

Posudek oponenta diplomové práce

Jméno a příjmení uchazeče/ky: Bc. Klementýna Kepková

Název práce: Příprava chirálních kondenzovaných N-heterocyklických derivátů [2.2]paracyklofanu

A. Bodové hodnocení jednotlivých aspektů práce (označte právě jednu z možností)

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

2. Odborná správnost	
x	A - výborná, bez závažnějších připomínek
	B - velmi dobrá, s ojedinělými drobnými závadami (nejasnost výkladu, chyby ve vzorcích nebo chemických názvech, nedokonalý popis metod nebo výsledků)
	C - uspokojivá, s četnějšími 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	
x	A - výborný, práce je napsána čtivě a srozumitelně, bez závažnějších gramatických n. pravopisných chyb
	B - velmi dobrý, ojedinělé stylistické neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby
	C - uspokojivý, četnější 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	
x	A - výborná, bez překlepů a chyb ve formátování
	B - velmi dobrá, ojedinělé chyby formátu citací, překlepy, chybějící zkratky apod.
	C - uspokojivá, s ojedinělými většími (např. vynechání stránky) nebo četnějšími drobnými chybami
	N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami

Slovní komentář k bodům 1. až 5. :

Diplomová práce Bc. Klementíny Kepkové pojednává o přípravě opticky aktivních N-heterocyklických derivátů [2.2]paracyklofanu (PCP). Obsah práce přinejmenším odpovídá rozsahu práce daného typu. Práce obsahuje minimum překlepů a chyb a je psaná srozumitelně. Práce je členěna víceméně klasickým způsobem. V úvodní kapitole "přehled problematiky" jsou shrnuty poznatky o chiralitě a jejich typech, dále o možnosti dosažení opticky aktivních látek pomocí kinetické rezoluce. Dále je čtenáři představen paracyklofanový motiv, a metoda C-H aktivace s využitím chirálních ligandů, vedoucí k chirálním produktům. Osobně jsem ocenil podkapitolu 1.4. "souhrn", která stručně sumarizovala klíčové poznatky, diskutované v této kapitole. Další kapitolou jsou cíle práce, které jsou zde jasně definované.

Kapitola výsledky a diskuse začíná shrnutím výsledků bakalářské práce aspirantky, které bych si osobně dovedl představit spíše v kapitole úvod, jelikož popisují základ, ze kterého samotná praktická práce vycházela. V této kapitole je diskutována optimalizace podmínek pro substráty, které během bakalářské práce byly připraveny v malých výtěžcích. Stěžejním se zdá přítomnost stopového množství vody. V další části je následně popsáno štěpení optických izomerů výchozí látky a syntéza opticky obohacených derivátů z těchto opticky aktivních výchozích látek.

Velice ambiciózní (minimálně pro diplomový projekt) je práce popsána v následné podkapitole. Autorka popisuje snahu provést optické štěpení PCP za využití chirálního, opticky aktivního katalyzátoru, během C-H aktivační/annelační reakce. Toto představuje nový koncept štěpení optických isomerů PCP. Komerčně dostupné katalyzátory však poskytly neuspokojivé výsledky, a proto se a studentka vydala na nesnadnou cestu přípravu opticky aktivních nekomerčních katalyzátorů. Po překonání problémů spjatých s reprodukovatelností popsaných literárních postupů byly připraveny dva finální rutheniové katalyzátory. Bohužel, jejich využití nevedlo ke kýženým výsledkům. Následující část, Experimentální sekce, je sepsána kvalitně a neshledal jsem zde zásadní nedostatky. Jen jsem zcela nerozuměl tomu, jak mohou mít amorfní látky definovaný přesný bod tání.

Mám jednu obecnou poznámku. Autorka by si měla dávat pozor na správné používání odborné terminologie. Mám na mysli výrazy: chirální syntéza, racemická syntéza, chirálně obohacené deriváty, apod., jenž nejsou zcela správně.

Ačkoli kinetické štěpení PCP isomerů, za využití C-H aktivace/annelace nepřineslo kýžené výsledky ani s komerčním, ani s in-house připraveným katalyzátorem je, dle mého názoru, tuto metodu možno využít (soudě dle toho, že malých enantiomerních přebytků bylo dosaženo v případě využití komerčních katalyzátorů). Zajisté je to však běh na delší trať, nad rámec diplomové práce. Opticky obohacených látek bylo nakonec dosaženo konzervativnější, nicméně efektivní metodou. Shoda nalezená softwarem turnitin 17%, bezesporu jde o práci originální. Práci doporučuji k obhajobě se známkou výborně.

B. Obhajoba

Dotazy k obhajobě

- Kapitola 3.1. Optimalizace reakčních podmínek pro 1,2-diary a dialky alkyny. Co je považováno za stopové množství vody, případně, bylo množství vody nějak stanovováno?
- In-house syntéza chirálního, opticky aktivního komplexu je zdlouhavá a náročná operace (jak se mohla autorka přesvědčit) a dle mého názoru je nezbytné dopředu promyslet pro a proti konkrétních komplexů. Co autorku vedlo k domněnce, že Cramerův ligand bude ten správný ligand?
- Opticky obohacené deriváty PCP se podařilo připravit. Mají tyto látky nějaký konkrétní potenciál?

Stanovisko k opravě chyb v práci:

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

C. Celkový návrh

Doporučuji k obhajobě.

Navrhovaná celková klasifikace: výborně

Datum vypracování posudku: 3.9.2024

Jméno a příjmení, podpis oponenta (SIS): Dr. Lukáš Rýček, MSc.