



Dr. Filip Uhlík
Katedra fyzikální chemie
Přírodovědecká fakulta
Univerzita Karlova
Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2
tel: +420 221951290, fax: +420 224919752
e-mail: uhlik@sals.natur.cuni.cz

31. 5. 2018

K rukám osoby, které se to týká.

Bakalářská práce pana Jaroslava Vacka s názvem “Teoretické studium dehydratace ethanolu katalyzované kyselými centry v zeolitech” se zabývá kvantově chemickým studiem průmyslově důležité reakce dehydratace ethanolu za vzniku ethylenu a etheru. Pro studium bylo použito několik metod funkcionalu (elektronové) hustoty a několik modelů zeolitů (klastrový a periodický, 2D a 3D). V práci lze najít překlepy (které uvádím zejména jako důkaz, že jsem ji opravdu četl), například 1: I v “Investigation”, 6: mezera před “3 Teoretický”, 6: “nebotří” bez mezery, 8: “Schrödingerov”, 9: “sytému”, 10: x_2 v determinantu (6) a tak dále až po poněkud nesystematický formát odkazů na literaturu. Těmto nepřikládám důležitost. Vyjasnit bych si však chtěl klasifikaci stacionárních bodů funkce více proměnných (strana 13), “vektory jednotkové cely” (strana 16), “lokální energetickou hustotu” (strana 11). V případě (patrně) časové náročnosti metody CC by měl být uveden její řád (strana 10). Adsorpční energie reaktantů/produktů by se lépe hledaly v tabulce ostatních energií. Existuje nějaký odhad, jak se aktivní energie mohou lišit pro jiné zeolity než odvozené od ZSM-5? Mohou být zajímavé zeolity s kovy? Experimentálně byl pozorován i vznik propylenu, který v práci nebyl uvažován.

S pozdravem,

Filip Uhlík