

Posudek

Na disertační práci Ing. Ing. Eva Koudelkové

Carbonylic species in alkali-metal exchanged zeolites

Předložená disertační práce se zabývá studiem alkalických forem zeolitů. Zvolené téma disertační práce hodnotím velmi kladně, neboť si dává za cíl objasnění problému, který je velmi aktuální.

Předložená disertační práce se skládá z 4 původních článků, nicméně autorka se zapojila do širšího výzkumu v této oblasti a publikovala i články s jinou tematikou, nicméně zaměřené na materiálový výzkum. Základní články disertace byly publikovány v časopisech *Topics in Chemistry and Material Science*, *Microporous Mesoporous Materials*, *J. Therm. Anal. Calorim.* a *Catalysis Today*, z nichž zejména **Microporous Mesoporous Materials** a **Catalysis Today** představují velmi kvalitní mezinárodní časopisy. Z tohoto pohledu jsou splněny základní požadavky na zveřejnění výsledků disertační práce, a protože byly jejich rukopisy recenzovány mezinárodními odborníky, snižuje to možnosti oponenta ke kritickým poznámkám.

K dosažení cílů disertace použila Ing. Koudelková kombinaci IČ spektroskopie, objemových měření adsorpčních izoterem a kalorimetrických adsorpčních tepel. Práce přinesla informace o molárních absorpčních koeficientech pro různé typy karbonylů, které se tvoří interakcí se sodnými a draselnými formami zeolitů MFI a FER.

Disertační práce je sepsána celkem slušnou angličtinou, což by mělo být již standardní při sepisování doktorských disertačních prací. Na druhé straně třeba v českém abstraktu je možné nalézt větu V literature bylo popsáno několik druhů karbonylů vznikající interakcí oxidu uhelnatého ... to by si určitě zasloužilo větší pozornost.

K disertační práci mám následující poznámky a dotazy k diskusi při obhajobě:


- 1) Umístění kationtů v zeolitu ... na straně 19 je věta ... Middle sized sodium ions bind equally in rings on the channel wall and at channel intersections.... jde zřejmě o zjednodušení popisu umístění sodných kationtů, neboť toto může, ale nemusí platit ve všech typech zeolitů. Závisí na velikosti kanálů a příslušných kruhů, které daný kanál nebo průsečík kanálů vytvářejí.
- 2) Tabulka 2 uvádí relativní populace karbonylových komplexů ve studovaných zeolitech typu FER a MFI s kationty sodíku a draslíku. Je výskyt můtkových komplexů závislý jen na struktuře zeolitu, Si/Al poměru a typu kationtu? Jsou výsledky kvantitativní analýzy přenositelné také na adsorpci jiných plynů?
- 3) Experimentálně studované frekvence vibrací adsorbovaných molekul CO a adsorpční tepla uvolňovaná při vzniku těchto komplexů jsou často diskutována a porovnávána s výsledky tepetických výpočtů a simulací. Mají Vámi určené hodnoty molárních absorpčních koeficientů také oporu ve výsledcích teoretických výpočtů?
- 4) V čem spatřujete význam existence můtkových komplexů studovaných v této disertační práci?

Závěrem lze konstatovat, že disertační práce Ing. Evy Koudelkové je na velmi dobré úrovni. Ing. Koudelková provedla velké množství vhodně navržených experimentů, které umožnily

dospět k zajímavým závěrům o chování a umístění kationtů alkalických kovů v zeolitech ZSM-5 a ferrieritu. Na základě prostudování disertační práce mohu prohlásit, že tato disertační práce splňuje všechny požadavky kladené na disertační práci a doporučuji ji k obhajobě.

V Praze, 29. 8. 2017

Prof. Ing. Jiří Čejka, DrSc.





ÚOCHB AV
CR
IOCB PRAGUE

Ústav organické chemie a biochemie
Akademie věd České republiky, v. v. i.
Institute of Organic Chemistry and Biochemistry
of the Czech Academy of Sciences

Oponentský posudek disertační práce Ing. Evy Koudelkové

„*Carbonylic species in alkali-metal exchanged zeolites*“

Disertační práce Ing. Evy Koudelkové je zaměřena na experimentální studium chování malých molekul uvnitř zeolitových kanálů, konkrétně byla studována interakce oxidu uhelnatého s mimomřížkovými kationty alkalických kovů s využitím kombinace IČ spektroskopie, mikrokalorimetrie a volumetrických měření adsorpčních izoterem. Předložená práce je souborem kvalitních publikací, které jsou vysoce aktuální a představují významný pokrok v popisu adsorpčních komplexů v mikroporézních materiálech.

