

Oponentský posudek disertační práce Ing. Pavla Topky „MoO₃ supported on mesoporous molecular sieves – new catalysts for alkene metathesis and alkyne polymerization“

Disertační práce Ing. Pavla Topky je zaměřena na vývoj heterogenního katalyzátoru pro metatézi alkenických látek, na bázi oxidu molybdenového. Jako nosič sloužila mezoporézní molekulová síta MCM-41, MCM-48 a SBA-15. Připravené katalyzátory byly charakterizovány řadou technik (XRD, XPS, DR-UV-VIS, Ramanova spektroskopie). Vlastnosti katalyzátorů byly testovány v několika reakcích, metatézi lineárních olefinů, 4-allylanisolu, diethyl-diallylmalonátu a polymeraci alkynických sloučenin. Téma práce je velmi aktuální, výsledky jsou potenciálně využitelné v teoretické i praktické oblasti.

Disertační práce přinesla řadu zajímavých výsledků, z nichž většina se stala předmětem celkem tří publikací v renomovaných časopisech. To je nepochybně chvályhodné a správné, i když prostor oponentovi pro hledání nedostatků práce je tak jistě zúžen. Práce je sepsána přehledně, má dobrou grafickou úpravu a obsahuje minimum formálních nedostatků. Výsledky jsou hodnoceny kriticky, prezentované závěry jsou logickým vyústěním různých úhlů pohledu na předmět studia. K práci mám jen několik připomínek resp. námětů pro diskusi při obhajobě:

1. Str. 16 – není uvedeno, kde společnost Boehinger Ingelheim zmiňuje práci ref. (5)!
2. I když reakční rychlost je mírou katalytické aktivity, není správné tyto pojmy zaměňovat – str. 18. „Katalytická aktivita je závislá na reakční teplotě? – správněji reakční rychlost (jak by to bylo u nekatalyzované reakce?). Podobně nesprávně je závislost „katalytické aktivity“ na typu substrátu, kde je opět třeba dát přednost „reakční rychlosti“.
3. V práci jsou systematicky špatně psány názvy sloučenin s číselným prefixem na začátku věty: 1-butene namísto 1-Butene (str. 23), 4-allyl-anisole namísto 4-Allylanisole (str. 45), též *Tert*-butylacetylene namísto *tert*-Butylacetylene. Chyby jsou přehledně patrné z tab. 4.3. (str. 46). Méně tolerantní oponent by protestoval i proti psaní 1-octene namísto oct-1-ene!
4. Produkce ethylenu, „cenného monoméru“ není jistě důvodem zájmu o metatézi 1-alkenů!

5. Co je kritériem teplotního optima 40 °C? Konstatování na str. 70 je příliš povrchní, za optimální (ze 3 měření!) je považována teplota, při které je dosaženo střední hodnoty reakční rychlosti a střední hodnoty selektivity. Proč?

6. I když se hodnoty selektivit v čase příliš nemění, forma jejich prezentace není vhodná, neboť se porovnávají ve stejných časech, nikoli při stejných konverzích! V některých případech je již v prvním odebraném vzorku poměrně vysoká konverze výchozí látky, což se může negativně promítnout do přesnosti určení počáteční reakční rychlosti.

7. Při obhajobě by mohly být hlouběji diskutovány problémy rovnováhy metatézních reakcí. Jsou známa rovnovážná data některých z nich? Z konstatování na str. 13/14 lze usuzovat, že rovnováhy při metatézi okt-1-enu je dosaženo při 50%ní konverzi výchozí látky, jednoznačně se to tvrdí na str. 8 v „Comprehensive summary“. Takový údaj byl někde nalezen? Proč umožňuje odstraňování ethylenu v daném případě konverzi nad 50%? Proč ne totální?

8. V kontextu s předchozím námětem by mě zajímal názor autora na možnosti ovlivňování rovnováhy v případech, kdy je odebrání jednoho z produktů nereálné a nejspíše je nereálné i použití jedné z výchozích látek v přebytku, neboť to by usnadnilo homometatézi této látky!?

9. Lze nějakým způsobem predikovat poměr geometrických isomérů nově vzniklé C=C dvojné vazby? Jsou k dispozici nějaké literární údaje?

Závěr

Disertační práce Ing. Pavla Topky splňuje všechny požadavky, kladené na doktorské disertace a plně ji doporučuji k obhajobě.

Praha, 10.10.2008

Prof. Ing. Libor Červený, DrSc.
VŠCHT Praha