

## Posudek oponenta bakalářské práce

### (EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

<b>Příjmení a jméno studenta:</b>	Jiří Navrátil
<b>Studijní program:</b>	Chemie a technologie potravin
<b>Studijní obor:</b>	Chemie a technologie potravin
<b>Zaměření</b> (pokud se obor dále dělí):	
<b>Ústav:</b>	Ústav technologie potravin
<b>Vedoucí bakalářské práce:</b>	Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
<b>Oponent bakalářské práce:</b>	Ing. Petr Janovský
<b>Akademický rok:</b>	2020/2021

#### Název bakalářské práce:

Příprava ligandu na bázi diamantanu a studium jeho supramolekulárních vlastností

#### Hodnocení bakalářské práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:

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

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

**B - velmi dobře**

### **Komentáře k bakalářské práci:**

Bakalářská práce Jiřího Navrátila si kladla za cíl syntetizovat a charakterizovat ligand pro supramolekulární systémy na bázi 4,9 - disubstituovaného diamantanu. Takový ligand by měl sloužit pro studium supramolekulárních komplexů s makrocyclickými sloučeninami.

Na 27 stranách čtivého textu teoretické části předložené práce autor popisuje skupinu diamantoidů a také vlastnosti a známé syntézy samotného diamantanu. Dále seznamuje čtenáře se základní problematikou supramolekulární chemie, hostitel-host chemie a popisuje dvě skupiny makrocyclických sloučenin, se kterými plánuje v budoucnu testovat komplexační schopnosti cíleného ligandu. Stejně tak je zde výčet a základní popis instrumentálních metod vhodných k těmto typům charakteristiky supramolekulárních komplexů. V poslední kapitole teoretické části se autor zaměřuje na opublikované ligandy obsahující diamantan jako vazebný motiv ve své struktuře a jejich komplexy s cykloextriny a cucurbit[*n*]urilů. Celá teoretická část je provázena řadou obrázků a schémat, které značně ulehčují orientaci v textu. Ocitováno je zde 50 prací, což je vzhledem k rozsahu práce dostačující.

Po obvyklém představení přístrojů a instrumentálních metod následuje experimentální část bakalářské práce. Zde autor podrobně popisuje provedené syntézy vedoucí k cíleným sloučeninám. Přičemž ke všem úspěšně provedeným syntézám přikládá výčet NMR, MS a IČ spekter produktů a stejně tak i teploty tání a retenční časy. Chybějící MS spektrum a retenční čas pro sloučeninu číslo 4 vysvětluje autor v diskuzi nízkou těkavostí sloučeniny a tedy nemožností zjistit tyto hodnoty pomocí GC-MS.

V úvodu diskuzní části je popsán a odůvodněn smysl a cíl práce, jsou zde uvedeny fakta vedoucí k návrhu struktury cílové sloučeniny a syntéze vedoucí k tomuto ligandu. Dále jsou zde vysvětleny jednotlivé kroky každé z uvedených syntéz a to i s příslušnými NMR, MS a GC spektry. Každý reakční krok je okomentován, vysvětlen a je zde popsáno i počet opakování daných reakcí za stejných podmínek. Velkou částí diskuze jsou výše zmíněné výstupy spektrálních metod (zpracované na úrovni přesahující většinu bakalářských prací) a to i s detailními popisky. Oceňuji i porovnání spekter s literaturou v případě známé sloučeniny 2. Po úspěšné nitraci 4,9-difenyldiamantanu je zde popsána optimalizace purifikace surového produktu 4. Poslední částí je diskuze neúspěšné redukce 4,9-bis(nitrofenyl)diamantanu, přičemž oba dva vyzkoušené postupy (katalytická hydrogenace i redukce železem v kyselině chlorovodíkové) jsou dostatečně okomentovány. Neúspěšné reakce jsou vysvětleny nízkou rozpustností výchozí látky, která reakci značně znesnadňuje. Dále je zde popsáno několik dalších možností provedení redukce, které autor v budoucnu plánuje vyzkoušet.

I přes výbornou formu lze této práci vytknout pár chyb či poukázat na pár drobných nesrovnalostí, tyto nesnižují úroveň práce samotné, ovšem měli by autorovi pomoci posunout se v daných směrech.

V kapitole 1.1 je nevhodně použito spojení „hustota molekuly“.

V kapitole 1.2 by neměla být mezera mezi číslem a symbolem procenta, myslí-li autor „jednoprocentní výtěžek“. V kapitole 1.3 je toto spojení naopak použito správně, jelikož autor uvádí výtěžek jedno procento.

V kapitole 2.2.1 autor patrně zaměnil pojem hydrofilní za hydrofobní při popisu vnější strany molekul cyklodextrinů.

V kapitole 2.2.2 je nevhodně použito spojení „zvýšená elektronegativita“, vhodnější by byl například termín zvýšená elektronová hustota.

Na obrázcích číslo 17, 18, 19, 21, 22, 23 a 25 je špatně nakreslená struktura diamantanu.

Na obrázku číslo 15 chybí anion u nakreslené kvarterní amoniové soli.

Na obrázku číslo 26 je ve schématu uvedena teplota 100 °C i přes to, že reakce probíhala ve směsi metanol – kyselina chlorovodíková. Sic je v dané podkapitole experimentální části řečeno, že 100 °C byla teplota olejové lázně, je vhodné do schémat uvádět teploty uvnitř reakční směsi.

Celkový dojem z předložené bakalářské práce Jiřího Navrátila je více než uspokojivý. Stylistická i obsahová stránka práce je na úrovni a lze vidět, že autor této práci věnoval dostatečné množství času a energie. To platí pro samotný text, ale převážně i pro provedené experimenty, jelikož je očividné, že na daném tématu bylo provedené značné množství práce a to i přes to, že se autor nestihl dostat k cílené sloučenině, což je u tohoto typu absolventských prací naprosto běžné.

Bakalářskou práci Jiřího Navrátila doporučuji k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm B – velmi dobře.

#### **Otázky oponenta bakalářské práce:**

1. V kapitole 2.1 uvádíte, že hostitelská molekula většinou obsahuje kavitu, do které inkluduje molekulu hosta a tak je tvořen supramolekulární komplex. Vznikají supramolekulární komplexy jen tímto způsobem? Popřípadě jaké jiné možnosti uskupení supramolekulárních komplexů tedy jsou?
2. Ve stejné kapitole hovoříte o tom, že k popisu afinit hostů k hostitelům se využívá disociační konstanta ( $K_S$ ) a vazebná konstanta ( $K_A$ ), jaký je rozdíl mezi těmito dvěma veličinami?
3. V kapitole 7.4 uvádíte, že výchozí látka pro redukci pomocí železa v kyselině chlorovodíkové je velmi špatně rozpustná v alkoholech a předpokládáte, že produkt této reakce se bude srážet ve formě nerozpustné sraženiny. Vysvětlíte, proč myslíte, že produkt reakce (tedy primární amin) se bude v prostředí HCl srážet?
4. Jaký myslíte, že je účel posledního uvažovaného kroku plánované syntézy (kvarternizace) pro studium supramolekulárních komplexů vzniklého ligandu? A jaká by tedy mohla být alternativa kvarternizace?

Ve Zlíně dne **02. 06. 2021**

Podpis oponenta bakalářské práce