Disertační práce je koncipována klasicky – po úvodu s přehledným shrnutím současného stavu problematiky následuje popis použitých materiálů a technik. V další části jsou zformulovány základní cíle disertační práce, kterými jsou kvantitativní analýza izolovaných a duálních kationtových center v různých zeolitech s důrazem na určení výskytu můstkových komplexů a stanovení adsorpčních tepel pro individuální kationtová centra. Výsledková část práce je členěna do tří sekcí podle výše uvedených cílů práce. Výsledky jsou podány formou komentovaného souhrnu publikací v odborných časopisech, jež jsou přiloženy jako nedílná součást práce. V závěru je přehledně shrnuto několik hlavních výsledků, za nejvýznamnější považují identifikaci a kvantitativní analýzu můstkových komplexů, která je zásadní pro pochopení adsorpčních vlastností zeolitů. Významným příspěvkem je rovněž vývoj a aplikace metodologie pro stanovení isosterických tepel s využitím VTIR spektroskopie.

Disertační práce je napsána v anglickém jazyce s minimálním počtem formálních nedostatků, jako jsou nepřesné či neúplné citace, nedůsledné používání zavedených symbolů apod. Celkově je úroveň práce po odborné i formální stránce velmi dobrá.

Kromě přiložených publikací (3 práce v impaktovaných časopisech – *Microporous Mesoporous Mat.* [IF=3.615], *J. Therm. Anal. Calorim.* [IF=1.953] a *Catal. Today* [IF=4.636] a kapitola v knize *Topics in Chemistry and Material Science*) je Eva Koudelková spoluautorkou dalších 6 prací (5 vyšlých a 1 zaslané) a 3 přednášek na mezinárodních konferencích, což

dokazuje její odbornou způsobilost a předpoklady k další vědecké práci. Rovněž je nutno zmínit, že autorka je členkou týmu, kterému byl udělen patent č. 306370 „Způsob přípravy submikronových vláken amorfního oxidu křemičitého a submikronová vlákna amorfního oxidu křemičitého připravená tímto způsobem“, jehož unikátnost spočívá ve využití odstředivé technologie výroby anorganických nanovláken.

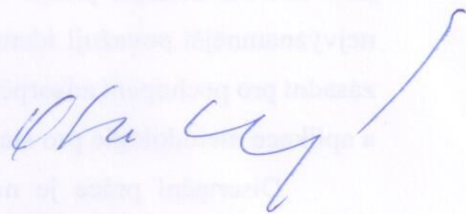
O aktuálnosti a nezpochybnitelné kvalitě dosažených výsledků svědčí množství publikací v kvalitních mezinárodních časopisech, kde již prošly recenzním řízením, a jejich citační ohlas. Přesto chci položit následující otázky jako námět do diskuze:

1) Za velmi zajímavé považuji odlišné chování Na^+ a K^+ iontů při tvorbě můstkových komplexů na duálních centrech. Zdůvodnění, že za toto chování může větší velikost K^+ iontů, která dovoluje jejich větší vzdálenost při tvorbě můstkového komplexu, a tudíž větší pravděpodobnost existence takového páru (str. 35), je opřeno o citaci práce Nachtigallová *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2006**, 8, 4849. V citované práci je ovšem pouze zmínka, že ideální vzdálenost pro tvorbu můstkového komplexu je 7.5Å pro K^+ a 6.5Å pro Na^+ iontový pár. Z čeho vyplývá tvrzení, že pravděpodobnost existence K^+ iontového páru je větší?

2) Jaké další strukturní a dynamické faktory mohou ovlivnit tvorbu můstkových komplexů?

Závěrem mohu konstatovat, že Ing. Eva Koudelková dostatečně prokázala schopnost samostatného tvůrčího myšlení a její dizertační práce splňuje všechny požadavky daného oboru, proto mohu tuto práci **doporučit k obhajobě**.

V Praze dne 1.9. 2017



RNDr. Ota Bludský, CSc.
Ústav organické chemie a
biochemie AV ČR, v.v.i.



