

Posudek oponenta bakalářské práce

(EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta:	Michaela Matejková
Studijní program:	Technologie a hodnocení potravin
Studijní obor/specializace:	Chemie a analýza potravin
Zaměření (pokud se obor dále dělí):	
Ústav:	Ústav chemie
Vedoucí bakalářské práce:	doc. Mgr. Robert Vícha, Ph.D.
Oponent bakalářské práce:	Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
Akademický rok:	2021/2022

Název bakalářské práce:
Supramolekulární komplexy kyseliny gibberellové

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

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

A - výborně

Komentáře k bakalářské práci:

Michaela Matejková se ve své bakalářské práci věnovala studiu vzniku supramolekulárních komplexů kyseliny gibberellové (GA_3) se třemi základními zástupci hostitelských molekul z rodiny cyklodextrinů (CD), konkrétně s α -CD, β -CD a γ -CD, které se vzájemně liší počtem glukopyranosových jednotek tvořících jejich strukturu, a tudíž také objemem jejich kavity. Supramolekulární chování daných směsí bylo studováno pomocí nukleární magnetické rezonance (NMR), izotermální titrační mikrokolorimetrie (ITC) a hmotnostní spektrometrie s elektrosprejovou ionizací (ESI-MS).

V teoretické části práce, která čítá přibližně 20 stran, na nichž se Michaela postupně věnuje stručně charakteristice jednotlivých druhů rostlinných hormonů a cyklodextrinů. Tato část práce je sepsána čtivou formou, je doprovázena řadou strukturních vzorců komentovaných typů sloučenin a Michaela se v ní odkazuje na 125 literárních zdrojů, což značí, že s literaturou pracovala velmi pečlivě. Následuje část popisující použité přístroje a metody, jakož i postupy přípravy vzorků pro jednotlivé typy analýz. Jádrem práce je část diskuzní, v níž Michaela postupně komentuje výsledky získané pomocí NMR, ITC a ESI-MS experimentů, které prováděla s cílem ověřit schopnost GA_3 tvořit hostitel–host komplexy se třemi zástupci makrocyclů z rodiny cyklodextrinů. V této části práce je komentář získaných výsledků velmi vhodně doprovázen velmi pěkně zpracovanými grafickými výstupy, zejména pak NMR spektra, záznamy z ITC a jedním obrázkem ESI-MS spektra. Způsob, kterým Michaela získané výsledky komentuje považuji, s ohledem na obtížnost tématu, které řešila a teoretické znalosti nabyté v rámci dosavadního studia, za velmi zdařilý. Získané výsledky jsou pak srozumitelnou formou shrnuty v závěru předložené práce.

K práci jako takové mám několik drobných výtek a doporučení, přičemž některé z nich si dovoluji uvést níže. V rukopisu se vyskytuje řada překlepů a formulačních nepřesností, kterým by se bylo dobré do budoucna, např. při sepisování práce diplomové, vyvarovat. Jako příklad lze uvést: „nepříjemných vůni“ (str. 9), „v letech 1926“ (str. 12), „biologický aktivní“ (str. 14) „příkladem umělého CK“ (lépe „syntetického“, str. 16), „6-benzylaminopurin“ (namísto „purin“, str. 16), „tepelně stabilitě“ (namísto „tepelné“, str. 29), atp. Celou práci se line nepřesnost ve znázornění struktury derivátů GA , kdy vazba CO—O spojující atomy C4 a C10 je nesprávně vedena nad vazbou C1—C10, namísto pod ní. Data použitá v grafu prezentovaném na Obrázku 16 (str. 28) byla převzata ze zdroje pocházejícího z roku 1997 a dost možná neodpovídají současnému stavu. Za nesprávný považuji název kapitoly 4.2.3. Poslední drobná připomínka, kterou si dovoluji uvést se týká umístění předložek na koncích řádků, které působí při čtení rukopisu rušivě.

Přes výše uvedené nedostatky si dovoluji tvrdit, že bakalářská práce Michaely Matejkové bezesporu splňuje požadavky na práce tohoto typu kladně. Je sepsána čtivou formou a doplněna řadou pečlivě zpracovaných obrázků. Získané výsledky, jakož i závěry z nich vycházející jsou interpretovány vhodnou formou. Michaela Matejková odvedla kus poctivé práce, kterou přetavila do podoby zdařilého rukopisu. Z těchto důvodů si dovoluji doporučit předloženou bakalářskou práci k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm A – výborně.

