

## Posudek oponenta diplomové práce

<b>Příjmení a jméno studenta:</b>	<b>Bc. Tereza Dostálová</b>
<b>Studijní program:</b>	Chemie a technologie potravin
<b>Studijní obor:</b>	Technologie tuků, detergentů a kosmetiky
<b>Zaměření</b> (pokud se obor dále dělí):	
<b>Ústav:</b>	Ústav technologie tuků, tenzidů a kosmetiky
<b>Vedoucí diplomové práce:</b>	Ing. Roman Kimmel, Ph.D.
<b>Oponent diplomové práce:</b>	Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
<b>Akademický rok:</b>	2014/2015

### Název diplomové práce:

Triazolové deriváty chinolin-2,4(1H,3H)-dionů potenciálně využitelné v kosmetice

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

Kritérium hodnocení	Hodnocení dle ECTS
1. Splnění zadání diplomové 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>A - výborně</b>
4. Popis experimentů a metod řešení	<b>A - výborně</b>
5. Kvalita zpracování výsledků	<b>A - výborně</b>
6. Interpretace získaných výsledků a jejich diskuze	<b>B - velmi dobře</b>
7. Formulace závěrů práce	<b>A - výborně</b>

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

**A - výborně**

### **Komentáře k diplomové práci:**

Diplomová práce Terezy Dostálové pojednává o přípravě série nových triazolových derivátů chinolin-2,4-dionů a studiu jejich schopnosti inhibovat růst vybraných skupin mikroorganismů. Práce je členěna do tří hlavních oddílů, a sice teoretické části, diskuzi a části experimentální.

Teoretická část je postupně zaměřena na charakterizaci kosmetických přípravků, výčtu různých druhů mikroorganismů, jež se mohou v těchto výrobcích vyskytovat, dále jsou uvedeny způsoby konzervace kosmetických přípravků a v neposlední řadě je pojednáno o sloučeninách s triazolovým skeletem. Tato část práce je, dle mého názoru, zpracována pečlivě a srozumitelně, přesto k ní mám určité výtky. V textu se vyskytují občasné překlepy a nevhodné formulace, k nimž se na tomto místě nebudu blíže vyjadřovat. Za komentář však stojí absence objasnění akronymu "CFU" na str. 28, kdy tato zkratka není ani součástí příslušného seznamu, dále pak v kapitole 3.3, v níž je podán přehled několika skupin konzervačních látek bych velmi uvítal strukturní vzorce komentovaných sloučenin. Za nejslabší stránku teoretické části pak považuji kapitolu věnující se triazolovým derivátům. Tato je zpracována na 5 stranách, nicméně obsahuje řadu obrázků a samotný text tak zabírá odhadem 2 strany. Předpokládám bych, že této problematice bude věnována větší pozornost.

V praktické části diplomové práce autorka nejprve uvádí syntetické postupy vedoucí k přípravě uvažovaných sloučenin, přičemž průvodní kometnář je vhodně doprovázen nejen schématy, ale také výsledky spektrálních analýz (HRMS a 2D NMR). V další kapitole autorka uvádí výsledky mikrobiologického testování vybraných sloučenin, kdy k tomuto účelu použila dva typy metod, a sice diskovou a jamkovou difuzní metodu. V poslední kapitole tohoto oddílu autorka přehlednou formou uvádí výpisy spektrálních charakteristik všech připravených sloučenin. Praktická část DP se mi jeví jako velice zdařilá, přičemž je patrné, že autorka odvedla velký kus poctivé práce. Přesto mám k této části rukopisu některé kritické připomínky: a) ve schématu 6 (str. 43) není uvedena výchozí látka (8b) sloužící k přípravě látky 5d; b) syntéza látky 8b je komentována na straně 46, ale první zmínka by, dle mého názoru, měla být uvedena minimálně o 3 strany dříve - čtenáři nezainteresovanému do výzkumu to velmi znesnadňuje orientaci v textu; c) uvádění exaktních hmotností u 2D NMR spektra na Obrázku 9 je poněkud zbytečné; d) chybně znázorněná struktura sloučenin 5d a 8b na stranách 48, 70 a 77; e) v Tabulkách 3-12 je nesprávně uváděna sloučenina 8a (namísto 8b); f) na Obrázcích 12, 14-16 jsou nesprávně ilustrovány výsledky mikrobiologických testů látky 5b (namísto 5c), f) výsledky mikrobiologických testů by bylo, dle mého názoru, vhodnější uvádět ve dvou souhrnných tabulkách s uvedením aktivní/neaktivní, u aktivních látek uvádět jen hodnotu nejnižší koncentrace, v níž aktivitu vykazuje (to, že bude aktivní i v koncentraci vyšší je celkem logické); g) v experimentální části je jako jedna z metod uvedena technika GC-EI-MS, přičemž se domnívám, že u většiny látek byla, s ohledem na jejich strukturu, aplikována technika přímého nástřiku vzorku do hmotnostního spektrometru (DI-EI-MS); h) v seznamu literatury (cit. 59-61) je uveden nesprávný autorský kolektiv (za úsměvné lze považovat to, že oním autorem "navíc" je ve všech případech vedoucí této DP).

Přes výše uvedené výtky považuji diplomovou práci Terezy Dostálové za kvalitní. Autorka nejen že připravila ucelenou sérii nových triazolových derivátů s chinolinovým skeletem, navíc se zabývala studiem možných biologických účinků vybraných sloučenin. Rukopis jako celek na mě působí velmi přehledně a uceleně, interpretace získaných dat je pro daný typ práce odpovídající.

Závěrem lze konstatovat, že Tereza Dostálová splnila zadání diplomové práce a připravila rukopis, který lze označit za velice povedený. Proto také diplomovou práci doporučuji k obhajobě.

**Otázky oponenta diplomové práce:**

- 1) V kapitole 3.2.2 (s. 32) řadíte quaternium-15 (nesprávně pojmenované jako quartenium 15) a bronopol do skupiny aldehydů, resp. formaldehydů. Uvedte, prosím, strukturní vzorce a systematické názvy těchto sloučenin a zhodnoťte, zda je toto zařazení vhodné.
- 2) V kapitole 4.2 uvádíte 15 triazolových chemoterapeutik. Ve struktuře žádného z nich není obsažen chinolinový sketel. Jsou v literatuře popsány nějaké triazolové deriváty obsahující tento dusíkatý heterocyklus, u nichž byla pozorována biologická aktivita?
- 3) Na straně 38 popisujete "one pot click reakce". Při syntéze Vámi připravovaných látek jste však vycházela z organického azidu a používala tzv. "click reakci". Co bylo důvodem tohoto časově náročnějšího postupu a byly z Vaší strany provedeny nějaké pokusy o syntézu uvažovaných látek pomocí "one pot click reakce"?
- 4) Součástí ESI-HRMS spekter na str. 44 je strukturní vzorec s vypočítanou exaktní hmotností sloučenin 4a a 4b. Nejsou zde však uvedeny žádné jednotky. Jaké jednotky mohou být v MS použity pro vyjádření exaktní hmotnosti?
- 5) Ze všech Vámi testovaných sloučen vykazovala nejvyšší aktivitu látka 5c. Vzhledem ke struktuře této látky mám však obavu o její rozpustnost ve vodě. Pokuste se navrhnout řešení, které by mohlo tento problém pomoci odstranit.

V e Zlíně dne **1.6.2015**

Podpis oponenta diplomové práce