

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího * posudek oponenta
 bakalářské práce * diplomové práce

Autor/ka: Bc. Miroslav Kettner
Název práce: Studium inverzního katalyzátoru CeO_x / Rhodium
Studijní program a obor: Fyzika, FPIP
Rok odevzdání: 2013

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: RNDr. Viktor Johánek, Ph.D.
Pracoviště: KFPP MFF UK
Kontaktní e-mail: viktor.johanek@mff.cuni.cz

Odborná úroveň práce:

- vynikající * velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné * vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- * originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký * standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající * velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- * téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající * velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:

Předkládaný rukopis odpovídá svým rozsahem diplomové práci a přináší původní vědecké výsledky. Text je poměrně přehledný a má logickou strukturu, popis chemického složení a struktury zkoumaných povrchů následuje rozbor měření adsorpcí a reakcí na těchto površích. V textu se sice místy vyskytují nepřesné nebo příliš obecné formulace a anglicismy, ale celkovou srozumitelnost to nijak zásadně nesnižuje. Je zřejmé, že autor umí dobře pracovat s použitými experimentálními metodami fyziky povrchů a dokáže využívat dostupnou literaturu v interpretaci výsledků svých experimentů.

Volba vzorků i experimentálních procedur je systematická a získaná experimentální data jsou zpracována pečlivě a konzistentně v rámci jednotlivých typů vzorků a procedur. Některé interpretace jsou sice mírně spekulativní nebo by si zaloužily důkladnější rozbor, nicméně se domnívám, že to je především v důsledku toho, že důkladnější pochopení pozorovaných jevů by si vyžádalo více času, než měl autor k dispozici v rámci řešení své diplomové práce.

Některá tabelizovaná data (např. tabulky 6-8 a 11) by si zasloužila také přehlednější prezentaci v grafické podobě, takto není příliš jednoduché se v množství prezentovaných dat zorientovat a vypořádat případné závislosti.

Ke konkrétním částem textu mám dále následující připomínky:

- Kapitola 1.2 (Současný stav poznání) a 1.3 (Cíle práce) by mohla být trochu obsažnější, aby bylo zřejmější, jaké konkrétní okruhy problémů má předkládaná práce řešit. Např. dosavadním poznatkům o reaktivitě a adsorpčních vlastnostech systému CeO_x/Rh(111), který je základem celé práce, jsou věnovány prakticky pouze 3 věty.
- Kap. 1.3 - "... měření se zaměřením na dynamiku..." - vzhledem k použitým (integrálním) in situ metodám se jedná spíše o studium kinetiky; reakční dynamika je sice s kinetikou úzce svázána, ale na rozdíl od kinetiky se týká individuálních jevů na mikroskopické úrovni a typicky na velmi krátkém časovém měřítku, které však nebyly přímo studovány.
- Str. 7 - Odhad tloušťky tenké vrstvy pomocí XPS - z obecné formulace "intenzita signálu" nemusí být zřejmé, jaký signál je myšlen.
- Kap. 2.2 - Drobné nepřesnosti v popisu metody TDS, např. princip metody nezávisí na lineárnosti ohřevu, není vysvětleno, co je to "řád desorpce" apod.
- Kap. 2.3 - 1 Langmuir je 10⁻⁶ Torr.s.
- Kap. 3.1, str. 17 - Kalibrace mezi skutečnou expozicí vzorku a "virtuální" expozicí měřenou vakuometrem a aparatuře může být použita pouze v případě, že koeficient ulpění na vzorku pro daný plyn je zanedbatelný, v opačném případě budou takto získané hodnoty expozic vždy podhodnocené.
- Na str. 26 jsou diskutovány různé způsoby odhadu tloušťky deponovaného oxidu a je zmíněna principiální chybovost vzorce (4) pro výpočet tloušťky z XPS dat u nespojitých vrstev. Již dříve v textu je zmíněno (kap. 1.2), že CeO_x (v množství ≤ 1 ML) roste na Rh substrátu pouze v jedné vrstvě. Za tohoto předpokladu by nemělo být obtížné modifikovat vzorec pro výpočet tloušťky, který by platil pro nespojitou vrstvu.
- Kap. 4.2.1, str. 28 - "... změřená spektra vzorků (...) byla normována na vazebnou energii stavu Rh 3d_{5/2} ..." - normováno může být na velikost signálu (plochu peaku), nikoliv vazebnou energii; autor měl evidentně na mysli *vztažení* vazebné energie k energii zmíněného stavu Rh. Stejná formulace je použita i na str. 37.

- Obr. 17 na str. 36 - Peak fitující složku "uhlíkatých nečistot" se zdá mít nejméně dvě komponenty (okolo 283.8 a 284.7 eV), což dle mého napovídá i výrazně větší pološířka tohoto peaku ve srovnání s ostatními peaky spektra C 1s.
- Kap. 4.3.1 - Z uvedené formulace mi není jasné, proč byly reakce na CeO_x/Rh(111) změřeny jen pro pokrytí 0.5 ML.
- Tabulky 9 a 10 vzájemně nekorrespondují pokud jde o jednotlivé vzorky; proč nejsou v Tab. 10 údaje pro 2. a 3. adsorpčně-desorpční cyklus? V textu je pouze konstatováno, že nebyly pozorovány výraznější rozdíly. Možná by také nebylo na škodu, kdyby byla prezentována samotná termodesorpční spektra.
- Obr. 24 - Z grafu není jasné, jaká je teplota vzorku, osa y je v [arb.u.]. Bylo by dobré použít dvojitě vertikální osy, už z důvodu lepšího přeškálování teplotní křivky. Totéž u Obr. 25 a 26.
- Výsledky měření steady-state reaktivity by si zasloužily důkladnější analýzu a lepší ukázání souvislosti s výsledky předchozích experimentů.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- Tvorbu slitiny Ce a Rh lze očekávat na rozhraní Rh substrátu a oxidové vrstvy, "slitinová" složka XPS signálu je tedy nejspíše částečně utlumena vrstvou oxidu. Bylo toto bráno v úvahu při výpočtu procentuálního zastoupení slitiny (např. v Tab. 4)?
- Kap. 4.3.2 - Na Obr. 21 je adsorpční křivka O₂ na čistém Rh(111). Pro účely diskuse ohledně nereaktivnosti CO+O na Rh(111) by však bylo relevantní změřit adsorpční křivku na Rh(111) pokrytém CO. Byl tento experiment proveden a pokud ano, s jakým výsledkem?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/~~bakalářskou~~.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/opponenta:

V Praze, 9.5.2013