ÚSTAV
CHEMICKÝCH
PROCESŮ
AV ČR

Posudek disertační práce

Autor - Ing. Eva Koudelková

Název - Carbonylic species in alkali-metal exchanged zeolites

Oponent – doc. Dr. Ing. Petr Klusoň

Disertační práce ing. Evy Koudelkové s anglickým názvem *Carbonylic species in alkali-metal exchanged zeolites* se zabývá studium chování malých molekul uvnitř zeolitových kanálů a interagujících s ionty kompenzujícími náboj v zeolitové mřížce. Jako charakteristický zástupce malých molekul byl zvolen oxid uhelnatý. Pozornost byla především věnována tvorbě a podmínkám existence tzv. můstkových komplexů v případě zeolitů MFI, FER a BEA. Autorka zvládla řadu experimentálních technik, především IČ spektroskopii, měření adsorpčních izoterem volumetrickou metodou a měření kalorimetrického adsorpčního tepla. Jako hlavní dosažené výsledky doktorandka uvádí, že byly získány informace o molárních adsorpčních koeficientech pro můstkové karbonyly, izolované karbonyly a izokarbonyly, které se tvoří na sodné a draselné formě zeolitů MFI a FER. Dále se podařilo exaktně posoudit množství jednotlivých komplexů. Experimentálně byla určena adsorpční tepla a vibrační charakteristiky adsorpčních komplexů oxidu uhelnatého na alkalických kovech v zeolite BEA.

Práce není členěna standardním způsobem na tři hlavní kapitoly (Teoretickou část, Experimentální část a na Výsledky a jejich diskusi), ale jde o poměrně rozsáhlou Úvodní kapitolu doplněnou jedenáctistránkovým komentářem k výsledkům. Úvodní část je sepsána velmi pečlivě, vyčerpávajícím způsobem a přináší také aktuální přehled literatury z diskutované oblasti. Tato kapitola je rovněž velmi „čtivá“ a dle mého soudu i čtenář bez hlubší znalosti problematiky v ní nalezne dostatek pečlivě vybraných a logicky utříděných informací. Experimentální část není

uvedena, což vyplývá ze zvolené koncepce práce. Informace tohoto charakteru lze dohledat v autorčiných publikacích. Komentáře k výsledkům jsou důkladné, činěné závěry přesvědčivé.

Po formální stránce práce také působí pozitivním dojmem. Odpovídající pozornost byla věnována grafickým výstupům, množství formálních chyb je nízké a dokumentuje pečlivý přístup autorky. Disertace je sepsána anglicky bez vážnějších gramatických a formulačních chyb. Celková jazyková úroveň je velmi solidní.

Vývoj činností spojených s disertační prací Ing. Evy Koudelkové je možné sledovat také prostřednictvím řady konferenčních ústních sdělení a posterů. Přehled těchto aktivit, včetně stáží, účasti na letních školách, kurzech atd. je úctyhodný. Za zcela mimořádnou považuji skutečnost, že kolegyně Eva Koudelková je v současné chvíli spoluautorkou 10 publikací, které vyšly v časopisech s „impact“ fakorem. Z toho byly čtyři práce přímo použity v disertaci. Tento počet opravdu velmi převyšuje běžný průměr a je nejlepším dokladem důkladného a poctivého přístupu autorky i odpovědného a svědomitého přístupu pana školitele. Všechny tyto práce prošly důkladným oponentním řízením a staly se, jak je z disertace zřejmé, podkladem pro sepsání její finální podoby. Všechny tyto časopisy vyžadují posudky minimálně dvou posuzovatelů, v některých případech jde o periodika se zvykem oslovovat tři a více oponentů. S určitou nadsázkou lze tedy prohlásit, že práce byla posouzena, byť vždy parciálně, již minimálně 8 nezávislými oponenty. To, že články jsou ve všech případech již dostupné, značí, že posudky byly pro konečné verze publikací vždy kladné a doporučující. V této situaci je těžké nalézat a skutečně i nalézt v práci položky, které by bylo možné považovat za chybné, mylné nebo významněji nepřesné.

Disertační práci Ing. Evy Koudelkové proto jednoznačně DOPORUČUJI k obhajobě.

25. srpna, 2017



doc. Dr. Ing. Petr Klusoň

kluson@icpf.cas.cz