

Tato práce je soustředěna na výzkum vlivu defektu silanolového hnízda na hydrolýzu zeolitů v přítomnosti horké vodní páry. Motivací této studie jsou nedávné experimentální práce, které ukazují, že přítomnost silanolového hnízda usnadňuje a urychluje hydrolýzu zeolitů. Přítomnost horké vodní páry simuluje podmínky podobné těm, které doprovází některé významné průmyslové procesy. Výzkum samotný byl proveden s využitím výpočtů pomocí teorie funkcionálu hustoty. K určení vlivu silanolového hnízda na hydrolýzu Chabazitu byly použity dva modely, nedefektní model s ideální jednotkovou celou a defektní model obsahující silanolové hnízdo. Oba modely byly periodické modely čistě křemičitého Chabazitu s 36, respektive 35 Si tetraedry. Na obou modelech byla uvažována vícekroková hydrolýza vedoucí až k odělení klastru  $\text{Si}(\text{OH})_4$  od struktury zeolitu. Tento proces je znám jako totální desilikace. Na obou modelech bylo nalezeno více možných cest hydrolýzy, které byly porovnány a diskutovány. Výsledky z obou modelů pak byly porovnány navzájem a to jak nejpříznivější cesty hydrolýzy z obou modelů, tak aritmetické průměry všech uvažovaných cest. Získaná data naplnila očekávání stanovená experimentem, že silanolové hnízdo usnadňuje a urychluje hydrolýzu zeolitu.