

Oponentský posudek bakalářské práce

pana Michala Trachty

na téma

Modeling of Hypothetical Zeolites Based on the ADOR Process

Nedávno byl objeven nový způsob syntézy zeolitů, tzv. ADOR protokol (z anglického Assembly – Disassembly – Organization – Reassembly), který umožňuje přípravu nových zeolitů. Tento protokol byl demonstrován na příkladu zeolitu UTL, ze kterého byly připraveny dva nové zeolity PCR a OKO. Cílem předložené práce je počítačově modelovat struktury nových zeolitů, které mohou být získány pomocí ADOR protokolu z jiných zeolitů.

V předložené bakalářské práci je navržen, implementován a aplikován postup k systematickému nalezení všech možných struktur zeolitů, které je možné teoreticky připravit ze zeolitů IWW, IWV, ITR, ITH, UTL a IWR. Struktury všech zeolitů byly optimalizovány pomocí molekulové mechaniky a energeticky nejstabilnější struktury byly následně přeoptimalizovány pomocí DFT metody. Jednotlivé struktury byly klasifikovány rovněž z hlediska různých kritérií používaných k posouzení, zda hypotetický zeolit může být připraven v laboratoři. Struktury zeolitů získané v předložené bakalářské práci jsou velice důležité pro experimentální chemiky zabývající se syntézou nových materiálů. XRD difraktogramy nově připravených zeolitů pomocí ADOR protokolu mohou být konfrontovány s difraktogramy hypotetických zeolitů prezentovaných v této bakalářské práci (a ve dvou zaslaných publikacích) a na základě jejich srovnání může být určena struktura nově připravených materiálů. Výsledky obsažené v bakalářské práci byly shrnuty ve dvou publikacích zaslaných do ChemPhysChem a Catal. Today.

Celkově mohu bakalářskou práci hodnotit jako mimořádně zdařilou, převyšující obvyklou úroveň bakalářských prací. Pan Trachta pracoval pod vedením svého školitele po celou dobu bakalářského studia a díky tomu je i rozsah bakalářské práce vysoce nadprůměrný. Práce je sepsána v anglickém jazyce na velice slušné úrovni (pro bakalářskou práci).

Celkově považuji práci za vynikající, doporučuji ji k obhajobě a navrhuji klasifikovat jako výbornou.

V Praze dne 13. června 2014

Doc. Petr Nachtigall