

Posudek oponenta bakalářské práce

(EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta:	Andrea Jarošová
Studijní program:	Chemie a technologie potravin
Studijní obor:	Technologie a řízení v gastronomii
Zaměření (pokud se obor dále dělí):	
Ústav:	Ústav analýzy a chemie potravin
Vedoucí bakalářské práce:	Ing. Zdeňka Prucková, Ph.D.
Oponent bakalářské práce:	Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
Akademický rok:	2018/2019

Název bakalářské práce:

Stanovení termodynamických parametrů vybraných komplexů s cyklodextriny pomocí isothermální mikrokalorimetrie

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	A - výborně
7. Formulace závěrů práce	A - výborně

Předloženou práci **Vyberte doporučení** k obhajobě a navrhuji hodnocení

A - výborně

Komentáře k bakalářské práci:

Bakalářská práce Andrei Jarošové je zaměřena do oblasti supramolekulární chemie, tedy multidisciplinárního oboru zahrnujícího v sobě organickou, anorganickou, analytickou či fyzikální chemii. V případě předložené bakalářské práce byla studována schopnost tří ligandů na bázi adamantantanu, vzájemně se lišících počtem vazebných míst, vytvářet supramolekulární komplexy s β -cyklodextrinem vázaným na dva biopolymery, a sice chitosan a hyaluronan. Supramolekulární chování jednotlivých systémů bylo studováno pomocí isotermální titrační kalorimetrie, což je vysoce sofistikovaná a citlivá analytická metoda poskytující kompletní popis termodynamických parametrů daného systému. Konkrétně se jedná o stechiometrii komplexu (N), rovnovážnou vazebnou konstantu (K_a) a entalpii (ΔH). Další termodynamické veličiny, entropie (ΔS) a Gibbsova energie (ΔG) pak mohou být ze získaných dat dopočítány.

V teoretické části bakalářské práce popisuje autorka biopolymery chitosan a hyaluronan, dále se zabývá charakteristikou cyklodextrinů a v poslední kapitole této části použitou analytickou metodou, tedy isotermální titrační mikrokolorimetrií. Členění jednotlivých kapitol v teoretické části uvedených je logické, text je přehledný a srozumitelný. Tato část práce je doprovázena řadou obrázků a celkem 31 citacemi na odbornou literaturu. Přes výše uvedené mám k této části práce několik více či méně závažných připomínek. V textu je použito několik ne zcela vhodných formulací. Jako příklad lze uvést tyto: „struktura chitosanu byla identifikována pomocí rentgenových paprsků...“ (str. 12); „Jeho aminoskupiny mají primární i sekundární hydroxylové skupiny v polohách...“ (str. 13); „...zachycena v dutině cyklodextrinu hostitelské molekuly“ (str. 28); „Po každé injekci ligandu...“ (str. 33). Dále si dovoluji autorce vytknout přítomnost neslabičných předložek na koncích řádků, absenci odkazů na obrázky doprovázející text (kap. 1 a 2) či opomnění atomu kyslíku ve výčtu prvků tvořících strukturu chitosanu (str. 12). Kapitola 3.2 se mi pak jeví jako příliš stručná.

Praktická část je rozdělena na dvě části, kdy v první z nich je podán výčet použitého přístrojového vybavení, modifikovaných biopolymerů a ligandů, jakož i postup přípravy roztoků použitých pro samotné měření. Druhá kapitola této části je pak zaměřena na komentář výsledků plynoucích z provedených experimentů, vhodně doplněný o graf ilustrující daný experiment a tabulku obsahující stanovované parametry (N, K_a , ΔH , ΔS). Ke komentáři získaných výsledků nemám žádné výtky a považuji jej odpovídající ve vztahu k tomuto typu práce. Drobnou připomínku bych měl ke vzorcům ligandů (str. 38 a 39), konkrétně pak k vazebným úhlům a způsobu napojení adamantanových jednotek na imidazoliové skelety. V neposlední řadě bych jako čtenář uvítal sumarizační přehlednou tabulku s uvedením nejvýznamnějších parametrů (N a K_a) komplexů jednotlivých ligandů s použitými hostitelskými molekulami.

