

Posudek vedoucího Disertační práce Mgr. Igora Píše na téma

## **Electronic structure of bimetallic systems - study of gas molecule interaction**

Vypracoval Doc. RNDr. Václav Nehasil, Dr. (vedoucí práce)

Předkládaná disertační práce se zabývá studiem bimetalického systému V – Rh. Autor studoval interakci deponovaného vanadu s podložkou Rh (polykrystalickou i monokrystalickou – orientace Rh(111) a Rh(110) i chování bimetalických částic V-Rh deponovaných na inertní podložce. Zaměřil se zejména na studium geometrické i elektronické struktury povrchu připravovaných vzorků. Sledoval též vlastnosti studovaného systému z hlediska adsorpce CO a O<sub>2</sub> a komplexně porovnával a diskutoval získaná data. Výsledky práce tak mohou posloužit pro lepší porozumění procesu heterogenní katalýzy. Systém V-Rh je ve srovnání s čistým povrchem Rh velice účinný při hydrogenaci CO, jedná se tedy i o práci, která může přinést cenné výsledky pro praxi.

Výsledky v práci prezentované byly získány experimentálními metodami, hlavně různými modifikacemi elektronové spektroskopie (XPS, SRPES, ARUPS) a difrakce (XPD, LEED). Reaktivitu povrchů zkoumal autor metodou TPD a detailní informace o struktuře povrchu systému V/Rh(110) získal pomocí metody STM. Experimentální výsledky jsou pečlivě zpracované a doplněné modely geometrické struktury povrchu, které autor navrhl a které získaným výsledkům odpovídají. Podstatná je i část práce zabývající se strukturou valenčního pásu povrchu Rh(111) a Rh(110), určením průběhů obsazených stavů a porovnáním výsledků s dříve známými publikovanými daty získanými teoretickými výpočty i experimentálně.

Experimentální práce byla prováděna na několika aparaturách na KFPP MFF UK, ale i na MSB – Synchrotron Elettra – Terst, Itálie a autor využil i své výsledky ze stáže na University of Patras, Řecko. Obzvláště v posledních letech svého studia autor cílevědomě vybíral metody a experimenty, kterými postupoval ve svém výzkumu a potvrzoval své hypotézy a teorie. Projevil velmi vysokou míru samostatnosti jak při experimentu tak i při interpretaci výsledků.

Práce je psána anglicky, podle mého mínění srozumitelně a jasně se zanedbatelným množstvím překlepů a chyb. Obtížnější čitelnost některých pasáží je dána spíš složitostí problematiky než nedobrymi formulacemi. Práce má velmi dobrou grafickou úroveň. Má 123 stran a obsahuje veškeré požadované náležitosti. Po úvodu (Introduction) a stručném výčtu a charakteristice použitých metod a experimentálních zařízení následuje nejobsáhlejší kapitola –

Výsledky a diskuse (Results and Discussion – cca 75 stran). Tato kapitola je dělena systematicky na podkapitoly týkající se jednotlivých studovaných systémů V-Rh (deponované V-Rh vrstvy na  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , V deponované na polykrystalickém povrchu Rh, V/Rh(111) a V/Rh(110). Následuje přehledná sumace dosažených výsledků (kapitola Summary) a přehled použité literatury obsahující 109 citací.

Za nejvýznamnější výsledky lze považovat potvrzení podpovrchového rozložení vrstvy V deponované na povrchu Rh, přičemž tento vanad značně ovlivňuje adsorpční vlastnosti povrchu Rh. U povrchu V/Rh(110) byly pozorovány metodou LEED rekonstrukce povrchu (dosud nikde nepublikované) závislé na teplotě, na kterou byl vzorek zahříván a metoda STM ukázala změny povrchové struktury s těmito rekonstrukcemi. Obzvláště zajímavá je rekonstrukce (1 x 2) s chybějící řadou atomů Rh ((1 x 2) missing row reconstruction), která je na povrchu Rh(110) nestabilní a v případě systému V/Rh(110) je stabilizovaná podpovrchovou vrstvou V. U systémů V/Rh(111) a V/Rh(110) autor pečlivě proměřil a zmapoval obsazení a průběhy stavů ve valenčním pásu a odlišil stavy povrchové a objemové. Dále provedl adsorpční experimenty s molekulami CO a odlišnosti proti čistému Rh(111) a Rh(110) interpretoval v souvislosti s geometrickými i elektronickými vlastnostmi. Tím vznikla velmi ucelená sada dat týkající se tohoto systému.

Výsledky práce byly zatím publikovány ve 2 článcích v impaktovaných časopisech a v 1 článku ve sborníku WDS, další publikace jsou před dokončením. Autor předložené disertační práce je ale autorem či spoluautorem celkem 19 publikovaných prací, z čehož je vidět, že jeho odborný záběr značně přesahuje téma předložené disertační práce.

V neposlední řadě mohu po téměř 9 letech spolupráce s Mgr. Igorem Píšem konstatovat, že se málokdy povede spolupracovat s člověkem tak nadaným a přitom všestranně slušným a ochotným účastnit se jakékoliv práce a pomoci, když je to potřeba, i když se zrovna nejedná o činnost v přímé souvislosti s jeho povinnostmi.

Vzhledem ke kvalitě předložené práce a všemu dalšímu, co jsem ve svém posudku uvedl, doporučuji, aby byla předložená práce přijata jako disertační a po její obhajobě aby byl Mgr. Igoru Píšovi udělen titul PhD.

Praha, 27. 2. 2013

Doc. RNDr. Václav Nehasil, Dr.  
vedoucí práce