



Posudek oponenta diplomové práce

„Deriváty 1,2,3-triazolu jako potenciální elektrolyty pro Li-iontové baterie”

Diplomant: Bc. Tomáš Černý
Vedoucí práce: Ing. Milan Klikar, Ph.D.
konzultant práce: Ing. Daniel Pokorný
Oponent: Ing. Jan Podlesný, Ph.D.

V předložené diplomové práci se diplomat Bc. Tomáš Černý zabývá vývojem organických sloučenin s cílem aplikovat tyto látky jako elektrolyty v Li-iontových bateriích (LIB). Ústřední strukturní motiv představuje pětičlenná heterocyklická dusíkatá sloučenina 1,2,3-triazol, jejíž skelet slouží jako aniontová část cílových organolithných solí. Jak diplomant dokládá v úvodu své práce, inovace v oblasti získávání, uchovávání a využívání elektrické energie jsou v rámci současné globální společnosti nanejvýš žádoucí až nezbytné. Technologie LIB pak představuje vysoce zajímavou alternativu pro uspokojení této poptávky. Zvolená tematika tak zcela odpovídá současným vědecko-výzkumným trendům v materiálových vědách s přesahem do aplikační sféry.

Diplomová práce sestává z ucelených kapitol se vzájemnou logickou návazností, které jsou reprezentovány Úvodem, Teoretickou částí, Experimentální částí, částí zabývající se dosaženými výsledky a jejich diskusí a Závěrem. Po krátkém úvodu do studované problematiky se diplomant v teoretické části precizně věnuje popisu složení a funkce elektrochemických článků s důrazem kladeným na předmětné LIB. Ocenit je třeba vynikající návaznost jednotlivých podkapitol, které se zabývají kromě historického pozadí vývoje LIB rovněž detailní charakterizací procesů probíhajících v LIB jak při nabíjení, tak následném využívání uložené elektrické energie. Diskutována je také různá architektura využívaných článků jakožto jednotlivé komponenty a materiály použité pro výrobu těchto komponent. Zcela správně jsou zároveň definovány klíčové parametry elektrolytů, na které je tato práce zaměřena především. Teoretická část je završena příklady doposud využívaných nebo studovaných elektrolytů včetně způsobů syntézy, které jsou uvedeny v dostupné literatuře. V experimentální části diplomant přehledně definuje použitou instrumentaci, obecné i specifické syntetické metody a rovněž příslušná analytická data ke všem připraveným látkám. V klíčové kapitole Výsledky a diskuse diplomant kriticky hodnotí veškeré použité způsoby syntéz i s přihlédnutím k ekonomické stránce použitých

procedur. Následně je pozornost zaměřena na strukturní analýzu připravených produktů, k čemuž byla využita především nukleární magnetická rezonance. Kapitola je následně zakončena popisem experimentů zaměřených na rozpustnost cílových derivátů v definovaných rozpouštědlech, resp. rozpouštědlových směsích.

K posuzované diplomové práci mám následující komentáře a připomínky:

- Odborné termíny typu „hustota energie“ by bylo dobré definovat při prvním výskytu v textu, byť např. tento termín je na následujících stránkách správně definován.
- Místo slovního spojení „ekologičtější varianty“ na str. 14 bych volil např. slovní spojení „ekologicky šetrnější varianty“.
- V souvislosti s energií, např. str. 15, bych nepoužíval termín „generování“ ale např. přeměna jedné formy energie na druhou. Jak známo, dle zákona o zachování energie, energii nelze vyrobit ani zničit.
- Při popisu funkce elektrochemického článku na str. 15 považuji termíny „negativnější“, „pozitivnější“, „nabíjet se kladně nebo záporně“ za fyzikálně nepřesné. Vzhledem k tomu, že se jedná o relativní hodnoty, použil bych pro popis jiná slovní spojení jako např. „hodnota elektrického potenciálu resp. náboje je větší nebo menší než ...“. Vždy by mělo být uvedeno k čemu se hodnota dané veličiny vztahuje.
- Číselné odkazy na literární zdroje je třeba uvádět při jejich prvním výskytu v textu postupně ve správném pořadí. Např. odkaz [10] je na str. 17 uveden dříve než odkaz [8].
- Je-li práce psána v českém jazyce, pak i text v obrázcích byl měl být v českém jazyce, např. Obrázek 2.
- Na Obrázku 3 jsou u jednotlivých typů baterií uvedeny hodnoty elektrického napětí v jednotkách volt, kdežto u prizmatického typu je uvedena jednotka výkonu watt. Domnívám se, že se jedná o chybu.
- Vzhledem k tomu, že je elektrické napětí definováno jako rozdíl elektrických potenciálů mezi dvěma body, slovní spojení „kladné napětí“ nebo „negativní napětí“ na str. 20 považuji za fyzikálně nepřesné.
- Vymezení teploty na str. 28 „pod 100 °C“ je téměř nicneříkající informace.
- Atom fluoru je substituent s kladným mezomerním efektem nikoliv se záporným jak je psáno na str. 29.
- Termín „pokojová teplota“ na str. 35 je nicneříkající.
- Dichlormethan bych neřadil mezi polární rozpouštědla (str. 35).
- U obecné metody D by měla být rovněž uvedena hodnota teploty, při které byla reakční směs 15 min. míchána.
- Místo slova „odejmutí“ na str. 68 bych volil spíše např. „odpaření“.
- Čistotu cílových látek nelze jednoznačně potvrdit pomocí GC/MS, jak je uvedeno na str. 77. GC/MS může čistotu pouze vyvrátit.

- Pro lepší interpretaci ^{13}C -NMR spekter by bylo dobré v rámci strukturní analýzy u dostatečně rozpustných látek využít také techniku APT.
- Předpony typu „para“ na str. 84 již není vhodné používat. Místo toho je třeba použít číselné lokanty.

K diplomové práci mám několik následujících dotazů:

- Byla poloha substituentu X u cílových benztriazolátů a fenyiltriazolátů zvolena záměrně?
- Lze nějak posoudit stabilitu připravených lithných solí vůči vzdušné vlhkosti a nemůže případná vázaná voda ovlivnit analýzu cílových látek?
- Byly ostatní připravené lithné soli kromě benztriazolátů THF prosté? Čím je možné vysvětlit, že THF má nejvyšší afinitu právě k benztriazolátům?
- Byl při nitraci intermediátů **7** a **12** pozorován rovněž produkt dvojnásobné nitrace?

Předloženou diplomovou práci shledávám jako vysoce kvalitní dílo a oceňuji zejména aktuálnost zvoleného tématu s potenciálem celosvětového pozitivního dopadu v oblasti energetiky. Sepsaný text je na vysoké úrovni s absolutním minimem překlepů. Místy by bylo pouze vhodné použít exaktní fyzikální termíny. Celkově je diplomová práce Bc. Tomáše Černého vynikající odborný text, který je započat představením obecné architektury a funkce elektrochemických článků a postupně pokračuje do hloubky tématu organolithných solí. Mé komentáře a připomínky jsou minoritního až zanedbatelného charakteru, a proto z výše uvedených důvodů tuto práci jednoznačně

doporučuji k obhajobě

a hodnotím ji známkou

výborně

V Českých Budějovicích 8. 5. 2024

Ing. Jan Podlesný, Ph.D.

Environmentální výzkumné pracoviště

Vysoká škola technická a ekonomická

v Českých Budějovicích

