

Posudek na diplomovou práci

Název práce: **Mechanismus oxidativního spojení naftolů katalyzovaného mědí**
 Jméno autorky: Bc. Tereza Schröpferová
 Oponent: Mgr. Miroslav Polášek, Ph.D.

Předložená diplomová práce představuje další z řady zajímavých studií zabývajících objasňováním mechanismů organických či organometalických reakcí a zejména pak struktury příslušných reakčních intermediátů pomocí metod hmotnostní spektrometrie. Cílem práce bylo, na základě studia monomolekulárních reakcí ad hoc vytvořených a v plynné fázi izolovaných reakčních intermediátů, odhalit zákonitosti, jimiž se řídí spojovací reakce naftolů a jejich derivátů katalyzované měďnatou solí vedoucí k preferenčnímu vzniku heteroproduktů.

Po formální stránce je obtížné této práci něco vytknout, snad jen dva odkazy na přednášky (citace 34 a 35), některé méně obratné formulace v textu, nazývání uváděných hmotnostních spekter „Schémata“ a používání slova „kapling“. Jinak je z práce na první pohled zřejmé, že byla sepsána a editována s velkou pečlivostí a na první prolistování působí velmi dobrým dojmem.

Po podrobnějším prostudování se však jistým výhradám k obsahu práce nemohu ubránit. V kapitole 1.3 Hmotnostní spektrometrie je několik nepřesností v popisu mechanismu ionizace elektrosprejem. Např. je zde uvedena pouze jedna ze dvou momentálně diskutovaných teorií vzniku plyných iontů, a to tzv. „ion evaporation model“. Alternativní „charge residue model“ zmíněn není. Dále, k desolvataci dochází z velké části až ve vyhřívané kapiláře a Schéma 4 není schématem používaného přístroje LCQ Deca. Iontová past neslouží jen k zachycení a fragmentaci iontů (jak je správně uvedeno), ale hlavně k jejich analýze podle m/z (což však již uvedeno není).

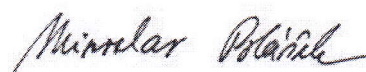
V kapitole 3. Výsledky a diskuze je ve všech schématech obsahujících „izotopické rozdělení klastrů“ opakovaně a bohužel nesprávně uváděno nukleonové číslo u Cu a Cl. Některé z dalších námitek či nejasností bych shrnul do následujících otázek pro diskuzi při obhajobě:

1. Jak je možné pozorovat adici vody (např. Schéma 10) nebo dokonce methanolu (Schéma 16) na nějaký fragmentový ion při CID?
2. Jakkoli je to mimo zadané cíle práce, ztráta neutrálního fragmentu o hmotnosti 71Da z ionů m/z 380 (Schéma 16) je natolik překvapivá, že se nelze nezeptat na možné vysvětlení (struktura, mechanismus?)
3. Text týkající se Schématu 19 v kapitole 3.3.1 se mi jeví velmi matoucí. Vysvětlení?
4. Schéma 21: mohla by přítomnost iontů $[\text{Cu}_2\text{Cl}(\text{TMEDA})]^+$ (m/z 277) naznačovat, že k tvorbě C-C vazby, tj. binolu **5**, dochází i po ztrátě molekuly TMEDA z iontu m/z 795? Byly měřeny MS/MS/MS spektra (tj. CID m/z 795, následovaná izolací jeho fragmentu m/z 679 a nakonec jeho CID)?
5. Schéma 24: je v tomto spektru přítomen ion m/z 277? Rozsah m/z 300 – 820 je nedostatečný.
6. Jakým způsobem byly z hodnot srážkových energií v jednotkách % NCE získány hodnoty v eV?

Předloženou práci doporučuji k obhajobě:

Hodnocení: velmi dobře

V Praze dne 2.6.2013



.....
podpis oponenta