



Univerzita Hradec Králové

Přírodovědecká fakulta

Katedra chemie



Hodnocení bakalářské práce

Posudekopponenta



Jméno autora: Kristýna Weisssová

Rok obhajoby: 2021



Název práce: Syntéza monokvarterních oxim-hydroxamátových hybridů jako reaktivátorů OP-inhibované acetylcholinesterasy



Vedoucí práce: Mgr. Eugenie Nepovimová, Ph.D.

Oponent práce: RNDr. Dávid Maliňák, PhD.



Téma práce:	aktuální
Téma bylo v literatuře:	diskutuje se o něm
Zaměření práce:	původní vědecká práce
Práce je zaměřena:	empiricky
Jazyková a stylistická úroveň práce:	odpovídá
Rozsah práce:	přiměřený
Použitá literatura:	aktuální
Počet uváděných titulů:	dostatečný
Citace v textu:	přiměřená
Statistické zpracování výsledků:	nebylo v náplni práce
Formální stránka práce:	odpovídá
Využitelnost pro praxi:	střední
Cíl práce:	splněn
Úroveň práce:	odpovídá požadavkům

Konkrétní náměty, připomínky nebo otázky vyžadující doplnění u obhajoby:

Predložená bakalárska práca študentky Kristýny Weisssovej je napísaná na 47 stranách.

Teoretická časť je zameraná na všeobecné informácie o cholinergnom systéme a taktiež sa venuje problematike organofosforových zlúčenín používaných ako pesticídy alebo nervovo paralytické látky. Hlavným cieľom predkladanej experimentálnej bakalárskej práce bolo syntetizovať dve nové monokvartérne zlúčeniny obsahujúce v štruktúre oximovú a hydroxamovú skupinu. Tieto zlúčeniny by sa mohli využiť ako potenciálny reaktivátory inhibovanej acetylcholinesterázy. Autorka pripravila osem medziproduktov a dve finálne monokvartérne soli 7 a 10. Zlúčenina 7 bola pripravená po siedmich reakčných krokoch, a zlúčenina 10 ako autorka uvádza v predloženej práci bola

pripravená po troch reakčných krokoch, keďže dôležitý prekursor pre prípravu látky 10 bol už pripravený výskumnou skupinou KCH PrF UHK a bol použitý aj pre prípravu iných derivátov v rámci záverečných prác. Štruktúry všetkých pripravených zlúčenín boli potvrdené pomocou NMR analýzy (oceňujem precízne vypracovanie NMR analýzy), ale v rámci MS analýzy sú v práci viaceré nezrovnalosti, na ktoré poukazujem nižšie v danom posudku. Aj keď je práca napísaná na dostatočnej úrovni, autorka sa nevyhla niekoľkým chybám, na ktoré by som chcel upozorniť (uvádzam len niektoré):

- Názov práce by mal obsahovať termín "hydroxamové" hybridy a nie "hydroxamatové", keďže sa jedná o hydroxamovú skupinu.
- Na druhom liste je termín odovzdania práce červen 2020, ale Vaša práca bola odovzdaná v prosinci 2020.
- Vzorce chemických zlúčenín nepatria do zoznamu použitých skratiek.
- m/z nie je skratka pre "Hmotnostní spektrometrii".
- Úvod práce by mohol byť rozsiahlejší ako na desať riadkov.
- Štruktúry chemických zlúčenín by mali byť vytvorené v odporúčaných programoch, v predkladanej práci podľa môjho názoru tak tomu nie je.
- Patria štruktúry na obrázku 23 a 25 zlúčeninám s označením 4-pyridinaldoxim a HI-6?
- Nesúhlasím s naznačenou izomériou oximovej skupiny napr. u zlúčenín na obrázkoch 24, 25 a 26.
- Chyba v číslovaní obrázkov (obrázok 27???)
- Všetky štruktúry nakreslené v práci s experimentálnym syntetickým cieľom by mali mať priradené číslo aj v obrázkoch aj v schémach aj v texte. Jak v teoretickej, experimentálnej časti tak v časti diskusie.
- Na str. 30 popis reakčnej schémy (obrázok 30) nezodpovedá správne popisu syntetických reakčných schém. Chýbajú reakčné teploty, časy a výťažky resp. rozsahy výťažkov. V podmienkach katalytickej hydrogenácie (reakčný krok "b") nie je uvedený vodík a to isté v schéme v experimentálnej časti.
- Na strane 32 je uvedený zlý vzorec pre deuterovaný methanol.
- V experimentálnej časti sú zle vypočítané teoretické hodnoty m/z pre zlúčeniny 3, 4, 6, 7, 9 a 10.
- Uvedte správne názvy podľa českého názvoslovía pre zlúčeniny 3-6 a 8-9.
- Časť diskusie je až na pár výnimiek podľa môjho názoru zopakovaním experimentálnych postupov reakčných krokov, ktoré sú už popísané v experimentálnej časti predkladanej práce. A keďže hlavným cieľom predloženej experimentálnej syntetickej práce bola chemická syntéza finálnych molekúl 7 a 10, myslím si že časť výsledkov a diskusie zo syntetických experimentov, ktoré autorka uviedla v bakalárskej práci by mala byť koncipovaná inak. Prosím študentku pri obhajobe bakalárskej práce o popis reakčných mechanizmov jednotlivých syntetických krokov, ktoré autorka experimentálne uskutočnila.

Aj napriek vyššie uvedeným nedostatkom práca splnila svoj cieľ, a preto doporučujem bakalársku prácu študentky Kristíny Weissové pripustiť k obhajobe.

Výsledné hodnocení:

vyberte hodnocení

V Hradci Králové dne 05.01.2021

Podpis oponenta