

Posudek na diplomovou práci

Název práce: Reakční intermediáty v homogenní zlatné katalýze

Jméno autora: Bc. Elena Shcherbachenko

Oponent: PharmDr. Eliška Matoušová, Ph.D.

Předložená diplomová práce se zabývá studiem reakčních intermediátů adice vody na 1-fenylprop-1-yn katalyzované zlatným komplexem s karbenovým ligandem $[\text{Au}(\text{IPr})(\text{MeCN})]\text{BF}_4$. Cílem práce bylo detekovat reakční intermediáty pomocí hmotnostní spektroskopie s elektrosprejovou ionizací, určit rychlostní konstanty jejich rozpadu a zkoumat kinetický izotopový efekt. Získané informace pak měly sloužit k diskusi o mechanismu dané reakce.

Rozsah práce je přiměřený, členění dobré, v textu je jen minimum překlepů. Literatura je citována správně, v práci je dohromady 55 citací. Snad jen u citace č. 8 by asi správněji měla být uvedena původní práce (tj. Erdmann, H.; Köthner, P. *Z. Anorg. Chem.* **1898**, 18, 48–58).

Diplomová práce je relativně přehledná, jen na některých stranách je vynecháno zbytečně mnoho místa, aby mohl být následující obrázek uveden na samostatné straně, což působí spíše kontraproduktivně (např. na str. 39). Schéma 3.2 je chybně uvedeno až v kapitole 3.1.1, i když text k němu je v úvodu kapitoly 3.1.

V diplomové práci se vyskytují některé formální nedostatky, z nichž nejdůležitější bych zde chtěla zmínit:

- Podle mého názoru není v českém názvu uvedena „zlatná katalýza“ správným překladem anglického „gold catalysis“. Obecně by znělo lépe katalýza zlatem, případně katalýza zlatnými komplexy.
- Český abstrakt práce je napsán ne úplně srozumitelně, což ale nehodnotím jako velký problém, když je práce psaná anglicky.
- Angličtina je na lepší úrovni, až na několik nesprávně uvedených slov a obrátů, např. „devoted“ na str. 6, „decays“ na str. 14, „unlikable“ na str. 17, „on low temperature“ (namísto at) na str. 20, „kinetic“ (namísto kinetics) na str. 22, „obtain“ (namísto obtained) na str. 24, „shows“ (namísto show) na str. 47, nebo chybějící podmět ve větě (it) na str. 28.
- Na str. 7 je chybně rozepsaná zkratka pro IPr (pomlčky, velké písmeno, chybí e na konci), podobně i v obou abstraktech.
- Ve Schématu 3.2 chybí tečka v allenu.
- V textu by se mělo u odkazů na schémata uvádět „Scheme“ s velkým písmenem. Několikrát je to uvedeno správně, ve většině případů však s malým s.
- V Tabulce 5.1 a 5.2 jsou nekonzistentně uvedeny desetinné čárky, resp. tečky. V anglicky psaném textu by měly být tečky.
- Na str. 35 je u diaurovaného intermediátu $[\text{Au}_2(\text{IPr})_2(\text{PhCCCH}_3)(\text{OH})]^+$ chybně uvedena hmota 1187 namísto 1303.
- Na str. 37 věta nad rovnicí 5.6 nedává smysl.
- V grafech na Obr. 5.8 chybí „full curves“ uvedené v popisku.
- Ve Schématu 6.3 u *n*-BuLi má být *n* kurzívou.

K práci mám dále několik věcných připomínek:

- Cíle práce jsou velice stručné, k lepší orientaci a pochopení celé práce by bylo lepší zde uvést konkrétní reakci, která se bude zkoumat (namísto „chosen reaction“), a také že se bude provádět měření kinetiky reakce pomocí NMR.
- V úvodu na str. 11 je třeba být opatrnější u tvrzení o ceně zlata. V současné době jsou platina i palladium levnější než zlato a citace z roku 2007 je z tohoto hlediska hodně zastaralá. (I když se jedná o výborné Hashmiho review.)
- Na str. 25 a dále uvádíte u přípravy reakčních směsí pouze použité objemy zásobních roztoků. Tady bych velmi ocenila, kdyby bylo uvedeno, kolika mol% katalyzátoru v reakci to odpovídá, protože bez použití kalkulačky to čtenář nemá šanci zjistit.
- Kapitola NMR na str. 44 je úplně vytržená z kontextu. Není zde ani žádná úvodní věta, která by vysvětlila, proč se NMR měření vlastně provádělo. Přitom v Diskusi na str. 47 je uvedeno, že dostatečně pomalá reakce (což bylo zjištěno právě pomocí NMR) byla podmínkou pro její sledování pomocí ESI-MS. Podle mého názoru by tedy bylo lepší, kdyby tato kapitola byla už na začátku Výsledků s diskusí.
- U experimentu na str. 52 chybí charakterizace produktu, nebo alespoň odkaz na charakterizaci již popsané látky v literatuře.

K diplomové práci mám následující otázky:

1. V práci není konkrétně uvedeno, jak bylo provedeno monitorování pomocí ESI-MS. Bylo to kontinuálním nástřikem nebo byl proveden každou minutu mechanický nástřik? Byla zajištěna homogenita reakční směsi?
2. Proč bylo u experimentů v Tab. 5.1 a 5.2 provedeno více měření pro „time delay“ 1 hod? Bylo to z důvodu větší odchylky u prvního měření?
3. V Závěru zmiňujete, že pro rozlišení navržených mechanismů reakce (na Schématech 5.4 a 5.5) by bylo potřeba provést doplňující experimenty. Můžete blíže specifikovat, které by to mohly být a co byste z nich mohla zjistit? Proč nebyly některé z nich provedeny?

Závěrem bych ráda konstatovala, že předložená práce i přes zmíněné výhrady splňuje požadavky kladené na tento typ prací a doporučuji ji proto k obhajobě.

Hodnocení: výborně

V Praze dne 9. 9. 2016

.....
podpis oponenta