

## Posudok doktorskej dizertačnej práce

### *"High-temperature Diffractometry of Thin Layers"*

*Mgr. Václav Valeš*

Predložená dizertácia sa zaoberá využitím rtg difrakcie a malouhlového rtg rozptylu pri šikmom dopade na štúdium štruktúry nanokompozitných a nanočasticových tenkých vrstiev na báze vybraných oxidov kovov a grafénu. Implementácia týchto metód prezentovaná v práci je na vysokej úrovni a v prípade potreby je podporená ďalšími komplementárnymi metódami ako Ramanova spektroskopia a EXAFS/XANES. To umožnilo prekonať niektoré obmedzenia rtg metód a získať originálne poznatky o štruktúre, fázových prechodoch a niektorých ďalších vlastnostiach študovaných nanoštruktúr, ako napr. koeficienty tepelnej rozťažnosti  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> fázy. Aktuálnosť študovaných nanoštruktúr spočíva v ich zlepšených fotokatalytických resp. magnetických vlastnostiach v porovnaní s tradičnými materiálmi. Poznanie ich štruktúry na atomárnej úrovni a jej teplotného vývoja priamo podmieňuje pochopenie ich zlepšených fyzikálnych vlastností s priamym dopadom na konkrétne aplikácie. Vedecké prínosy dizertačnej práce patria teda do oblasti materiálového výskumu nanoštruktúr. Osobitne treba vyzdvihnúť výsledky práce v oblasti nanokompozitov oxidov kovov Ti-Fe a Ti-Ce pre fotokatalýzu.

Z hľadiska formálneho je práca prehľadne členená na teoretickú, experimentálnu a výsledkovú časť a má veľmi dobrú grafickú úpravu.

Z hľadiska obsahového mám k práci jednu poznámku a dve otázky :

- Hoci je v úvodnej kapitole aktuálnosť riešenej problematiky čiastočne naznačená, stručné sformulovanie cieľov práce by lepšie ukázalo motiváciu prezentovaného výskumu.
- Záverečná kapitola je popisným súhrnom získaných výsledkov. V čom vidí autor hlavné prínosy týchto výsledkov pre fyzikálne poznanie a aplikácie študovaných nanoštruktúr?
- Výsledky uvádzané v práci boli získané v rámci širšieho kolektívu, čo je pre súčasný špičkový experimentálny výskum vo fyzike typické a často nevyhnutné. Mohol by autor upresniť svoj podiel na výsledkoch uvádzaných v jednotlivých častiach práce?

Ďalej mám niekoľko poznámok a otázok k jednotlivým výsledkom :

- Difrakčné diagramy nanočastíc boli simulované na základe Debyeovej rovnice. Bolo by inštruktívne ukázať, ako sa simulácia mení s distribúciou medziatómových vzdialeností (t.j. veľkosťou nanočastice).
- Prečo je v tabuľkách 3.1 a 3.3 kvalitatívne iné fázové zloženie nanočastíc Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> pripravených tou istou metódou?
- Prečo v kapitole 4.1 v druhom odseku sa uvádza simulačný model nanočastíc s  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> fázou, ale táto v tabuľke výsledkov 4.1 nevystupuje?
- Grafická prezentácia multivrstvého modelu nanočastíc by uľahčila diskusiu výsledkov v kapitole 4.2 (napr. čo sa myslí pod "roughness").
- Aká bola disperzia veľkosti syntetizovaných nanočastíc v koloïdnom roztoku, ktorý bol použitý na depozíciu v kap. 6? Táto disperzia podstatne ovplyvňuje procesy samosporiadania.
- Ako ovplyvňuje form faktor nanočastíc simulovaný diagram GISAXS v obr. 6.1a, obr. 6.2a? Aký bol dôvod použiť elipsoidný tvar nanočastíc?

- Vzhľadom na existenciu laterálnych maxím v meraniach GISAXS (obr. 6.1 b, d, obr. 6.2 b, d) je prekvapivá medzičasticová vzdialenosť 16 nm v porovnaní s laterálnou veľkosťou nanočastíc 12 nm v simuláciách GISAXS (tabuľka 6.1), keďže sterickej repulzie hrá dôležitú úlohu pri samousporiadaní nanočastíc. Tento rozdiel nevysvetľuje ani organická obálka, ktorá je hrubá 1 nm. Ako autor vysvetľuje tento rozdiel?
- Uhlíkové zvyšky po spálení organiky môžu značne skresľovať porovnanie výsledkov AFM (po žihaní pri 300°C/15min) a GISAXS v tabuľke 6.1, čo v prípade veľkosti nanočastíc konštatuje aj sám autor. Ešte dôležitejšie ale je, že odstránenie surfaktantu môže spôsobiť zásadné zmeny v usporiadaní nanočastíc, na čo existuje viacero štúdií, napr. aj pre nanočastice Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> na Si s podobným surfaktantom ako v práci (doi:10.1021/la904636g). Z tohto hľadiska výsledky AFM a štruktúry ukázané na obr. 6.1 e, f, obr. 6.2 e, f nie sú pre diskusiu výsledkov GISAXS veľmi relevantné.

V práci je niekoľko zjavných chýb, napr. prvé dve vety kapitoly 3.1 si odporujú, čím sťažujú pochopenie následného textu, alebo popis k obrázku 5.6 neobsahuje všetky v ňom použité farby a tieto sú v rozpore s diskusiou k obrázku v texte. Tieto nedostatky však nemajú zásadný vplyv na správnosť použitých postupov a správnosť výsledkov získaných v práci.

Záverom konštatujem, že práca má vysokú odbornú úroveň, rieši aktuálnu problematiku v oblasti nanoštruktúr pomocou pokročilých a relevantných metód štruktúrnej analýzy a prináša nové vedecké poznatky o atómovej štruktúre a fázových transformáciách nanokompozitných a nanočasticových tenkých vrstiev na báze oxidov kovov Ti-Fe, Ti-Ce a grafénu s potenciálom praktických aplikácií v oblasti fotokatalýzy a magnetizmu. Týmito výsledkami preukázal autor svoje predpoklady na samostatnú tvorivú prácu, preto odporúčam, aby mu bol po úspešnej obhajobe udelený titul *philosophiae doctor*.

v Bratislave 25.5.2015



Ing. Matej Jergel, DrSc.