

Oponentský posudek diplomové práce
Bc. Hany Odehnalové

**Syntéza biologicky aktivních sulfamoylbenzamidů
s benzthiazolovým blokem**

V rámci své diplomové práce Bc. Hana Odehnalová vyvinula univerzální postup pro syntézu sulfamoylbenzamidů s benzthiazolovým blokem. Použitelnost tohoto postupu ověřila při syntéze celkem šestnácti nových sloučenin, které vhodným způsobem charakterizovala.

Oponovaná diplomová práce sestává z 96 číslovaných stran a je standardním způsobem členěna.

Po krátkém Úvodu následuje na literární rešerši založená Teoretická část, která je v souladu se zadáním diplomové práce a postupně pojednává o sulfamoylbenzamidech a benzthiazolech. Diplomantka čtivě shrnuje informace o biologické aktivitě, možnosti využití a syntéze těchto sloučenin. Tato část diplomové práce je přehledně zpracovaná, uvedené informace jsou podloženy citacemi použité literatury.

V Experimentální části jsou popsány provedené syntézy a je uvedena charakterizace připravených látek a to bodem tání, optickou otáčivostí, ^1H , ^{13}C , ^{19}F NMR spektry, elementární analýzou a HRMS. Tato, svým rozsahem padesáti stran největší, část diplomové práce sice přehledně shrnuje provedené experimenty, ale osobně bych jí trochu přepracoval. Autorka se v této části diplomové práce rozhodla oddělit popis syntézy jednotlivých látek od jejich charakterizace. Tato skutečnost by byla akceptovatelná a dokonce i žádoucí v případě, že by byla experimentální část koncipována jako jedno obecné reakční schéma (podobně jako např. Schéma 16 str. 88 ve Výsledcích a diskuzi) s uvedenými akronymy jednotlivých sloučenin (analogicky např. se Schématem 12 str. 32 v Teoretické části). Následně by byly popsány obecné postupy provedených syntéz uvedených v tomto schématu a nakonec by byl uveden výčet připravených sloučenin s příslušnou charakterizací. Takový postup je v literatuře běžně používán a vede k přehlednému a úspornému textu. Experimentální část oponované diplomové práce však připomíná spíše laboratorní deník. Tento způsob zápisu je sice přehledný, ale text diplomové práce zbytečně prodlužuje. Absence číslování (akronymů) pro jednotlivé sloučeniny v Experimentální části pokládám za velice nešťastné. Navíc vzhledem ke skutečnosti, že autorka tento způsob číslování používá v textu Teoretické části oponované práce, předpokládám, že je tento styl autorce vlastní. K uvedené charakterizaci připravených látek nemám výhrady.

Ve Výsledcích a diskuzi jsou zhodnoceny jednotlivé provedené syntézy. Tato, dle mého názoru, nejdůležitější kapitola diplomové práce obsahuje pouze šest stran. Autorka navrhla, optimalizovala, a na řadě sloučenin ověřila univerzálně použitelný syntetický postup vedoucí k zadaným sulfamoylbenzamidům s benzthiazolovým blokem. V této části práce mně chybí komentář k provedené optimalizaci navrženého syntetického postupu, jeho srovnání s postupy známými z literatury a srovnání ekonomických, ekologických a bezpečnostních

aspektů navrženého postupu s literaturou. Získané výsledky této technologicky orientované diplomové práce by takto šlo „lépe prodat“.

V Závěru autorka v krátkosti shrnuje předloženou diplomovou práci. Samotný závěr diplomové práce obsahuje dva odstavce, přičemž první odstavec sem dle mého názoru nepatří.

K oponované diplomové práci mám několik komentářů a dotazů:

Diplomová práce Bc. Hany Odehnalové je psaná srozumitelnou češtinou s minimem chyb. Mezi ně lze zařadit zmínku o toxicitě oxidu uhličitého uvolňovaného při rozkladu oxalylchloridu (str. 23). Kapitulu Úvod bych nečísloval pořadovým číslem 0. Ve vzorcích sloučenin bych používal bezpatkové písmo. Místo „vodní vrstvu“ bych použil „vodnou fázi“. Na stranách 81 a 83 jsou ve vypočtených hodnotách m/z pro HRMS-MALDI uvedeny hodnoty $[M]^+$ a ne $[M + H]^+$. Nehovořil bych o MALDI spektrometrii, ale o HRMS. MALDI je ionizační technika. HRMS je hmotnostní spektrometrie s vysokým rozlišením.

Autorka popisuje NMR spektra řady látek a uvádí rovněž přiřazení jednotlivých chemických posunů jednotlivým vodíkovým atomům. Byly v tomto případě použity nějaké 2D korelační techniky? V případě, že ano, proč toto autorka nediskutuje v kapitole Výsledky a diskuse. Tímto způsobem by nejen rozšířila tuto podstatnou část diplomové práce, ale zdůraznila by rovněž své pokročilejší znalosti ve vyhodnocování tohoto typu spekter.

Závěr:

Bc. Hana Odehnalová ve všech bodech splnila zadání diplomové práce. Prokázala schopnost orientace v odborné literatuře a samostatné laboratorní práce. Dokázala navrhnout a optimalizovat postup syntézy univerzálně použitelný pro syntézu zadaných modelových sloučenin. Připravené sloučeniny dokázala vhodným způsobem charakterizovat a to jak z hlediska jejich identity, tak jejich čistoty. Na základě těchto skutečností doporučuji diplomovou práci Bc. Hany Odehnalové k obhajobě. Vzhledem k výše uvedeným připomínkám ohledně zpracování oponované diplomové práce ji hodnotím klasifikačním stupněm

B

V Pardubicích dne 30. 5. 2019



Ing. Jan Svoboda, Ph.D.
Ústav organické chemie a technologie
Fakulta chemicko-technologická
Univerzita Pardubice
Studentská 573
532 10 Pardubice