



Oponentní posudek na disertační práci

Autor: Ing. Jan Vaculík
Název: Acidobazické vlastnosti zeolitů
Školitel: prof. Ing. Roman Bulánek, Ph.D.

Stručná charakteristika disertační práce

Disertační práce se zabývá studiem acidobazických vlastností zeolitů a zaměřuje se na popis kyselých center studovaných 3D zeolitů a jejich 2D analogů kombinací pokročilých experimentálních metod.

Práce je psána v českém jazyce jako komentovaný souhrn 5 článků publikovaných v mezinárodních časopisech s recenzním řízením. Po úvodním představení problematiky jsou formou otázek, na něž je v disertační práci hledána odpověď, představeny vlastní cíle práce. Komentovaný souhrn je přehledný, a na 59 stranách poskytuje ucelený přehled o studované problematice včetně 106 odkazů na relevantní odbornou literaturu. Práce je sepsána pečlivě s minimem překlepů. Drobnou výhradu bych zde měl k použití anglických popisů nejen v obrázcích, ale i tabulkách a s tím souvisejícím nekonzistentním psaní desetinných teček a čárek v textu.

Hodnocení disertační práce

Na práci oceňuji především její propracovanost, jasné vymezení studované problematiky a pečlivě zvolenou strategii, která přinesla velmi cenné vědecké poznatky v oblasti síly kyselých center zeolitů a přístupů k jejich charakterizaci. Díky tomu bylo možné výsledky disertační práce publikovat v 5 odborných článcích v kvalitních časopisech (Applied Catalysis A: General, 2x Microporous Mesoporous Materials, Journal of Thermal Analysis and Calorimetry a Catalysts). Kromě uvedených článků prezentoval disertant výsledky své vědecké práce v celé řadě prezentací na odborných konferencích a symposiích. Některé z těchto prezentací jsem měl možnost osobně vyslechnout a mohu konstatovat, že se v problematice, která je podstatou předložené disertační práce, velmi dobře orientuje.

Přečtení disertační práce mne inspirovalo k několika otázkám a komentářům, které mohou sloužit jako podklad pro diskusi během obhajoby disertační práce.



Otázky a komentáře k disertační práci

1. Jaký je podíl disertanta na jednotlivých publikačních výstupech? Které práce si cení disertant nejvíc a proč?
2. Využívají se průmyslově i jiné kyselé heterogenní katalyzátory než zeolity?
3. Mezi průmyslovými procesy využívajícími zeolity uvádí disertant zpracování aromátů a izomeraci alkanů. Jaké jsou nejběžnější průmyslové procesy zpracování aromátů využívající zeolity? Kde a s jakým typem katalyzátoru se průmyslově uplatňuje izomerace alkanů? Na str. 30 disertant dále uvádí, že uhlovodíky C1 až C3 vystupují v reálných průmyslových procesech se zeolity – v kterých?
4. Na str. 16 zmiňuje disertant tvorbu polyolefinů v zeolitech. Prosím o bližší vysvětlení.
5. Přítomnost Lewisovských kyselých center je často spojována s defekty ve struktuře zeolitových materiálů. Znamená to, že pokud by byla struktura bez defektů, nebudou v materiálu přítomna Lewisovská centra? Jakým způsobem ovlivňuje opracování vzorků pomocí D₂O, resp. H₂O poměr Brønstedovských a Lewisovských kyselých center ve studovaných materiálech a případně i vlastní experimenty s H/D výměnou?
6. V práci jsou uvedeny přednosti hierarchických zeolitových struktur. Jaké jsou však jejich nevýhody z pohledu vlastností zeolitů? Kde se hierarchické zeolitové materiály využívají průmyslově?
7. Jak je to s diferenciací Brønstedovských a Lewisovských kyselých center pomocí TPD amoniaku? Podle informací na straně 28 by se mohlo zdát, že všechna Brønstedovská centra jsou přibližně stejně silná a že v teplotním rozmezí 350-500°C nedesorbuje amoniak z Lewisovského typu kyselých center.
8. Celá řada kyselých center může být nepřístupná reaktantům. Umožní zvolené experimentální přístupy (H/D výměna, dehydratace etanolu, apod.) sledovat cíleně pouze dostupná (a tedy z pohledu katalýzy relevantní) kyselá centra?
9. Na obr. 18 je ukázána rozdílná deaktivace materiálů **CHA** a **MFI**. Čím je to způsobeno? Může to být ovlivněno poměrem Si/Al a tedy i rozdílnou povrchovou hustotou kyselých center? Jak je to s etylenem – opravdu téměř nevzniká anebo rychle podléhá následným reakcím za vzniku uhlíkatých úsad?
10. Velmi zajímavým zjištěním je změna hlavního produktu (a tedy i mechanismu?) dehydratace etanolu v závislosti na uspořádání experimentu. Co je příčinou tohoto jevu? Jedná se v obou případech o povrchovou reakci anebo dochází i k reakci adsorbovaných molekul s těmi v plynné fázi? Jak by to šlo ověřit experimentálně?



11. V práci jsou zmiňovány na několika místech problémy s difúzí uvnitř vnitřních kanálů zeolitů. Šlo by tato omezení kvantifikovat a využít výsledky pro detailnější popis studovaných katalytických systémů?
12. Z naměřených dat vyplývá, že aktivační energie závisí na poměru Si/Al studovaného materiálu (CHA, obr. 22B). Proč?
13. Na straně 41 je konstatováno, že kyselost **MFI** je vyšší než kyselost **MWW**. Tomu ale neodpovídají výsledky stanovení kyselých center (Tab. 4). Prosím o vysvětlení.

Závěr

Ing. Jan Vaculík předložil dizertační práci, která splňuje všechny požadavky kladené na tento typ závěrečné práce. **Jednoznačně proto doporučuji přijmout práci k obhajobě.**

V Praze 20. 06. 2022

doc. Ing. David Kubička, Ph.D. MBA

Ústav technologie ropy a alternativních paliv

VŠCHT Praha