

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Michal Fečík

Název práce: „Ab initio“ studium systémů na bázi CeO₂

Studijní program a obor: Fyzika, FTF

Rok odevzdání: 2013

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: doc. RNDr. Zdeněk Chvoj, DrSc.

Pracoviště: Fyzikální ústav AVČR

Kontaktní e-mail: chvojz@gmail.com

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:

Diplomová práce Michala Fečíka je příspěvkem ke studiu základních vlastností materiálů založených na Ce, zvláště systému CeO₂, které jsou perspektivními materiály pro mnohé aplikace, z nichž jmenujme například heterogenní katalýzu. V předložené práci autor studuje elektronové vlastnosti, pásovou strukturu, hustotu stavů a povrchové stavy „ab initio“ metodami. Z tohoto hlediska je práce zajímavá a aktuální.

Úvodní část práce je věnována přehledu a kritickému rozboru metod studia elektronové struktury pevných látek. Tato část je napsána s přehledem a ukazuje na dobrou orientaci autora v problematice. Vedle přehledu teorie se autor věnuje i experimentálním metodám studia elektronových stavů, které jsou založeny na fotoelektrickém jevu.

K výpočtu elektronových stavů materiálů založených na Ce byla zvolena metoda DFT+U, vhodná pro silně korelované systémy. Ke studiu povrchových stavů definuje autor hexagonální supercelu (111). Její vhodnost na studovaný systém byla úspěšně testována na modelovém systému Cu. Tento materiál je velmi důkladně studován a může tedy sloužit jako referenční systém pro test teoretických metod. Po testu metody přistoupil autor k studiu Ce materiálů, k určení pásové struktury, hustoty stavů a povrchových stavů. Výsledky jsou porovnány s experimentálními daty stanovenými ARPES metodou.

Zajímavé výsledky poskytlo studium elektronových stavů CeO₂ v závislosti na tloušťce vrstvy. Ukazuje na povrchové stavy, které mohou být zodpovědné za katalytické vlastnosti systému. Autorem užitá metoda pro studium elektronových stavů umožňuje určit plochy konstantní energie i stanovení Fermiho plochy a její 2D řezy. Ukázalo se, že povrchové stavy pak leží pod Fermiho energií.

Práce je na velmi dobré úrovni, přináší původní zajímavé výsledky a svědčí o dobré orientaci autora v problematice „ab initio“ výpočtů elektronových stavů pevných látek.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Porovnání experimentálních dat s autorovými výpočty vykazuje rozdíl absolutních hodnot energie kolem 2eV. Symetrie výpočtů ploch konstantní energie a experimentu se také liší, viz obr. 3.11. Autor v diskusi naznačuje vysvětlení těchto rozdílů. Může se však autor k těmto otázkám blíže vyjádřit, případně uvést své zkušenosti s další analýzou problému?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Praha, 20. srpna 2013

