

ABSTRAKT

Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové

Katedra farmaceutické chemie a kontroly léčiv

Kandidát: Mgr. Jaroslav Kušnír

Konzultant: PharmDr. Radim Kučera, Ph.D.

Názov rigorózneho práca: Identifikace hlavních degradačních produktů butan-1,3-diolu

Butan-1,3-diol obsahuje tri neznáme nečistoty, z čoho dve o relatívnej molekulovej hmotnosti 118 a jednu o relatívnej molekulovej hmotnosti 160. Hlavnou úlohou rigorózneho práca bola ich identifikácia. Vzhľadom k malému množstvu nečistôt bola použitá oxidácia peroxidom vodíka za účelom zvýšenia ich obsahu. Oxidáciou vznikli ďalšie dve nové látky - 3-hydroxybutanal a 4-hydroxybutan-2-on. Pri zvýšení teploty oxidácie na 70 °C vznikla kyselina octová ako ďalší rozkladný produkt.

Reakciou butan-1,3-diolu s 3-hydroxybutanalom vzniká látka o relatívnej molekulovej hmotnosti 160. Pokusmi sa potvrdilo, že spektrá nami pripravenej látky a nečistoty butan-1,3-diolu boli totožné a pomocou NMR a MS bola táto látka identifikovaná ako 1-(4-methyl-1,3-dioxan-2-yl)propan-2-ol.

Ďalšie dve látky o relatívnej molekulovej hmotnosti 118 sú pravdepodobne doprovodné látky s molekulovým vzorcom $C_6H_{14}O_2$. Ich hmotnostné spektrum bolo takmer totožné a ďalšia identifikácia ich štruktúry pomocou EI/CI-GC/MS nebola možná. Nečistoty nevznikajú oxidáciou (ani za iných stresových podmienok) a preto ich množstvo nebolo dostatočné pre identifikáciu ďalšími metódami ako napríklad NMR, IR.