Závěrem je mojí milou povinností konstatovat, že bakalářská práce Andrei Jarošové splňuje běžné standardy na práce tohoto typu kladené. Navíc si dovoluji vyzdvihnout odvalu autorky pustit se do studia problematiky, se kterou se v rámci bakalářského studia v žádném z absolvovaných předmětů neměla možnost seznámit, kdy z rukopisu samotného jsem nabyl přesvědčení, že autorka studované problematice porozuměla.

Bakalářskou práci Andrei Jarošové doporučuji k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm „A – výborně“.

Otázky oponenta bakalářské práce:

- 1) Na str. 21 uvádíte, že NMR, RTG a molekulové modelování poskytují důkaz o existenci uspořádané struktury molekul roztoku hyaluronanu, což je, s ohledem na to, že se každá z uvedených metod používá pro studium struktury molekul v jiné fázi, poněkud zavádějící. Mohla byste to, prosím, uvést na pravou míru?
- 2) Na str. 25 hovoříte o tom, že se hyaluronan vyskytuje, mimo jiné, v synoviální tekutině. Mohla byste, prosím, tento termín blíže specifikovat?
- 3) Na str. 27 uvádíte, že jsou strukturně popsány cyklodextriny obsahující až 39 glukózových jednotek. Věděla byste jaké nejmenší cyklodextriny byly do dnešního dne popsány?
- 4) Při výpočtu průměrné molární hmotnosti CH/HA- β -CD jste jako jednu z hodnot použila molární hmotnosti modifikovaných β -CD, a sice 1382,24 (str. 41) a 1575,39 (str. 45). Mohla byste, prosím, blíže specifikovat, jakým sloučeninám tyto molární hmotnosti náleží?

Ve Zlíně dne **23. 05. 2019**

Podpis oponenta bakalářské práce

Posudek oponenta bakalářské práce

(EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta:	Andrea Jarošová
Studijní program:	Chemie a technologie potravin
Studijní obor:	Technologie a řízení v gastronomii
Zaměření (pokud se obor dále dělí):	
Ústav:	Ústav analýzy a chemie potravin
Vedoucí bakalářské práce:	Ing. Zdeňka Prucková, Ph.D.
Oponent bakalářské práce:	Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
Akademický rok:	2018/2019

Název bakalářské práce:

Stanovení termodynamických parametrů vybraných komplexů s cyklodextriny pomocí isothermální mikrokalorimetrie

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	A - výborně
7. Formulace závěrů práce	A - výborně

Předloženou práci **Vyberte doporučení** k obhajobě a navrhuji hodnocení

A - výborně

Komentáře k bakalářské práci:

Bakalářská práce Andrei Jarošové je zaměřena do oblasti supramolekulární chemie, tedy multidisciplinárního oboru zahrnujícího v sobě organickou, anorganickou, analytickou či fyzikální chemii. V případě předložené bakalářské práce byla studována schopnost tří ligandů na bázi adamantantanu, vzájemně se lišících počtem vazebných míst, vytvářet supramolekulární komplexy s β -cyklodextrinem vázaným na dva biopolymery, a sice chitosan a hyaluronan. Supramolekulární chování jednotlivých systémů bylo studováno pomocí isothermální titrační kalorimetrie, což je vysoce sofistikovaná a citlivá analytická metoda poskytující kompletní popis termodynamických parametrů daného systému. Konkrétně se jedná o stechiometrii komplexu (N), rovnovážnou vazebnou konstantu (K_a) a entalpii (ΔH). Další termodynamické veličiny, entropie (ΔS) a Gibbsova energie (ΔG) pak mohou být ze získaných dat dopočítány.

