

Posudek školitele na bakalářskou práci

pana Miroslava Položije

na téma

Teoretické studium Friedländerovy reakce katalyzované materiálem CuBTC

Cílem předložené práce je přispět k objasnění mechanismu Friedländerovy reakce katalyzované dvoumocnými Cu^{2+} ionty přítomnými v hybridním organokovovém porézním materiálu typu MOF („Metal Organic Framework“) CuBTC. Materiály typu MOF se v poslední době intenzivně studují experimentálně i teoreticky vzhledem k jejich potenciálním aplikacím v adsorpčních a separačních technologiích a v katalýze. Studované téma bylo součástí mezinárodního projektu MACADEMIA.

V předložené práci je studován mechanismus Friedländerovy reakce pomocí standardní kvantově chemické metodiky (B3LYP funkcional ve spojení s DZP typem báze) pro tři různé situace: (i) nekatalyzovaná reakce, (ii) reakce katalyzovaná ionty H^+ a (iii) reakce katalyzovaná ionty Cu^{2+} v materiálu MOF. Rovněž byl studován efekt rozpouštědla. Každá ze studovaných reakčních cest probíhá přes řadu meziproductů, pro každou z reakčních cest je tedy nutné lokalizovat řadu stacionárních bodů na příslušné hyperploše potenciální energie. Lokalizace tranzitních struktur je často komplikovaná. Z toho je evidentní, že předložená práce je časově velice náročná a mohla být dokončena jedině díky tomu, že pan Položij se začal práci věnovat již v červnu 2010. Rád bych vyzdvihnul jeho nasazení a efektivitu, bez kterých by práce neměla tento rozsah. Dosažené výsledky poslouží jako základní materiál k publikaci v mezinárodním časopise.

Pan Položij prokázal velice dobré schopnosti řešit zadanou problematiku, velikou motivaci se zabývat vědeckou prací a obdivuhodné nasazení. **Jeho práci hodnotím jako výbornou a doporučuji ji k obhajobě.**

V Praze dne 14. června 2011



Doc. Petr Nachtigall