

Věc: Posudek disertační práce
Studijní oddělení - doktorské studium
Ke Karlovu 3
121 16 Praha 2

V Praze, dne 18. 8. 2014

Vážený pane děkane,

zasílám oponentní posudek disertační práce s názvem „**Investigating model CeO₂ and TiO₂ systems by means of Scanning Tunneling Microscopy and Atomic Force Microscopy**“ předložené doktorandem Oleksandrem Stetsovychem v oboru 4f-5 Fyzika povrchů a rozhraní.

Stručný obsah:

Práce se zabývá studiem a charakterizací perspektivních materiálů na bázi kyslíčnicků kovů na atomární úrovni pomocí pokročilých technik rastrovacích mikroskopů. Jmenovitě jsou v této práci studovány modelové systémy technologicky důležitých oxidů ceru a titanu pomocí rastrovací tunelové mikroskopie (STM) a bezkontaktní mikroskopie atomárních sil (nc-AFM). Práce přináší nové poznatky v oblasti atomární a elektronové struktury tenkých vrstev oxidu ceru rostlých na povrchu mědi a jejich možné využití pro heterogenní katalýzu. Dále se práce zabývá studiem atomární struktury povrchu anatase a adsorpcí vybraných molekul na tento povrch. Práce také přináší nový způsob nc-AFM měření, který umožňuje dosažení vysokého intramolekulárního rozlišení na vybraném systému.

Aktuálnost práce:

Doktorská práce se zabývá vysoce aktuálními tématy a pokročilými experimentálními technikami rastrovacích mikroskopů. Obsah této práce se pohybuje na hraně současného poznání v daném oboru.

Metodika:

V rámci práce si kandidát osvojil pokročilé techniky rastrovacích mikroskopů, přípravy tenkých vrstev oxidů ceru a depozici vybraných molekul. Experimentální měření byla podpořena teoretickou analýzou ve spolupráci s externími teoretickými skupinami.

Forma zpracování:

Práce je zpracována přehledně. Jednotlivé kapitoly jsou řazeny logicky. Z formálního hlediska mi chybí seznam doposud publikovaných článků a prezentací na vědeckých konferencích a workshopech, a také osobní podíl doktoranda na dosažených výsledcích. Očekával by jsem, že popis experimentálních technik bude více detailnější. Jmenovitě by

jsem uvítal popis relativně nové progresivní ale instrumentálně a teoreticky náročné techniky nc-AFM a také popis jednotlivých aparatur, na kterých byly prováděny jednotlivé experimenty.

Celkový význam práce:

Práce přináší zcela nové poznatky nejen v oblasti heterogenní katalýzy tenkých vrstev oxidů ceru, atomární a elektronové struktury oxidů kovů a adsorpce vybraných molekul na povrchu oxidů kovů. Dosažené výsledky byly/budou publikovány v předních vědeckých časopisech.

Přednosti:

Zejména by jsem ocenil (i) kvalitu naměřených experimentálních dat a dosažených vědeckých výsledků, (ii) aktuálnost a možný aplikační význam daného tématu, (iii) úzkou spolupráci s teoretickými skupinami a (iv) plné osvojení a další rozvoj progresivních experimentálních metod.

Nedostatky (otázky pro obhajobu):

V určitých pasážích je diskuze poněkud nepřehledná a těžko srozumitelná. K samotnému obsahu mám následující otázky, které by měly být adresovány během samotné obhajoby:

1. Na stránce 13 autor tvrdí, že absence „moiré“ vzoru v nc-AFM obrázcích ultra-tenkých vrstev oxidu ceru na povrchu mědi poukazuje spíše na elektronický efekt než reálnou mechanickou deformaci vrstev. Nicméně, v následující kapitole 3.2 je provedena detailní analýza rozložení napětí v ultra-tenkých vrstvách, kde je uvažována deformace ~ 3%. Je možné tento zdánlivý rozpor mezi nc-AFM a STM měřeními vysvětlit? Co je původem „moiré“ vzoru?
2. Tab. 3.1. na straně 17 porovnává kontrakci různě silných vrstev oxidu ceru určených pomocí STM a DFT výpočtů. Odchylka mezi experimentálními a teoretickými hodnotami pro danou vrstvu činí až 100%. Je možné podrobněji vysvětlit velký rozdíl mezi experimentálními a teoretickými daty?
3. Na straně 20, autor tvrdí, že hrot byl velmi pravděpodobně zakončen OH skupinou. Je možné experimentálně dosáhnout cílené depozice OH skupiny na hrot, tj. provést kontrolovanou a opakovatelnou funkcionalizaci hrotu za účelem dosažení vysoké rozlišení (viz. následující otázka)?
4. Obecně je předpokládáno, že právě přítomnost specifické funkční skupiny na konci hrotu, která je vysoce flexibilní, umožňuje dosažení ultra vysokého rozlišení. Není jasné jestli vysoké intramolekulární rozlišení dosažené pomocí dual-pass měření je skutečné výsledkem samotné procedury nebo naopak určitým stavem hrotu, jmenovitě hrotu zakončeného OH skupinou?

Shrnutí:

Práce ukazuje, že kandidát plně zvládnul značně komplikované experimentální techniky a základní teorie nutné pro interpretaci experimentálních výsledků. Je patrné, že je schopen

samostatné vědecké a tvůrčí práce, a to ve značném rozsahu a vysoké kvalitě. Splnil všechny požadavky kladené na absolventa doktorandského studia MFF UK, a proto doporučuji, aby mu byl udělen odpovídající titul.

S přátelským pozdravem

Dr Pavel Jelinek

Fyzikální Ústav AV ČR, v.v.i.

Cukrovarnická 10

Praha 6

CZ-162 00

Email: jelinekp@fzu.cz

Tel.: +420 220 318 430

Fax: +420 233 343 184

