

## Posudek oponenta diplomové práce

**Příjmení a jméno studenta:** Bc. Jiří Navrátil  
**Studijní program:** Chemie potravin a bioaktivních látek  
**Studijní obor:**  
**Zaměření**  
(pokud se obor dále dělí):  
**Ústav:** Ústav chemie  
**Vedoucí diplomové práce:** doc. Ing. Michal Rouchal, Ph.D.  
**Oponent diplomové práce:** prof. Ing. Vladimír Šindelář, Ph.D.  
**Akademický rok:** 2022/2023

**Název diplomové práce:**  
Syntéza ligandu na bázi 4,9-disubstituovaného diamantanu a studium jeho supramolekulárních vlastností

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

Kritérium hodnocení	Hodnocení dle ECTS
1. Splnění zadání diplomové práce	A - výborně
2. Formální úroveň práce, včetně jazykového zpracování	C - dobře
3. Množství, aktuálnost a relevance použitých literárních zdrojů	A - výborně
4. Popis experimentů a metod řešení	C - dobře
5. Kvalita zpracování výsledků	B - velmi dobře
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:**

Předkládaná diplomová práce se zabývá syntézou jednoho derivátu diamantanu a studiem tvorby supramolekulárních komplexů mezi touto látkou a vybranými makrocycly.

Práce je standartně dělena na teoretickou, experimentální a diskuzní část. Teoretická část má 43 stran, je tedy relativně rozsáhlá. Přehledně uvádí do světa derivátů diamantanu, popisuje způsoby jeho substituce a možné způsoby jeho využití. V samostatné části se pak věnuje uplatnění diamantanových struktur v supramolekulární chemii. Dělení teoretické části, a především důraz na supramolekulární komplexy, je zcela v souladu s experimentálním obsahem práce.

Experimentální část obsahuje 4 strany, které popisují přípravu dvou diamantanových derivátů a způsoby charakterizace těchto látek či jejich supramolekulárních komplexů. Její součástí je i seznam použitých přístrojů. Zde měl být také uveden popis měření supramolekulárních vlastností pomocí NMR spektroskopie a izotermální titrační kalorimetrie (ITC). Ten lze více méně nalézt (alespoň pro NMR) v diskuzní části. Dále zde chybí základní charakterizace získaných krystalografických struktur včetně postupu přípravy krystalů.

Diskuzní část má 44 stran. Kromě syntézy se věnuje studiu interakcí mezi finálním diamantanovým derivátem 3 a několika homology cucurbiturilů a cyklodextrinů a to pomocí hned několika metod. Supramolekulární komplexy byly studovány v plynné fázi pomocí hmotnostní spektrometrie, v roztoku pomocí NMR a ITC a v pevném stavu pomocí rentgenové difraktometrie. Navíc byly některé komplexy zkoumány pomocí výpočetních metod.

Práce je sepsána srozumitelně, ale obsahuje i jistý počet nepřesností. Z nich vybírám následující: v legendě obrázků 64 – 66 je chybně uveden CB[7] na místo CB[8], na str. 87 se mluví o vymazání molekuly jódu na místo jodidu, termodynamické parametry v tabulkách 7 a 8 by měly být psány kurzívou. Pro snadnější orientaci by jistě pomohlo, pokud by signály NMR spekter ukazující titrace byly popsány nejen u spektra výchozího derivátu, ale i v případě vznikajících komplexů. Snad nejzásadnější připomínkou k práci je, že jsem nikde nenašel, proč byla práce zaměřena na zkoumání právě derivátu 3.

Na práci se mi líbí její zaměření na supramolekulární systémy diamantanu, které vynikají svou stabilitou především v případě komplexů s cucurbiturilů. Komplexů diamantanu je v literatuře popsáno jen relativně malé množství. V práci se podařilo připravit nový derivát diamantanu a především poprvé popsat některé unikátní supramolekulární komplexy. Zajímavý je především komplex s  $\beta$ -cyklodextrinem nebo ternární komplex, ve které derivát 3 interaguje zároveň s cucurbit[7]urilem (CB[7]) a  $\beta$ -cyklodextrinem.

Závěrem konstatuji, že se mi práce líbila, uvedené výtky nejsou závažné a významně nesnižují dobou úroveň práce.

### **Otázky oponenta diplomové práce:**

1. Zdůvodněte, proč jste se rozhodli připravit a zkoumat právě derivát 3 a ne nějaký jiný derivát diamantanu?
2. Upřesněte, jaké experimenty jste prováděl sám a co bylo uděláno vašimi kolegy.
3. Jak vyplývá z údajů na str. 65, látka 3 byla získána v čistotě jen přibližně 65%. O jaké nečistoty se jednalo? Alespoň nějaké informace o zdroji nečistot by bylo dobré doplnit. Byla čistota látky brána v potaz při výpočtu výtěžku? Čemu tedy výtěžek 12% odpovídá?
4. Ve stejném odstavci na str. 65, kde je diskutována nutnost korekce molární hmotnosti látky 3, je uvedeno následující: „Makrocyclické sloučeniny byly získány z komerčních zdrojů a jejich uváděná molární hmotnost byla následující:  $\beta$ -CD (1134,98 g·mol<sup>-1</sup>),  $\gamma$ -CD (1297,12 g·mol<sup>-1</sup>), CB[7] (1162,96 g·mol<sup>-1</sup>) a CB[8] (1329,10 g·mol<sup>-1</sup>).“ To působí dojmem, že k výpočtům navážek byly použity teoretické molární hmotnosti makrocycly. Je tomu tak?
5. Na straně 68 je uvedeno že: „Z posunu signálu He k nižšímu poli je zřejmé, že jsou atomy vodíku methylových skupin v kontaktu s portálem makrocycly.“ Při pohledu na obrázek 61 není jasné, jak by

k tomu mohlo dojít. Vzdálenost methylenových skupin od portálu je příliš velká. Můžete to vysvětlit?

V Brně dne **02.06.2023**

Podpis oponenta diplomové práce