

## Posudek disertační práce Mgr. Igora Piše:

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

Pro detailní pochopení mechanismů složitých procesů probíhajících při heterogenní katalýze mají zásadní důležitost stav a proměny geometrické a elektronové struktury povrchů katalyzátorů. K modelování reálných systémů jsou nezbytné jednodušší modelové systémy, které umožňují sledovat důsledky změn jednotlivých komponent systémů na průběh katalytické reakce.

Po úvodu do problematiky studia katalytických reakcí pomocí modelových katalyzátorů (15 stran) je kap.2 (15 stran) věnována obecnému přehledu použitých povrchově citlivých experimentálních metod a kap.3 (4 strany) popisu aparatur použitých autorem jak na pracovišti v Praze, tak i v centru Elettra v Itálii a na universitě v Patrasu v Řecku. Těžiště vlastní práce představuje kap.4 (73 stran) o modelových systémech s monovrstvami V na polykrystalických vrstvách Rh a u povrchů monokrystalu Rh(111) a Rh(110). Přehledné shrnutí všech dosažených výsledků podává kap.5 (3 strany).

Úvodní kapitoly i vlastní práce je zpracována důkladně, přehledně a fundovaně. Citace (celkem 109) ukazují podrobnou znalost výsledků získaných ve studované problematice v odborné literatuře. Obrázky jsou provedené pečlivě a jsou přehledně umístěny v textu. Vytknout lze jen občasné chyby v angličtině textu.

Důkladné přípravě vzorků a modifikacím jejich uspořádaných povrchů byla věnována patřičná pozornost. To, že určení atomové struktury povrchů je náročné a vyžaduje použití řady komplementárních povrchově citlivých metod je obecně známo. V předkládané práci byly ke studiu krystalografické a elektronové struktury povrchů vhodně využity povrchově citlivé metody LEED, XPS, XPD, TPD a STM. Získaná experimentální data byla důkladně zpracována, podle možnosti ověřována pracemi z literatury a výsledky byly adekvátně interpretovány.

Rád bych vyzvednul komplexnost provedeného studia modelového katalyzátoru -bimetalického systému Rh,V- kdy byly detailně studovány oba důležité aspekty ovlivňující adsorpci a desorpci molekul plynů na povrchu: změny krystalografické i elektronové struktury systému jak po napaření tenké vrstvy V tak i po následném žhání.

Hodnověrnosti závěru o zabudování atomů V pod povrchem Rh(111) (Fig.4.25 z XPD lišící se od Fig.1.5 z literatury) mohla pomoci i další podpora: např. z měření a interpretace intenzit zpětně difraktovaných svazků elektronů (I-V křivky v LEEDu).

Proč nebyla metoda XPD použita i pro přímé stanovení orientace molekul CO vůči povrchu krystalu?

K objasnění mikroskopických procesů probíhajících při substitučním zabudování atomů V do povrchu Rh a při následné adsorpci CO a O<sub>2</sub> na různě modifikovaných površích bimetalického systému Rh-V Mgr. Piš prokázal schopnost přípravy potřebných definovaných povrchů modelových systémů. Zvládl řadu povrchově citlivých metod potřebných pro experimentální studium krystalografické a elektronové struktury, provedl náročná měření a na jejich základě a s využitím podrobné znalosti literatury provedl adekvátní interpretaci výsledků.

Předložená disertační práce jasně prokazuje předpoklady autora k samostatné tvořivé práci.

Praha, 25.2.2013

Doc. RNDr. Igor Bartoš, DrSc., FZU AV ČR