



**Oponentnský posudek na habilitační práci Ing. Jiřího Krupky, Ph.D.,
Technologické, katalytické a mechanistické aspekty hydrogenací nitrilů na tuhých
katalyzátorech**

Habilitační práce je ve zaměření popis průběhu složitých chemických procesů probíhajících při heterogenně-katalytické hydrogenaci alifatických i aromatických nitrilů s primárním účelem výroby průmyslově důležitých aminů. Práce má klasickou strukturu, tj. uceleně a systematicky popisuje uvedenou tematiku nahlíženou ze dvou komplementárních pohledů; prvním z nich je mechanismus katalýzy a druhým je zohlednění a využití poznatků o mechanismu hydrogenace nitrilů při návrhu a modifikaci technologie výroby aminů touto cestou. Tyto dva pohledy tvoří dvě ústřední kapitoly práce (kap. 2 a 4) a jsou – kromě nezbytného úvodu a závěrečného shrnutí (kap. 1 a 5) – doplněny kapitolou o vlivu rozpouštědla na průběh reakce (kap. 3). I když habilitační práce není koncipována jako komentář význačných publikací autora na dané téma, je vhodně doplněna přílohou se čtyřmi vybranými pracemi autora, ve kterých čtenář může získat doplňkové informace.

Pokud bych měl práci shrnout několika stručnými charakteristikami, pak je to ucelenost, systematicčnost a smysl pro preciznost. I přes to, že naznačené charakteristiky někdy mohou narazit, byť i neúmyslně, na úskalí „suchopárné“ vědy, práce je napsaná čtivě a srozumitelně i pro toho, kdo není specialistou na organickou heterogenní katalýzu. Úvod obsahuje přehled hydrogenace nitrilů a základní náčrt mechanismu vzniku primárních, sekundárních i terciárních aminů, který je užitečným výchozím bodem, i když nezohledňuje specifické rysy heterogenní katalýzy.

Navazující kapitola o možných detailních mechanismech postupně rozkrývá celou širší problematiku a vyúsťuje v základní autorův vklad – model heterogenně katalytického mechanismu se zahrnutím vlivu různých typů katalytických kovů od niklu a kobaltu až po paladium a platinu. Moje znalosti heterogenní katalýzy se vážou spíše na katalytické dospalování plynů vystupujících ze spalovacích motorů a tedy tuto část jsem četl jako nezasvěcený čtenář. Nicméně způsob podání ve mě vyvolal zaujetí ne nepodobné rozplétání složitého detektivního příběhu, na jehož konci jsem získal uspokojivý pocit porozumění. Kromě precizního a při tom srozumitelného výkladu považuji za důležitou část, ve které autor uvádí doklady věcné správnosti navrženého mechanismu, ať už uváděné jinými autory, nebo vlastní, speciálně prováděné experimenty. Závěr této části je zajímavý také tím, že se zde střetává trojice „jádrových“ mechanismů heterogenní katalýzy: z předchozího výzkumu velmi dobře známá dvojice mechanismů typu Langmuir-Hinshelwood a Eley-Rideal a nový koncept katalýzy překryvnou vrstvou. Zároveň je patrné, že k „úplnému“ poznání mechanismu a zejména ke kvantitativnímu kinetickému popisu je třeba dalšího výzkumu, což je pro vědecký výzkum příznačné. I přes to bych uvítal, kdyby v práci byl tento aspekt zmíněn (případně může být diskutován v habilitační přednášce).

Následná kapitola pojednává o vlivu rozpouštědla prostřednictvím lineárního regresního modelu. Z analýzy sice vyplývá negativní závěru o schopnosti modelu popsat vliv rozpouštědla u jiných než alifatických nitrilů, nicméně jde o rozsáhlou a originální experimentální studii, která je provedena stejně systematicky jako předchozí rozbor mechanismu.

Konečně v kapitole o technologických aspektech je ukázána velmi důležitá část práce, na které se autor významně podílel, tj. realizace průmyslové výroby 3-(dimethylamino)propylaminu, kde je nutné hluboké porozumění mechanismu, aby bylo zabráněno vzniku vedlejších produktů a eliminován vliv nečistot. Návazně jsou vysvětlovány možné technologické postupy při výrobě dalších typů aminů na stejném zařízení v technologických přestávkách. Z uvedeného výkladu je zřejmé, že teoretická znalost chemismu je zásadní při návrhu prakticky proveditelných technologií.

Z mého hodnocení jednotlivých kapitol vyplývá, že habilitační práce Ing. Jiřího Krupky, Ph.D. je uceleným a zasvěceným dílem obsahujícím originální příspěvky k poznání jedné skupiny heterogenně katalytických reakcí a zároveň je dokladem autorovy schopnosti dané téma podat precizním a přesto srozumitelným způsobem. Ve smyslu zákona č. 111/1998 Sb. je tím naplněn dvojitý účel habilitace, prokázání vědeckých schopností a zároveň prokázání schopnosti vysvětlovat, což je nezbytné pro pokročilou pedagogickou práci. Komisi pro habilitační řízení dr. Krupky doporučuji bez výhrad práci k dalšímu řízení. Rolí oponenta není hodnotit další kritéria požadovaná při habilitačním řízením a tedy v tomto posudku nejsou obsažena.

V Praze dne 5.1.2018



Prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.