Oponentský posudek bakalářské práce Terezy Benešové

Teoretické zkoumání interakce vody se zeolity za vysokých teplot

Theoretical investigation of water-zeolite interactions under steaming conditions

Metody výpočetní chemie jsou již řadu let nepostradatelným nástrojem výzkumu v různých oblastech chemie např. v materiálových vědách či v katalýze. Nedávné experimentální i teoretické studie prokázaly, že zeolity jsou při kontaktu s vodou nestabilní a podléhají různým strukturním změnám. V předložené bakalářské práci se autorka zabývá teoretickým výzkumem hydrolýzy a izotopické výměny atomů kyslíku v zeolitu chabasitu za vysokých teplot. Navazuje zejména na studii publikovanou v Nature Commun. v loňském roce, na níž se výrazně podílelo několik pracovníků KFMCh PřF UK.

Práce je vhodně členěna, cíl práce je jasně formulován. V teoretické části jsou shrnuty důležitější charakteristiky chabasitu, zejména se zřetelem na jejich interakce s vodou, dále pak podstatné rysy metody DFT (funkcionálu elektronové hustoty), včetně její verze uzpůsobené pro výpočty periodických systémů, a rovněž důležité charakteristiky hyperploch potenciální energie spolu s příslušnými metodami a modely. Další kapitola je věnována stručnému souhrnu předchozích důležitějších výsledků týkajících se hydrolýzy chabasitu. Vlastní výsledky, diskuse a závěry, uvedené v kap. 5 – 7, čítají 22 stran, tj. zhruba polovinu celé práce. Autorka ukázala, že za vysokých teplot může v zeolitu chabasitu při kontaktu s vodou probíhat izotopická výměna kyslíkového atomu vody a určitých mřížkových atomů kyslíku v zeolitu, což je v souladu s experimentálními zjištěními. Na základě rozsáhlých DFT výpočtů navrhla mechanismy této výměny, k nimž by mělo docházet za vysokých teplot, a které představují procesy kompetitivní s hydrolýzou.

Bakalářská práce Terezy Benešové je sepsána přehledně a srozumitelně s velmi pěknou grafickou úpravou a minimem překlepů či drobných nedopatření. K práci nemám žádné zásadní výhrady a omezím se pouze na několik drobnějších připomínek či dotazů:

S ohledem na povahu práce by bylo, myslím, vhodné rozšířit odstavec o využití zeolitů v různých oblastech chemie. V oddílu věnovanému disperznímu problému v metodě DFT by se hodila zmínka i o jiných možnostech zahrnutí disperzní energie (než je Grimmeho metoda). Navrhuji, aby se autorka v diskusi vyjádřila ještě ke dvěma otázkám obecnější povahy:

1) Předchozí studie ukázaly, že horká voda degraduje některé zeolity a že rozsah této degradace koreluje s počtem defektů materiálu. Jaké typy defektů jsou v těchto systémech nejdůležitější?
2) Lze v případě interakcí zeolitu s vodou založit úvahy o mechanismu reakce pouze na statických charakteristikách potenciálové hyperplochy?

Závěrem mohu konstatovat, že posuzovaná bakalářská práce Terezy Benešové je velmi kvalitní a splňuje všechny požadavky na tyto práce kladené. Rád ji proto doporučuji k obhajobě a navrhuji klasifikaci známkou výborně.

Doc. Jiří Fišer
KFMCh PřF UK

Praha, 28.6. 2020.