Otázky oponenta bakalářské práce:

- 1) Jaký je rozdíl ve struktuře aldehydu GA_{12} a jeho metabolického produktu (GA_{12}), který, jak uvádíte na straně 15, není biologicky aktivní?

- 2) Sloučenina 25 (GR24) je na Obr. 11 znázorněna v podobě racemátu, přestože se vyskytuje ve formě dvou enantiomerů. V jaké podobě je tato látka používána? A jsou popsány enantioselektivní metody její syntézy?
- 3) Na základě výsledků jakých metod (jaké metody) navrhl K. J. Freudenberg a jeho kolegové cyklickou strukturu CD?
- 4) Na straně 25 hovoříte o syntéze modifikovaných CD s cílem získat sloučeniny s lepšími fyzikálně-chemickými vlastnosti. Neuvádíte však žádné příklady. Mohla byste mi, prosím, říci, který derivát CD vykazuje nejvyšší rozpustnost ve vodném prostředí?
- 5) Z NMR titrace GA_3 roztokem β -CD a γ -CD je patrné, že zatímco v případě β -CD docházelo v při přidávání makrocyklu do směsi k mírným, ale přesto zřetelným posunům některých signálů pocházejících z GA_3 (např. „a“, „b“, „f“ či „o“) k vyšším hodnotám ppm, v případě titrace γ -CD tomu bylo naopak (signály se posouvaly k nižším hodnotám ppm). Mohla byste, prosím, tuto skutečnost blíže vysvětlit?
- 6) ITC měření byla, jak je patrné z uvedených obrázků, v některých případech (např. směsí s α -CD a γ -CD) zatížena značnou chybovostí (rozptyl bodů kolem modelové funkce). Proto bych se rád zeptal: i) kolikrát byla daná měření prováděna? ii) jak si vysvětlujete skutečnost, že nejvyšší hodnota K byla naměřena u směsi GA_3 s α -CD (v pufru)?

Ve Zlíně dne **06. 06. 2022**

Podpis oponenta bakalářské práce

Posudek oponenta bakalářské práce

(EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta:	Michaela Matejková
Studijní program:	Technologie a hodnocení potravin
Studijní obor/specializace:	Chemie a analýza potravin
Zaměření (pokud se obor dále dělí):	
Ústav:	Ústav chemie
Vedoucí bakalářské práce:	doc. Mgr. Robert Vícha, Ph.D.
Oponent bakalářské práce:	Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
Akademický rok:	2021/2022

Název bakalářské práce:
Supramolekulární komplexy kyseliny gibberellové

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

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

A - výborně

Komentáře k bakalářské práci:

Michaela Matejková se ve své bakalářské práci věnovala studiu vzniku supramolekulárních komplexů kyseliny gibberellové (GA_3) se třemi základními zástupci hostitelských molekul z rodiny cyklodextrinů (CD), konkrétně s α -CD, β -CD a γ -CD, které se vzájemně liší počtem glukopyranosových jednotek tvořících jejich strukturu, a tudíž také objemem jejich kavity. Supramolekulární chování daných směsí bylo studováno pomocí nukleární magnetické rezonance (NMR), izotermální titrační mikrokalorimetrie (ITC) a hmotnostní spektrometrie s elektrosprejovou ionizací (ESI-MS).

V teoretické části práce, která čítá přibližně 20 stran, na nichž se Michaela postupně věnuje stručně charakteristice jednotlivých druhů rostlinných hormonů a cyklodextrinů. Tato část práce je sepsána čtivou formou, je doprovázena řadou strukturních vzorců komentovaných typů sloučenin a Michaela se v ní odkazuje na 125 literárních zdrojů, což značí, že s literaturou pracovala velmi pečlivě. Následuje část popisující použité přístroje a metody, jakož i postupy přípravy vzorků pro jednotlivé typy analýz. Jádrem práce je část diskuzní, v níž Michaela postupně komentuje výsledky získané pomocí NMR, ITC a ESI-MS experimentů, které prováděla s cílem ověřit schopnost GA_3 tvořit hostitel–host komplexy se třemi zástupci makrocyclů z rodiny cyklodextrinů. V této části práce je komentář získaných výsledků velmi vhodně doprovázen velmi pěkně zpracovanými grafickými výstupy, zejména pak NMR spektry, záznamy z ITC a jedním obrázkem ESI-MS spektra. Způsob, kterým Michaela získané výsledky komentuje považuji, s ohledem na obtížnost tématu, které řešila a teoretické znalosti nabyté v rámci dosavadního studia, za velmi zdařilý. Získané výsledky jsou pak srozumitelnou formou shrnuty v závěru předložené práce.

