

Posudek oponenta bakalářské práce

(EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta:	Barbora Gřešková
Studijní program:	Chemie a technologie potravin
Studijní obor:	Chemie a technologie potravin
Zaměření (pokud se obor dále dělí):	
Ústav:	Ústav technologie potravin
Vedoucí bakalářské práce:	Ing. Zdeňka Prucková, Ph.D.
Oponent bakalářské práce:	Ing. Michal Rouchal, Ph.D.
Akademický rok:	2017/2018

Název bakalářské práce:

Optimalizace postupu přípravy 2H-pyran-2-onu

Hodnocení bakalářské práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:

Kritérium hodnocení	Hodnocení dle ECTS
1. Splnění zadání bakalářské práce	B - velmi dobře
2. Formální úroveň práce, včetně jazykového zpracování	C - dobře
3. Množství, aktuálnost a relevance použitých literárních zdrojů	B - velmi dobře
4. Popis experimentů a metod řešení	A - výborně
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

B - velmi dobře

Komentáře k bakalářské práci:

Barbora Gřešková se ve své bakalářské práci zabývala syntézou heterocyklické sloučeniny, jejíž další transformace by mohly vést k přípravě klecového uhlovodíku, konkrétně kuban-1,3-dikarboxylové kyseliny, který není v supramolekulární chemii prozatím příliš prozkoumán. Do dnešního dne byla publikována pouze jedna práce, v níž byl kubanový derivát použit jakožto ligand při studiu jeho schopnosti vytvářet inkluzní komplexy s cucurbit[7/8]urilem. Na rozdíl od uvažovaného 1,3-disubstituovaného kubanu, byl onen, již publikovaný, substituovaný v polohách 1 a 4, tedy v ose kubanového skeletu. Úspěšná syntéza 1,3-disubstituovaného kubanového derivátu by tedy otevřela dveře k přípravě neaxiálně substituovaných ligandů vhodných pro přípravu supramolekulárních komplexů typu `hostitel@host`.

Práce má klasické členění na teoretickou a praktickou část. V teoretické části se autorka nejprve věnuje charakteristice heterocyklických sloučenin, následně poměrně detailně popisuje možnosti syntézy uvažované sloučeniny, tedy 2H-pyran-2-onu, a to pomocí třech různých syntetických postupů. Tato část práce je přehledná, jednotlivé pasáže na sebe logicky navazují a velmi vhodně tak uvádějí čtenáře do problematiky, kterou se autorka zabývala a jež je dále popsána v praktické části. Nutno podotknout, že se v této části práce, vyjma chyb formální povahy (překlepy, chybějící předložky apod.) nachází řada více či méně závažných pochybení, z nichž na tomto místě uvedu jen některé. Na str. 11 autorka uvádí, že v Obrázku 2 se pod písmenem "X" nachází atom kyslíku či síry s formálním nábojem 1+, nicméně, v obrázku se žádné písmeno "X" nevyskytuje. Na str. 18 popisuje autorka syntézu, v níž byl jako reaktant použit pentakarbonylželeza. Zatímco v textu uvádí pro tuto látku vzorec $\text{Fe}(\text{CO})_5$, tak v Obrázku 11, dle mého názoru chybně, $\text{Fe}(\text{CO})_3$. V popisku Obrázku 12 (str. 19) je namísto "kyseliny" uvedeno "sloučeniny". Na též straně je pak nesprávně uveden název sloučeniny, kdy v jejím názvu je použito výrazu "bromo" (správně je "brom"). Celým rukopisem se line nesprávné skloňování schémat či obrázků plynoucí pravděpodobně z toho, že autorka tyto odkazy vkládala do textu automaticky a nevypisovala je. Jako příklad lze uvést "jsou shrnuty ve Schéma 1" či "Sled reakcí dle Schéma 2" (str. 20). Na str. 22 je uvedeno "teoretický výtěžek látky 2 je 65 %". Věřím, že tato formulace vznikla v důsledku nepozornosti autorky při přípravě rukopisu. Na str. 24 autorka ne příliš vhodně popisuje průběh reakce slovy "reakce běží za tmy" (jako vhodnější se mi jeví "reakce probíhá (je uskutečňována) za tmy"). Zkratku "Et3N" autorka vysvětluje jako "triethylanilin", osobně se však domnívám, že se jedná o "triethylamin", který se používá v organické syntéze jako báze. Dále bych autorce do budoucna doporučil, aby i ve schématech, která jsou obecné povahy (např. Schéma 2, 11 a 12) uváděla alespoň obecné reakční podmínky, případně i výtěžky, v nichž byly předmětné sloučeniny izolovány. Popis jednotlivých syntéz mi přijde až příliš podrobný, kdy bych např. oželel detailní objasňování zpracovávání reakčních směsí.

