

Doporučení školitele

Disertační práce Ing. Adély Fridrichové s názvem: „Struktura a reaktivita komplexů skandia a yttria stabilizovaných cyklopentadienylovými ligandy“ byla vypracována na Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AVČR v oddělení Syntézy a katalýzy. Tématice metalocenových komplexů a jejich využití v katalýze se zde věnujeme již řadu let, ovšem doposud se vždy jednalo o přechodné prvky IV. skupiny (Ti, Zr a Hf). V této disertační práci Ing. Adély Fridrichové je z minulého výzkumu zastoupena pouze zkušenost s přípravou různě substituovaných cyklopentadienylových kruhů. Práce se věnuje přípravě sloučenin III. skupiny přechodových prvků, konkrétně skandia a yttria, tedy oblasti, ve které bylo jen minimum předchozích zkušeností, ale která na druhé straně otevírá zcela nové možnosti dalšího výzkumu. Doktorandka tedy stála před výzvou zpracovat zcela netknuté téma s minimem zkušeností o studované oblasti, které jak se ukázalo, kladlo vysoké nároky na čistotu a preciznost práce vzhledem k vysoké reaktivitě organometalických sloučenin skandia a yttria vůči kyslíku a vzdušné vlhkosti.

Jak vyplývá z názvu, práce je zaměřena na studium možností přípravy metalocenových komplexů skandia a yttria a testování jejich reaktivity v stechiometrických i katalytických reakcích. Sterické a elektronické vlastnosti komplexů se měnily pomocí substituce na cyklopentadienylových kruzích. Disertační práce je členěna klasickým způsobem na teoretickou, výsledkovou a experimentální část, přičemž závěr poté shrnuje obdržené výsledky. V teoretické části Ing. Fridrichová popisuje zhruba na 30 stranách dosud získané znalosti o přípravě, stabilizaci a reaktivitě relevantních systémů a z literární rešerše poměrně jasně vyplývá, že se jedná o problematiku aktuální, velmi rychle se rozvíjející a náročnou na dodržování experimentálních podmínek. V závěru této kapitoly jsou formulovány záměry a cíle disertační práce.

V experimentální části je popsána příprava a charakterizace všech sloučenin. Sloučeniny byly identifikovány především pomocí multinukleární NMR spektroskopie pouze několik z nich pomocí rentgenostrukturní analýzy. Právě neochota většiny připravených sloučenin poskytovat krystalický materiál kladla vysoké nároky na zručnost při syntéze, manipulaci a izolaci jednotlivých sloučenin a to zejména v inertních podmínkách, přičemž některé z derivátů vykazovaly vysokou citlivost na vzduch a vlhkost.

Výsledková část je logicky rozdělena na jednotlivé podkapitoly, které odpovídají vždy uceleným tématům, které se věnují chemii polosendvičových a metallocenových sloučenin a na závěr polymerizačním reakcím. A právě tyto výsledky katalytické aktivity převážně yttrocenových komplexů přinesly velmi zajímavé a důležité poznatky. Při srovnání katalytické aktivity při polymerizaci ethylénu bez použití kokatalyzátoru methylovými yttrocenovými komplexy se plně projevil vliv různé substituce na cyklopentadienylovém kruhu na celkovou aktivitu systému a typ vznikajícího polymeru. Tyto systémy jsou aktivní i při mírných podmínkách a poskytují v závislosti na teplotě lineární vysokohustotní či nízkohustotní polyethylén. Velmi perspektivní oblastí výsledků pak je i in-situ aktivace více stabilnějších chlorokomplexů alkylačními sloučeninami lithia a hořčíku vedoucí k změně povahy single site koordinační polymerizace na kontrolovanou polymerizaci tzv. coordinative chain transfer polymerization (CCTP).

Hlavní přínos práce Ing. Adély Fridrichové spatřuji v systematickém prostudování chemie metallocenových sloučenin skandia a yttria s různě substituovanými cyklopentadienylovými kruhy a jejich využití jako katalyzátorů v polymerizačních reakcích ethylénu. Na tomto místě je nutné dodat, že se tímto otevřelo v oddělení Syntézy a katalýzy nové téma, na němž bude možné stavět i v budoucnu například při studiu obdobných systémů pro těžší prvky III. skupiny a lanthanoidy.

Podstatná část výsledků disertační práce byla publikována ve dvou publikacích v impaktovaných časopisech (European Journal of Inorganic Chemistry a Inorganic Chemistry Communications) a další publikace týkající se převážně katalytických výsledků je již před dokončením a je spíše vinou školitele, že se tyto katalytické výsledky nestihly publikovat před dokončením této práce.

Ing. Adéla Fridrichová se zhostila svého úkolu úspěšně. Práce je podle názoru školitele přehledná, uváděné závěry jsou logické, dobře formulované a přesvědčivě podepřené experimentálními výsledky. Musím zde vyzdvihnout samostatnost doktorandky v celém průběhu studia jednak při experimentální práci a charakterizaci sloučenin, ale i při formulování tezí disertační práce.

Na základě výše uvedených faktů s radostí disertační práci Ing. Adély Fridrichové **doporučuji k obhajobě.**

V Praze 12. 1. 2017



Mgr. Michal Horáček, Ph.D.