

Title: Molecular modeling of layered double hydroxides intercalated with small organic anions

Author: Petr Kovář

Department: Department of Chemical Physics and Optics

Supervisor: RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D.

Supervisor's e-mail address: [pospisil@karlov.mff.cuni.cz](mailto:pospisil@karlov.mff.cuni.cz)

Abstract:

The samples of Zn<sub>4</sub>-Al<sub>2</sub> and Mg<sub>4</sub>-Al<sub>2</sub> layered double hydroxides (LDHs) intercalated with benzoate anions and its derivatives (p-methylbenzoate and p-bromobenzoate) were prepared and characterized by powder X-ray diffraction, chemical analysis and thermogravimetry. The interlayer arrangement was calculated by molecular modeling combined with X-ray diffraction. Molecular mechanics and classical molecular dynamics were carried out in *Cerius*<sup>2</sup> modeling environment. In the case of LDH intercalated with benzoate the guests adopt as the best a parquet arrangement in the interlayer space. The addition of CH<sub>3</sub> groups and Br atoms in the p-positions of the benzoate ring causes a disorientation of the guests. The interlayer water molecules are located in the planes with COO<sup>-</sup> groups near the LDH layers. The strategy leading to solving of interlayer arrangement of LDH (LDH layers were kept as rigid units during the energy minimization and NVT statistical ensemble was used during the dynamics simulations) was successfully applied in the case of LDH intercalated with bulky anions (porphyrin derivatives anions).

Keywords: layered double hydroxides, powder X-ray diffraction, molecular modeling

Název práce: Molekulární modelování podvojných vrstevnatých hydroxidů interkalovaných malými organickými anionty

Autor: Petr Kovář

Katedra (ústav): Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D.

e-mail vedoucího: [pospisil@karlov.mff.cuni.cz](mailto:pospisil@karlov.mff.cuni.cz)

Abstrakt:

Byly připraveny vzorky podvojného vrstevnatého hydroxidu (LDH) typu Zn<sub>4</sub>-Al<sub>2</sub> a Mg<sub>4</sub>-Al<sub>2</sub> interkalovaného benzoátovými anionty a jejich deriváty (p-methylbenzoátem a p-bromobenzoátem). Vzorky byly charakterizovány pomocí práškové rentgenové difrakce, chemické analýzy a termogravimetrie. Uspořádání mezivrstev bylo zkoumáno metodou kombinace molekulárního modelování a práškové difrakce. Molekulární mechanika a klasická molekulární dynamika byly provedeny v programu *Cerius*<sup>2</sup>. V případě LDH interkalovaného benzoátem hosté zaujímají v mezivrstevném prostoru parketové uspořádání. Výskytem skupin CH<sub>3</sub> a atomů bromu v para pozicích benzenového jádra dojde k neuspořádání hostů v mezivrstevném prostoru. Mezivrstevná voda se nachází v rovinách spolu s karboxylovými skupinami podél LDH vrstev. Strategie vedoucí k vyřešení mezivrstevného uspořádání (vrstvy LDH drženy jako rigidní jednotky v průběhu minimalizace energie a užití NVT statistického souboru při molekulární dynamice) byla úspěšně aplikována v případě LDH interkalovaného velkými anionty (anionty derivátů porfyriu).

Klíčová slova: podvojně vrstevnaté hydroxidy, prášková rentgenová difrakce, molekulární modelování