

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího ✗ posudek oponenta
✗ bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Miroslav Kettner

Název práce: Studium interakce molekul plynů s aktivními povrchy

Studijní program a obor: Fyzika, obecná fyzika

Rok odevzdání: 2011

Jméno a tituly vedoucího/oponenta: 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:

Předkládaná práce odpovídá svým rozsahem bakalářské práci a přináší původní vědecké výsledky, na jejichž získání se autor přímo podílel. Hlavní závěr zpracované série experimentů je sice v podstatě negativní (zkoumaný katalytický systém se ukázal jako nevhodný pro praktické využití), ale má svou důležitost pro vymezení pokračování dalšího výzkumu, jakožto i pro seznámení autora s některými experimentálními metodami fyziky povrchů.

Text je logicky strukturován a je sepsán poměrně srozumitelně, mám však k němu následující připomínky:

Autor na mnoha místech příliš volně zachází s některými pojmy, které mají svoji přesnou definici, používá jich ve špatném kontextu, případně sám zavádí pojmy, jejichž význam není zřejmý. Několik příkladů:

- V abstraktu se vyskytuje slovní spojení „pasivace systému vůči adsorpci a desorpci“; není mi jasný význam pojmu „pasivace vůči desorpci“.
- Domnívám se, že pojem „aktivní katalyzátor“ (str. 2) se v daném kontextu takto nepoužívá; O větu později je pak chybně označen jako „reaktant“.
- Str. 4 – Čištění povrchů bombardem se provádí ionty, nikoliv *molekulami* inertního plynu.
- Pojem „heterogenní katalýza“ na str. 4 není vysvětlen.
- Str. 5 – místo „nadkritické teploty“ zřejmě mělo být „podkritické teploty“.
- Str. 9 – „Rychlost“ není správným názvem veličiny (jedná se o tok plynu).
- „Výdrž“ na několika místech v kap. 3.3.
- Str. 18 - „fitovat redukci“ – fitují se jednotlivé peaky spektra, v daném kontextu redukovaného vzorku, použité vyjádření nedává smysl.
- Str. 20 – „nárůst Fermiho meze“ – jedná se o nárůst *elektronové hustoty* v okolí Fermiho meze.
- Pro „arbitrary units“ se používá zkratka „arb.u.“, „a.u.“ je spíše určeno pro „astronomical unit“.
- Str. 27 – „katalyzační reakce“.

Další věcné připomínky a komentáře:

- Pro každou konkrétní veličinu je dobré se držet všude stejné jednotky. Např. tlak je v textu uváděn někde v pascálech, někde v torrech. Podobně teplota je většinou v kelvinech, někde však ve stupních celsia.
- Str. 1 – Není pravda, že katalyzátory *nevstupují* do chemické reakce; charakteristikou katalyzátorů je, že nejsou reakcí, které se účastní, *spotřebovávány*.
- Str. 4 – K průběhu katalyzované povrchové reakce není vždy potřeba adsorpce a následná disociace jednotlivých složek (např. Eley-Rideal reakční mechanismus); dále není pravda, že by nebylo možné sledovat chování systému i v bodech 2) a 3) – např. technikami RAIRS, STM, PES, ...
- Str. 7 – Existují i „vysokotlaké“ XPS systémy (provozovatelné v tlacích řádově 100 Pa)
- Str. 12 – MEBES – bylo by dobré uvést referenci.
- Str. 14 – molekuly, separované kvadrupólovým filtrem QMS dopadají typicky na kolektor nebo do násobiče, nikoliv do spektrometru (v něm se už nachází)
- Kap. 3.2 – Není zmíněna důležitá skutečnost, že QMS má vlastní diferenciální čerpání.
- Kap. 3.3 – Již v popisu experimentálních procedur by mohlo být aspoň naznačeno, proč byly procedury sestaveny právě takovým způsobem. Takto působí výčet kroků poměrně nesystematicky.
- Kap. 4.1 – V komentáři k obr. 6 – redukce TiO₂ nevede v XPS k *posunu* k nižším BE, ale ke vzniku nového (resp. nových) chemického stavu na nižší EB.

- Obr. 6 – Není uvedeno, o jakou elektronovu hladinu Ti se jedná. Spektrum „po ohřevu bez Rh” – na jakou teplotu byla vrstva ohřáta? Vztah mezi jednotlivými spektry v tomto obr. A doprovodným textem by měla být zřejmější.
- Obr. 7 – FWHM jednotlivých peaků se poměrně dost liší, a to i vzájemně u jednotlivých složek dubletů (zejména u Ti_2O_3), provedení fitu tedy není po fyzikální stránce zřejmě v pořádku (ač po stránce matematické může jít o nejlepší fit za daných podmínek).
- Obr. 8 – Není uvedeno, o jakou elektronovu hladinu Rh se jedná. Navíc tento obr. Není v textu nijak komentován.
- Popiska obr. 11 je naprosto nedostatečná a nekonkrétní.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- Str. 9 – Předpoklad zanedbatelné re-adsorpce je v daném případě oprávněný, nicméně se domnívám, že plyne především ze statistiky pohybu molekul plynu v aparatuře a nikoliv z rozdělení aktivačních energií na povrchu vzorku.
- Str. 12 – Je zmíněna hrubost povrchu TiO_2 . Jak byla měřena?
- Proč je dle autora lepší vynášet reakční křivky v závislosti na čase a ne na teplotě? (obr. 13, 14)
- Proč není v práci uvedeno reakční spektrum pro první cyklus CO oxidace do 620 K, aby bylo přímé srovnání s obr. 14?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako ~~diplomovou~~/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta: *Praha, 10.6.2011*