

## **Posudek dizertační práce Electronic structure of bimetallic systems – study of gas molecule interaction**

Dizertační práce „Electronic structure of bimetallic systems – study of gas molecule interaction“ autora Igora Piše se zabývá studiem bimetalického systému Rh-V. Jedná se o aktuální téma, kterému se v literatuře pro svoji zajímavost a také potencionální praktické využití věnuje nemalá pozornost. Autor se tématem zabývá do značné šíře, soustředil se jak na vlastnosti bimetalických filmů nesených na  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ , tak i na spíše modelové příklady depozice V na površích {111} a {110} monokrystalů Rh a také na folii Rh. Tyto systémy byly studovány širokou škálou metod fyziky povrchů a jejich výsledky byly vyhodnoceny a vzájemně porovnány.

Práce má přehlednou formu, autor v úvodu shrnuje přístup ke studiu katalyzátorů a známé poznatky z literatury. Z toho vychází obsah práce. Dále pak popisuje použité metody. Na to navazují části, zabývající se konkrétními systémy.

V části 4.1 jsou to růst a vlastnosti bimetalické vrstvy Rh-V nesené na  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ . Analýza měřených dat ukazuje, že film Rh-V o tloušťce 0.8ML vykazuje odlišné desorpční vlastnosti CO než vrstva Rh, což souvisí s tvorbou slitiny těchto dvou kovů.

1. Dalo by se zhruba kvantifikovat množství oxidu vanadia na povrchu? Mohl by tento oxid ovlivňovat katalytické vlastnosti podobně jako je tomu  $\text{RuO}_2$ ?

Také měření na polykrystalické vrstvě Rh (část 4.2) ukazují na důležitost pronikání atomu V do podpovrchových pozic.

Modelové systémy V-Rh(111) a V-Rh(110) (části 4.3 – 4.4) poskytují nejvíc možností k detailnímu pochopení struktury a elektronových stavů.

K těmto měřením mám několik dalších dotazů:

2. K analýze struktury V-Rh(111)-(2x2) pomocí XPD bych byl rád, kdyby autor vysvětlil, jak byly vypočítány chyby strukturních parametrů. Autor správně použil k výpočtu teoretických křivek u XPD mnohonásobného rozptylu. Proč je to důležité?
3. Může autor vysvětlit rozdíl mezi svým výsledkem pro relaxaci povrchu u V-Rh(111)-(2x2) na základě XPD a obr. 1.5, kde je laterální relaxace atomů opačným směrem?
4. Z modelu na obrázku 4.41 není jasná periodičita V atomu ve třetí vrstvě ve směru [1-10]. Může se autor k tomu vyjádřit?

Přínosem této části jsou detailní nové informace o struktuře a elektronových stavech těchto povrchů.

V závěru autor ukazuje na shodné rysy studovaných systémů a také na některé rozdíly. Tyto výsledky považuji za důležité. Srovnání modelů s reálnými systémy je nejlepší cesta k jejich pochopení a následnému praktickému využití.

V předložené práci se aktuální problém řeší komplexně pomocí široké škály metod. Jejich principy a použití autor zvládl. Předností je určitě příležitost používat nejmodernější měřicí systémy, jako např. stanice MSB u synchrotronu Elettra v Terstu.

Kombinací měřících metod byl autor schopen získat celou řadu nových poznatků. O kvalitě práce svědčí také to, že část výsledků už byla publikována v renomovaných odborných časopisech. Volba angličtiny ukazuje, že autor je schopen prezentovat své výsledky na mezinárodním fóru.

Předložená práce splňuje podmínky pro dizertační práci. Práce prokazuje předpoklady autora k samostatné tvořivé práci.

Po uspokojivém zodpovězení otázek v tomto posudku doporučuji udělit panu Igoru Píšovi titul PhD

V Praze 25.2. 2013

Martin Polčík