

Oponentský posudek disertační práce

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta

Studijní program: Fyzikální chemie

Student: **Mgr. Valeryia I. Kasneryk**

Název práce: Design of zeolite materials with tailored interlayer structure and tunable textural properties

Tato práce se zaměřuje na úpravu struktury a texturních vlastností germanosilikátů s využitím různých způsobů postsyntetického zpracování. K tomuto cíli autorka použila dva postupy, jednak postsyntetickou transformaci vybraných zeolitů s cílem připravit nové zeolitické struktury, a dále postsyntetickou modifikaci, vedoucí k úpravě texturních vlastností připravených materiálů a k úpravě jejich kyselosti.

V rámci své práce autorka studovala zeolitické germanokřemičitanu typu **UOV**, **CIT-13** a **IWR**, které obsahují D4R jednotky bohaté na germanium, což jí umožnilo rozšířit skupinu těchto zeolitů o 3 nové materiály (**IPC-12**, **IPC-13** a **IPC-17**). Autorka tak navazuje na předchozí práce její výzkumné skupiny a významně posunuje stupeň znalostí o studovaných materiálech, tj. zeolitických sloučenin připravovaných metodou ADOR. V další části se zabývala postsyntetickou modifikací zeolitů typu **UOV**, **ITH** a **IWW** a postsyntetickou aluminací germanokřemičitanů **UOV**, **ITH**, **CIT-13**, **UTL** a **IWW**.

Stručný a přehledný Úvod, popisující současný stav studované problematiky, jasně definuje tématiku strategie ADOR a z ní vyplývající otázky, které jsou v disertační práci řešeny. Vzhledem k tématu své práce se autorka zaměřila na dosavadní stav znalostí o postsyntetickém zpracování zeolitických materiálů. Podrobněji také popisuje materiály použité v její práci.

Experimentální část práce srozumitelně a přehledně popisuje metody použité při syntéze výchozích zeolitů i metody jejich postsyntetického zpracování. Jsou popsány i způsoby charakterizace připravených materiálů. K této části bych měl následující připomínku: V kapitole "3.4. Post-synthesis Treatment" je uveden postup pro postsyntetickou úpravu **UTL** podrobně, úprava **UOV** je popsána velmi stručně (str. 28). Text naznačuje, že vzorky **UOV** byly upravovány odlišně od vzorků **UTL**. Nejsou uvedeny postupy u ostatních vzorků, i když zřejmě vzorky **IWW** a **CIT-13** byly upravovány podobně jako vzorky **UTL**. Tato kapitola by si zasloužila podrobnější a především přehlednější zpracování.

V části Výsledky a diskuze oceňuji velmi pečlivé zmapování reakčních podmínek pro syntézu zeolitu **UOV** s ohledem na množství a kvalitu vytvořených produktů. V části textu popisující výsledky získané metodou ADOR autorka analyzuje a charakterizuje nový typ zeolitu **IPC-12**, připravený z **UOV**. Další kapitola se zabývá přípravou **IPC-13** z **CIT-13**. Zde myslím chybí tabulka s podmínkami reakcí přípravy **CIT-13** (v textu je uváděn vzorek **CIT-13-4** jako výchozí materiál pro přípravu **IPC-13**, což naznačuje, že se jedná o jeden z řady vzorků **CIT-13**, ale bližší podrobnosti chybí - str. 40). Dále je zde popsán a charakterizován nový zeolit **IPC-17**.

Připravené zeolity autorka prodobila postsyntetickému zpracování/úpravě a to působením kyselin a postsyntetickou aluminací. V části popisující postsyntetickou aluminaci připravených zeolitů autorka studovala vliv teploty a reakční doby na množství a charakter tvořených kyselých míst. V této části také popisuje, jaký vliv má postsyntetická aluminace na změnu charakteru pórů v těchto materiálech. Stejně jako v první části své práce autorka věnuje velkou pozornost charakterizaci studovaných materiálů pomocí solid state NMR,

zejména tomu, jak se uvedená postsyntetická úprava projeví na poměru křemík/hliník v připravených materiálech. Na základě získaných informací potom navrhuje mechanismus zabudování hliníku do struktury zpracovávaných látek.

Množství práce provedené autorkou v rámci jejího doktorského studia, tak jak je prezentováno v předložené disertační práci a připojených publikacích, je značné a zcela naplňuje rozsah předpokládaný pro takovýto doktorský projekt.

K práci bych měl následující dotazy:

Tabulka 4, str. 33: Značení vzorků - "c" je uváděno pro "koncentrované" vzorky (poměr $H_2O/T(IV) = 5$). Proč je ale takto označen vzorek UOV-6-c, kde je poměr $H_2O/T(IV)$ uváděn jako 10?

Na str. 46 autorka píše: "Based on the topology of initial **IWR** zeolite, several possible structures of IPC-17 were predicted by Density Functional Theory (DFT) method. Fig. 30 shows the comparison of experimental and theoretically simulated XRD patterns, which matches quite good .." - znamená to, že zde bylo navrženo několik predikovaných struktur, které měly shodný difraktogram, nebo je v Obr. 30 simulovaný difraktogram jen jedné z těchto predikovaných struktur?

V části popisující transformaci **IWW na IPC-18** pomocí "Non-contact" transformace v parách HCl autorka uvádí "The idea was based on possible hydrolysis of Ge–O bonds by limited amount of water molecules adsorbed in the zeolite pores." Byl tento předpoklad ověřen např. studiem kinetiky transformací několika vzorků výchozího **IWW** majících různý obsah vody v pórech?

Závěr

Disertační práci Mgr. **Valeryie I. Kasneryk** považuji za důležitý přínos ke studiu chemie zeolitů. Jak z předložené disertační práce vyplývá, autorka se velmi dobře orientuje ve svém oboru a je schopna samostatné vědecké práce, čehož jsou dokladem i její publikace v kvalitních odborných časopisech. Jedná se o 5 článků, zabývajících se tematikou studovanou v předkládané disertační práci, většinou v prestižních časopisech, u 4 z nich byla doktorandka prvním autorem.

Práci Mgr. **Valeryie I. Kasneryk** proto **doporučuji** k obhajobě.

V Pardubicích dne 20. srpna 2018

Doc. Ing. Vítězslav Zima, CSc., DSc.