

Posudek oponenta bakalářské práce (EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta: Šimon Janků
Studijní program: Technologie a hodnocení potravin
(pokud se program dělí)
Specializace: Chemie a analýza potravin
Ústav: Ústav chemie
Vedoucí bakalářské práce: doc. Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
Oponent bakalářské práce: Ing. Petr Janovský, Ph.D.
Akademický rok: 2024/2025

Název bakalářské práce:

Studium tvorby supramolekulárních komplexů vybraných derivátů na bázi adamantanu s cyklodextriny a cucurbit[n]urily v plynné fázi

Hodnocení bakalářské práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:

Kritérium hodnocení	Hodnocení dle ECTS
1. Splnění zadání bakalářské práce	B - velmi dobře
2. Formální úroveň práce, včetně jazykového zpracování	B - velmi dobře
3. Množství a relevance použitých literárních zdrojů	C - 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	B - velmi dobře

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

B - velmi dobře

Komentáře k bakalářské práci:

Bakalářská práce Šimona Janků se zabývá studiem tvorby supramolekulárních komplexů typu hostitel–host mezi disubstituovanými pyrrolo[2,3-d]pyrimidiny obsahujícími adamantanový skelet a dvěma skupinami makrocyclických sloučenin – cyklodextriny (α -, β -, γ -) a cucurbit[7]urilem. Cílem práce bylo zjistit, zda a jaké komplexy tyto látky vytvářejí v plynné fázi, a to pomocí hmotnostní spektrometrie s elektrosprejovou ionizací a iontovou pastí. Práce kombinuje přehlednou teoretickou část s rozsáhlou experimentální sekcí, ve které jsou systematicky testovány interakce mezi zvolenými ligandy a makrocykly v plynné fázi.

Přestože je práce rozsáhlá a napsaná čtivě, obsahuje několik drobných nedostatků, které snižují její odbornou hodnotu. Především je třeba vytknout, že některé závěry jsou vyvozeny pouze na základě intenzity signálu v hmotnostním spektru, například tvrzení, že CB7 a β -CD „se projevily jako vhodné makrocykly“ vychází jen z přítomnosti signálů odpovídajících komplexům což není dostatečné pro potvrzení. Dále není vždy jasně odlišeno, co je skutečně experimentálně doloženo a co je pouze spekulativní interpretace. V teoretické části se vyskytují drobné faktické chyby, či překlepy. Některé pasáže by si rovněž zasloužily jazykovou úpravu pro větší srozumitelnost a stručnost. Zápis referencí je v pár příkladech nekonzistentní.

Na druhé straně je třeba ocenit pečlivost, s jakou se autor věnoval rešerši literatury, především v oblasti supramolekulární chemie a fyziky nekovalentních interakcí. Experimentální část je rozsáhlá, přehledně strukturovaná a reflektuje snahu systematicky porovnat chování různých ligandů i makrocyclů. Práce má také aktuální vědecký kontext a tematicky navazuje na výzkum probíhající na daném pracovišti, což je pro bakalářskou úroveň velmi cenné.

Celkově lze práci považovat za přínosnou, s dobrým teoretickým základem a slušným experimentálním zpracováním, a to i přes výše uvedené výhrady. Práci doporučuji k obhajobě a hodnotím ji známkou **B – velmi dobře**.

Otázky oponenta bakalářské práce:

1. Většina pozorovaných komplexů vykazuje stechiometrii 1:1. Proč jste tedy v měřených vzorcích použil poměr složek 1:3 (L:CD/CB[7])? Jaká byla koncentrace ligandů ve měřených vzorcích a jaký vliv může mít koncentrace na zastoupení jednotlivých komplexů?
2. Za předpokladu, že zkoumané makrocykly (CD/CB[7]) obsazují adamantanová vazebná místa, musí jejich portály interagovat s přítomnými funkčními skupinami (alkohol, keton). Jak očekáváte, že tyto skupiny budou interagovat s portály daných makrocyclů, jaké typy interakcí mohou nastat a jak by se mohly projevit na stabilitě komplexů v plynné fázi?
3. Ve směsích s CB[7] byly u ligandů L1 a L2 pozorovány komplexy složené ze dvou molekul ligandu a jedné molekuly CB[7] ($L_2@CB[7]$). Naproti tomu ve spektrech směsí ligandů L3 a L4 s CB[7] převažovaly komplexy jednoho ligandu se dvěma molekulami makrocyclu ($L@CB[7]_2$). Jak vysvětlujete tyto výrazné rozdíly mezi dvěma skupinami strukturálně podobných ligandů? Jaké uspořádání těchto komplexů lze předpokládat?

Ve Zlíně dne **30. května 2025**

Podpis oponenta bakalářské práce