

Oponentský posudek diplomové práce Bc. Lucie Richterové:

Využití nových Pd katalyzátorů v ekologicky přijatelných rozpouštědlech

Diplomová práce Bc. Lucie Richterové představuje rozsáhlý materiál publikovaný na 93 stranách.

Diplomová práce je rozdělena standardním způsobem do osmi kapitol. V Teoretické části práce jsou diskutovány faktory, které ovlivňují náročnost výroby farmaceutik z hlediska vlivu na životní prostředí (E-faktor, mnohostupňové syntézy, volba procesu s cílem používat minimum kroků a tím i rozpouštědel a to nejlépe CO₂ nebo vodu, dvoufázové systémy, recyklace katalyzátorů, jejich rozpustnost ve vodě, atd.). Suzuki-Miyaura cross-coupling reakce je vhodným modelem k testování náhrady organických rozpouštědel vodou, což vyvolává potřebu vývoje ve vodě rozpustných katalyzátorů, nezbytných pro tuto reakci. Obecně nejsnazším řešením je zavedení sulfoskupiny do molekuly katalyzátoru.

Cíle diplomové práce jsou vytyčeny na straně 30. Jedná se o výzkum Pd(II) katalyzátorů rozpustných ve vodě na bázi nových fosfinů a jejich Pd(II) komplexů. Katalyzátory byly testovány na Suzuki-Miyaura cross-coupling reakci a výsledky porovnány s výsledky získanými pomocí komerčně dostupného katalyzátoru. Druhým tématem jsou katalyzátory pro hydrogenaci s důrazem na syntézu nových komplexů ruthenia. Téma disertační práce je velmi aktuální, protože o aplikaci tohoto přístupu má velký zájem farmaceutický průmysl.

V Experimentální části jsou detailně popsány syntézy a charakterizace fosfinů (7 látek) a jejich Pd(II) komplexů (10 sloučenin), které byly využity jako katalyzátory při testování Suzuki-Miyaura cross-coupling reakce. Dále byla uvedena příprava osmi nových komplexů Ru(II) s fosfiny. Nově připravené sloučeniny byly charakterizovány pomocí elementární analýzy, ¹H, ¹³C, ³¹P a ¹¹⁹Sn NMR spekter, hmotnostních spekter a v šesti případech i rentgenovou strukturní analýzou.

V kapitole 5 Použité experimentální techniky jsou velmi stručně zmíněny základní principy těchto technik a jejich charakteristické veličiny.

V kapitole Výsledky a diskuse jsou diskutovány argumenty jednoznačně podporující navržené struktury a komentovány výsledky katalytických studií, které vykazují ve směsi etanol/voda stejnou nebo vyšší konverzi ve srovnání s komerčně používaným katalyzátorem [(PPh₃)₂PdCl₂]. Analogický postup byl uplatněn při studiu sloučenin ruthenia, kde byla věnována

pozornost vlivu SnCl_2 jako potenciálního ko-katalyzátoru. Byl proveden výzkum vlivu reakčních podmínek (rozpuštědlo, báze, katalyzátor, ligand, teplota) na průběh studovaných reakcí.

Diplomová práce je ukončena jednostránkovým Závěrem, majícím spíše charakter souhrnu, a velmi stručným přehledem literatury.

Výsledky práce jsou sepsány srozumitelným způsobem, jsou detailně členěné a závěry jsou založeny na důkladné analýze experimentálních dat.

K práci nemám zásadnějších připomínek spíše jen komentář.

1. Byla popsána příprava osmi nových komplexů Ru(II) s fosfiny. Jedná se o rozšíření tématu oproti zadání diplomové práce, což je jistě pozitivní. V textu diplomové práce bylo ale zmíněno, že tyto látky mohou sloužit jako katalyzátory pro redukci. V textu jsem nenašel zmínku o tom, že by byly skutečně testovány. Jsou tyto testy plánovány?
2. Existují nějaké katalyzátory, třeba i jiného typu než fosfinového, použitelné pro katalýzu Suzuki-Miyaura cross-coupling reakce v čisté vodě?
3. Nové katalyzátory pro Suzuki-Miyaura cross-coupling reakce vykazovaly stejné nebo o něco lepší výsledky než standardně používaný katalyzátor $[(\text{PPh}_3)_2\text{PdCl}_2]$. Otázka se týká toho, zda by byla šance použít připravené katalyzátory v technické praxi, zda by byla vyhovující cena, stabilita katalyzátorů a možnost opakovaného použití, a pod.

Závěr:

Diplomantka odvedla velké množství experimentální práce, nejen splnila ale objemem práce a rozšířením tématu i překročila zadání diplomové práce, připravila a důkladně charakterizovala tři třídy látek. Pd(II) komplexy byly využity jako katalyzátory při testování Suzuki-Miyaura cross-coupling reakce. Na základě výše uvedených skutečností hodnotím recenzovanou diplomovou práci známkou

v ý b o r n ě.



Prof. Ing. Antonín Lyčka, DrSc.

Výzkumný ústav organických syntéz a.s.

Rybitví 296

533 54 Rybitví

V Pardubicích 25.5.2015