

Oponentský posudek diplomové práce

Bc. Zuzany Kotíkové

Studium kinetiky a mechanismu bazické hydrolyzy thio- a dithiokarbamátů

V rámci své diplomové práce Bc. Zuzana Kotíková připravila dvě série sloučenin. Šest *O*-fenylothiokarbamátů a šest fenyldithiokarbamátů. Obě série látek byly připravovány za účelem studia mechanismu jejich bazické hydrolyzy a lišily se substitucí na fenylskupině. Diplomantka provedla řadu kinetických měření, na jejichž základě navrhla mechanismus bazické hydrolyzy, který následně diskutovala v kontextu známých informací z literatury.

Oponovaná diplomová práce sestává ze sedmi kapitol (55 číslovaných stran) a třech příloh (19 stran). První tři kapitoly (rešeršní část) popisují postupně přípravu, vlastnosti a využití karbamátů, thiokarbamátů a dithiokarbamátů, následuje stručný úvod do metod použitých při studiu mechanismu, experimentální část, diskuze a přehled použité literatury.

Rešeršní část diplomové práce je sepsána přehledně a je odpovídajícím způsobem citována.

Experimentální část shrnuje provedené experimenty z hlediska přípravy jednotlivých karbamátů, jejichž identifikace a čistota byla ověřena na základě změřených ^1H a ^{13}C NMR spekter a bodů tání. Dále je zde stručně uveden postup jednotlivých kinetických měření. Kladně hodnotím zpracování výsledků experimentální práce formou přehledných tabulek i jejich umístění do příloh diplomové práce. Přípravy (složení) jednotlivých použitých pufrů jsou uvedeny v tabulkách v Příloze 1, vyhodnocené pozorované rychlostní konstanty s uvedením podmínek měření pak uvádějí tabulky v Příloze 2. V Příloze 3 jsou zobrazena změřená NMR spektra diplomantkou připravených dosud v literatuře nepublikovaných karbamátů, u kterých byla navíc provedena elementární analýza, a byl stanoven bod tání.

Pozornost si zaslouží zejména kapitola 6 Diskuze. Je sepsána srozumitelně, tvrzení zde uvedená jsou podložena citovanou literaturou, ze které autorka nejen přebírá uvedená fakta, ale rovněž je tvůrčím způsobem používá k interpretaci vlastních výsledků. Tato část diplomové práce jednoznačně ukazuje na pokročilou schopnost diplomantky vyhodnocovat nejen vlastní experimenty, ale také kriticky zhodnocovat již publikovaná data. Vlastní text je navíc psán velmi úsporně, což dokládá například Tabulka 1. Na oponované diplomové práci oceňuji rovněž konfrontaci „klasického kinetického přístupu“ s „moderními“ DFT kalkulacemi.

Diplomová práce Bc. Zuzany Kotíkové je sepsána srozumitelně, bez gramatických chyb a s minimem překlepů, jež nezasluhují dalšího komentáře.

K oponované diplomové práci mám následující dotazy:

V Příloze 1 se vyskytuje v popisu přípravy pufrů V_{HA} – objem HCl (ml), avšak nenalezl jsem, kde byl tento objem použit. V popisu nad tabulkami je pak uvedena koncentrace $c_{\text{HA}} = 2 \text{ mol/l}$, pravděpodobně údaj pro koncentraci kyseliny chlorovodíkové, který však v příslušných tabulkách rovněž není použit. Byla kyselina chlorovodíková použita při přípravě jednotlivých pufrů nebo pouze při přípravě roztoků kyselých složek jednotlivých pufrů?

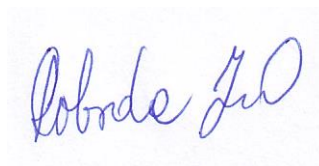
Dále bych se rád zeptal, zdali různý počet desetinných míst údajů uvedených v tabulkách jednotlivých příloh nějak souvisí se směrodatnou odchylkou? Znamená, že poslední uvedené desetinné místo jsme schopni v rámci experimentální chyby garantovat?

Závěr:

Bc. Zuzana Kotíková ve všech bodech splnila zadání diplomové práce. Prokázala výjimečně dobrou schopnost pracovat s odbornou literaturou. Při vhodně navržených a jednoduchých syntézách prokázala schopnost systematicky pracovat v laboratoři, syntetizovat cílené látky, ověřit jejich identitu a čistotu. Velice oceňuji práci odvedenou při kinetických měřeních, množství diplomantkou prostudované odborné literatury odrážející se ve kvalitě zpracování oponované diplomové práce. Na základě těchto skutečností jednoznačně doporučuji diplomovou práci Bc. Zuzany Kotíkové k obhajobě a hodnotím ji známkou

V ý b o r n ě

V Pardubicích dne 25. 5. 2016



Ing. Jan Svoboda, Ph.D.
Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i.
Studentská 84
532 10 Pardubice