

## Posudek oponenta bakalářské práce

### (EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

<b>Příjmení a jméno studenta:</b>	<b>Bc. Berenika Kočí</b>
<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>	Mgr. Robert Vícha, Ph.D.
<b>Oponent bakalářské práce:</b>	Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
<b>Akademický rok:</b>	2017/2018

#### Název bakalářské práce:

Příprava a studium supramolekulárních vlastností 4,9-bis(4-aminofenyl)diamantanu

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

Kritérium hodnocení	Hodnocení dle ECTS
1. Splnění zadání bakalářské práce	<b>B - velmi dobře</b>
2. Formální úroveň práce, včetně jazykového zpracování	<b>A - výborně</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>A - výborně</b>
7. Formulace závěrů práce	<b>B - velmi dobře</b>

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

**A - výborně**

### **Komentáře k bakalářské práci:**

Bakalářská práce Bereniky Kočí pojednává o přípravě axiálně disubstituovaného diamantanu, klecového uhlovodíku se značným potenciálem pro přípravu vysoce afinitních supramolekulárních komplexů s cucurbit[n]urily. Cílová sloučenina, jejíž struktura je uvedena v rukopisu předložené práce, se mi jeví jako velmi zajímavá a nezbyvá, než se těšit až bude tato látka nasyntetizována a podrobena supramolekulárním studiím.

Práce je napsána velice čtivě, bez většího výskytu formálních chyb, rovněž je velice dobře zpracována po grafické stránce. Jednotlivé kapitoly jsou sespsány způsobem, z něhož usuzuji, že autorka práce studované problematice velmi dobře rozumí. Tím nemám na mysli jen samotnou supramolekulární chemii, ale také organickou chemii či interpretaci výsledků získaných pomocí metod strukturní analýzy.

Přes výše uvedené mám k práci několik drobných připomínek. Na straně 17 je uvedeno, že při přípravě diamantanu pomocí krakování vznikají monomethylované deriváty v polohách 1, 3 a 4. Na Obrázku 5 jsou ale uvedeny sloučeniny obsahující methylovou skupinu v polohách 2, 3 a 4. Na též straně autorka píše, že při použití této metody vznikají deriváty obsahující 14 až 16 atomů uhlíku, což by znamenalo, že vyjma monomethylovaných, jsou ve směsi přítomny i dimethylované deriváty. Na Obrázku 5 však tyto zmíněny nejsou. Na Obrázku 7 (str. 20) postrádám uvedení výtěžku, nebo alespoň vzájemných poměrů sloučenin při daných reakcích vznikajících. Na straně 26 je použita nevhodná formulace "Syntéza komplexu mezi 4,9-disubstituovaným diamantanem a CB7...", přestože se tyto typy komplexů nesyntetizují v pravém slova smyslu, nýbrž připravují prostým smícháním roztoků molekuly hosta a hostitele. V kapitole 4 (Přístroje a vybavení) jsou popsány podmínky měření <sup>13</sup>C NMR a IČ spekter, přestože výsledky těchto analýz nejsou uvedeny u žádné z připravených sloučenin a není tak zřejmé, zda skutečně byly provedeny. V pracovních postupech (kapitola 5 až 8) nejsou uvedeny žádné odkazy na literaturu (či jiné zdroje), podle nichž byly jednotlivé syntézy prováděny. Dále bych Berenice doporučil, aby v diskuzní části v budoucnu připravovaném rukopisu diplomové práce jednotlivé sloučeniny číslovala, což případnému čtenáři velmi usnadňuje orientaci v rukopisu jako takovém.

Závěrem si dovoluji konstatovat, že bakalářskou práci Bereniky Kočí považuji za vysoce nadprůměrnou, a to i přesto, že se Berenice nepodařilo připravit titulní sloučeninu. Proto doporučuji předloženo bakalářskou práci k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm A - výborně.

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

1) Objasněte důvody o několik řádů nižších asociačních konstant supramolekulárních komplexů derivátů diamantanu s cyklodextriny ve srovnání s cucurbit[n]urily.

2) Z výpisu MS spektra (str. 29) se zdá, že předmětná sloučenina (4,9-dichlordiamantan) obsahuje v molekule pouze jeden atom chloru. Jak si tuto skutečnost vysvětlujete?

3) Na straně 29 uvádíte, že 4,9-dichlordiamantan byl získán ve výtěžku 84 %. V diskuzi je ovšem napsáno, že produkty chlorace byly použity do dalších reakcí bez jakéhokoliv čištění. Co přesně tedy hodnota 84 % vyjadřuje?

4) Na Obrázku 16 jsou uvedena  $^1\text{H}$  NMR spektra dvou připravených sloučenin. A) Čím si vysvětlujete posunutí signálů "fenylových" atomů vodíku (označených písmeny "c" a "d") k vyšším hodnotám ppm poté, co byly do molekuly zavedeny dvě nitro skupiny? B) Z jakého důvodu se tyto signály nacházejí v  $^1\text{H}$  NMR spektru "dinitro" derivátu v jiném pořadí, než je tomu u nesubstituovaného "difenylového" derivátu?

V e Zlíně dne 30. května 2018

Podpis oponenta bakalářské práce