

## Posudek oponenta diplomové práce

**Příjmení a jméno studenta:** Hromádková Aneta  
**Studijní program:** N2901 Chemie a technologie potravin  
**Studijní obor:** Chemie potravin a bioaktivních látek  
**Zaměření**  
(pokud se obor dále dělí):  
**Ústav:** Ústav chemie  
**Vedoucí diplomové práce:** doc. Mgr. Robert Vícha, Ph.D.  
**Oponent diplomové práce:** doc. Ing. Stanislav Kafka, CSc.  
**Akademický rok:** 2019/2020

**Název diplomové práce:**

Příprava tritopických bipyridiniových ligandů a studium jejich supramolekulárních vlastností

**Hodnocení diplomové práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:**

Kritérium hodnocení	Hodnocení dle ECTS
1. Splnění zadání diplomové práce	<b>B - velmi dobře</b>
2. Formální úroveň práce, včetně jazykového zpracování	<b>C - dobře</b>
3. Množství, aktuálnost a relevance použitých literárních zdrojů	<b>B - velmi dobře</b>
4. Popis experimentů a metod řešení	<b>C - dobře</b>
5. Kvalita zpracování výsledků	<b>A - výborně</b>
6. Interpretace získaných výsledků a jejich diskuze	<b>A - výborně</b>
7. Formulace závěrů práce	<b>B - velmi dobře</b>

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

**B - velmi dobře**

### **Komentáře k diplomové práci:**

Práce je členěna do kapitol, Teoretická část, Praktická část, Diskuse a Seznam použité literatury.

V teoretické části jsou uváděny dosud publikované poznatky (24 strany, 71 odkaz). Podle zadání měla diplomantka provést rešerši na téma využití bipyridiniových strukturních motivů v supramolekulární chemii. Oproti zadání má teoretická část širší záběr – pojednává také o solích se [4,4'-bipyridin]-1,1'-diiiovými kationty z hlediska jejich fyzikálních vlastností, syntézy a využití mimo supramolekulární chemii, cucurbiturilech, cyklodextrinech a supramolekulárních komplexech obecně. Ve schématu, které má vysvětlovat mechanismus Zinckeovy reakce na s. 15 jsou chyby a odkaz na literaturu ke zmíněnému mechanismu neodpovídá. Supramolekulárním útvarům s bipyridiniovými resp. bipyridindiiiovými ionty jsou věnovány 3 strany s 10 odkazy, přičemž text podkapitoly Supramolekulární polymery zabírající v nich přibližně jednu stranu není zcela srozumitelně napsaný.

V kapitole Praktická část jsou popsány přípravy šesti kvarterních solí odvozených od 4,4'-bipyridylu, z nichž dvě byly známé meziproducty v syntéze zbývajících čtyř dosud v literatuře nepopsaných sloučenin. Připravené sloučeniny jsou charakterizovány teplotami tání, IČ spektry, ESI-MS a NMR spektry. V názvech všech uvedených sloučenin (**1-6**) jsou chyby – neodpovídají pravidlům současného českého názvosloví a některé neodpovídají žádné struktuře neodporující čtyřvalnosti atomů uhlíku. Odkaz (69) na teplotu tání sloučeniny **1** v literatuře (s. 39) je chybný – má být 71. V popisu <sup>1</sup>H-NMR spektra této sloučeniny nejsou uvedeny interakční konstanty. V popisu přípravy sloučeniny **3** je nesrovnalost – uvádí se, že směs byla refluxována při 50 °C, přičemž reakčním médiem byl acetonitril, jehož normální teplota varu je 80 °C; navíc není uvedeno, kde byla tato teplota naměřena (v lázni nebo v reakční směsi?). Nejsou uvedeny popisy experimentálních postupů zaměřených na průzkum tvorby inkluzních sloučenin **2-4** a **6** s β-CD, CB7 a CB8 (NMR titrace, kalorimetrická měření).

V části kapitoly Diskuse věnované přípravě solí je mj. podrobně rozebírána interpretace jejich <sup>1</sup>H-NMR spekter. Nikde v práci jsem však nepostřehl zmínku ohledně přiřazení signálů v <sup>13</sup>C-NMR spektrech, které je v Praktické části uvedeno pro sloučeniny **2-4** a **6**. Překvapivá je pravděpodobná přítomnost trijodidových aniontů v solích **3** a **4**. V části věnované studiu tvorby supramolekulárních komplexů jsou přehledně a přesvědčivě interpretovány posuny signálů v <sup>1</sup>H-NMR spektrech sloučenin **2-4** a **6** a v tabulkách jsou uvedeny hodnoty termodynamických veličin získaných z kalorimetrických měření. Žádný z inkluzních komplexů však nebyl izolován.

V závěru se v rozporu s diskusí uvádí prokázání tvorby inkluzních komplexů NMR titrací zkoumaných sloučenin nejen s β-CD a CB7, ale i s CB8. Formálním nedostatkem seznamu použité literatury je nejednotný formát položek. Součástí práce je také seznam zkratk, pro jejichž malý počet příliš nevádí, že nejsou abecedně seřazeny. Některé použité zkratky ale chybějí (např. ITC) a chybně je uvedena sloučenina, již vyjadřuje zkratka TEMPO.

Na různých místech se v práci vyskytují názvy neodpovídající pravidlům českého odborného názvosloví (např. kvarterfenyl, koncovky -óza v názvech cukrů a -áza v názvu enzymu) a pravopisné chyby nebo překlepy (např. bipyridin, bipyridil). V případě dvou možností pravopisu by měla být v práci používána jen jedna (diskuse nebo diskuze v obsahu shodně s nadpisem kapitoly).

### **Otázky oponenta diplomové práce:**

1. Jak je definován pojem kompetitor?
2. Jaké jsou název a struktura sloučeniny označované zkratkou TEMPO?
3. Máte vysvětlení pro přítomnost iontů těžších než kationty solí **1-6**, které se projeví v jejich ESI-MS?
4. Na základě čeho byly přiřazeny signály ve <sup>13</sup>C-NMR spektrech sloučenin **2-4** a **6**?

Ve Zlíně dne **03. 06. 2020**

Podpis oponenta diplomové práce