

## **Posudek školitele na bakalářskou práci Michala Trachty**

### **„Modeling of Hypothetical Zeolites Based on the ADOR Process”**

Bakalářská práce Michala Trachty „Modeling of Hypothetical Zeolites Based on the ADOR Process” se zabývá studiem nové strategie syntézy zeolitů, známou pod akronymem ADOR. Tato strategie, založená na použití lamelárních prekurzorů, umožňuje syntézu mnoha nových materiálů s definovanou strukturou a porozitou. V bakalářské práci je zkoumána především souvislost mezi strukturou hypotetických zeolitů a možností jejich syntézy.

Úroveň práce je podle mého soudu velmi vysoká, a to zejména po odborné stránce. Zvládnutí tématiky vyžadovalo osvojení celé řady výpočetních metod, počínaje periodickými DFT výpočty se zahrnutím nelokální elektronové korelace až po empirický Sanders-Leslie-Catlow potenciál vyvinutý speciálně pro popis zeolitů. Musím rovněž zdůraznit, že autor kromě standardních prostředků výpočetní chemie využil také celou řadu vlastních programů napsaných v prostředí MATLAB. Zásadní výsledky práce jsou shrnuty ve dvou publikacích zaslaných do ChemPhysChem a Catalysis Today, ve kterých je Michal Trachta prvním autorem.

Závěrem konstatuji, že bakalářská práce Michala Trachty splňuje všechna kritéria kvalitní vědecké studie, a proto ji doporučuji k obhajobě s hodnocením **výborně**.

Praha 12.6. 2014

RNDr. Ota Bludský, CSc.  
Ústav organické chemie a biochemie, v.v.i.