V teoretické části bakalářské práce popisuje autorka biopolymery chitosan a hyaluronan, dále se zabývá charakteristikou cyklodextrinů a v poslední kapitole této části použitou analytickou metodou, tedy isothermální titrační mikrokolorimetrií. Členění jednotlivých kapitol v teoretické části uvedených je logické, text je přehledný a srozumitelný. Tato část práce je doprovázena řadou obrázků a celkem 31 citacemi na odbornou literaturu. Přes výše uvedené mám k této části práce několik více či méně závažných připomínek. V textu je použito několik ne zcela vhodných formulací. Jako příklad lze uvést tyto: „struktura chitosanu byla identifikována pomocí rentgenových paprsků...“ (str. 12); „Jeho aminoskupiny mají primární i sekundární hydroxylové skupiny v polohách...“ (str. 13); „...zachycena v dutině cyklodextrinu hostitelské molekuly“ (str. 28); „Po každé injekci ligandu...“ (str. 33). Dále si dovoluji autorce vytknout přítomnost neslabičných předložek na koncích řádků, absenci odkazů na obrázky doprovázející text (kap. 1 a 2) či opomnění atomu kyslíku ve výčtu prvků tvořících strukturu chitosanu (str. 12). Kapitola 3.2 se mi pak jeví jako příliš stručná.

Praktická část je rozdělena na dvě části, kdy v první z nich je podán výčet použitého přístrojového vybavení, modifikovaných biopolymerů a ligandů, jakož i postup přípravy roztoků použitých pro samotné měření. Druhá kapitola této části je pak zaměřena na komentář výsledků plynoucích z provedených experimentů, vhodně doplněný o graf ilustrující daný experiment a tabulku obsahující stanovované parametry (N, K_a , ΔH , ΔS). Ke komentáři získaných výsledků nemám žádné výtky a považuji jej odpovídající ve vztahu k tomuto typu práce. Drobnou připomínku bych měl ke vzorcům ligandů (str. 38 a 39), konkrétně pak k vazebným úhlům a způsobu napojení adamantanových jednotek na imidazoliové skelety. V neposlední řadě bych jako čtenář uvítal sumarizační přehlednou tabulku s uvedením nejvýznamnějších parametrů (N a K_a) komplexů jednotlivých ligandů s použitými hostitelskými molekulami.

Závěrem je mojí milou povinností konstatovat, že bakalářská práce Andrei Jarošové splňuje běžné standardy na práce tohoto typu kladené. Navíc si dovoluji vyzdvihnout odvahu autorky pustit se do studia problematiky, se kterou se v rámci bakalářského studia v žádném z absolvovaných předmětů neměla možnost seznámit, kdy z rukopisu samotného jsem nabyl přesvědčení, že autorka studované problematice porozuměla.

Bakalářskou práci Andrei Jarošové doporučuji k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm „A – výborně“.

Otázky oponenta bakalářské práce:

- 1) Na str. 21 uvádíte, že NMR, RTG a molekulové modelování poskytují důkaz o existenci uspořádané struktury molekul roztoku hyaluronanu, což je, s ohledem na to, že se každá z uvedených metod používá pro studium struktury molekul v jiné fázi, poněkud zavádějící. Mohla byste to, prosím, uvést na pravou míru?
- 2) Na str. 25 hovoříte o tom, že se hyaluronan vyskytuje, mimo jiné, v synoviální tekutině. Mohla byste, prosím, tento termín blíže specifikovat?
- 3) Na str. 27 uvádíte, že jsou strukturně popsány cyklodextriny obsahující až 39 glukózových jednotek. Věděla byste jaké nejmenší cyklodextriny byly do dnešního dne popsány?
- 4) Při výpočtu průměrné molární hmotnosti CH/HA- β -CD jste jako jednu z hodnot použila molární hmotnosti modifikovaných β -CD, a sice 1382,24 (str. 41) a 1575,39 (str. 45). Mohla byste, prosím, blíže specifikovat, jakým sloučeninám tyto molární hmotnosti náleží?

Ve Zlíně dne **23. 05. 2019**

Podpis oponenta bakalářské práce