

Posudek disertační práce Mgr. Petra Janečka:

Studium struktury a interakce s molekulami plynů systémů Rh-Sn a Rh-SnO<sub>2</sub>

Pro detailní pochopení mechanismů složitých procesů probíhajících při heterogenní katalýze mají zásadní důležitost stav a proměny geometrické a elektronové struktury povrchů katalyzátorů. K modelování reálných systémů jsou nezbytné jednodušší modelové systémy, které umožňují sledovat důsledky změn jednotlivých komponent systémů na průběh katalytické reakce.

Po úvodu do problematiky studia katalytických reakcí pomocí modelových katalyzátorů (15 stran) je kap.1 (10 stran) věnována obecnému přehledu použitých povrchově citlivých experimentálních metod a kap.2 (6 stran) popisu aparatur použitých autorem jak na pracovišti v Praze, tak i v centrech Elettra v Itálii a NIMS v Japonsku. Těžiště vlastní práce představují kap.3 o modelovém systému Sn/Rh(110) (26 stran) a kap.4 o vrstvách SnO<sub>2</sub> (17 stran).

Úvodní kapitoly i vlastní práce je zpracována přehledně a citace ukazují na důkladné seznámení autora s výsledky získanými v odborné literatuře. Jen vyskytující se překlepy a občasný výskyt odborného slangu mohly být eliminovány.

Důkladné přípravě vzorků a modifikacím jejich uspořádaných povrchů byla věnována patřičná pozornost. To, že určení atomové struktury povrchů je náročné a vyžaduje použití řady komplementárních povrchově citlivých metod je obecně známo. V předkládané práci se to projevilo při návrhu představ o rekonstrukci povrchu Rh(110) při adsorpci Sn vycházejícím z analogií a z naměřených difrakčních obrazců elektronů. Výsledky následného měření pomocí spektroskopie pomalých iontů Ar vedly k zásadní revizi původně navrhovaného modelu rekonstrukce povrchu. Srovnání s výsledky získanými na systému Sn-Rh(111) potvrzují význam kompaktnosti uspořádání atomů v povrchových vrstvách na povrchové vlastnosti krystalu, konkrétně na jejich adsorpční aktivitu vůči plynům.

V této části není jasný důvod pro výrazný rozdíl hodnoty posuvů energií Ar iontů odražených od atomů Rh a Sn, a to očekávaného (obr.2) a naměřeného (obr.25).

Pro potvrzení revidovaného modelu zabudování atomů Sn do povrchu Rh(110) je třeba další podpora: tu by mohlo poskytnout měření a interpretace intenzit difraktovaných svazků elektronů (I-V křivky v LEEDu) nebo fotoelektronová difrakce (zmiňovaná pod čarou v obecné části v kap.1).

V kap.4 je popsána úspěšná volba parametrů pro růst epitaxní vrstvy SnO<sub>2</sub>(110) na krystalickém substrátu v laboratoři NIMS a pozorování různých rekonstrukcí v závislosti na vyhřátí vzorků. Depozice Rh na povrch epitaxní vrstvy v Praze pak umožnila porovnat výsledky oxidace na definovaném povrchu Rh-SnO<sub>2</sub> s těmi kdy Rh bylo napařeno na povrch polykrystalického SnO<sub>2</sub>.

K objasnění mikroskopických procesů probíhajících při adsorpci CO a O<sub>2</sub> na různě modifikovaných površích Rh Mgr. Janeček prokázal schopnost připravit potřebné definované povrchy modelových systémů. Zvládl řadu povrchově citlivých metod potřebných pro experimentální studium krystalografické a elektronové struktury, provedl náročná měření, včetně těch na dvou zahraničních pracovištích, a na jejich základě provedl interpretaci výsledků.

Předložená disertační práce prokazuje předpoklady autora k samostatné tvořivé práci.

Praha, 15.8.2012

Doc. RNDr. Igor Bartoš, DrSc.