

Posudek oponenta bakalářské práce

Jméno a příjmení uchazeče/ky: **Michaela Rusnáková**

Název práce: **Nesymetricky substituované makrocyclické ligandy**

A. Bodové hodnocení jednotlivých aspektů práce

| 1. Rozsah BP a její členění | |
|-----------------------------|---|
| | A - přiměřené, odpovídají charakteru BP a významu jednotlivých částí |
| X | B - nevyrovnané, členění není logické nebo rozsah jednotlivých částí nekoresponduje s jejich významem |
| | C - uspokojivé, rozsah některých částí nedostačuje |
| | N - nedostatečné |

| 2. Odborná správnost | |
|----------------------|---|
| | A - výborná, bez závažnějších připomínek |
| X | B - velmi dobrá, s ojedinělými drobnými závadami (nejasnost výkladu, chyby ve vzorcích nebo chemických názvech, nedokonalý popis metod nebo výsledků) |
| | C - uspokojivá, s čtenějšími drobnými závadami |
| | N - nevyhovující, s hrubými chybami |

| 3. Uvedení použitých literárních a j. zdrojů | |
|--|---|
| X | A - bez připomínek, všechny převzaté údaje s citací zdroje, celkový počet citací odpovídá charakteru práce |
| | B - uspokojivé, s občasnými neobratnostmi zejm. v umístění odkazů, nebo s celkově nižším počtem citací |
| | C - s vážnějšími závadami, např. převažují "nestandardní" odkazy na učebnice, přednášky, webové stránky, nebo se ojediněle vyskytuje opominutí odkazu na zdroj převzatých dat |
| | N - nevyhovující, velmi málo citací, ev. rysy plagiátu (časté opomíjení odkazu na zdroj převzatých dat, popř. opsání velkých částí textu) |

| 4. Jazyk práce | |
|----------------|---|
| | A - výborný, práce je napsána čtivě a srozumitelně, bez závažnějších gramatických n. pravopisných chyb |
| | B - velmi dobrý, ojedinělé stylistické neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby |
| X | C - uspokojivý, čtenější slohové neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby, ojediněle se vyskytují obtížně srozumitelné n. nejednoznačné formulace |
| | N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami |

| 5. Formální a grafická úroveň práce | |
|-------------------------------------|--|
| | A - výborná, bez překlepů a chyb ve formátování |
| | B - velmi dobrá, ojedinělé chyby formátu citací, překlepy, chybějící zkratky apod. |
| X | C - uspokojivá, s ojedinělými většími (např. vynechání stránky) nebo čtenějšími drobnými chybami |
| | N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami |

Předložená bakalářská práce Michaely Rusnákové se věnuje přípravě nesymetricky substituovaných makrocyclických ligandů. Na úvod si dovoluji tvrdit, že cíle práce nejsou dle mého názoru jednoznačně stanoveny. V textu není jasně uvedeno, zdali je cílem samotná syntéza ligandu DO3AP nebo jen navrzení vhodného syntetického postupu přípravy výše zmíněného ligandu. V textu se objevuje spíše diskuze o vlivu pendantních ramen na vlastnosti navrženého ligandu a vhodné postupy pro syntézu zcela nesymetricky substituovaného cyklu, což jsou informace spíše vhodné pro kapitolu teoretického úvodu, kde jsou navíc tyto vlastnosti již diskutovány.

Jinak je práce z formálního hlediska přiměřeného rozsahu, zpracována na 38 stranách, rozdělena do sedmi kapitol.

Teoretický úvod je zajímavě sepsán a čtenáři nabízí vhled do syntézy a fyzikálně-chemických vlastností nejen zcela nesymetricky substituovaných cyklenů srozumitelnou formou s minimálním množstvím překlepů často však s faktickými nedostatky. Také grafické zpracování by si zasloužilo větší péči, které v podobě, jaké je, čtenáři poměrně zneprůjemňuje samotné čtení jinak zajímavé práce. Jejich výčet bude uveden na následujících řádcích:

