

# OPONENTSKÝ POSUDEK DIPLOMOVÉ PRÁCE

## Syntéza a charakterizace heterocyklických sloučenin s atomem boru vycházející z $\beta$ -enaminoesterů

Autor: **Bc. Nicol Š V Á B K O V Á**

Cílem diplomové práce Bc. Nicol Švábkové byla syntéza a charakterizace substituovaných šestičlenných heterocyklů obsahujících atom boru. Příprava vycházela z  $\beta$ -enaminoesterů. Jejich reakcí s diazonium-tetrafenylborátovými solemi a následnou termickou cyklizací byly připraveny substituované triazaboriny. Reakcí s diazonium-tetrafluorborátovými solemi a následnou reakcí s  $\text{BF}_3 \cdot \text{Et}_2\text{O}$  byly získány směsné produkty obsahující také oxadiazaborinový cyklus. Strukturní analýza byla provedena s využitím NMR technik. Téma diplomové práce navazuje na studie reakcí polarizovaných ethylenů, které je dlouhodobě studováno na Oddělení mechanismů organických reakcí Ústavu organické chemie a technologie FCHT Univerzity Pardubice. Poznatky získané v rámci této práce budou významnou inspirací pro další výzkum.

Diplomová práce je členěna do šesti částí a je doplněna Přehledem použité literatury a obsáhlými Přílohami NMR spekter. Úvod stručně seznamuje s  $\beta$ -enaminoestery a přístupy k jejich syntéze. Teoretická část přehledně uvádí práce zabývající se studovanou problematikou publikované v letech 2023 a 2024. V deseti kapitolách jsou shrnuty novinky v syntéze heterocyklů vycházejících z  $\beta$ -enaminoesterů. Pozornost je věnována také mechanismům publikovaných reakcí.

Experimentální část po přehledu metodik NMR a RTG měření popisuje syntézu výchozích látek, ethyl-3-aminobut-2-enoátu (**1**) a diazoniových solí. V přípravě látky **1** je uvedeno „přidán amoniak (38 ml)“, zřejmě se ale jedná o vodný roztok amoniaku. Následuje popis syntézy acyklických produktů. Zde na str.52 v **Tabulce 3** je pro látku **68c** publikován hmotnostní výtěžek reakce, který je v nesouladu s uvedenými procenty. Oceňuji, že diplomantka prokázala svou zručnost v oblasti organické syntézy, příprava a izolace diazoniových solí, termická cyklizace, dělení směsných produktů atd. Připravené látky jsou charakterizovány  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  a  $^{11}\text{B}$  NMR, EA. Na str. 53 je uvedena EA pro látku **68c** sumárního vzorce  $\text{C}_{34}\text{H}_{39}\text{BN}_4\text{O}_2$ , uvedená data neodpovídají struktuře. V souvislosti s interpretací  $^{15}\text{N}$  NMR spekter látek **68** a **69** bych se ráda autorku požádala o vysvětlení: Pro acyklický produkt **68d** je v přílohách pouze  $^1\text{H}$  NMR, v popisu  $^{15}\text{N}$  NMR jsou uvedeny chemické posuny pouze pro 3 dusíkové atomy, v molekule jsou 4 (str.54). Pro azokopulační

produkt **69a** jsou uvedeny chemické posuny všech 3 atomů dusíku, pro látky **69b** a **69d** však pouze dva. Ve struktuře jsou 3 resp. 4 atomy dusíku (str. 56, 57).


Část Výsledky a diskuze nejprve shrnuje výsledky v oblasti reakcí polarizovaných ethylenů získané na pracovišti v posledních letech. Následuje podrobný rozbor provedených experimentů a interpretace NMR spekter. Jedná se o krásný příklad použití této techniky v analýze struktur připravených látek. Čím si autorka vysvětluje překvapivou stabilitu acyklických produktů **68a-d** ?

Výsledky práce jsou shrnuty ve stručném Závěru. Diplomová práce je doplněna Seznamem použitých zkratk a 69 literárními odkazy. Závěrečné Přílohy obsahují reprezentativní  $^1\text{H}$   $^{13}\text{C}$   $^{15}\text{N}$   $^{11}\text{B}$  a  $^1\text{H} - ^{15}\text{N}$  HMBC NMR spektra připravených sloučenin.

Práce je přehledně zpracována s velmi pěknou grafickou úpravou. V textu jsem našla jen drobné nepřesnosti:

- Str. 12 systematický název TEMPOLu
- Str. 73 třetí řádek: acyklické sloučeniny **66a-c** — má být **68a-c**
- Str. 100 první  $^1\text{H}$  NMR spektrum není látka **69d** ale **68d**

Vzhledem k tomu, že diplomantka splnila všechny body zadání a prokázala schopnost samostatné tvůrčí práce, hodnotím její diplomovou práci jak po stránce rozsahu a kvality provedených experimentů, tak po stránce zpracování jako *výbornou*, klasifikace **A**, a doporučuji ji k obhajobě.

  
MVDr. Ing. Ludmila Hejtmánková, Ph. D.  
Zentiva a.s. Praha  
Pobočka Pardubice-Doubravice

Pardubice 22.5.2024