

**Projekt: Molekulární simulace interakcí sepiolitu a TiO<sub>2</sub>**  
**Vedoucí: doc. RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D. ([miroslav.pospisil@mff.cuni.cz](mailto:miroslav.pospisil@mff.cuni.cz)),**  
**Katedra chemické fyziky a optiky**

Projekt bude zaměřen na prozkoumání vzájemných interakcí mezi jílovým minerálem sepiolitem (obr. 1) a TiO<sub>2</sub> metodami počítačových simulací v programu Materials studio [1,2]. Výsledný materiál vykazuje fotokatalytické vlastnosti při rozkladu CO<sub>2</sub>. Simulace budou zaměřeny na určení struktury zkoumaných materiálů na základě informací z experimentálních měření a dále zjištění vzájemných interakcí mezi oběma materiály s cílem popsat jejich vzájemné uspořádání.

Projekt bude navazovat na dříve zkoumané interakce mezi jílovým minerálem palygorskitem a TiO<sub>2</sub> a rozšiřovat tak možnosti průmyslového uplatnění jílových minerálů pro stabilizaci TiO<sub>2</sub>. Současný stav problematiky je přiblížen v předchozí práci zaměřené na interakce TiO<sub>2</sub> s palygorskitem [3].

Zajímavé je, že z těchto výpočtů vyplývá, že velmi záleží na uspořádání atomů na povrchu jílového minerálu v závislosti na typu řezu roviny jílovým krystalem a právě interakce mezi různými typy rovin řezu sepiolitem a TiO<sub>2</sub> budou cílem zkoumání tohoto projektu. Hlavní náplní tohoto projektu tedy bude, s využitím metod molekulárních simulací, tuto odlišnost v chování různých typů interagujících vrstev dvou nanočástic popsat a vysvětlit.

Cíle projektu:

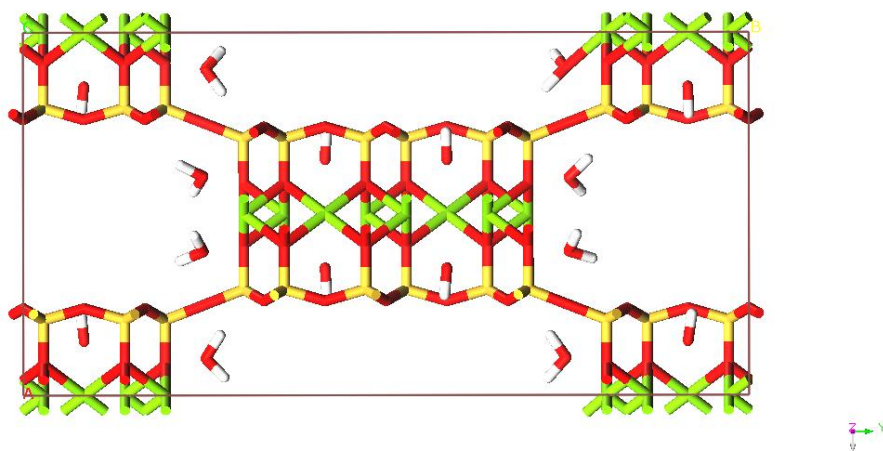
- Vlastní modelování struktur jednotlivých řezů rovin sepiolitu a různých řezů krystalem TiO<sub>2</sub> a následně jejich vzájemné interakce.
- Ověření správnosti výpočtů vzhledem k existujícím experimentálním výsledkům.
- Popsání a vysvětlení vzájemných interakcí a prezentace dosažených výsledků ideálně formou publikace.

Časový rámec:

- 1.měsíc – seznámení se s programem Materials Studio, tvorba a úpravy řezů rovin sepiolitu a TiO<sub>2</sub>
- 2.-3.měsíc - simulace vzájemných interakcí různě zvolených řezů obou struktur
- 4.-konec projektu - porovnávání výsledků experimentálními daty, analýza výsledků, optimalizace výpočtů, prezentace výsledků.

Doporučená literatura:

- [1] Briggati, M.F.; Galan, E.; Theng, B.K.G.; Structures and mineralogy of clay minerals. In Handbook of Clay Science, Bergaya, F., Theng, B.K.G., Lagaly, G., Eds.; Elsevier: Amsterdam, 2006; pp 19-86.
- [2] Accelrys. Software Materials Studio Modelling Environment. Release 4.3 Documentation; Accelrys Software Inc: San Diego; 2003.
- [3] Mavrikos, A; Pospíšil, M.; Gianni, E.; Lazaratou, C.V.; Pšenička, M.; Papoulis, D.: "Interactions among TiO<sub>2</sub> and palygorskite revealed: Boost for stability of well-known photocatalyst", Journal of Molecular Liquids 343, 117678 (2021). doi:10.1016/j.molliq.2021.117678:



Obrázek 1. Struktura sepiolitu s molekulami krystalové vody (Mg – zelená, Si –žlutá, O – červená, H – bílá).