- Postrádám číslování molekul ve schématech s jejich následným odkazem v samotném textu při komentování jejich syntézy/výtěžků či jejich vlastností.
- Dále postrádám výtěžky příslušných produktů ve schématech.
- Časté jsou také chybějící reakční podmínky (teplota) u reakcí jako např. ve schématu 1 nebo schématu 2 u první a druhé reakce, schématu 3 a druhé reakce ve schématu 6.
- S tím souvisí nestandardní zápis počtu ekvivalentů u reagentů, případně molarity u kyselin a bází (pakliže jsou uvedeny), které se standardně uvádějí za reagentii do závorky.
- Autorka používá rozdílnou velikost obrázků a schémat, jako např. na straně 11, 12 a 13 (obecně bych doporučil použití ACS šablony v ChemDraw).
- U reakčních schémat se standardně objevují nad a pod šipkou reagentie spolu s reakčními podmínkami a použitými rozpouštědly. Zápis hexanu ve schématu 5 na straně 16, který sloužil k extrakci, by tam dle mého názoru nemělo být.
- Na straně 16 ve schématu 6 se po první reakce s molekulou nic nestalo, i přes použití 1M HCl, pravděpodobně vinou „copy/paste“.
- Na stejné straně se objevuje formulace „elektrofilní derivát dané chránící skupiny“ u skupiny Cbz. Tuto formulaci považuji za velmi nešťastnou.
- Popisek k obrázku č. 8 na straně 10 je až na další straně 11.

Další částí práce je experimentální část, která je z mého pohledu nezvykle (ne však závadně) umístěna před kapitolu s výsledky a diskuzí. Samotná tato část práce je napsána srozumitelně a věcně, přesto se v ní vyskytují některé nedostatky, které budou uvedeny v následujícím výčtu:

- Na straně 20 ve schématu 7 je uvedena směs rozpouštědel EtOH/H₂O, v textu se však uvádí směs MeOH/H₂O.
- Na straně 21 ve schématu 8 se opět pod reakční šipkou setkávám s hexanem, který sloužil pouze k extrakci.
- Dále bych se vyhnul formulaci „malého množství“ při použití sušidla v množství 1 gram. Samotné použití přesného množství sušidla se opakuje v celé experimentální části a z mého pohledu je diskutabilní, kdy se jeho množství řeší laicky řečeno okometricky v závislosti na experimentálních podmínkách.
- V práci na straně 23 se objevuje schéma 9 (opět rozdílné velikosti, než schémata předešla i následující), které není v textu nikterak komentováno a čtenáři chvíli trvá si uvědomit, co chtěl autor textu tímto schématem sdělit.
- Na stejné straně ve schématu 10 je uvedeno, že byla reakce prováděna při laboratorní teplotě.

V samotném popisu experimentu se však uvádí jako počáteční teplota 0 °C.

- Ve schématu 11 na straně 24 jsou za číslem jedna pro první reakční podmínku uvedena dvě interpunkční znaménka – tečka i závorka.
- Ve schématu 14 na straně 26 není uvedena reakční teplota pro druhou reakci – deformylaci.
- Autorka si také plete pojmy extrakce a promytí během extrakce (syntéza látky 6, strana 27), kdy je každý termín jasně definován.
- Na straně 31 se autorka při popisu přípravy cyklenu substituovaného formylovou funkční skupinou odkazuje na literaturu, která s touto syntézou nesouvisí.

V části s výsledky a diskuzí autorka poměrně zdařile komentuje získané výsledky jednotlivých syntetických kroků. Opět však musím zmínit grafickou úpravu, která postrádá již výše uvedené náležitosti.

V poslední části závěru autorka stručně a věcně shrnuje získané výsledky vedoucí k přípravě DO3AP, nicméně zde trochu postrádám diskuzi, zdali byly naplněny vytyčené cíle práce.

I přes výše zmíněné, předloženou práci hodnotím kladně a doporučuji ji přijmout k obhajobě.

B. Obhajoba

Dotazy k obhajobě

1. Při přípravě formyl-cyklenu **2** je využit dimethyl acetal *N, N*-dimethylformamidu jako zdroj formylové skupiny. Mohla by autorka objasnit mechanismus této reakce?
2. Při přípravě formyl-cyklenu **2** autorka uvádí, že získala směs tohoto produktu, výchozí látky a disubstituovaného produktu. Autorka neuvádí, jestli a případně jak průběh reakce sledovala eventuálně, jestli se nepokusila, i vzhledem vysokému výtěžku reakce v původní práci, reakci optimalizovat? Autorka sama uvádí, že se jí nepodařilo dostatečně z reakce odstranit DMFDMA.
3. Pro přípravu látky **5** autorka používá chlorahydrát pro alternativní zavedení formylu do výchozí molekuly. Mohla by autorka objasnit průběh této reakce?

Stanovisko k opravě chyb v práci:

~~opravný lístek~~/oprava v textu **JE** / **NENÍ** podmínkou přijetí práce

C. Celkový návrh

Práci doporučuji k přijetí k dalšímu řízení: **ANO** / **NE**

Navrhovaná celková klasifikace: **Chvalitebně**

Datum vypracování posudku: 07.06. 2024

Jméno a příjmení, podpis oponenta: Mgr. Martin Kamlar, Ph.D.