



Posudek habilitační práce

Autor	Mgr. Mariya V. Shamzy, Ph.D.
Pracoviště	Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova
Název práce	"Řízení aktivních míst v zeolitových katalyzátorech."
Oponent	doc. RNDr. Jan Veselý, Ph.D.
Pracoviště	Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2

Habilitační práce Mgr. Mariya V. Shamzy, Ph.D. je věnována velmi aktuální problematice - designu, přípravě a studiu vlastností nových zeolitových materiálů, využitelných jako katalyzátory - a shrnuje tak nejdůležitější vědecké výsledky uchazečky. První část práce je věnována vývoji katalyzátorů odvozených od germanokřemičitanových zeolitů, které ve své struktuře obsahující různě kyselá katalytická centra zavedená do nových materiálů pomocí výměny atomů Ge za atomy jiných kovů (B, Ga, Al, aj.) Takto byla připravena série nových zeolitových katalyzátorů, které oproti původním materiálům vykazovaly vyšší termální stabilitu, porozitu, a substratově-specifickou katalytickou aktivitu. Druhou oblastí zájmu uchazečky bylo využití infračervené spektroskopie pro studium síly, umístění, koncentrace a povahy (LA vs. BA) kyselých center v zeolitových materiálech. V této oblasti byla především pozornost věnována kvalitativní a kvantitativní analýze germanosilikátů a titanosilikátů, a též k objasnění reakčních mechanismů vybraných reakcí katalyzovaných těmito materiály. Další část práce je zaměřena na syntézu nanokrystalických zeolitů s definovanou porozitou a vysokým povrchem za využití organokřemičitých modifikátorů a amfifilních surfaktantů. Význam těchto materiálů byl názorně demonstrován na chemo- a regioselektivě vybraných chemických transformacích. Vedle výše zmíněného se uchazečka též věnovala designu a syntéze zeolitických katalyzátorů obsahující vedle kyselých aktivních center též nanočástice kovů (Co, Rh, Pd, Pt, aj) pomocí impregnačních a enkapsulačních metod.

Předložená habilitační práce je komentovaný soubor třiceti dvou vybraných publikací uchazečky, což představuje přibližně polovinu jejích odborných publikací. Jedná se o originální dílo (bez známek plagiátorství - potvrzeno systémem Turnitin). Po formální stránce je práce sepsána poměrně úsporně, avšak velmi zdařile. Text na třiceti třech stranách je čtivý, logicky postavený a vhodně doplněný grafickým materiálem. Autorka srozumitelnou formou čtenáře seznamuje s podstatnými fakty svého dosavadního výzkumu, vyslovuje hypotézy, které následně rozvíjí, potvrzuje či vyvrací na základě provedených experimentů a pozorování. Přiložené práce dokumentují velmi vysokou odbornou úroveň a svědčí o tom i úroveň časopisů, ve kterých byly práce Mgr. Mariya V. Shamzy, Ph.D. publikovány (2x *Chem. Soc. Rev.*, 2x *Angew. Chem. Int. Ed.*, 3x *ACS Catal.*, 2x *Chem. Mater.*, *Appl. Catal. B.*, aj.)



K formální stránce práce mám pouze následující drobné připomínky, které však významně nesnižují celkovou kvalitu práce:

- 1) V práci jsem postrádal kapitolu Seznam zkratk. Ačkoliv je většina zkratk v textu vysvětlena, pro lepší čitelnost je vždy vhodné zkratky na začátku, či na konci textu uvést. K lepší přehlednosti práce by též přispělo řádné očíslování příloh, aby dohledávání původních výsledků bylo časově méně náročné.
- 2) Uvedení sumárních vzorců (např. C_3H_7OH) není vhodné, jelikož těmito vzorci není jednoznačně popsána sterická náročnost alkoholů (n-PrOH, vs i-PrOH) v kontextu diskuse (Str. 10.)
- 3) Kapitola Introduction neobsahuje reference na odbornou literaturu, či jiné zdroje, které by podpořily obecná konstatování autorky v této části. Je to poměrně v kontrastu se zbytkem předložené práce.

Po pročtení habilitační práce mě napadá několik podnětů do diskuse:

- 1) Velmi oceňuji kapitolu věnovanou využití FTIR spektroskopie pro popis a charakterizaci kyselých center v zeolitických materiálech. Zajímalo by mne však detailnější srovnání s dalšími metodami. Mohla by autorka nastínit jaké další analytické metody/techniky lze použít pro kvantitativní a kvalitativní analýzu LA/BA center?
- 2) V rámci dlouhotrvající práce v dané oblasti autorka připravila řadu zajímavých materiálů, které vykazují velmi dobré vlastnosti jako katalyzátory. Nedílnou součástí pro uvedení katalyzátorů do průmyslu (na trh) je jejich dostupnost. Mohla by autorka popsat, zda některé z připravených katalyzátorů disponují snadnou dostupností, tj. nízkými náklady na jejich přípravu a možností přípravy ve velkém množství?
- 3) V souvislosti se syntézou zeolitických katalyzátorů obsahující vedle kyselých aktivních center též nanočástice kovů by mne zajímalo, zda byly provedeny snahy připravit definované zeolitické katalyzátory obsahující více různých kovových iontů zároveň (např. Rh a Au, Pd a Au, aj). Pokud ano, s jakými výsledky?

Závěrem bych rád konstatoval, že předložená habilitační práce svědčí o tom, že Mgr. Mariya V. Shamzy, Ph.D. svou činností v oboru získala vědecké a pedagogické zkušenosti, které je schopna dále úspěšně uplatňovat jak při vědeckém tak při pedagogickém působení. Předložená práce má velmi dobrou úroveň odbornou i formální, a splňuje všechny předepsané požadavky, které jsou kladeny na tento typ prací. Rozsah pedagogické, vědecké a publikační činnosti uchazečky dokazuje její schopnost vést studenty a systematicky rozvíjet vědecké poznatky v daném oboru. Proto doporučuji přijmout habilitační práci Mgr. Mariya V. Shamzy, Ph.D. jako podklad k habilitačnímu řízení a k udělení vědecko-pedagogického titulu docent.

doc. RNDr. Jan Veselý, Ph.D.