

Posudek školitele dizertační práce Mgr. Lucie Szabové

Chemical reactivity of metal-supported ceria thin films: a density functional study

Práce se zabývá teoretickým studiem systémů epitaxních tenkých vrstev $\text{CeO}_2(111)/\text{Cu}(111)$, které se experimentálně studují na našem pracovišti a využívají se jako modelové katalyzátory. V této oblasti bylo dosaženo mnoho originálních experimentálních výsledků. Pochopení interakce oxidu ceru s Cu v závislosti na tloušťce vrstev oxidu je zásadní pro pochopení mechanismu růstu a katalytických vlastností epitaxních vrstev $\text{CeO}_2(111)/\text{Cu}(111)$. Experimentální metody sice přinášejí řadu informací, pro pochopení vlastností těchto vrstev je nutné doplnit je teoretickými výpočty. V práci uchazečka popsala metody studia elektronové struktury pevných látek a zaměřila se především na rozbor metody DFT+U. Cenné je, že přestože jde o práci teoretickou, autorka se věnuje i rozboru experimentálních metod, jejichž výsledky v práci porovnává s výsledky svých výpočtů. Práce je zaměřena na dva problémy:

1. strukturní a elektronické vlastnosti ultratenkých vrstev (1 - 2 monovrstvy) ovlivněné interakcí s povrchem substrátu Cu(111)
2. studium reaktivity povrchu ultratenkých vrstev inverzního katalyzátoru vzhledem k adsorpci vody.

V práci je ukázáno, že adsorpce vody závisí na tloušťce vrstev oxidu Ce, a že v případě velmi tenké vrstvy (1 ML) se silně projevuje vliv přenosu náboje mezi substrátem a oxidem ceru. To vede k vytváření kyslíkových vakancí na povrchu, které představují aktivní pozice pro disociaci molekul vody. To je významný výsledek, který ukazuje na obecné problémy využití ultratenkých epitaxních vrstev jako modelových povrchů. Zároveň vysvětlují, proč velmi tenké, zvláště nespojitě, vrstvy CeO_x lze úspěšně využít ke studiu reaktivity jako inverzních katalyzátorů. Práce tím představuje velmi solidní základ pro další teoretické studium interakcí molekul, např. metanolu se systémy $\text{CeO}_2\text{-Cu}$, které již studujeme experimentálně.

Práce je psána v anglickém jazyce, velmi přehledně a srozumitelně. Slečna Szabová projevila velkou dávku samostatnosti, dokázala výborně komunikovat jak s konzultantem tak vedoucím práce. Přestože řešení práce a výpočty vyžadovaly četné cesty do Terstu, všeho se zhostila velmi efektivně. Práci hodnotím jako velmi úspěšnou, splňující všechny požadavky kladené na dizertační práci. Výsledky práce byly publikovány v prestižních časopisech.

Mgr. Lucie Szabová jasně prokázala ve své dizertační práci, že je schopna efektivně pracovat s výsledky, analyzovat je v souvislosti s již publikovanými experimentálními daty, interpretovat a publikovat. V neposlední řadě je nutno zmínit i úspěšné zvládnutí složité experimentální problematiky DFT+U pro silně korelované systémy.

Autorství anebo spoluautorství 4 publikací v mezinárodních recenzovaných časopisech a podání dizertační práce, kterou považuji za velmi zdařilou, v období kratším než 4 roky je samo o sobě dokladem kvality práce Lucie Szabové.

Závěrem konstatuji, že předložená práce splnila vytyčené cíle a kritéria kladená na doktorskou disertaci. Doporučuji proto přijmout práci Mgr. Lucie Szabové k obhajobě.

V Praze 21. 11. 2013

Prof. RNDr. Vladimír Matolín, DrSc
Školitel, KFPP MFF UK