

## **Posudek diplomové práce Bc. Barbory Vystrčilové na téma „Příprava organických karbonátů katalytickou reesterifikací“.**

Diplomová práce Bc. Barbory Vystrčilové se zabývá velice perspektivním tématem, a to reesterifikací dimethylkarbonátu (DMC) různými typy primárních a sekundárních alkoholů katalyzovaných komplexními sloučeninami a uhličitane draselným.

Tato práce je důležitá zejména s ohledem na to, že v případě nalezení "zelené" metody methylace oxidu uhličitého na DMC bude tento možné převádět na významné produkty či meziproducty organické chemie. Jedněmi z těchto meziproductů, vhodnými zejména jako specifická paliva, maziva, alkylační činidla a antidetonační přísady jsou právě lineární karbonáty. Další výhodou těchto sloučenin je jejich nízká toxicita a využitelnost i k dalším organickým transformacím. Tyto karbonáty se však průmyslově vyrábí pomocí velice , zejména pro životní prostředí, nebezpečných syntéz, a to zejména pomocí transformací fosgenové chemie.

Kandidátka využila klasických reakcí při atmosférickém tlaku s cca jedním procentem tří typů katalyzátorů: a) čtyř typů organocínicitých katalyzátorů, b) jednoho imobilizovaného organocínatého katalyzátoru a c) uhličitane draselný na aktivním uhlí. Použité katalyzátory lze rozdělit na Lewisovské kyseliny - a) a b) a klasický bazický katalyzátor - c). Z výsledků diplomové práce vyplývá, že nejlepších výtěžků při reakcích DMC s butanoly na dibutylkarbonáty bylo dosaženo v případě katalyzátoru č. 1, tj. monoorganocínicitého katalyzátoru a uhličitane draselného. V případě pokusu o reesterifikaci DMC pomocí terciárních alkoholů nebo nerozvětvených alkoholů s delšími alifatickými řetězci nebylo dosaženo požadovaných výsledků, avšak v případě lineárních dlouhých řetězců jako např. n-oktyl vznikají dialkylethery. K identifikaci produktů a kvantifikaci výsledků bylo použito plynové chromatografie s FI, TC a MS detektory.

Samostatná práce je členěna klasickým způsobem s rozsáhlou, ale hodnotnou teoretickou částí s kvalitně zpracovanými literárními odkazy. Experimentální část obsahuje všechny dostatečné údaje pro případnou reprodukci výsledků, včetně všech kalibračních řad použitých při stanovování výtěžků produktů studovaných reakcí. V kapitole Výsledky jsou zpracovány jednotlivé typy katalýz v přehledných tabulkách a doplněny o grafy a chromatografické záznamy včetně MS fragmentací jednotlivých eluentů. Kapitola Závěr vhodně shrnuje dosažené výsledky. Celá práce je doplněna nejen velkým množstvím odkazů

zejména na patentovou literaturu ale také přílohou částí. K této práci mám následující výtky, komentáře a náměty k diskusi:

- 1) v teoretické části dochází k pomíchání anorganického a organického názvosloví a to zejména v názvech aniontů vs. funkčních skupin (uhličitan vs. karbonát)
- 2) ve vzorcích a jejich popiscích jsou použity jiné fonty než v textu, a také některé popisky ve schématech působí poněkud roztrhaně
- 3) aromatické kruhy ve vzorcích jsou naznačovány dvěma různými způsoby což působí nekonzistentně
- 4) na str. 20, 22 a 24 jsou patrné příklady otrockého překladu z cizích jazyků (např. halid vs. halogenid); vrcholným výtvozem v tomto smyslu je titul schématu 12 str. 25 "Reakce přechodné fáze katalyzátoru alkyl halidů s kovovým karbonátem"; "fenoxid titanu" je dalším z příkladů
- 5) na str. 39 a 40 působí až komicky uvádění molekulových hmotností použitých katalyzátorů na sedm desetinných míst
- 6) katalyzátor č. 5 není organocínčitá sloučenina jak je uváděno v textu, nýbrž sloučenina organocínatá


Následující připomínky jsou námětem na pokračování započatého výzkumu, a mohou být položeny i v rámci obhajoby:

- a) ovlivnil by prováděnou katalýzu faktor sušení a odplynění použitých organických substrátů?
- b) proč nebyly logicky zkoušeny také reesterifikace pomocí fenolů?
- c) lze ovlivnit rovnováhu prováděných reakcí pomocí tlaku?

**Uvedené připomínky nikterak neovlivňují vysokou kvalitu zjištěných výsledků ani nesnižují množství odvedené práce, a samotnou diplomovou práci Bc. Barbory**

**Vystrčilové doporučuji k obhajobě a hodnotím ji známkou**

**výborně-m**

  
doc. Ing. Aleš Růžička, PhD.