

## Posudek oponenta diplomové práce

**Příjmení a jméno studenta:** Bc. Ludmila Mudráková  
**Studijní program:** Materiálové inženýrství a nanotechnologie  
**Studijní obor:**  
**Zaměření**  
(pokud se obor dále dělí):  
**Ústav:** Ústav fyziky a materiálového inženýrství  
**Vedoucí diplomové práce:** doc. Mgr. Robert Vícha, Ph.D.  
**Oponent diplomové práce:** doc. Ing. Michal Rouchal, Ph.D.  
**Akademický rok:** 2022/2023

**Název diplomové práce:**

Studium stability komplexů cucurbit[6]urilu a ditopického pH citlivého ligandu

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

Kritérium hodnocení	Hodnocení dle ECTS
1. Splnění zadání diplomové 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	B - velmi dobře
6. Interpretace získaných výsledků a jejich diskuze	B - velmi dobře
7. Formulace závěrů práce	A - výborně

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

**B - velmi dobře**

### Komentáře k diplomové práci:

Lída Mudráková se ve své diplomové práci zabývala stanovením asociačních konstant binárních a ternárních hostitel–host komplexů ditopického ligandu na bázi adamantanu s cucurbit[6]urilem a makrocykly z rodiny přírodních a modifikovaných cyklodextrinů.

Rukopis diplomové práce má klasické členění do tří hlavních částí, teoretické, experimentální a diskuzní.

Nejrozšířenější částí práce je, co do rozsahu, bezesporu ta věnující se popisu současného stavu studované problematiky. Obsahuje pět kapitol, v nichž Lída nejprve představuje makrocykly z rodiny cucurbit[*n*]urilů (CB*n*) a cyklodextrinů (CD). Následně se věnuje pH rezponzivním ligandům pro homology CB6–8 a supramolekulárním spínačům reagujícím na různé typy podnětů. V poslední kapitole této části práce (důvody pro její situování právě na toto místo mi unikají) jsou představeny ligandy použité v praktické části předložené práce. Teoretická část je psána srozumitelnou a čtivou formou, je podpořena řadou grafických prvků a podpořena odpovídajícím množstvím citované literatury. Zatímco k použitým formulacím mám jen drobné připomínky (např. „pro CB*n* je nejvýhodnější komplexace s kladně nabitými hosty, jako jsou deriváty adamantanu, diamantanu, ferrocenu...“ (s. 13) – uvedené deriváty samy o sobě náboj nenesou, jak by se mohl leckterý čtenář mylně domnívat; „jednotlivých jednotek CB*n*“ (s. 13) – mělo by být uvedeno „jednotlivých homologů CB*n*“; „CB6 se vázal za rychlé výměny na pyridinové místo ligandu **30**“ (s. 36) – lépe snad „CB6 se vázal v režimu rychlé výměny na pyridinové místo ligandu **30**“), v případě obrázků a schémat by se jich našlo podstatně více. Jako příklad uvedu jen některé: v Obr. 4 a 16 a Tab. 2 (s. 16 a 27) jsou velmi matoucím způsobem znázorněny substituenty „R“, na Obr. 28 (s. 35) jsou nesprávně znázorněny některé vazebné úhly a na Obr. 30 (s. 37) je nesprávně popsán H@G systém znázorněný v jeho levé části – správně má být „**32**@CB7<sub>2</sub><sup>ka</sup>“.

V experimentální části věnuje Lída nejprve pozornost popisu provedených metod, chromatografickými počínaje a NMR konče, s následným popisem pracovního postupu provedených syntéz a výpisu spektrálních charakteristik připravených látek. Popis přípravy vzorků pro NMR analýzy, jakož i postup provedených syntéz je srozumitelný a poskytuje všechny potřebné informace pro jejich případné opakování. Drobnou výtkou tak může být jen chybějící popis důležitých parametrů měření v kapitole 6.4 (chromatografická kolona, teplotní program atp.) a výpis EI-MS spektra u sloučeniny **1** (přesto, že z uvedeného plyne, že byla GC-EI-MS analýza provedena).

