

Posudek oponenta bakalářské práce (EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta:	Patricia Dulanská
Studijní program:	Materiály a technologie
Studijní obor:	
Zaměření (pokud se obor dále dělí):	Biomateriály a kosmetika
Ústav:	Ústav technologie tuků, tenzidů a kosmetiky
Vedoucí bakalářské práce:	Ing. Zdeňka Prucková, Ph.D.
Oponent bakalářské práce:	doc. Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
Akademický rok:	2023/2024

Název bakalářské práce:

Optimalizace syntézy strukturního motivu na bázi adamantanu a cyklodextrinu pro tvorbu supramolekulárních polymerních sítí

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	B - velmi dobře
4. Popis experimentů a metod řešení	A - výborně
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

A - výborně

Komentáře k bakalářské práci:

Bakalářská práce Patricie Dulanské je zaměřena na přípravu strukturního motivu na bázi adamantanu a cyklodextrinu, vzájemně spojených triazolovým kruhem, který by mohl být využit pro přípravu supramolekulárních polymerních sítí (SPS). Samotné zaměření práce považuji za vysoce zajímavé a perspektivní. Stejně tak je nutné podotknout, že se jedná o komplexní problematiku kladoucí na studentku vysoké nároky nejen po stránce teoretických znalostí z oblastí, se kterými se v rámci dosavadního studia nesetkala (instrumentální metody, supramolekulární chemie), ale také praktických dovedností, zejména co se prováděných syntéz týká.

Práce má klasické členění na teoretickou a experimentální (praktickou) část a oddíl věnující se diskuzi získaných výsledků.

V teoretické části se Patricie nejprve věnuje obecné charakterizaci supramolekulární chemie, kdy si jako příklad typické struktury vybrala molekulu DNA a také popisu komplexů typu hostitel–host. Dále se věnuje makrocyclickým sloučeninám z rodiny cyklodextrinů, jejich aplikaci v medicíně a také při tvorbě hydrogelů. V části praktické je nejprve popsáno použité přístrojové vybavení, dále pak detailní postupy přípravy jednotlivých sloučenin a jejich základní spektrální charakteristiky. Nejdůležitější částí práce je pak diskuze získaných výsledků, která je zpracována přibližně na 20 stranách a je vhodně doplněna řadou schémat ilustrujících realizované syntézy a protonových NMR spekter poskytujících důležité informace stran návrhu struktury izolovaných sloučenin. Až na drobné formulační nedostatky je diskuzní část sepsána nejen čtivou, ale zejména pak srozumitelnou formou.

Bakalářská práce je psána ve slovenském jazyce, kterému sice rozumím, ale vyjadřovat se k případným gramatickým nedostatkům (tak jako to běžně dělám u prací psaných v jazyce českém) si v tomto případě nedovolím. Zaměřím se tedy na drobné výtky, které k jednotlivým částem předložené práce mám.

Teoretická část:

- v kap. 1 (s. 11) jsou mezi nekovalentní interakce nesprávně řazeny také „hostitelské komplexy“, což je ovšem typ uskupení, jehož existence je nekovalentními interakcemi zabezpečována
- v kap. 1.2.1 (s. 17) je nesprávně uvedeno, že hostitelskou molekulou je „makromolekula“ ... vhodnější by bylo uvést „makrocyclická sloučenina“
- v kap. 1.2.2 (s. 18) je použita nevhodná formulace „jednoduchých/vyšších stechiometrických komplexů“ ... lépe snad „komplexů s (určitou) stechiometrií“
- na Obr. 11 (s. 21) je ve struktuře nimesulidu nesprávně navázána nitroskupina k fenylovému kruhu (místo $\text{NO}_2\text{—Ph}$ by mělo být $\text{O}_2\text{N—Ph}$)
- na s. 24 zmiňuje autorka chemické a fyzikální síťování hydrogelů ... vhodnější členění by, dle mého názoru, mělo být následující: a) kovalentní síťování, b) dynamické kovalentní síťování, c) fyzikální (supramolekulární) síťování (více viz *Chem. Rev.* **2021**, *121*, 10908)
- v teoretické části práce postrádám kapitolu věnující se popisu konkrétních příkladů SPS vznikajících na bázi komplexace cyklodextrinů a derivátů s adamantanovým motivem

Praktická část:

