výše uvedené výtky považuji Lídinu bakalářskou práci za velice zdařilou, čtivou, přehlednou a srozumitelnou. Lída se popasovala s tématem, kterému se neměla možnost věnovat v rámci kteréhokoliv z doposud absolvovaných předmětů, nebojím se říci, výborně. Závěrem je mojí milou povinností konstatovat, že bakalářskou práci Lídy Mudrákové doporučuji k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm „A – výborně“.

Otázky oponenta bakalářské práce:

- 1) Na str. 16 uvádíte, že CDs mohou být tvořeny nekonečným množstvím D-glukopyranosových jednotek. Mohla byste mi, prosím, říci, jaký největší derivát CD je znám a dále pak u jakého největšího CD je popsána jeho schopnost vytvářet supramolekulární komplexy typu hostitel–host?
- 2) Na str. 17 uvádíte, že mezi makrocycly může docházet k vzájemnému „přitahování“. Mohla byste, prosím, uvést nějaké konkrétní příklady takových interakcí?
- 3) V kap. 3.1.3 a 3.1.4 popisujete samovolnou reorganizaci hostitel–host systémů. Nikde však není uvedeno, v jakém čase k daným reorganizacím dochází. Mohla byste, prosím, toto upřesnit?
- 4) Na Obrázku 21 (str. 35) je schematicky znázorněna reorganizace Vámi studovaných systémů. Domníváte se, že by v daných systémech mohlo během reorganizace docházet také ke vzniku komplexů typu $D_1/D_2@β\text{-CD}_2$?
- 5) Máte nějaké vysvětlení pro skutečnost, že v případě použití (2-hydroxypropyl)- $β\text{-CD}$ reorganizace neprobíhala?

Ve Zlíně dne **08. 06. 2021**

Podpis oponenta bakalářské práce