

Název práce: Strukturální flexibilita a její vliv na transport hmoty v porézních materiálech

Autor: Bc. Tomáš Volný

Katedra: Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Ota Bludský, CSc., Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

Abstrakt: V této práci byly systematicky studovány účinky strukturální flexibility na pomalou difuzi v porézních materiálech za použití zeolitu chabazite jako modelového systému. Difuzní koeficienty pro sérii uhlovodíků byly vypočteny pomocí teorie tranzitního stavu (TST) a dále opraveny pomocí korekčního schématu QM–MM. Opravené teoretické predikce byly ověřeny porovnáním s experimentálními daty získanými pomocí volumetrie a gravimetrie. Různé typy flexibility struktury a jejich vliv na difuzní mechanismy byly analyzovány – geometrické, teplotní a vyvolané adsorbovanými molekulami. Bylo zjištěno, že deformace struktury hrají zásadní roli, zejména pro větší uhlovodíky. Studie ukázala, že teoreticky predikované difuzní koeficienty kvalitativně odpovídají experimentálním trendům. Vyvinutá metodologie poskytuje konzistentní rámec pro studium pomalé difuze a může být rozšířena na komplexnější materiály, jako jsou zeolity se strukturálními defekty, MOF nebo ZIF materiály.

Klíčová slova: porézní materiály, zeolity, pomalá difuze, strukturální flexibilita, QM–MM korekce