

Posudek oponenta bakalářské práce (EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

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

Název bakalářské práce:

Syntéza substituovaných 2-amino-1,3,4-thiadiazolových ligandů pro cucurbit[*n*]urilové supramolekulární systémy

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

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

A - výborně

Komentáře k bakalářské práci:

Andrea Bobčíková se ve své bakalářské práci věnuje přípravě série 1,3,4-thiadiazolových derivátů a základnímu studiu jejich supramolekulárního chování. Tematicky tak práce spadá do oblasti supramolekulární chemie, která představuje jeden ze základních výzkumných směrů, kterým je na Ústavu chemie dlouhodobě věnována pozornost.

Práce má klasické členění na teoretickou, experimentální a diskuzní část, jejichž vzájemný poměr se mi jeví jako přiměřený. Práce je sepsána srozumitelnou a čtivou formou, je doplněna o řadu přehledných schémat a dalších grafických výstupů (např. NMR či ESI-MS spektra), jejichž kvalita je příkladná. Ačkoliv se autorka věnovala přípravě sloučenin pomocí „one-pot“ reakcí, je zřejmé, že odvedla značný kus práce a připravila sérii sloučenin, které se mi jeví jako zajímavý odrazový můstek pro návrh a přípravu další série podobných derivátů obsahujících ve své struktuře více vazebných míst pro makrocyclické sloučeniny.

V práci se lze setkat s některými drobnými nesrovnalostmi, formulačními a gramatickými nedostatky, kterým by bylo dobré se při sepisování diplomové práce vyvarovat. Níže uvádím některé náměty a připomínky, jejichž cílem není předloženou práci kritizovat, nýbrž dát autorce podněty k zamyšlení, zejména směrem k přípravě rukopisu diplomové práce.

1) V některých případech jsem jako čtenář postrádal znázornění strukturních vzorců sloučenin, vystupujících v komentovaných reakcích, např. Lawenssonovo činidlo či Nafion NR50 (s. 14).

2) Ve schématech zpravidla nejsou uvedeny výtěžky ilustrovaných reakcí, případně chybí vysvětlení substituentů „R“ (Obr. 4b, s. 15).

3) Několik komentářů mám k Obr. 5: a) s ohledem na roky citovaných publikací by měla být schémata (a komentář k nim) uvedena v opačném pořadí; b) uvádění některých substituentů R je zmatečné, např. 3,4-Cl₂C₆H₃ (3,4-Cl₂Ph), PhCH₂ (Bn), CCH₂CH₂CN (???), 4-pyridine (4-pyridin), 2-HOC₆H₄ (2-OHPh) apod.

4) Názvy některých komentovaných sloučenin nejsou v souladu s českou nomenklaturou: (s. 16) 4-bromobenzohydrazidu (správně 4-brom), (s. 17) 2,3-dichloro... (správně 2,3-dichlor), v názvech připravených aminium-chloridů by měla být uvedena pomlčka, (s. 26) α-D-gluko... (správně α-D-gluko...), (s. 46 a 56) ethanový řetězec (!) – správně má být „ethylenový řetězec“.

5) citace nejsou uváděny vzestupně, kdy se např. po citaci 10 objevují citace 71–73, následované citacemi 68–70 a poté 11–17 (s. 16 a 17) apod.

6) Znázornění obecné struktury R1COOX na Obr. 7 považuji za nesprávné, jelikož: a) obecně se symbol „X“ používá pro znázornění halogenů; b) má-li výše uvedená struktura znázorňovat v práci jmenované funkční deriváty karboxylových kyselin (halogenidy, esterz, anhydridy a nitrily), není to v případě halogenidů a nitrilů možné, jelikož obsahují jeden nebo žádný atom kyslíku.

7) V českém jazyce se nepoužívají k zápisu desetinných čísel desetinné tečky (s. 17, 19–21), ale desetinné čárky.

8) Domnívám se, že uvedení jednotek „μg/ml⁻¹“ (s. 21) není správné, totéž platí pro uvádění jednotky „μ“ v ESI-MS spektrech (správně má být „u“).

9) V textu postrádám odkazy na Obr. 20, 21, 23, 24, 26 a 28.

10) Pro číslování série aminium-chloridů bych zvážil (z důvodu lepší přehlednosti) číslování vycházející z jejich volných bází, např. **1** a **1**·HCl atd.

11) Je škoda, že syntetické postupy komentované na s. 43 a 48 nejsou graficky znázorněny pomocí reakčních schémat (zvýšila by se tím přehlednost této části práce).

12) Nedomnívám se, že je v textu správně vysvětlen pozorovaný typ chemické výměny (pomalá výměna) během NMR titrací studovaných směsí připravených aminium-chloridů s CB6.

Přes výše uvedené jsem přesvědčen, že Andrea Bobčíková odvedla v laboratoři kus opravdu poctivé práce a připravila rukopis svojí kvalitou (výzkumnou, nikoliv stylistickou) značně převyšující standardy na práce tohoto typu kladené. Předloženou práci doporučuji k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm **A – výborně**.

Otázky oponenta bakalářské práce:

- 1) Na s. 19 a 20 popisujete biologickou aktivitu sloučenin I a II. Příliš nerozumím použitým formulacím „v množství 0,5 µg slouč. I“ a „ve vyšší dávce 8 mg byla slouč. II“. Jaké byly skutečné koncentrace, při nichž byla biologická aktivita daných sloučenin studována?
- 2) Proč jste do reakční směsi při přípravě sloučenin popisované v kap. 5.2 přidávala po 1 až 2 hodinách destilovanou vodu a dále ponechala reakční směs refluxovat? Jakou roli tedy v reakcích voda plnila?
- 3) Proč nebyl připraven aminium-chlorid také ze sloučeniny **4**?
- 4) V ^1H NMR spektru sloučeniny **4** (Obr. 31, s. 44) se v alifatické části spektra (vedle DMSO) vyskytuje jeden minoritní signál. Máte ponětí o jeho původu?
- 5) Co máte na mysli „samokondenzací acetonu“, kterou zmiňujete na s. 48? Prosím o detailní vysvětlení, včetně reakčního mechanismu.
- 6) K syntéze sloučenin popisovaných v kap. 5.4 mám následující dotazy:
 - a) Jaký byl poměr vznikajících *E/Z* izomerů?
 - b) Pokoušela jste se o purifikaci získané směsi produktů?
 - c) Byla ověřena čistota výchozích kyselin?
 - d) Čím si vysvětluje skutečnost, že z čistých výchozích látek (byly-li skutečně čisté) vznikla směs *E/Z* izomerů?
- 7) Jakým způsobem byly spočítány navrhované hodnoty vazebných konstant pro systémy **11**·CB₆, **12**·CB₆ a **15**·CB₆?
- 8) Mohla byste, prosím, nastínit směr, kterým se bude pokračování této práce ubírat?

Ve Zlíně dne **28. května 2025**

Podpis oponenta bakalářské práce