

Posudek oponenta bakalářské práce (EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta:	Lukáš Žáček
Studijní program: (pokud se program dělí)	Technologie a hodnocení potravin
Specializace:	Chemie a analýza potravin
Ústav:	Ústav chemie
Vedoucí bakalářské práce:	doc. Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
Oponent bakalářské práce:	doc. Mgr. Robert Vícha, Ph. D.
Akademický rok:	2024/2025
Název bakalářské práce:	Příprava monosustituovaného ligandu na bázi diamantanu

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:

Práce Lukáše Žáčka (dále jen autor) zapadá do kontextu aktivit výzkumné skupiny směřujících k přípravě a popisu supramolekulárního chování modelových ligandů odvozených od objemných lipofilních uhlovodíkových klecí. V tomto konkrétním případě jsou předmětem zájmu monosubstituované deriváty diamantanu. Autor v práci vychází sice z již publikovaných postupů a z komunikace s výzkumnou skupinou Dr. Šekutor, ale osvojení si daných postupů a jejich adaptace v podmínkách místních laboratoří vytváří cenný základ pro studium těchto komerčně nedostupných látek.

Předložený text je obvykle strukturován na teoretickou, experimentální a diskuzní část. Rozsah a náplň těchto pasáží odpovídá formálním i věcným nárokům na bakalářskou absolventskou práci. Grafická a typografická úroveň práce je nadprůměrná. Nalezl jsem jen drobné nedostatky, jejichž seznam, pro jeho krátkost, si dovoluji zde uvést, zejména jako pomůcku pro vylepšení případných dalších autorových textů.

str. 23 – autor pravděpodobně omylem uvádí jako oxidační činidlo kyselinu 3-chlorbenzoovou namísto 3-chlorperoxybenzoové

str. 24, a všude jinde – (toto je vážná výhrada) autor nesprávně pojmenovává klíčové látky jeho práce jako hydroxydiamantany přičemž správný název je diamantan-#-ol

str. 26 – v popisu reakce pravděpodobně zaměnil autor kyselinu propenovou za propionovou

str. 28 – sousloví „hydrofobní interakce“ je nesprávné. Nic takového neexistuje. Hydrofobní efekt je důsledek termodynamické rovnováhy různě solvatovaných komponent, nikoliv specifická lokalizovatelná interakce mezi molekulárními entitami.

str. 28 – „self-assembly“ a „host-guest“ jsou rovnocenné koncepty v rámci supramolekulární chemie, což z textu není zřejmé.

str. 30 – popis „ideálního hosta“ není zcela přesný. Ideální objem části hosta uvnitř kavity je menší než samotný objem kavity právě o prázdný prostor mezi molekulami vody (pro systémy ve vodě), zabírajícími prostor rovný objemu kavity.

str. 31 – etymologie slova „cucurbituril“ je poněkud zjednodušená. Jde o složení dvou slov: cucurbit – odkazuje na dýňovitý tvar základních homologů, uril – odkazuje na klíčovou komponentu, močovinu, ze které jsou tyto látky připravovány. Každý C_{Bn} obsahuje 2n molekul močoviny.

str. 31 – molekula cucurbiturilů zcela jistě není kruhově symetrická.

str. 31 – nesprávné použití pojmu „formální náboj“. Formální náboj je teoretický konstrukt umožňující formální zápis chemických struktur a nemusí odpovídat skutečné elektronové hustotě v daném místě molekuly. Autor pravděpodobně měl na mysli (v kontextu dané věty) „alespoň parciální kladný náboj“.

všude v práci – jediná typografická nedokonalost, kterou jsem odhalil, spočívá v používání pomlčky „-“, namísto znaku pro mínus „-“.

Dále jsem v práci narazil na několik věcných nejasností, které prosím dovysvětlit během obhajoby na základě níže položených dotazů.

Závěrem konstatuji, že práce Lukáše Žáčka je velmi zdařilá a doporučuji ji k obhajobě. Doufám, že autor bude v podobném duchu pokračovat a na základě dosud získaných dovedností a poznatků významně přispěje k výzkumu diamantanových supramolekulárních ligandů.

Otázky oponenta bakalářské práce:

Diskuzi nad prací si dovoluji iniciovat následujícími otázkami:

- 1) Autor uvádí na straně 27 možnost převést karboxylovou kyselinu na amin přes odpovídající karbamát. Prosím o návrh a stručný komentář detailního schématu/mechanismu této transformace.
- 2) Prosím o vysvětlení, proč náhrada hydroxyskupiny za brom selhala Appeleho postupem, ale proběhla bez problémů pomocí thionylbromidu (mechanismus obou reakcí).
- 3) Na straně 48 autor uvádí, že rychlé zpracování reakční směsi vyžadovalo „čtyři ruce“. Prosím o podrobnější popis této operace.
- 4) Jak byly vizualizovány diamantanoly na TLC?
- 5) Prosím o upřesnění reakčních podmínek na straně 41: reflux v thionylbromidu s bodem varu 68 °C při 90 °C.
- 6) Thionylbromid byl pro příslušné bromace použit i jako rozpouštědlo, tedy ve velikém přebytku. Byla zvažována/vyzkoušena možnost jeho recyklace oddestilováním z reakční směsi?
- 7) Byla zvažována/vyzkoušena možnost odbarvit roztok surového produktu promytím vodným roztokem redukčního činidla, například $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$?
- 8) Na straně 49 popisuje autor chlazení směsi pomocí acetonitrilové lázně. Pokud nejde o omyl, proč byl zvolen acetonitril?

V Louče, dne 27. května 2025

Podpis oponenta bakalářské práce