

## **Posudek školitele na diplomovou práci "Theoretical investigation of Mechanisms of Chemical Reactions Taking Place in Microporous Materials" vypracovanou Bc. Miroslavem Položijem**

Pan Miroslav Položij pracuje pod mým vedením již od druhého ročníku bakalářského studia. Po čtyech letech společné práce mohu jednoznačně říct, že Miroslav prokázal výborné schopnosti řešit zadané úkoly a velmi dobrou orientaci v zadané problematice.

Diplomová práce se zabývá teoretickým studiem mechanismů chemických reakcí katalyzovaných mikroporezními materiály. Diplomová práce navazuje na bakalářskou práci pana Položije, významně rozšiřuje studii Friedlanderovi reakce a nově přináší výsledky studia Knoevenagelovi reakce a intramolekulární cyklizace nenasyčených alkoholů. Výběr studovaných reakcí byl motivován nedávnými experimentálními výsledky, které nebylo možné interpretovat na základě doposud známých modelů. Výsledky prezentované v diplomové práci přináší interpretaci těchto experimentálních dat. Ukazuje se, že u všech studovaných reakcí hraje významnou roli koncentrace katalyticky aktivních center ve studovaných materiálech – studované organické reaktanty jsou dostatečně velké na to, aby současně interagovaly s více než jedním katalytickým centrem. Právě interakce reakčních intermediátů se dvěma aktivními centry je rozhodující k pochopení experimentálních dat. Vysoká koncentrace katalytických center, která je typická pro mikroporezní materiály, může způsobit zvýšení nebo snížení aktivity katalyzátoru. Tento závěr diplomové práce je naprosto originální a doposud mu v literatuře nebyla věnována pozornost.

Výsledky prezentované v diplomové práci byly doposud publikovány ve třech článcích v kvalitních mezinárodních časopisech s vysokým impact factorem a další publikace (týkající se Knoevenagelovi reakce) se připravuje. Kromě zmíněných tří publikací je pan Položij rovněž spoluautorem článku v Nature Chemistry, který se ovšem netýká mechanismů chemických reakcí a jehož výsledky nejsou v diplomové práci uváděny.

Diplomová práce je sepsána v anglickém jazyce, jazyková úroveň je dobrá a práce je velice přehledná. Velice oceňuji stručnost a výstižnost diplomové práce, bez úvodních formalit a literatury je práce shrnuta na 37 stranách. Přesto se jedná o výsledkově nebývale bohatou práci. Studie každé jednotlivé ze tří studovaných reakcí by pravděpodobně představovala dostatečný materiál k sepsání diplomové práce.

Pan Položij je mimořádně pracovitý student s výbornými schopnostmi. Jsem velice rád, že se rozhodl nastoupit do doktorského studijního programu Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur a pokračovat ve vědecké práci v mé skupině. Diplomovou práci vypracovanou Miroslavem Položijem považuji za velice dobrou a navrhuji hodnocení "výborně".

Doc. RNDr. Petr Nacthigall  
Školitel