

Oponentský posudek diplomové práce Bc. Jakuba Moravce

Estery nitrobenzoových kyselin s diethylenglykolem

Oponent: Mgr. Radovan Skácel, Ph.D.
Explosia, a.s.
Výzkumný ústav průmyslové chemie
Semtín 107
530 50 Pardubice

Předložená diplomová práce je věnována problematice esterů diethylenglykolu mono- a dinitrobenzoové kyseliny, které by mohly být využity při výrobě propelentů. Jde o poměrně perspektivní náhrady karcinogenního dinitrotoluenu a také nitrosaminy tvořících stabilizátorů typu Akardit a Centralit, které se v současné době používají. Uvedené látky jsou zajímavé z pohledu komerční dostupnosti, protože některé z nich jsou meziprodukty při výrobě síťovadel polyurethanů. Mají poměrně nízký obsah energie, což je pro tzv. deterenty žádoucí, přičemž je jejich rozklad exotermní, což je zase výhodné z balistického hlediska.

V úvodu práce autor výstižně shrnuje možné přínosy nových látek a problematiku deterentů z pohledu teorie i praxe. Teoretická část pak obsahuje literární údaje o syntéze známých esterů ethylenglykolu, diethylenglykolu, triethylenglykolu a triethanolaminu s použitím nitrobenzoových kyselin a jejich chloridů.

Praktická část pak obsahuje cenné informace o syntéze cca desítky látek, nejprve v gramových množstvích a dále pak již o klasické přípravě v trojhrdlé baňce v řádu desítek až stovek gramů. Oceňuji provedení řady pokusů ve větším množství, což poskytuje většinou již reálné podklady pro případnou výrobu v poloprovozním měřítku. Celkový objem provedené práce a počet vyhodnocení produktů v mnoha ohledech je značný. Kromě nitro a dinitrobenzoátů je opsána také syntéza dinitro-azido derivátů benzoové kyseliny a meziproductů (chloridů). Zavádění azidů je přínosné z pohledu kladného slučovacího tepla těchto sloučenin, kdy může být dosaženo vysokého výkonu propelentu – vysoké úst'ové rychlosti, pokud bude rozklad deterentu probíhat ještě dostatečně pomalu, pro snížení „tlakové špičky“, při odhořívání povrchu propelentu.

Všechny připravené produkty jsou hodnoceny s pomocí elementární analýzy, FTIR a Ramanových spekter a HPLC, dále byla stanovena teplota tání produktů, hustota a vyhodnocena teplota rozkladu a další parametry s pomocí DTA. Konečně byla také stanovena bezpečnost produktů s pohledu citlivosti k mechanickým podnětům.

V závěru jsou stručně shrnuty možnosti syntézy nitro i azido derivátů esterů kyseliny benzoové. Autor se přiklání k syntéze s pomocí chloridů kyselin, což vede ke snadnější a úplnější přípravě produktů. Také je zmíněna možnost analýzy produktů z pohledu možného využití různých metod. V závěru bych ocenil možnost dalšího využití produktů a obsírnější diskusi k potenciálu produktů a možného dalšího směřování následných výzkumů, i když to nebylo přímo v zadání práce,

Celkově autor prokázal schopnost dobré orientace v literatuře, zvolil správně směry dalšího výzkumu, využil všech dostupných metod ke zjištění vlastností připravených esterů nitrobenzoových kyselin. Diplomová práce vypovídá o velkém množství provedené práce a vyhodnocení mnoha získaných produktů z pohledu čistoty, stability i užitných vlastností produktů. Formálně je práce téměř bez chyb, zpracována přehledně a výstižně. Jde o cenný příspěvek v oblasti výroby nových látek místo karcinogenního dinitrotoluenu pro oblast nitrocelulózových střelných prachů a případně i namísto TNT pro lité trhavin.

Doporučuji komisi přijmout diplomovou práci k obhajobě a hodnotím ji výborně.

V Pardubicích, 26.8.2020

Mgr. Radovan Skácel, Ph.D.

Autorovi práce bych rád položil tyto dotazy:

- 1) Jaká je předpokládaná akutní a chronická toxicita vyrobených sloučenin, ve srovnání s DNT a TNT ?
- 2) Které připravené látky by autor doporučil pro náhradu TNT v oblasti trhavin ?
- 3) Jaké navrhuje autor vylepšení postupů z pohledu omezení znečištění deriváty chloru, zejména pro výrobu detergentů?