- v kap. 3 (s. 28) je nesprávně uveden jeden z rozměrů chromatografické kolony použité při GC-MS analýzách (místo 1,0 mm má být 1,0 μm)
- v kap. 4 je opakovaně používán termín „suchý diethylether/dichlormethan“ ... vhodněji snad „bezvodý“
- ve výpisech ^1H NMR spekter sloučenin 4–6 je uveden nesprávný počet atomů H: slouč. 4 (teor. 19 H, exp. 10 H), slouč. 5 (teor. 21 H, exp. 10 H), slouč. 6 (teor. 21 H, exp. 11 H)
- nerozumím opakovaně použité formulaci na s. 35 „přítomnost nezměněné sloučeniny 7“

Výsledky a diskuze:

- v kap. 6 (str. 37) je nesprávně uvedeno, že „TLC je instrumentální metoda“
- NMR spektra: a) signály v některých spektrech nejsou správně integrovány; b) signál s posunem cca 5,3 ppm (Obr. 22) nepatří atomům vodíku vody, ale dichlormethanu; c) ze spektra uvedeného na Obr. 23 lze jen velmi obtížně cokoli vyčíst, jelikož ve spektru dominují signály rozpouštědla a vody; d) osa x na Obr. 25 a 27 má nevhodný rozsah, takže není možné posoudit, zda se ve spektru signál atomu vodíku z triazolového kruhu nachází či nikoliv); e) signál označený na Obr. 27 jako CHCl_3 rozpouštědlo nenáleží (tento atom vodíku náleží signálu s posunem cca 7,3 ppm)
- na s. 46 autorka hovoří o atomu vodíku „nacházejícím se na 5. uhlíku“ ... bohužel čtenář nemá možnost se dovtípit, o jaký atom vodíku se jedná (toto se dozví až na s. 48)
- schémata: a) při psaní rukopisu diplomové práce bych doporučil používat ve schématech bezpatkové písmo (Arial); b) u reakčních schémat postrádám bližší informace o reakčních podmínkách (teplota, čas apod.)

Výše uvedené poznámky nepředstavují kritiku předloženého rukopisu, který považuji za velmi povedený, sepsal jsem je proto, aby se měla Patricie možnost s nimi seznámit a při přípravě rukopisu diplomové práce se těmto drobnostem pokusila vyvarovat.

Závěrem si dovoluji konstatovat, že Patricie Dulanská splnila zadání bakalářské práce, v laboratoři odvedla kus velmi poctivě a kvalitní práce, dle mého názoru, převyšující nároky kladené na práce tohoto typu a připravila rukopis, který lze považovat za velmi zdařilý. Zároveň oceňuji její odvalu pustit se do výzkumu z oblasti přípravy stavebních bloků pro konstrukci SPS, jelikož se jedná o problematiku komplexní a vysoce složitou.

Otázky oponenta bakalářské práce:

1) Na Obr. 11 (s. 21) jsou uvedena dvě léčiva používaná v klinické praxi v kombinaci s CDs. Z textu není patrné, s jakým typem CD se daná léčiva kombinují a zda dochází k tvorbě inkluzního komplexu. Prosím o objasnění.

2) Na s. 21 uvádíte, že se v klinické praxi „z přírodních derivátů nejčastěji používá β -CD, vzhledem k velikosti jeho kavity a nízké toxicitě. Jaké deriváty β -CD se v praxi používají častěji než samotný β -CD a proč?

3) V obecném popisu přístrojového vybavení (kap. 3) používáte zkratku GC-MS, ve výpisu spektrálních charakteristik připravených sloučenin (kap. 4) pak zkratku GC-EI-MS. Jedná se o stejný přístroj? A co znamená akronym „EI“?

4) V kap. 7.2 (s. 39) popisujete Swernovu oxidaci alkoholu **2**. Zmiňujete, že pomocí GC-MS byla potvrzena přítomnost karbaldehydu **3**. Byly v získaném chromatogramu pozorovány i jiné píky? Pokud ano, jaké bylo relativní zastoupení detekovaných látek a o jaké látky se jednalo?

5) K reakci popisované na v kap. 7.3 mám následující dotazy: a) o jaký typ reakce se jedná?; b) jaký je mechanismus reakce?; c) jaký typ produktu byste očekávala, reagoval by karbaldehyd **3** se sekundárním aminem?

6) V ^1H NMR spektru uvedeném na Obr. 23 (s. 42) je velmi výrazný signál s chemickým posunem cca 1,52 ppm nepřirazený žádnému z protonů sloučeniny **5**. Mohla byste, prosím, uvést, čemu daný signál náleží?

7) Můžete mi, prosím, prozradit, jakým směrem se bude, v experimentální rovině, rozpracovaný projekt dále vyvíjet?

Ve Zlíně dne **29. 5. 2024**

Podpis oponenta bakalářské práce