

Název práce: Chemická reaktivita tenkých vrstev oxidů ceru na kovových podložkách studovaná metodou teorie funkcionálu hustoty

Autor: Lucie Szabová

Katedra (ústav): Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Vedoucí dizertační práce: Prof. RNDr. Vladimír Matolín, DrSc., Katedra fyziky povrchů a plazmatu, MFF, UK

Abstrakt: Oxidy ceru vykazují vysokou účinnost zejména pro rozklad vody a CO oxidaci, což jsou reakce s velkým významem pro katalýzu a palivové články. Práce ukazuje, že elektronické, strukturní i chemické vlastnosti tenkých vrstev jsou významně závislé na jejich tloušťce. Výpočty spolu s experimenty provedené pomocí skenovacího tunelového mikroskopu ukazují rozdíl v náboji, napětí a přítomnosti kyslíkových vakancí mezi první monovrstvou a tlustšími vrstvami. Rozdíly v reaktivitě vrstev v závislosti na tloušťce byly ukázány na případu adsorpce vody. Vrstva oxidu tlustá dvě monovrstvy vykazuje vyšší adsorpční energie než tenčí nebo tlustší vrstvy.