Diskuzní část je započata stručným komentářem k provedeným syntézám, který je následován nejvýznamnějšími kapitolami celé práce, v nichž se Lída věnuje diskuzi výsledků získaných pomocí nespočtu provedených NMR titrací. Komentář je vhodně doplněn nejen <sup>1</sup>H NMR spektry a tabulkami s výčtem vypočtených asociačních konstant, ale také množstvím přiložených dat (Tabulky 1–26). Závěry, které Lída ze získaných výsledků vyvozuje jsou srozumitelné a opírají se o vhodnou interpretaci nemalého množství naměřených dat. K této části práce mám opět několik drobných připomínek: v kapitole 7 postrádám jakýkoliv důkaz (NMR či MS spektrum) dokazující úspěšnou přípravu ligandu **2** (byť se jedná o látku již dříve připravenou, měl by mít čtenář nějaké spektrum k dispozici, když už ne v těle rukopisu tak alespoň formou přílohy); názvy kapitol 8 a 9 by mohly být formulovány lépe; diskuze by mohla být v některých jejích částech malinko více rozvedena; význam symbolů „-“ a „\*“ použitých v Tabulkách 7–9 by měl být pod danou tabulkou vysvětlen.

Toto jsou však jen drobné výtky, které nikterak nesnižují kvalitu práce jako takové. Jsem skálopevně přesvědčen, že Lída odvedla kus velmi poctivé práce, která se odráží v odevzdaném rukopisu její diplomové práce. Proto tuto doporučuji k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm **B – velmi dobře**.

**Otázky oponenta diplomové práce:**

- 1) Byla nějakým způsobem ovlivněna fosforescence H@G systému popisovaného na Obr. 6 (s. 17) přítomností substituentů R<sub>1</sub>–R<sub>5</sub> ve struktuře studovaného ligandu?
- 2) Na s. 18 popisujete cykloadiční reakci realizovanou uvnitř kavity CB6, přičemž uvádíte, že tato reakce „běží uvnitř kavity CB6 rychleji než mimo ni“. Uvádí autoři citované práce, jaký je rozdíl v rychlosti reakce probíhající uvnitř a vně kavity CB6? A jakým způsobem toto stanovili?
- 3) Na Obr. 28 (s. 35) popisujete termoresponzivní supramolekulární spínač sestávající z ligandu na bázi pyridinia a CB6, kdy uvádíte, že zvýšením teploty došlo k urychlení posunu CB6 z pyridiniového vazebného místa na místo alkylové (ve srovnání s laboratorní teplotou). Mohla byste, prosím, rychlost posunu CB6 po ose ligandu za obou uvedených teplot blíže kvantifikovat?
- 4) Na s. 46 uvádíte, že sloučenina **2** byla izolována ve výtěžku 28 %. Nikde v práci jsem se však nedozvěděl, čím byla tvořena zbylá část (72 %) – výchozí látka, vedlejší produkty – a jak s ní bylo dále „naloženo“. Mohla byste mi to, prosím, osvětlit?
- 5) Jak si vysvětlujete skutečnost, že ligandy **A<sub>3</sub>** a **A<sub>5</sub>** (tedy ty s kratším, resp. delším alifatickým řetězcem) komplex s CB6 netvořily?
- 6) Jaké geometrické uspořádání případného komplexu byste očekávala při přípravě ekvimolární směsi ligandu **2** s CB7 (při pH = 7 a pH = 2). A jaký vliv by mohlo mít případné přidání přebytku β-CD ke vzniklému binárnímu komplexu?
- 7) Pro systém **2**-α-CD byla vypočtena asociační konstanta  $K = 10^{-3} \text{ M}^{-1}$ . Lze v takovém případě stále hovořit o tvorbě H@G komplexu? Jaké se domníváte (a proč), že má vzniklý systém geometrické uspořádání?
- 8) Co reprezentuje signál, který v <sup>1</sup>H NMR spektrech (Obr. 39, 42 a 43) vykazuje posun cca 2,3 ppm? A z jakého důvodu dochází během titrací k jeho mírnému posunu k nižším hodnotám ppm?

Ve Zlíně dne 25.5.2023

Podpis oponenta diplomové práce