

Stanovisko školitele k doktorandské disertační práci Ing. Petra Kleina

“NMR Spectroscopy of Cations in Extra-framework Sites in Zeolites”

Ing. Petr Klein absolvoval své doktorandské studium v Oddělení struktury a dynamiky v katalýze v Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského. Zároveň je Ing. Klein řádným zaměstnancem Ústavu. Tématem doktorandské práce Ing. Kleina bylo studium lokalizace a distribuce jednomocných kationtů v mimomřížkových kationtových polohách křemíkem bohatých zeolitů na atomární úrovni a vývoj analytických postupů umožňujících analýzu lokalizace těchto kationtů. Téma disertační práce bylo zvoleno s ohledem na jedinečné vlastnosti křemíkem bohatých zeolitů, které v současnosti představují nejvýznačnější skupinu heterogenních katalyzátorů aplikovaných v chemickém průmyslu, s neobyčejným potenciálem pro další aplikace.

Cílem práce bylo vyvinout metody a postupy založené na aplikaci NMR spektroskopie vysokého rozlišení v pevné fázi pro analýzu lokalizace a distribuce mimomřížkových kationtů a ověřit možnosti jejich aplikace v reálných systémech. Za tímto účelem bylo nutné propojit znalosti a výsledky z rozdílných oblastí – zeolitických materiálů, MAS NMR spektroskopie a kvantově chemických výpočtů.

Doktorand se v rámci své práce podílel na první kompletní analýze distribuce hliníku v křemíkem bohatém zeolitu (ferrieritu), který pak sloužil jako matrice pro vývoj metod charakterizace kationtových poloh. Klíčovou oblastí práce pak byl vývoj NMR metod umožňujících charakterizaci kationtových poloh. V této oblasti vyvinul doktorand zcela nový přístup pro charakterizaci kationtových poloh kationtů lithia za ložený na ${}^7\text{Li}$ - ${}^7\text{Li}$ korelační spektroskopii, která umožnila první analýzu lokalizace lithných iontů v křemíkem bohatém zeolitu. Kombinace vybraných postupů vysokorozlišeného NMR experimentu a první aplikace ultravysokého pole v NMR pevné fáze českým autorem (ve spolupráci s kanadskými kolegy) pak umožnila analýzu kationtových poloh sodného iontu v křemíkem bohatém zeolitu. Ing. Klein pak dále vyvinul metody měření MAS NMR dehydratovaných zeolitů, které umožnily analýzu lokální struktury skeletálních atomů Al v zeolitické matici a představují nepřímou metodu analýzy kationtových poloh v zeolitech. Tato další světová priorita návrh umožnila objasnění významného problému NMR spektroskopie ${}^{27}\text{Al}$ v zeolitech – mechanismus rozšíření rezonancí ${}^{27}\text{Al}$ v důsledku dehydratace,

U Ing. Kleina vysoce oceňuji především jeho zvládnutí velmi specializované a náročné oblasti NMR spektroskopie pevné fáze, kterou ovládl na špičkové úrovni. Tyto vysoce specializované znalosti se mu navíc povedlo skloubit se schopností zapojit se do týmové práce a aplikovat NMR spektroskopii pro řešení komplexních problémů, kdy NMR spektroskopie představuje pouze jednu z použitých metod a pro spolupráci s širokým týmem je nutný značný rozhled i mimo oblast NMR spektroskopie. Tento přístup vedl k tomu, že

doktorand významně přispěl a přispívá k řešení několika projektů GA AV ČR, TA ČR, EU (v rámci 7.RP) i projektů financovaných průmyslovým partnerem (BP Chemicals Inc.)

Část svých výsledků již Ing. Kleiř publikoval v prestižních zahraničních časopisech (2x J. Phys. Chem. C, 1x Chem. Commun.) a na řadě mezinárodních konferencí, další publikace připravuje. Mimo úzké téma disertační práce je pak spoluautorem dalších 15 publikací (včetně v tak prestižních časopisech jako jsou ACS Catalysis, Chemistry of Materials a Angewandte Chemie). Jeho současný h-index je díky tomu 10 s průměrně více než 18ti citacemi na článek (celkem více než 390 citací).

Jsem přesvědčen, že doktorand dokázal touto prací svoji schopnost samostatné, systematické a tvořivé vědecké práce s cílem řešit dané problémy se širokým přehledem. Doporučuji tedy jednoznačně jeho doktorandskou práci k obhajobě a k udělení titulu PhD.

V Praze, 25.9.2018

Mgr. Jiří Dědeček, CSc., DSc.
Školitel

