

Oponentský posudek na doktorskou disertační práci

Ing. Davida Kociána

„The preparation of methyl esters and their application in epoxidation“

Ve své práci se Ing. David Kocián zabývá využitím methylesterů mastných kyselin (FAME) vyrobených z různých rostlinných olejů pro výrobu epoxidů. Práci lze tematicky rozdělit na 2 části. První část je zaměřena na vybrané aspekty přípravy FAME, při které byly pro větší komplexnost připraveny vedle vzorků FAME i příslušné ethylestery a butylestery mastných kyselin. Vedle konvenční, homogenně katalyzované transesterifikace, byla provedena i příprava FAME s využitím heterogenního katalyzátoru. Druhá část práce je pak zaměřena na vlastní přípravu epoxidů, metody analýzy reakčních produktů a predikci vybraných parametrů epoxidace a vlastností připravených produktů. Vzhledem k celospolečenským trendům kladoucím důraz na udržitelnost a využívání obnovitelných zdrojů surovin a energie považuji zvolené téma za velmi aktuální.

Disertační práce je vypracována ve formě komentovaného souboru celkem šesti hodnotných vědeckých publikací (evidovaných v databázi WoS), na jejichž tvorbě se disertant podílel. Vzhledem k charakteru a jazyku těchto publikací oceňuji, že je celá práce napsaná v angličtině. Práce nemá klasické členění (Literární část, Experimentální část a Výsledky a diskuse), jednotlivé kapitoly ji rozdělují pouze tematicky, což však považuji v tomto případě za optimální. Celkově je disertační práce zpracována logicky a přehledně, jednotlivé kapitoly obsahují patřičný úvod do problematiky podpořený příslušnými referencemi. Celkem 204 literárních odkazů svědčí bezesporu o značném objemu odborné literatury, který disertant k danému tématu zpracoval. Spatřuji pouze drobný prostor pro optimalizaci uspořádání a názvů kapitol (např. kapitola 4.2 nese název „Purification of products of a homogeneous transesterification“, ale čištění produktů transesterifikace se příliš nevěnuje).

Klíčové výsledky experimentální činnosti jsou prezentovány a komentovány vhodným a srozumitelným způsobem, popisky obrázků a tabulek jsou jasné a srozumitelné, jen výjimečně ne zcela přesné. Podrobnější popis experimentů lze snadno dohledat v přiložených publikacích, stejně tak jako hlubší diskusi výsledků. Disertační práce obsahuje pouze malé množství překlepů, drobných nepřesností a formálních chyb. Například na str. 10 je uvedeno, že ethanol se do benzínu typu E10 přidává v koncentraci 10 % hm. Na str. 13 se pak horší nízkoteplotní vlastnosti bionafty vysvětlují nižším bodem zákalu a nižším bodem tekutosti. Co se týče rovnic uvedených na str. 41, pokles jodového čísla, konverzi methylesterů a relativní konverzi na oxiran bych nepovažoval za vlastnosti produktu, jak je uvedeno např. na str. 49. Tyto drobné nepřesnosti však nijak nesnižují celkově vysokou úroveň práce. Jsem přesvědčen o tom, že výsledky získané v rámci řešení předložené disertační práce přinejmenším rozšiřují danou oblast výzkumu o nové poznatky na světové úrovni.

K disertační práci vznáším tyto dotazy a náměty k diskusi:

1. Na str. 13 je uvedeno, že bionafta má celkově neutrální uhlíkovou bilanci. Následující věta však toto tvrzení do jisté míry popírá, neboť správně uvádí, že celkový proces výroby bionafty je spojen s emisemi CO₂. Můžete to vysvětlit a uvést jakým způsobem se dá uhlíková stopa paliv kvantifikovat?
2. Na str. 14 je uvedeno, že výroba bionafty se skládá ze dvou kroků - (i) extrakce oleje a (ii) konverze olejů/tuků. Způsoby konverze přitom zahrnují vedle transesterifikace i „pyrolýzu“, „ředění“ a „tvorbu mikroemulze“. Můžete blíže vysvětlit poslední 3 procesy a popsat, jakým způsobem se při nich konvertuje rostlinný olej na bionaftu (FAME)?

3. V experimentální části publikace I (str. 263) se uvádí, že pro stanovení obsahu esterů a stanovení volného a vázaného glycerolu byla použita metoda EN 14105. Ta je ale určena pouze pro stanovení volného a vázaného glycerolu. Byla tato metoda nějakým způsobem modifikována, aby umožnila současně i stanovení obsahu methylesterů/butylesterů nebo byla pro stanovení obsahu esterů použita jiná metoda?
4. Můžete upřesnit navrhovaný vliv sudého počtu atomů uhlíku v molekulách ethyl-/butylesterů mastných kyselin na jejich stejnou distribuci v esterové a glycerolové fázi (publikace I, str. 264)?
5. Na str. 20 jsou pro ilustraci uvedeny hodnoty dipólových momentů methylesterů a ethylesterů, není však jasné kterých. V původní publikaci (publikace I, str. 264) je pak uvedeno, že se jedná o dipólové momenty methanolu a ethanolu. Můžete tyto nejasnosti uvést na pravou míru?
6. Na str. 41 jsou uvedeny rovnice pro predikci některých parametrů epoxidace a vlastností jejich produktů. U vlastností jako je hustota a kinematická viskozita poněkud postrádám uvedení teplot, při kterých jsou tyto parametry udávány. Jestliže se jedná o teploty převzaté z publikace V, proč je hustota udávána při poněkud neobvyklé teplotě 23 °C?
7. V práci jsou zmíněny obecné možnosti využití epoxidů (str. 29). Disertant pak zmiňuje možné využití epoxidů připravených z FAME jako maziv (str. 42). Jaké vlastnosti, dle disertanta, předurčují tyto epoxidy k této aplikaci a jaké vlastnosti by mohly být naopak problematické? Předpokládá se pro aplikaci epoxidů nějaká forma jejich rafinace nebo přítomnost nasycených FAME, případně vedlejších produktů není na závadu? Mají epoxidy vyrobené z FAME potenciálně nějaké jiné využití?

Po prostudování disertační práce Ing. Davida Kociána mohu konstatovat, že předkládaná disertační práce splňuje podmínky kladené na doktorskou disertační práci, a že disertant bezpochyby prokázal schopnosti potřebné k samostatné vědecké práci. **Předloženou disertační práci proto doporučuji přijmout k obhajobě.**

V Praze, dne 21. srpna 2025


doc. Ing. Pavel Šimáček, Ph.D.