

**Posudek disertační práce Mgr. Tomáše Duchoně:
Electronic and structural properties of model catalysts based on cerium oxide.**

Předkládaná práce má tři hlavní části: 10 stránek má úvod, 13 stránek má experimentální část a 50 stránek jsou výsledky a jejich diskuse. Práci uzavírá rozsáhlá bibliografie (196 citací) a příloha věnovaná fitování naměřených fotoelektronových spekter.

V první části je zdůvodněna potřeba modelových systémů pro detailní popis heterogenní katalýzy. Ukazuje se na význam oxidů ceria které mohou vhodně nahrazovat drahé kovové katalyzátory. Tato část obsahuje přehled získaných poznatků o jejich struktuře a vlastnostech.

Druhá část uvádí experimentální metody použité ke studiu povrchů tenkých vrstev postupně vytvářených tenkých vrstev oxidů Ce: fotoelektronovou spektroskopií, difrakcí pomalých elektronů (LEED) a elektronovou mikroskopií (LEEM).

Těžiště práce představuje třetí část, kterou tvoří 5 prací s výrazným podílem autora disertace: každá z prací je uvedena shrnujícím přehledem, přispívajícím k porozumění následujícího reprintu práce (publikace v J.Phys.Chem.C a Phys.Rev.B).

V 1.práci je věnována nejen stechiometrii ale i důležitému rozložení kyslíkových vakancí. Využívá se přípravy modelových systémů CeO_2 a Ce_2O_3 pomocí depozice různě tlustých vrstev Ce na buffer vrstvě $\text{CeO}_2(111)$ na substrátu $\text{Cu}(111)$ což umožňuje přípravu vzorků s různou koncentrací kyslíkových vakancí. Na tuto práci navazuje i další. Využití skutečnosti že interakce uvnitř oxidové vrstvy je silnější než její interakce se substrátem potvrdilo že příprava vzorků s kontrolovanou koncentrací kyslíkových vakancí nezávisí na substrátu když místo substrátu $\text{Cu}(111)$ byl použit $\text{Ru}(0001)$.

3.práce ukazuje možnost přípravy různých definovaných struktur s mikrometrovými rozměry na zvoleném povrchu oxidu což umožňuje porovnávat jejich vlastnosti za identických podmínek.

Metody LEEM a fotoelektronová mikroskopie použité in situ odhalují heterogenitu připravených povrchů ignorovanou jak metodami průměrujícími přes velkou oblast (XPS) tak i metodami pracujícími s atomovým rozlišením (STM). V souvislosti s defekty v substrátu $\text{Cu}(111)$ vyplývá potřeba využívat ke studiu mikrometrových oblastí i dalších metod. Ukazuje se zde na možnost získání nesprávných závěrů plynoucích z neúplné znalosti povrchu.

Za nejvýznamnější příspěvek považuji detailní experimentální i teoretické studium elektronové struktury základního stavu CeO_2 a Ce_2O_3 . v 5.práci. Řeší se zde rozpory v literatuře předložených interpretací experimentálních dat týkající se obsazení f-slupky. S použitím rezonanční fotoelektronové spektroskopie s úhlovým rozlišením získaný dispersní vztah ukazuje kovalentní hybridizaci ve valenčním pásu mezi $\text{Ce}4f$ a $\text{O}2p$ v CeO_2 na rozdíl od bezdispersního průběhu fotoemise z Ce_2O_3 prokazujícího atomovou lokalizaci elektronu v $\text{Ce}4f$. Tyto závěry potvrzuje DFT teorie ve výpočtech parciální hustoty elektronových stavů (pDOS) pro základní a excitovaný stav.

Rozsáhlá bibliografie a její využití ukazuje autorovu důkladnou znalost studované problematiky.

Z drobných, převážně formálních, výhrad uvádím že v textu k obr.3.24 chybí plný popis pDOS (spin) a že došlo k opakování dvou identických odstavců na str.80 a 81. V textu k obr. 3.8 by mělo být uvedeno že k plnému určení struktury povrchu difrakční obrazec LEED nestačí.

Předložená disertační práce jasně prokazuje předpoklady autora k samostatné tvořivé práci.

Praha, 15.8.2017

Doc. RNDr. Igor Bartoš, DrSc.