

Posudek na diplomovou práci Bc. Petra Motlocha nazvanou "*Efekt stříbra v homogenní zlaté katalýze*"

Diplomové práce pana Motlocha se skládá z obecnějšího úvodu, kde celkem vtipně začíná alchymii a pokračuje shrnutím některých dosavadních poznatků z homogenní katalýzy komplexů a solemi zlata a stříbra. Vzhledem k obrovskému rozmachu této chemie v poslední dekádě nebylo možné vyčerpávající review, ale jako úvod k tematu diplomové práce to postačuje. Vlastní výsledky zahrnují stanovení vazebných disociačních energií zlatných a stříbrných komplexů s ligandem a dalším uhlovodíkem v plynné fázi pomocí hmotové spektrometrie. Muselo se jednat o poměrně pracnou studii (17 komplexů Au^+ a 17 komplexů Ag^+ s PPh_3 a 4 komplexy s acetonitrilem), kdy každý experiment byl 6x opakován a výsledky statisticky zpracovány. Rovněž se pokusil o teoretické výpočty těchto disociačních energií pomocí 2 variant DFT metod. Výsledky výpočtů velmi dobře korelovaly s experimentálními daty. Hodnoty BDE nepochybně budou velmi užitečné pro další mechanistické studie ve skupině Prof. Roithové, ale tato data sama o sobě mechanismus působení Ag v Au katalýze nevysvětlují – zde je tedy samotný název práce trochu hyperbolický. Podle mého názoru bude největším problémem při aplikaci těchto dat ve studiu mechanismů vlivu proti-aniontu (např. při použití chloridových solí bude vypadávat AgCl a tím posouvat rovnováhu i u reakcí, které by jinak byly energeticky nevýhodné) a vliv bulk rozpouštědla, který v experimentu v MS nemůže být pozorován a ani ve výpočtu nebylo rozpouštědlo zahrnuto (pro publikaci to zřejmě bude nutné dopočítat). Chybí hlubší diskuze získaných výsledků v kontextu mechanismu Au-Ag katalyzovaných reakcí alkenů a alkynů. Práce je napsána v obvyklé struktuře, čtivě a srozumitelně. U poděkování je celkem pochopitelná jistá míra citového zabarvení, ale díky "Barče a Běďovi" jsou už trochu moc expresivní a mělo to být spíše sděleno ústně.

Pro diskuzi při obhajobě bych tedy požádal diplomanta, aby prodiskutoval možný vliv aniontu a rozpouštědla a načrtnul další postup při studiu mechanismu tohoto typu katalýzy.

Celkově se dá shrnout, že diplomant vypracoval metodiku experimentálního stanovení i teoretických výpočtů BDE a prostudoval mnoho komplexů Au a Ag. Množství i kvalita výsledků rozhodně bohatě odpovídají požadavkům na diplomovou práci, kterou tímto doporučuji k obhajobě. Ovšem vzhledem k absenci relevantní diskuze navrhuji klasifikaci **velmi dobře**.

V Praze 4. 9. 2014


Prof. Ing. Michal Hocek, CSc., DSc.