

Posudek oponenta bakalářské práce (EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta: Bagáři Michaela
Studijní program: Technologie a hodnocení potravin
(pokud se program dělí)
Specializace: Chemie a analýza potravin
Ústav: Ústav chemie
Vedoucí bakalářské práce: Ing. Roman Kimmel, Ph.D.
Oponent bakalářské práce: doc. Ing. Stanislav Kafka , CSc.
Akademický rok: 2024/2025Studium
Název bakalářské práce:
Studium reaktivity diethyl-malonátů s fenolem

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	C - dobře
3. Množství a relevance použitých literárních zdrojů	B - velmi dobře
4. Popis experimentů a metod řešení	B - velmi dobře
5. Kvalita zpracování výsledků	B - velmi dobře
6. Interpretace a diskuze výsledků	B - velmi dobře
7. Formulace závěrů práce	D - uspokojivě

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

B - velmi dobře

Komentáře k bakalářské práci:

Tato práce sestává ze dvou částí – teoretické, již představuje literární rešerše, která se jen okrajově dotýká tématu vyjádřeného názvem práce, a praktické, jež odpovídá tématu. Jako celek odpovídá zásadám pro vypracování stanoveným studentce vedoucím práce. Každá z obou částí by mohla být samostatnou bakalářskou prací – první z nich rešeršní a druhá experimentální.

Teoretická část s rozsahem 11 stran a spolu s předchozím úvodem obsahující 66 odkazů na literaturu pojednává v části zaměřené na biologické účinky derivátů kumarinu jen o sloučeninách s protinádorovými účinky. Vůbec není zmíněna kompetitivní inhibice vitaminů řady K, již se vyznačuje řada derivátů kumarinu, které tedy účinkují jako nepřímá antikoagulancia, a z nichž některé jsou využívány k profylaxi a léčení tromboembolických onemocnění. V části věnované syntézám kumarinů jsou představeny nejvýznamnější metody a hlavně v ní jsou významnější chyby. Například chybí dvojná vazba ve středním vzorci ve Schématu 2 (s. 20), o Perkinově reakci se říká, že zahrnuje bázi katalyzovanou reakci aromatických aldehydů s kyselinou octovou (s. 21, 3. ř. zdola), tvrdí se, že kumarin vzniká z kyseliny 2-hydroxyskořicové dekarboxylací a cyklizací (s. 21, předposlední a poslední řádek), ve Schématu 6 produkt neodpovídá reaktantům (s. 22), v posledním kroku syntézy znázorněné Schématem 9 je uvedena odstupující molekula vody místo hydroxidového aniontu.

V praktické části studentka referuje o úspěšných syntézách osmi 3-substituovaných 4-hydroxykumarinů, které již byly v literatuře popsány, kondenzací fenolu s ethylestery malonových kyselin a o neúspěšných pokusech o syntézu dvou derivátů stejnou metodou. Ve všech případech použila konvenční ohřev reakční směsi a v případě syntézy jednoho z těchto derivátů kumarinu prováděla pokusy i s mikrovlnným ohřevem, přičemž vedle žádaného produktu izolovala také dosud nepopsaný meziprodukt. Tři z připravených hydroxykumarinů se neúspěšně pokusila převést reakcí se sulfurylchloridem nebo chlorem na odpovídající 3-chlorchroman-2,4-diony. Jeden z nich převedla reakcí s bromem na směs, v níž pomocí NMR spekter identifikovala 3-bromchroman-2,4-dion.

Struktury připravených sloučenin jsou doloženy ^1H - a ^{13}C -NMR spektry a všechny jsou charakterizovány stanovenou teplotou tání a IČ spektrem, avšak nejsou uvedeny teploty tání známých sloučenin z literatury.

V popisu postupů je několik nedůsledností či nesrovnalostí, například v popisu syntézy 4-hydroxykumarinů (s. 34) je uvedeno jen látkové množství fenolu a chybí jeho hmotnost, v popisu syntézy sloučeniny **1j** (s. 37) je hmotnost fenolu uvedena s nevěrohodnou přesností, v popisu pokusu o chloraci za použití SO_2Cl_2 (s. 38) je objem činidla uveden s nevěrohodnou přesností, přičemž není uvedeno látkové množství, a dioxan použitý jako rozpouštědlo charakterizován nadbytečnými údaji.

Závěr nedává informaci o tom, co nového práce přináší, ani srovnání dosažených výsledků s publikovanými výsledky jiných autorů. Ani v diskusní části není uvedeno, příprava kterých 3-substituovaných 4-hydroxykumarinů kondenzací fenolu s esterem substituované kyseliny malonové je již popsána v literatuře, srovnání vlastních výtěžků s publikovanými výtěžky látek připravených stejnou nebo jinou reakcí či zda výsledky pokusů s použitím mikrovlnného ohřevu naznačují, že po optimalizaci podmínek by použití mikrovlnného ohřevu mohlo být výhodnější než postup s konvenčním ohřevem.

Celkově konstatuji, že studentka odvedla více než dostačující objem dobré práce v kategorii bakalářských prací a předloženou bakalářskou práci doporučuji k obhajobě.

Otázky oponenta bakalářské práce:

1. Jaká je správná podoba Schématu 6 na straně 22?
2. Jaké změny postupu vedly ke zvýšení výtěžku sloučeniny **1c** ze 3 % na 13 % a výtěžku sloučeniny **1g** z 12 % na 50 %?
3. Na základě čeho byly přiřazeny signály ve ^{13}C -NMR spektrech sloučenin?
4. Čím se lišilo provedení vašeho pokusu o převedení 3-fenyl-4-hydroxykumarinu na 3-chlor-3-fenyl-chroman-2,4-dion od postupů chlorace téhož nebo i jiných 3-substituovaných 4-hydroxykumarinů sulfurylchloridem popsáných v literatuře?

Ve Zlíně dne 30. května 2025

Podpis oponenta bakalářské práce