

Název práce: Teoretické studium reaktivních interakcí vody se zeolity

Autor: Tereza Benešová

Katedra: Katedra fyzikální a makromolekulární chemie

Školitel: Christopher Heard, PhD.

Abstrakt: Byla provedena *in silico* studie interakcí vody se zeolity kombinující statický i dynamický přístup výpočtů teorie funkcionálu hustoty. Byly použity dva periodické modely zeolitu chabazitu, čistě křemičitý a hlinitokřemičitý, což umožnilo vysvětlit rozdíl mezi chováním vody v blízkosti Si—O—Si a Al—O—Si můstku. V modelu byly zahrnuty jedna nebo dvě molekuly vody v jednotkové supercele, což odpovídá experimentálním podmínkám za vysokých teplot. Za těchto podmínek může voda reagovat se zeolity prostřednictvím adsorpce, ale rovněž prostřednictvím reaktivních interakcí jako je hydrolýza a výměna kyslíku mezi vodou a mřížkou zeolitu. Hlavním cílem práce bylo objasnění této výměny kyslíku na atomární úrovni. Byly nalezeny proveditelné mechanismy výměny kyslíku. Tyto mechanismy jsou rozdílné pro Si—O—Si a Al—O—Si můstek, nicméně pro oba můstky je výměna kyslíku iniciována částečnou hydrolýzou mřížky. Po této hydrolýze mechanismus výměny kyslíku uzdravuje mřížku a zanechává v ní kyslík, který byl původně v molekule vody. Oba nalezené mechanismy jsou konkurenceschopné s uzdravením mřížky bez výměny kyslíku i s další hydrolýzou mřížky, která by vedla k degradaci zeolitu. Je pozorován přednostní výskyt výměny kyslíku na Al—O—Si můstku. Toto chování je ve shodě s experimentálními pozorováními.

Klíčová slova: Teorie funkcionálu hustoty, katalýza, zeolity, molekulová dynamika, hydrolýza