



Posudek školitele diplomové práce

Jméno a příjmení uchazeče: Bc. Jaroslav Vacek

Název práce: Teoretická studie vlivu defektů silanolového hnízda na hydrolyzu zeolitu chabazitu

Bc. Jaroslav Vacek začal pracovat v naší skupině už během bakalářského studia, ale na daném tématu pracoval jen něco přes rok. Navazoval přitom na práci jedné z našich PhD studentek. Během práce na daném tématu musel Bc. Vacek zvládnout základy fyziky pevných látek a zejména se naučit pracovat s metodami hledání tranzitních stavů v periodických výpočetních modelech (metody Nudge Elastic Bond a Dimer). Úspěšná práce s těmito metodami vyžaduje kromě základního pochopení metodologie i poměrně hodně času na jejich osvojení v praxi. To vše Bc. Vacek zvládl na rozumné úrovni.

Hlavním cílem diplomové práce bylo určit, jak závisí hydrolytická stabilita zeolitů na přítomnosti specifického, často se vyskytujícího typu defektu, tzv. silanolového nestu. Uvažovali jsme přitom nízkou koncentraci vody v zeolitu, která odpovídá podmínkám, tj. vysokým teplotám, za nichž dochází k znehodnocování zeolitických katalyzátorů v průmyslu, a to např. při tzv. katalytickém krakování ropy - jedním z hlavních procesů při jejím zpracování. Výsledky studie popsané v diplomové práci jasně ukazují, nakolik jsou defekty zodpovědné za sníženou hydrolytickou stabilitu zeolitu. Tyto výsledky mají značnou míru novosti a důležitosti. V připravované publikaci by měly být doplněny o experimenty našich spolupracovníků zacílené na validaci hypotéz vyplývajících z této teoretické studie.

Naneštěstí, právě nedostatečné zdůraznění významu práce a jejího zasazení do kontextu existujících znalostí, spolu jen s poměrně letmou analýzou získaných dat, jsou slabými stránkami práce Bc. Vacka. S tím spojená je i poměrně nízká vlastní aktivita a samostatnost během řešení práce, když bylo např. potřebné změnit mód spolupráce z dobrovolných konzultací na pravidelné týdenní setkání s podáváním reportů, jelikož práce během dobrovolných konzultací příliš nešla kupředu a ani Bc. Vacek dostatečně iniciativně neřešil problémy, které postup práce zpomalovaly. Po změně módu spolupráce na týdenní setkání došlo ke zlepšení, ale i v tomto módu nešlo vše úplně bez problémů. Při sepisování diplomové práce ale musím uznat, že došlo k výraznému zlepšení, co se týče samostatnosti a aktivity, a to na úroveň, kterou bych mohl hodnotit pozitivně.

Přírodovědecká fakulta UK

Lukáš Grajciar

adresa: Hlavova 8, 128 43 Praha 2

telefon: 221 951 298

e-mail: lukas.grajciar@natur.cuni.cz

ičo: 00216208, **dič:** CZ00216208

web: www.natur.cuni.cz/chemistry



PŘÍRODOVĚDECKÁ
FAKULTA
Univerzita Karlova

Na základě výše uvedeného, a s přihlédnutím k určitým zdravotním problémům Bc. Vacka, doporučuji práci k obhajobě a navrhuji klasifikovat jako "velmi dobře".

V Praze dne 26.08.2020

RNDr. Lukáš Grajciar, PhD.

Přírodovědecká fakulta UK

Lukáš Grajciar

adresa: Hlavova 8, 128 43 Praha 2

telefon: 221 951 298

e-mail: lukas.grajciar@natur.cuni.cz

ičo: 00216208, **dič:** CZ00216208

web: www.natur.cuni.cz/chemistry
