

Předložená práce se zaměřuje na teoretické zkoumání strukturních a elektronických vlastností systému smíšeného oxidu Sn/CeO<sub>2</sub> prostřednictvím metody DFT+U. Hlavními důvody zkoumání jsou pozorované zlepšené katalytické vlastnosti, jejichž základem mohou být zejména katalytické vlastnosti oxidů ceru, které dokáží přijímat či odevzdávat atomy kyslíku prostřednictvím procesu oxidace a redukce. V práci jsou postupně zkoumány jednotlivé části tvořící tento systém – subsystemy kovového Sn a CeO<sub>2</sub>, dále jsou však zkoumány i systémy SnO<sub>2</sub> a Ce<sub>2</sub>O<sub>3</sub> a to zejména z pohledu pásové struktury a hustoty stavů. Následně je zkoumán systém se substitučním Sn defektem v objemovém oxidu CeO<sub>2</sub>, tj. Sn/CeO<sub>2</sub>. V této práci byly vzaty v potaz dvě odlišné modifikace tohoto systému – v jedné z nich je vytvořena kyslíková vakance (systém Sn/CeO<sub>2-x</sub>), druhá je ponechána beze změn (systém Sn/CeO<sub>2</sub>). Ve středu našeho zájmu je potom zkoumání vlivu Sn příměsi a výskytu kyslíkové vakance na vlastnosti systému CeO<sub>2</sub> – z pohledu heterogenní katalýzy nás zajímá zejména vliv na možnou redukci cerových atomů.