

## Oponentní posudek doktorské disertační práce

Jméno disertanta: Ing. Lada Dubnová

Název práce: Pokročilá analýza vztahu mezi optickými, elektronovými, texturními a strukturními vlastnostmi dopovaných TiO<sub>2</sub> materiálů a jejich fotokatalytickou aktivitou

Školitel: prof. Ing. Libor Čapek, Ph.D.

Studijní obor: Fyzikální chemie

Školící pracoviště: Katedry fyzikální chemie, Univerzita Pardubice

### Stručná charakterizace práce

Předložená disertační práce je zpracována na 107 stranách, obsahuje 42 obrázků, 11 tabulek a odkazuje se na 130 literárních zdrojů. Součástí práce jsou i seznamy obrázků, tabulek a zkratk/značek. Práce je přehledně rozdělena na část teoretickou a experimentální, část pro diskusi výsledků a závěr. Téma práce je aktuální, neboť se zabývá dopováním oxidu titaničitého v práškové podobě a jeho imobilizaci na inertním nosiči pro lepší separaci fotokatalyzátoru a reakční směsi.

Disertační práce je zaměřena na modifikaci oxidu titaničitého pomocí lanthanoidů (La a Nd) a nekovových prvků (N, F). Dopování bylo prováděno s ohledem na fotokatalytické vyvíjení vodíku z vodného roztoku methanolu. U fotokatalyzátorů N-La/TiO<sub>2</sub> a F-La/TiO<sub>2</sub> byl zajištěn synergický efekt dopantů, který vedl k nejvyšší produkci vodíku. V druhé části práce byly studována imobilizace těchto fotokatalyzátorů na povrchu pevné pěny (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiO<sub>2</sub>) a borosilikátového skla. Nanosený film na borosilikátovém skle byl použit v mikro-foto reaktoru pro vyvíjení vodíku.

Práce obsahuje původní výsledky, které byly publikovány v pěti člancích impaktovaných časopisů: *Frontiers in Chemistry* (IF = 5,5), *Applied Surface Science* (IF = 6,7) a *Materials* (IF = 3,4). Ing. Dubnová je spoluautorkou celkem 16 publikací v časopisech indexovaných na Web of Science, které získaly 135 citací, h-index je 8. K práci mám několik poznámek a dotazů, z nichž uvádím tyto:

### Poznámky

1. Str. 25, obr. 4: Místo o „síle“ laseru“ by bylo vhodnější hovořit o „výkonu“ laseru.
2. Str. 44: Elektroda Ag/AgCl byla pravděpodobně použita jako referenční elektroda. Místo výrazu „protielektroda“ (Pt) je vhodnější výraz „pomocná elektroda“.
3. Str. 45 a jinde: V práci by bylo vhodné ujednotit používání jednotek ve tvaru mocnin nebo zlomků, např. m<sup>2</sup> g<sup>-1</sup> nebo m<sup>2</sup>/g. Mimořádně, symbol M se používá pro molekulovou hmotnost, ale často se neopodstatněně používá pro označení molární koncentrace.
4. Str. 46: Poněkud nešťastná formulace „nepřímá energie širší pásu zakázaných energií“.
5. Str. 55, 67, 89: V obr. 17, 24 a 39 se nejedná přímo o DR spektra, ale o závislost  $(\alpha h\nu)^{1/2}$  vs  $h\nu$  dle Taucovy metody. Mohly být rovněž vyznačeny tečny křivek pro odečet energií zakázaného pásu.
6. Str. 66, obr. 23: Difrakční píky mohly být popsány Millerovými indexy.
7. Str. 92: Záření nelze pokládat za fázi z fyzikálního hlediska (pevná látka, kapalina, plyn).
8. Str. 101-103: Citace 59, 61 a 78 nejsou úplné.

### Dotazy

1. Str. 17: Jaký je pozitivní vliv vakancí na fotokatalytické reakce, když působí jako nábojové pastí?
2. Str. 18, obr. 1: U typu heteropřechodu „Broken gap“ nejsou naznačeny přechody elektronů děr. Vysvětlete prosím rozdíl mezi heteropřechody typu Z- a S-schéma?
3. Str. 28, rovnice (2): Proč byl ke koeficientu „n“ zaveden další koeficient „m“?
4. Str. 29: Prosím o vysvětlení věty: „Přímé zakázané přechody nemají dostatečnou energii fotonů a je méně pravděpodobné, že k nim dojde“.
5. Str. 39: Co se myslí vysokou kinetikou degradačních reakcí?
6. Str. 43 a jinde: Jakým způsobem byly vypočteny velikosti krystalitů?
7. Str. 45: Jak dlouho je pevná pěna v kontaktu s roztokem během namáčení?
8. Str. 55 a 56: V  $\text{TiO}_2$  byla potvrzena pouze existence pouze  $\text{Ti}^{4+}$  (dle píků  $\text{Ti } 2p_{3/2}$  a  $\text{Ti } 2p_{1/2}$ ). Jak si vysvětluje složení 26,7 at.%  $\text{Ti}^{4+}$  viz Tab. 3? Teoreticky by to mělo odpovídat cca 33,33 at. %. Kromě toho součet obsahů prvků není 100 %.
9. Str. 57, 58 a 64: Byl obsah uhlíku a dusíku skutečně stanoven pomocí AAS? Není zvláštní, že fotokatalyzátor N-La/ $\text{TiO}_2$  obsahoval dusík pod mezí detekce?
10. Str. 60 a 61: Bylo by vhodné porovnávat snímky TEM se stejným zvětšením. Má být 0,96 at. % nebo 0,97 at.% N-La/ $\text{TiO}_2$ ?
11. Str. 62, obr. 21: Byly energie zakázaného pásu určeny s ohledem na Urbachův chvost viz str. 30?
12. Str. 74: Prosím o vysvětlení, jak hydroxylové radikály podporují separaci elektronů a děr.
13. Str. 76: Mohl by být při obhajobě naznačen mechanismus, jak hydroxylové skupiny napomáhají tvorbě vodíku?
14. Str. 82, rovnice 2: Naznačuje tato rovnice, že neodym existuje na  $\text{TiO}_2$  v atomární formě? Pokud ano, je pro to experimentální důkaz?
15. Str. 83: Je zde zmínka o mimořádném fotokatalytickém chování N-La/ $\text{TiO}_2$  a F-La/ $\text{TiO}_2$ . Mohlo by být při obhajobě provedeno srovnání produkce vodíku s použitím jiných fotokatalyzátorů?

### Závěr

Doktorská disertační práce Ing. Lady Dubnové představuje ucelenou výzkumnou studii v oblasti fotokatalýzy. O kvalitě a novosti výsledků svědčí pět publikací v impaktovaných vědeckých časopisech. Autorka ve své práci bezpochyby prokázala schopnost samostatné vědecké činnosti. I přes výše uvedené připomínky práci hodnotím jako velmi zdařilou a rád

**doporučuji k obhajobě.**

V Ostravě dne 18. 6. 2024

prof. Ing. Petr Praus, Ph.D.  
Fakulta materiálově-technologická  
VŠB-Technická univerzita Ostrava  
17. listopadu 15  
708 33 Ostrava-Poruba