

Posudek na habilitační práci Ing. Pavla Jelínka, Ph.D.

## **„High-resolution scanning probe microscopy: tool for chemical analysis of molecules on surfaces“**

Habilitační práce se zabývá využitím technik rastrovacích mikroskopii v blízkém poli – skenovací tunelové mikroskopie (STM) a mikroskopie atomárních sil (AFM) – pro zobrazování molekul na površích s vysokým rozlišením a získání relevantních informací o zkoumaných molekulách „na atomární úrovni“. Jedná se o komentovaný soubor publikací, které vznikly spoluprací autora a jeho domácích kolegů s řadou zahraničních pracovišť. Práce spojuje experimentální a teoretický přístup – pro spolehlivou interpretaci experimentálních výsledků je nutné porozumění studovaným jevům a současně naměřená data představují kritérium pro ověření správnosti teoretického přístupu. Problematika, kterou se práce zabývá, stojí v centru pozornosti předních světových pracovišť v daném oboru.

Autor opírá práci o 12 publikací převážně v časopisech s vysokým impakt faktorem (např. Phys. Rev. Lett. 4x, Nat. Commun. 2x, Nat. Chem., ACS Nano). V úvodní kapitole stručně charakterizuje současný stav poznání v oblasti studia molekul na površích pomocí STM a AFM a aktuálně řešené problémy. V další kapitole autor diskutuje nejdůležitější výsledky obsažené v příložených pracích. V jednotlivých podkapitolách se postupně zabývá zobrazením s vysokým rozlišením pomocí AFM, STM a využitím neelasticky tunelujících elektronů pro zobrazování v STM (IETS-SRTM), dále pak studiem rozložení náboje a potenciálu na adsorbovaných planárních molekulách, studiem povrchových reakcí molekul a poslední část je věnována transportu elektronů mezi molekulami a měření slabé van der Waalsovy interakce. V diskuzi k jednotlivým problematikám autor uvádí výsledky do kontextu s publikovanou literaturou (text odkazuje na 114 prací) a potvrzuje svůj přehled v problematice.

Po experimentální stránce obsah práce vychází vesměs z náročných měření v ultra-vakuových podmínkách za velmi nízkých teplot a pomocí hrotů modifikovaných adsorbovaným atomem či molekulou. Výsledky měření lze analyzovat a kvantitativně interpretovat pouze v kombinaci s teoretickým přístupem. Autor s kolegy vytvořil nové teoretické nástroje a řešení opírající se zejména o DFT výpočty. Díky nim bylo možné zkoumat současné působení přítomných sil různého typu a dosahu mezi modifikovaným hrotem a povrchem (planární molekulou). Řešená problematika a dosažené výsledky mají značný význam pro rozvoj poznání v oblasti přímého studia struktur a procesů na atomární a molekulární úrovni. Práce představuje aktuální přehled v problematice a lze ji doporučit všem, kdo v dané oblasti vědy pracují nebo se o ni přinejmenším zajímají.

Po formální stránce je práce přehledná a doplněná řadou obrázků ilustrujících obsah kapitol. Text je srozumitelný a trpí pouze malým množstvím překlepů či jiných opomenutí (např. problém používání členů v anglickém textu). Čtenář by na některých místech ocenil

menší stručnost, bez nutnosti obracet se při čtení často na text příslušné publikace. Nicméně, práci jsem přečetl se zájmem, a byla pro mne inspirující v řadě ohledů.

V rámci svého posudku bych se omezil pouze na následující komentáře a otázky:

Terminologie – otázka vhodnosti používání pojmu „elektrostatická“ interakce resp. „elektrostatické pole“ v situaci, kdy na atomární úrovni operujeme se středními hodnotami (časovými i prostorovými) elektrických polí dynamických systémů (zejména v kapitole 2.4 zabývající se měřením povrchového potenciálu.).

Na řadě míst v textu se opakovaně, v různých souvislostech, rozlišují „blízké“ a „vzdálenější“ pozice hrotu vůči zkoumanému povrchu. Zejména čtenář bez vlastních zkušeností s problematikou by uvedení odpovídajícího „číselného“ údaje jistě uvítal.

Pro získání silových spekter je potřeba přepočítat frekvenční posuv kmitů raménka sondy na sílu. Jaká velká nepřesnost se pak objeví v závislosti síly na změně vzdálenosti?

V kapitole 2.6.2 se autor zmiňuje o měření van der Waalova silového působení mezi molekulami CO na hrotu a povrchu. Jedná se o dosud nepublikovaná data? Jakým způsobem byly v tomto případě získány hodnoty interakční energie pro závislosti na vzdálenosti?

Závěrem konstatuji, že předložená práce svědčí jednoznačně o vysoké úrovni vědecké práce Ing. Pavla Jelínka. Publikace, ze kterých vychází, potvrzují jeho schopnosti v oblasti mezinárodní vědecké spolupráce. Práci doporučuji uznat jako habilitační.

V Praze, 12. dubna 2017

doc. RNDr. Ivan Ošřádal, CSc.