

## Posudek oponenta diplomové práce

Předložená diplomová práce Bc. Terezy Korábkové je zaměřena na studium regioselektivity palladiem katalyzovaných C–H aktivačních reakcí. Uchazečka v úvodu své diplomové práce poskytuje dobře napsaný a vcelku vyčerpávající úvod do studované problematiky a použité metodologie. Následuje experimentální část, ve které jsou popsány použité instrumentální techniky a provedené experimenty. V dalším kapitole potom uchazečka získané výsledky adekvátním způsobem komentuje. Připravené látky jsou charakterizovány pomocí NMR spektroskopie (včetně 2D experimentů), infračervené spektroskopie, hmotnostní spektrometrie a stanovením bodů tání. V případě jednoho z připravených palladnatých komplexů a jednoho substrátu pro katalytické reakce se dokonce podařilo získat monokrystaly vhodné pro stanovení jejich krystalové struktury. Výsledky některých katalytických experimentů jsou potom diskutovány za pomoci DFT výpočtů.

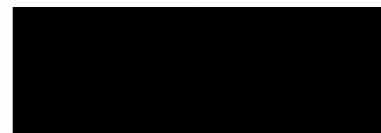
Diplomová práce shrnuje značné množství experimentální práce, a ačkoliv ne všechny provedené experimenty lze označit za úspěšné, a ne všechny vytyčené cíle za zcela dosažené, přináší zajímavé a pro danou problematiku relevantní zjištění a je psána na odpovídající úrovni. Získaná experimentální data jsou diplomantkou poměrně přehledně prezentována a až na některé výjimky dostatečně diskutována. V tomto ohledu postrádám zejména zevrubnější diskusi prezentovaných krystalových struktur, která by vzhledem k zaměření diplomové práce byla namísto především u velmi zajímavého komplexu 1.3. Samotné zpracování obrázku molekuly této látky považuji za poněkud odbyté. V textu lze sice nalézt několik méně či více závažných překlepů a formálních nedostatků, například chyba v číslování obrázků (v sekci Teoretická část nalezneme obrázky 1-3, v sekci Výsledky a diskuse se potom znovu objevuje obrázek 2), nebo chybně nakreslený produkt ve Schématu 24 na straně 31, jejich počet se však nijak nevymyká a nesnižuje zásadním způsobem celkovou kvalitu díla. Osobně v Experimentální části postrádám snahu přiřadit jednotlivé signály v NMR spektrech, a především připravené palladnaté komplexy by zasloužily zevrubnější charakterizaci. Minimálně doplnění ESI MS analýzy, která by vzhledem k bazickým pendantním ramenům neměla být problematická. Jediným vyloženým nedostatek je potom chybějící popis rentgenostrukturní analýzy, včetně odkazů na použitý software. Z hlediska jazykové úrovně bych práci vytknul sklon autorky k používání četných anglickanismů (solvent, reagent, DFT kalkulace, ellipsoids). Celková kvalita práce je nicméně na dobré úrovni, a proto navrhuji její přijetí k obhajobě a klasifikaci stupněm výborně (A).

K předložené práci mám následující otázky a náměty do diskuse:

1. Z jakého důvodu nebyly připravené palladnaté komplexy studovány pomocí hmotnostní spektrometrie? Ta by mohla pomoci objasnit například nuklearitu vznikajících komplexů.
2. Připravený komplex 1.3 je strukturně velmi zajímavý. Neuvažovali jste o studium jeho stechiometrické reaktivity s vhodnými činidly? Tato studie by mohla ukázat, který z palladacyklů v molekule (aminový nebo amidový) reaguje přednostně.
3. Donorové vlastnosti  $\text{NMe}_2$  skupiny, kterou používáte jako DG, lze kontrolovat pomocí změny pH. Zvažovali jste pro úpravu pH použití kyselin obsahujících nekoordinující aniont (jako je např.  $\text{HBF}_4$ )?

Navrhovaná klasifikace: Výborně (A)

Datum vypracování posudku: 27.8. 2021



RNDr. Jiří Schulz, Ph.D.  
Univerzita Karlova v Praze  
Přírodovědecká fakulta  
Albertov 6, 128 43 Praha 2