

## Posudek na diplomovou práci Michala Škody

Pan Michal Škoda vypracoval Diplomovou práci „Studium valenčního pásu přechodových kovů a jejich slitin“ na katedře Elektroniky a vakuové fyziky MFF UK pod mým vedením. Cílem práce bylo studium vzniku intermetalického rozhraní Pd – Ce při depozici céru a jeho oxidů na povrch monokrystalu Pd(111), studium vlivu teploty na vznik slitiny a jejího chování při interakci s kyslíkem. Ke studiu byly použity metody fotoelektronové spektroskopie buzené rentgenovým (XPS) a synchrotronovým zářením (SREPS) a tzv. rezonanční spektroskopie (RPES) v rozsahu energií budícího záření 115 – 130 eV. Práce byla z velké části řešena na zařízení optické dráhy materiálového výzkumu synchrotronu Elettra v Terstu.

RPES je náročnou metodou využívající silného zvýšení fotoemise z valenčních hladin céru při naladění energie budícího záření na hodnotu odpovídající rezonančnímu mezipásovému přechodu 4d – 4f. Porovnání spekter získaných v rezonanci při energii okolo 122 eV a mimo rezonanci (115 eV) umožňuje získat informaci o příspěvku stavů Ce k celkové hustotě stavů ve valenčním pásu. Obtížnost úkolu je umocněna tím, že měření na synchrotronu vyžadují oproti laboratorní fotoelektronové spektroskopii zvládnutí obsluhy monochromátoru a v případě RPES i zpracování velkých objemů dat. Navíc v rámci práce byla metoda RPES použita na našem pracovišti poprvé a diplomant se tedy nemohl opírat o předchozí zkušenosti. Zpracování dat vyžaduje značnou dávku samostatnosti a v případě Ce, pro který jsou typická značně komplikovaná spektra vzhledem k uplatňujícím se různým mechanismům stínění vzniklé fotodíry, i důkladné vyhledání informací v literatuře.

Motivem práce bylo přispět k pochopení vlivu dopantů, v tomto případě Pd, na katalytické vlastnosti katalyzátorů Pd-CeO<sub>2</sub>.

Pan Škoda proměřil a vyhodnotil parametry růstu vrstvy Ce na Pd z porovnání spekter vnitřních hladin Ce 3d a Pd 3d a dospěl k závěru, že cér difundoval do objemu krystalu Pd i za pokojové teploty. Proces difúze se ukázal jako teplotně závislý.

Následné depozice Ce a oxidu Ce v různé stechiometrii a odpovídající měření RPES valenčního pásu ukázala, že hustota stavů je silně závislá na chemickém stavu Ce a na hybridizaci orbitálů f a s,p, což se projevuje silnou modifikací konečného stavu ve fotoemisi. mezi nejzajímavější výsledky patří překvapivá spektrální závislost f-stavů pro slitinu Pd-Ce (obr. 4.14 a 4.15), kde je prakticky úplně potlačena rezonance f<sup>0</sup> a je vidět pouze slabá

resonance  $f^1$ . Naprosto opačný charakter je vidět na rezonančních spektrech získaných po ohřevu vrstvy oxidu céru na obr. 4.20.

Práce jasně ukázala, že vznik různých forem rozhraní Pd-Ce ať již v případě depozice Ce nebo  $CeO_x$  se projeví dramatickými změnami ve struktuře valenčního pásu. Vzhledem k velké složitosti interpretace dat, kde je potřeba brát v potaz jak modifikace počátečního tak konečného stavu, není zatím jasné k jakým konkrétním změnám dochází. Pochopení těchto jevů bude vyžadovat další detailní studium, především teoretických aspektů fotoemise z Ce a jeho sloučenin. I přesto je přínos práce velký, protože jasně ukázala, že mechanismus způsobující změny vlastností katalyzátorů  $CeO_2/Pd$  v závislosti na jejich přípravě je spojen se vznikem binárních rozhraní Pd-Ce a jejich značnou proměnlivostí. Experimentálně tato práce otevřela v naší laboratoři novou cestu ke studiu sloučenin Ce metodou rezonanční spektroskopie, která patří pro svou náročnost mezi málo běžné metody fotoelektronové spektroskopie.

K práci mám následující připomínky:

Z obr. 4.4 a příslušného komentáře není jasné proč difunduje Ce do objemu. I tlustá vrstva Ce na substrátu by vedla ke stejnému tvaru závislosti intensity Ce na době depozice.

V práci by bylo potřeba vysvětlit detailněji vznik struktury spektra valenčního pásu a vliv počátečního a konečného stavu v procesu fotoemise.

V průběhu řešení pan Škoda projevila velkou dávku samostatnosti. Dokázal, že je nejen dobrým experimentátorem, ale že je schopen i samostatné práce v oblasti interpretace výsledků. Práce představuje velmi cenný přínos k rozvoji nových experimentálních metod na pracovišti fyziky povrchů.

Práci hodnotím jako velmi úspěšnou, která splňuje všechny požadavky kladené na diplomovou práci a doporučuji ji ohodnotit známkou ....

Prof. RNDr. Vladimír Matolín, DrSc

Vedoucí práce



14.5.2006