

## Posudek školitele na diplomovou práci Bc. Yelyzavety Nikitiny s názvem “ Syntetické cesty vedoucí k neopentylcyklopentanu“

Paní Bc. Yelyzaveta Nikitina vypracovala svou diplomovou práci v rámci navazujícího magisterského studia na Ústavu organické chemie a technologie, Fakulty chemicko-technologické, Univerzity Pardubice.

Jejím úkolem bylo prověřit možnosti přípravy neopentylcyklopentanu za využití výchozích látek a experimentálních technik, které dovolí jeho přípravu v gramovém měřítku. Optimalizované procedury by měly posloužit k přípravě látky v množství cca 20 g, které umožní studium mechanismu  $\beta$ -štěpení cílové molekuly (nebo jejích isomerů) probíhající při hydrokrakování diethylbenzenů na Pt/H-\*BEA zeolitech ve spolupráci s ústavem Fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR. Neopentylcyklopentan dosud nebyl připraven v čisté formě a charakterizován, takže jeho příprava (navíc v tomto množství) byla již od počátku náročným výzkumným úkolem.

Bc. Nikitina experimentálně prověřila několik syntetických postupů, avšak narážela na několik typově stejných problémů, které komplikovaly její snahy. Jmenovitě se jedná o sterickou náročnost *terc*-butyl skupiny (která znemožnila využití řady jinak rutinních reakcí), náchylnost skupin, sousedících s *t*-Bu skupinou, k přesmykům (H-shift, alkyl-shift), absence chromoforu komplikující vizuální detekci (např. na TLC), vysoká těkavost jak cílové molekuly (odhadovaný bod varu při STP cca 160 °C) tak meziproductů, spojená s tendencí k tvorbě azeotropických směsí s běžnými organickými rozpouštědly. Ze zmíněného výčtu komplikací je tedy patrné, že příprava neopentylcyklopentanu byla komplikována nejen po stránce chemické reaktivity, ale také z čistě praktických důvodů zejména při požadavku připravovat látku v gramových množstvích. Nelze taktéž nezmínit zásah vládních protiepidemických opatření, které měly za důsledek, že významnou většinu AR 2020/21 nebylo možné vykonávat žádnou laboratorní práci.

Experimentální činnosti se Bc. Nikitina zhostila s odhodláním a pracovitostí i přes všechny komplikace a úskalí se jí podařilo vypracovat metodiku, která vede k přípravě neopentylcyklopentanu. Cílová látka však nebyla připravena v čisté podobě a nebylo tedy možné jí detailně spektrálně charakterizovat.



Své výsledky zpracovala ve formě 63stránkové diplomové práce, která je členěna do 6 kapitol a obsahuje 9 stran příloh – naměřených spekter.

V rámci teoretické části Bc. Nikitina shrnula možnosti přípravy isomerů/homologů cílové molekuly a získané poznatky využila k návrhu retrosyntetické analýzy.

V experimentální části práce byly popsány jednotlivé experimenty, které však ve většině případů končily neúspěšně. V případě úspěšných experimentů jsou pak produkty analyzovány zejména pomocí GC/MS a  $^1\text{H}$  a  $^{13}\text{C}$  NMR spektry. Z NMR spekter je jasné, že žádná z připravených látek nebyla v čistotě přesahující 95 %, avšak vzhledem k charakteru látky považuji i toto za velmi úspěšné.

Na závěr bych rád vyzdvihnul že i přes velmi komplikované a mnohdy frustrující zadání a vnější okolnosti se Bc. Yelyzavětě Nikitině podařilo splnit všechny body zadání, a proto hodnotím diplomovou práci známkou:

**Výborně (A)**

V Pardubicích dne 10. 5. 2022



---

Ing. Jan Bartáček, Ph.D.  
(školitel)