

Posudek na diplomovou práci Bc. Kláry Bosákové
„Syntéza a charakterizace katalyticky aktivních komplexů palladia na bázi
6-fluor-1,3-benzthiazolylalkylaminů“

Předložená diplomová práce se zabývá přípravou a charakterizací šestnácti originálních potenciálně katalyticky aktivních komplexů palladia nesoucích různě substituované ligandy na bázi 6-fluor-1,3-benzthiazolylalkylaminů. Před vlastní přípravou těchto cílených palladnatých komplexů bylo nutno připravit vícestupňovými syntézami vlastní ligandy obsahující benzthiazolylalkylaminový fragment. Těchto prekurzorů palladnatých komplexů bylo připraveno také šestnáct. Všechny připravené sloučeniny byly detailně charakterizovány pomocí vhodných metod strukturálního výzkumu, zejména pomocí multinukleární NMR spektroskopie. Ve čtyřech případech byla určena totální struktura připravených sloučenin pomocí rentgenostrukturální analýzy vypěstovaných monokrystalů.

Diplomantka odvedla mimořádný kus experimentální práce a využila tak velmi efektivně čas, který měla k vypracování diplomové práce k dispozici. Práce je sepsána přehledně a výstižně. Teoretická část je přiměřeně obsáhlá a relevantní, experimentální část i úroveň následné diskuse svědčí o nabytí velkého množství zkušeností jak preparativních a celkově experimentálních, tak i teoretických. V diplomové práci je zřetelný významný metodický podíl vedoucího diplomové práce Ing. Vladimíra Pejchala, Ph.D.

K vlastní diplomové práci mám přesto několik připomínek či komentářů:

1) V teoretické části se poměrně často vyskytují nevhodná nebo příliš „kostrbatá“ slovní spojení (např. „palladium katalyzované cross-couplingové reakce“, bis(NHC)-palladium komplexy), což je zcela zjevně způsobeno nedostatkem zkušeností autorky při překladu původních anglických textů do českého jazyka. Tento fakt však naštěstí nebrání pochopení faktického významu vlastního textu.

2) Na straně 18 se v textu hovoří o použití 2-halogenarylisokyanátů, což je v rozporu se Schématem 2, kde je naprosto jasně naznačeno použití 2-halogenarylithiokyanátu.

3) V několika případech jsou uvedeny chybné odkazy na původní literární zdroje (např. na straně 21 je chybný odkaz [30], na straně 22 je nesprávně uveden odkaz na literaturu [38]).

4) V některých schématech by bylo vhodné doplnit (nebo alespoň naznačit nad nebo pod šipkou) jaké další reaktanty byly použity, respektive jaké vedlejší produkty při dané reakci vznikají (např. schémata na stranách 19, 20, 22, 31 a další).

5) Vzorec palladnatého komplexu na straně 27 není fakticky správný. Ze znázorněného vzorce by vyplývalo, že palladium se v dané sloučenině vyskytuje v oxidačním stavu 4+, přičemž ve skutečnosti má mít samozřejmě formální oxidační stav 2+. Pro naznačení vazby uhlík-palladium se v případě takovýchto karbenových komplexů kovů používá výhradně šipka směřující od uhlíku k atomu kovu (tedy C→Pd).

6) Mechanismus Heckovy reakce na straně 32 je zobrazen chybně. Ví autorka, který krok mechanismu je typický právě pro tento typ „cross-couplingu“ a který ve schématu chybí?

7) Dále by mne zajímalo, zda autorka nezkusila při vlastní syntéze palladnatých komplexů zkrátit reakční dobu ze 48 např. na 24 hodin, či zda nezkoušela reakční směs zahřívát za účelem urychlení průběhu reakce. Plánuje autorka nebo vedoucí diplomové práce v budoucnosti studovat katalytickou aktivitu připravených sloučenin při zmiňovaných „cross-coupling“ reakcích v praxi?

Závěrem je nutné konstatovat, že diplomantka splnila cíle diplomové práce v celém rozsahu jejího zadání. Výsledky práce jsou na velmi vysoké úrovni, publikovatelné i ve vybraném impaktovaném časopisu (např. Journal of Organometallic Chemistry). Diplomovou práci „Syntéza a charakterizace katalyticky aktivních komplexů palladia na bázi 6-fluor-1,3-benzthiazolylalkylaminů“ tímto doporučuji k obhajobě a hodnotím ji známkou

výborně - m.

V Pardubicích 16. května 2014


Ing. Petr Švec, Ph.D.