

Stanovisko školitele k doktorandské disertační práci Mgr. Marii Lemishky

“Binuclear TMI centers in zeolites; their preparation, characterization, and catalytic properties.”

Mgr. Mariia Lemishka absolvovala své doktorandské studium v Oddělení struktury a dynamiky v katalýze v Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského. Zároveň je Mgr. Mariia Lemishka řádnou zaměstnankyní Ústavu. Tématem doktorandské práce Mgr. Lemishky bylo studium aktivních redoxních katalytických center na bázi kationtů přechodových kovů lokalizovaných v mimomřížkových kationtových polohách zeolitů na atomární úrovni a rozpracování a vývoj analytických postupů umožňujících analýzu lokalizace a vlastností těchto kationtových center. Téma disertační práce bylo zvoleno s ohledem na jedinečné vlastnosti iontů přechodových kovů v zeolitech v oblasti redoxní katalýzy, a to s důrazem na studium binukleárních center. Jejich specifický typ byl popsán nedávno a má unikátní vlastnosti. Tato centra jsou schopna aktivovat malé molekuly včetně molekulárního kyslíku jejich disociací za tvorby extrémně aktivní kyslíkové spécie, která je následně schopna oxidovat metan na metanol. Vzhledem k tomu, že obě dvě reakce probíhají za atmosférického tlaku a od laboratorní teploty, mají neobyčejný potenciál pro průmyslovou aplikaci.

Cílem práce bylo vyvinout postupy založené primárně na aplikaci FTIR spektroskopie pro analýzu lokalizace a distribuce dvoumocných kationtů a využít je při studiu reaktivity kationtových center s vybranými molekulami (N_2O , O_2 , CH_4). Za tímto účelem bylo nutné propojit výsledky doktorandky i s výsledky z dalších oblastí a na základě znalostí doktorandky v těchto oblastech je interpretovat. Její práce tak vyžadovala kromě důkladného porozumění FTIR spektroskopii a problematice katalýzy na zeolitech integraci znalostí z oblastí Mössbauerovské spektroskopie, kvantově chemického modelování i rentgenové absorpční spektroskopie.

Doktorandka se v rámci své práce podílela až na samotný objev binukleárních center a jejich aktivace molekulárního kyslíku na drtivě většině následných objevů a prací oddělení v oblasti oxidace metanu na metanol kyslíkem. Je proto spoluautorkou několika světových priorit – objev aktivity binukleárních center využívajících i jiné ionty než $Fe(II)$ pro disociaci kyslíku a oxidaci metanu, objev že i binukleární centra v zeolitech jiné topologie než FER mohou oxidovat metan na metanol, včetně popsání nezbytných podmínek pro strukturu aktivních center. Zároveň přispěla k detailnímu porozumění aktivity $Fe(II)$ center ve ferrieritu jako klíčového modelového systému pro oxidaci metanu na metanol a spolu s centry v mordenitu i pro eliminaci NO a N_2O .

U Mgr. Lemishky vysoce oceňuji nejen její zvládnutí techniky FTIR včetně za in-situ podmínek, ale především její skloubení vlastních výsledků získaných pomocí FTIR se schopností zapojit se do týmové práce a aplikovat FTIR spektroskopii pro řešení komplexních problémů, kdy představuje pouze jednu z použitých metod a pro spolupráci s širokým týmem je nutný značný rozhled i mimo oblast FTIR spektroskopie. Tento přístup vedl k tomu, že doktorandka významně přispěla a přispívá k řešení několika projektů GA ČR a TA ČR.

Část svých výsledků již Mgr. Lemishka publikovala v prestižních zahraničních časopisech (Applied Catalysis B: Environmental, 2x ACS Catalysis, Communications Chemistry) a na řadě mezinárodních konferencí, další publikace jsou po jejím návratu z rodičovské dovolené v přípravě.

Jsem přesvědčen, že doktorandka dokázala touto prací svoji schopnost samostatné, systematické a tvořivé vědecké práce s cílem řešit dané problémy se širokým přehledem. Doporučuji tedy jednoznačně její doktorandskou práci k obhajobě a k udělení titulu Ph.D.

V Praze, 25.5.2024

[REDACTED]
Mgr. Jiří Dědeček, CSc., DSc.
Školitel