

Zeolity jsou významnou skupinou katalyticky aktivních hlinitokřemičitanů. Jsou běžně používány jako katalyzátory při zpracování ropy. Mohou být použity i pro jiné reakce, například pro dehydrataci ethanolu, kterou lze také označit za deoxygenaci ethanolu. V této práci byly použity oba tyto termíny zaměnitelně. Experimentálně bylo zjištěno, že produkty reakce jsou diethylether a ethylen. Tato reakce představuje potenciální způsob zpracování ethanolu jako biopaliva. Diethylether a ethylen jsou žádanými molekulami a mají široké využití. Jejich výroba z ethanolu je potenciálně zajímavá.

V rámci experimentální studie (Shashikant A. Kadam, Mariya V. Shamzhy) z roku 2018 bylo zjištěno, že reakční podmínky ovlivňují složení a poměr produktů deoxygenace ethanolu. Za zvýšené teploty a za nízkých tlaků stoupá podíl ethylenu ve směsi produktů. Diethylether je preferovaný produkt za vysokých tlaků a za nižších teplot. Cílem této práce bylo objasnění mechanismu reakce a vysvětlení změny v selektivitě katalyzátoru za různých podmínek. Tato práce je koncipována jako navazující teoretická studie.

Metody výpočetní chemie poskytují teoreticky podloženou představu o geometrii a energii molekulárních systémů. S jejich pomocí je možné zkoumat mechanismus chemických reakcí a jejich energetické bariéry a bilance, které umožňují reakci popsat a pochopit. Na základě výpočetní chemie je možné učinit i závěry o průběhu a selektivitě chemické reakce. Tato práce je teoretickým výzkumem deoxygenace ethanolu na kyselém zeolitu MFI.