K práci jako takové mám několik drobných výtek a doporučení, přičemž některé z nich si dovoluji uvést níže. V rukopisu se vyskytuje řada překlepů a formulačních nepřesností, kterým by se bylo dobré do budoucna, např. při sepisování práce diplomové, vyvarovat. Jako příklad lze uvést: „nepříjemných vůni“ (str. 9), „v letech 1926“ (str. 12), „biologický aktivní“ (str. 14) „příkladem umělého CK“ (lépe „syntetického“, str. 16), „6-benzylaminopurin“ (namísto „purin“, str. 16), „tepelně stabilitě“ (namísto „tepelně“, str. 29), atp. Celou práci se line nepřesnost ve znázornění struktury derivátů GA , kdy vazba CO—O spojující atomy C4 a C10 je nesprávně vedena nad vazbou C1—C10, namísto pod ní. Data použitá v grafu prezentovaném na Obrázku 16 (str. 28) byla převzata ze zdroje pocházejícího z roku 1997 a dost možná neodpovídají současnému stavu. Za nesprávný považuji název kapitoly 4.2.3. Poslední drobná připomínka, kterou si dovoluji uvést se týká umístění předložek na koncích řádků, které působí při čtení rukopisu rušivě.

Přes výše uvedené nedostatky si dovoluji tvrdit, že bakalářská práce Michaely Matejkové bezesporu splňuje požadavky na práce tohoto typu kladně. Je sepsána čtivou formou a doplněna řadou pečlivě zpracovaných obrázků. Získané výsledky, jakož i závěry z nich vycházející jsou interpretovány vhodnou formou. Michaela Matejková odvedla kus poctivé práce, kterou přetavila do podoby zdařilého rukopisu. Z těchto důvodů si dovoluji doporučit předloženou bakalářskou práci k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm A – výborně.

Otázky oponenta bakalářské práce:

- 1) Jaký je rozdíl ve struktuře aldehydu GA_{12} a jeho metabolického produktu (GA_{12}), který, jak uvádíte na straně 15, není biologicky aktivní?

- 2) Sloučenina 25 (GR24) je na Obr. 11 znázorněna v podobě racemátu, přestože se vyskytuje ve formě dvou enantiomerů. V jaké podobě je tato látka používána? A jsou popsány enantioselektivní metody její syntézy?
- 3) Na základě výsledků jakých metod (jaké metody) navrhl K. J. Freudenberg a jeho kolegové cyklickou strukturu CD?
- 4) Na straně 25 hovoříte o syntéze modifikovaných CD s cílem získat sloučeniny s lepšími fyzikálně-chemickými vlastnostmi. Neuvádíte však žádné příklady. Mohla byste mi, prosím, říci, který derivát CD vykazuje nejvyšší rozpustnost ve vodném prostředí?
- 5) Z NMR titrace GA_3 roztokem β -CD a γ -CD je patrné, že zatímco v případě β -CD docházelo v při přidávání makrocyklu do směsi k mírným, ale přesto zřetelným posunům některých signálů pocházejících z GA_3 (např. „a“, „b“, „f“ či „o“) k vyšším hodnotám ppm, v případě titrace γ -CD tomu bylo naopak (signály se posouvaly k nižším hodnotám ppm). Mohla byste, prosím, tuto skutečnost blíže vysvětlit?
- 6) ITC měření byla, jak je patrné z uvedených obrázků, v některých případech (např. směsí s α -CD a γ -CD) zatížena značnou chybovostí (rozptyl bodů kolem modelové funkce). Proto bych se rád zeptal: i) kolikrát byla daná měření prováděna? ii) jak si vysvětlujete skutečnost, že nejvyšší hodnota K byla naměřena u směsi GA_3 s α -CD (v pufru)?

Ve Zlíně dne **06. 06. 2022**

Podpis oponenta bakalářské práce