

Posudek oponenta bakalářské práce

(EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta: Dubinová Hana
Studijní program: B0721A210002 / Technologie a hodnocení potravin
Studijní obor: Chemie a analýza potravin
Zaměření
(pokud se obor dále dělí):
Ústav: Ústav chemie
Vedoucí bakalářské práce: Zdeňka Prucková
Oponent bakalářské práce: Michal Kovář
Akademický rok: 22/23

Název bakalářské práce:

Stanovení termodynamických parametrů vybraných komplexů s cyklodextriny pomocí isothermní titrační mikrokalorimetrie

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	D - uspokojivě
4. Popis experimentů a metod řešení	B - velmi dobře
5. Kvalita zpracování výsledků	B - velmi dobře
6. Interpretace získaných výsledků a jejich diskuze	C - dobře
7. Formulace závěrů práce	B - velmi dobře

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

C - dobře

Komentáře k bakalářské práci:

Hana Dubinová se ve své bakalářské práci věnovala stanovení termodynamických parametrů komplexů β a γ cyklodextrinů s ligandy, které byly syntetizovány na Ústavu chemie jinými pracovníky. Zaměřila se hlavně na rovnovážnou konstantu a stechiometrický poměr, ze kterých se dá vyvozovat stabilita komplexu a jeho složení.

Textu BP chybí stránkování. Proto místo výskytu připomínkovaného textu popisují slovně. Text je proložen překlepy a pravopisnými chybami, ale jejich počet není moc velký (shoda podmětu s přísudkem, diakritika, bireta, diiodid atd.).

V teoretické části Hana vysvětlila, co je to supramolekulární chemie, nastínila vlastnosti a praktické využití hostitelských molekul cyklodextrinů a popsala princip a využití titrační mikrokalorimetrie. Nebylo by na škodu v teoretické části se více věnovat konkrétní problematice, která je řešena v praktické části, například rešerší ozřejmit, které motivy ligandů zvyšují stabilitu komplexu, vliv motivů na umístění hostitelských molekul, stechiometrii atd.. Toto pak dát do diskuze nad výsledky vlastního měření. V diskuzi je uvedena jen jedna citace na toto téma.

U vysvětlování principu ITC Hana trochu nepřesně popsala funkci termočlánku, který slouží k velmi přesnému měření teplot a ne k zajištění přísunu energie (konstantním a proměnlivým příkonem). Používání pojmu „nevazebné interakce“ pro nekovalentní interakce mi nepřijde moc šťastné, zvláště pro elektrostatické přitahování iontů, například u prezentovaného hydroxidu vápenatého, kdy se jedná o iontovou vazbu.

Další formální připomínky k teorii:

- dávkovací zařízení ITC je jednou nazýváno automatickou b~~i~~rerou jindy automatickou pipetou
- chyba ve vzorci v kapitole 3 Isotermální titrační mikrokalorimetrie
- stechiometrie označena někde N, jinde n

V experimentální části pak autorka bezesb~~y~~tku splnila zadání BP - změnila požadované termodynamické parametry komplexů předložených ligandů s β a γ cyklodextriny.

Čtení textu o výsledcích experimentů ale bylo poněkud obtížné, zlepšilo by to vložení dat do tabulky, přiložení obrázků ligandů, případně i s očekávaným umístěním hostitelské molekuly (molekul) versus s experimentálně zjištěnou nebo odhadnutou polohou.

Několik dalších připomínek:

- na rozdíl od molových hmotností ligandů nejsou uvedeny molové hmotnosti β a γ cyklodextrinu
- u reverzního stanovení ligandu č. 4 s β -cyklodextrinem je v textu řádová chyba v koncentraci ligandu
- v kapitole 4.2.6. Ligand č. 6 je v názvu adamantan, ve vzorci je dimethyladamantan
- koncentrace roztoků je prezentováno na 1 až 3 platných míst, chtělo by to sjednotit
- ostatní připomínky budou následovat formou otázek

Otázky oponenta bakalářské práce:

1. Jak byste lépe nazvala „hydroxylový anion“ a „kation vápníku“ o kterých se zmiňujete v kap. 2.3. Nevazebné interakce?
2. V kapitole 3 Isotermální titrační mikrokalorimetrie je chybně uveden 1. vzorec. Zkuste odvodit jeho správné znění ze vzorce pro výpočet reakční ΔG s přidáním podmínky chem. rovnováhy. Co znamená symbol $^\circ$ u termodynamických veličin ?

3. Zřejmě vhodnější je uvádět rovnovážnou konstantu bezrozměrně, čehož dosáhneme tím, že používáme relativních koncentrací, kdy poměrová koncentrace je 1 mol/l. Odhlédneme-li od tohoto, jaký by byl správný fyzikální rozměr K pro komplexy v poměru host-hostitel 1:2? V BP máte uvedeno u všech komplexů rozměr $l \cdot mol^{-1}$, jak u 1:1 tak i u 1:2.
4. V kapitole 5.6 Ligand č. 6 píšete o p-xylylenovém motivu. Na obrázku vzorce tohoto ligandu, který se nachází na jiném místě BP, však žádný p-xylylenový motiv není. Ani sumární vzorec a zároveň molová hmotnost ligandu 6 nevypovídá o tom, že obsahuje p-xylylen. Zřejmě omylem došlo k vypuštění nebo překrytí methylenu ve strukturním vzorci a pak byl následně z tohoto chybného vzorce spočítán sumární vzorec a mol. hmotnost. Uveďte na pravou míru. Případně přepočítejte i koncentrace.

Ve Zlíně dne 5.6.2023

Podpis oponenta bakalářské práce