V praktické části se Barbora nejprve věnuje popisu použitých přístrojů, provedených syntéz a výpisu základních spektrálních charakteristik dvou úspěšně připravených sloučenin. Tato část práce je přehledná a srozumitelná, svojí formou plně odpovídající běžným zvyklostem v oblasti organické syntézy. Nicméně i zde se vyskytují některá pochybení, na něž bych autorku rád upozornil. Domnívám se, že IČ spektra byla změřena na přístroji Alpha-T (Bruker), nikoliv Smart Omni (o němž se navíc hovoří jako o "technologii"). Poněkud zvláštní mi přijde termín "anti-rozpouštědlo" (str. 30), s nímž jsem se doposud nesešel (čímž tedy nevrhám, že je nesprávný). U sloučeniny "3" (budu-li se držet číslování použitého v teoretické části práce) nebylo změřeno IČ spektrum. Bylo-li tomu tak z

důvodu olejovité konzistence této látky, pak se domnívám, že je to škoda, protože i látky této povahy lze analyze podrobit.

V poslední části práce poskytuje Barbora kometář k jednotlivým provedeným syntézám, jejich průběhu a získaným výsledkům. U každé z připravených sloučenin dokládá jako důkaz jejich chromatografické čistoty a molekulární struktury výsledek z analýzy GC-MS, kdy vyjma chromatogramu a hmotnostního spektra navrhuje také fragmentaci příslušné sloučeniny za podmínek EI-MS, což velmi oceňuji. V celé diskuzi je bohužel uvedeno pouze jedno reakční schéma, což mi poněkud komplikovalo orientaci při četbě rukopisu. Dále se zde nachází některé nepřesnosti, na které by si měla dát autorka do budoucna pozor. Jako příklad lze uvést popis k obrázkům 15C a 16C "fragmentace molekuly 2/3 na iontovém detektoru", kdy by úplně stačilo napsat "návrh fragmentace sloučeniny 2/3". Na str. 37 je nesprávně uvedena jednotka exaktní hmotnosti předmětné sloučeniny, kdy by namísto g/mol mělo být "u", případně "amu" (atomic mass unit).

Jako celek hodnotím předloženou bakalářskou práci Barbory Gřeškové jako zdařilé dílo a to přesto, že nedospěla ke kýženému cíli, což není v organické syntéze nikterak výjimečné. Oceňuji nejen Bářinu odvalu pustit se do syntézy s, na první pohled, ne zcela jistým výsledkem, ale zejména její výdrž neustále opakovat jednu či druhou reakci a hledat co možná neoptimálnější podmínky a postup při přípravě požadovaných sloučenin. Toto je pro mne jednoznačným důkazem, že Bára problematika, které se věnovala bavila a zajímala, jinak by totiž po prvních nezdarech vzala nohy na ramena a utíkala se věnovat zcela jinému tématu (dost možná ne z oblasti organické syntézy). Přes veškeré výše uvedené výtky, které by měly sloužit autorce jako "rady do budoucna", si dovoluji tvrdit, že bakalářská práce Barbory Gřeškové splňuje požadavky na práce tohoto typu kladené, doporučuji ji k obhajobě a hodnotím ji klasifikačním stupněm B - velmi dobře.

Otázky oponenta bakalářské práce:

- 1) V teoretické části se zmiňujete o aromaticitě některých organických sloučenin. Látky tohoto typu mohou být vzájemně přitahovány k jiným atomům či molekulám prostřednictvím tzv. pí-interakcí. Mohla byste uvést některé příklady tohoto typu nekovalentních interakcí?
- 2) Na obrázku 11 popisujete fotochemickou reakci, při níž vznikají dvě látky "c" a "d" v poměru 1:1. Při nižší teplotě (-15 °C) je pak upřednostňován vznik látky "c", vzájemný poměr obou látek však již neuvádíte. Mohla byste to uvést na pravou míru?
- 3) Na str. 29 uvádíte, že jste při monitorování průběhu reakcí použila "reverzní chromatografii na tenkých vrstvách". Mohla byste, prosím, tento pojem blíže objasnit?
- 4) V chromatogramu na obrázku 16 jsou patrné dva minoritní píky. A) Můžete uvést, jaká byla jejich relativní intenzita? B) Máte nějaký předpoklad o molekulární struktuře těchto látek (vedlejší produkty syntézy, nezreagované výchozí látky)?

V e Zlíně dne 30. května 2018

Podpis oponenta bakalářské práce

