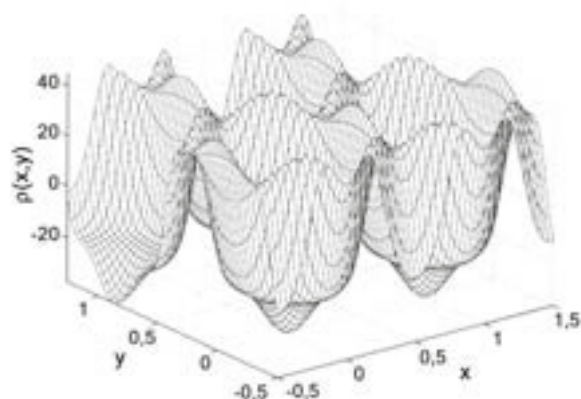


V posledních letech projevuje intenzivní zájem o praktické využití techniky a metodiky vysokých hydrostatických tlaků i oblast biologických věd. V ČR byl zachycen odpovídající vývoj v oblasti potravinářství a tak technické a metodické poznatky získané v oblasti výše uvedeného badatelského výzkumu nacházejí své nečekané, ale velmi účelné uplatnění v rámci resortních projektů MPO ČR a MZe ČR.

TEORIE

Charakteristickým rysem vědecké práce oddělení je těsné propojení experimentálního a teoretického studia. Po dlouhou dobu byly experimentální výsledky konfrontovány s výpočty založenými na tzv. efektivním hamiltoniánu, který odrážel magnetické interakce a interakce v krystalovém poli.

Metoda efektivního hamiltoniánu je stále používaná, je však zatížena nutností určit volné parametry modelu srovnáním (fitem) s experimentálními daty. Proto byla od počátku devadesátých let vzrůstající pozornost věnována metodám výpočtů elektronové struktury z prvních principů, kde jedinými parametry, které je nutno specifikovat, je krystalová struktura a typy atomů, z nichž je systém složen. V této souvislosti byla a je zvláště důležitá spolupráce Pavla Nováka a Jana Kuneše při vývoji programového souboru WIEN používaného několika sty pracovišti po celém světě. Díky jejich úsilí je v tomto souboru zahrnuta řada programů umožňujících určení důležitých vlastností magnetických systémů (spin-orbitální vazba, orbitální příspěvky k hyperjemnému poli, magnetooptika a další). Bohužel v magnetických systémech výpočty z prvních principů často nepopisují situaci uspokojivě. Proto se jako zvláště plodné ukázalo jejich spojení s metodou efektivního hamiltoniánu - parametry, které v původním přístupu bylo nutno určit simulací experimentu, jsou nyní vypočteny z prvních principů. Určením parametrů krystalového pole tak bylo možno lépe pochopit chování iontů vzácných zemin ve vysokoteplotních supravodičích [M. Diviš, V. Nekvasil, *J. Alloys and Compounds*, **323**, 567 (2001)].



4/ Rozložení náboje v triangulární mřížce vortexů

Teoretickým problémem, který se během let stále znovu vynořuje, je tlumení pohybu magnetizace v magnetických kovech skupiny železa. Naším originálním přínosem zde je započítání spinorbitální vazby a konečné doby života delokalizovaných 3d stavů na Fermiho mezi. Problém byl řešen na různé úrovni, odpovídající výpočetním možnostem, které byly v dané době k dispozici. Nedávno se Janu Kunešovi a Vladimíru Kamberskému podařilo skloubit tento problém s výpočty elektronové struktury z prvních principů zmíněnými výše [Phys. Rev. B **65**, 212411 (2002)].

Výsledky získané v laboratoři daleké infračervené spektroskopie vedly k navržení zcela nové teorie dynamiky supravodivých vírů, jež dokázala vysvětlit výsledky měření provedených nejen v této, ale i v jiných laboratořích, jež byly též s původní teorií v rozporu. V limitě nulové frekvence tento přístup objasnil dvojí změnu znaménka Hallova jevu, považovanou za jednu z nejzáhadnějších vlastností supravodičů. Ve svých důsledcích to vedlo J. Kolářka, P. Lipavského a E. H. Brandta i k rozšíření Ginzburg-Landauovy teorie supravodičů [Phys. Rev. Lett. **86**, 312 (2001)], do níž se podařilo zahrnout i přítomnost elektrického pole v supravodičích. Rozšířená teorie umožnila počítat i náboje supravodivých vírů a dokázala vysvětlit záhadný rozpor mezi nábojem supravodivých vírů předpovídaným BCS teorií a experimentálně pozorovanou skutečností (viz obr. 4).

TENKÉ VRSTVY A POVRCHY

Jan Kočka, Vladimír Cháb, Zdeněk Chvoj

Vznik tohoto oddělení v roce 1990 byl odrazem rychlé rostoucího významu tenkých vrstev a skutečnosti, že právě pro tenké vrstvy je důležité znát strukturu

a dynamické vlastnosti povrchů. Tato idea se také odrazila na základním členění do dvou skupin. První z nich byla nejprve zaměřena na přípravu a charak-

terizaci tenkých vrstev amorfního hydrogenizovaného křemíku (a-Si:H) a mikrokrystalického křemíku ($\mu\text{-Si:H}$), které lze nanášet na nejrůznější substráty. Oba tyto materiály se používají v řadě aplikací, například v plochých displejích či fotovoltaických článcích. Studován byl také porézní křemík a nejnověji křemíkové nanokrystaly. Druhá skupina se zaměřila na experimentální studium povrchů polovodičů, převážně monokrystalického Si, který je základním materiálem mikroelektroniky. Experimentální a teoretické studium povrchové difuze je důležité jak pro mikroelektroniku, tak pro řadu chemických procesů, například katalyzátory.

PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE TENKÝCH VRSTEV RŮZNÝCH FOREM KŘEMÍKU

Na přelomu devadesátých let bylo těžištěm výzkumu stále studium a-Si:H, zahájené již v sedmdesátých letech. I když některé společné práce s Milanem Vaněčkem, který přešel do oddělení optických krystalů, se týkaly ještě optických vlastností, zejména tzv. absolutní CPM metody resp. rozptylu světla v $\mu\text{-Si:H}$, hlavním směrem této skupiny se stalo studium transportních vlastností.

Významnou roli sehrála spolupráce s Gytisem Juškou z university ve Vilniusu, který je spoluautorem řady prací. Součin pohyblivosti (μ) a doby života (τ) elektronů a děr kontroluje sběr fotogenerovaných nosičů. Mezi hodnotami ($\mu\tau$) určenými pomocí tzv. doby průletu - TOF (Time of Flight) a ze stacionární fotovodivosti (důležité pro sluneční články), byly často značné rozdíly. Na unikátním samonosném vzorku a-Si:H, na jehož přípravě a samozřejmě i na automatizaci metody TOF se výrazně podílel Emil Šípek, se jednoduchým trikem podařilo prokázat izotropii driftové pohyblivosti elektronů a vyloučit anizotropii, jako jinými autory navržené vysvětlení. V rozsáhlé práci [J. Kočka, C. E. Nebel, C. D. Abel, Phil. Mag. B **63**, 221 (1991)] pak byl tento $\mu\tau$ -problém podrobně objasněn. V sérii prací se podařilo prokázat, že při silném osvětlení, vedoucím ke vzniku proudů omezených prostorovým nábojem (SCLC), lze metodu TOF využít pro měření na reálných (tenkých) fotovoltaických článcích a v tzv. „post-transit“ módu studovat i změny v počtu metastabilních defektů v a-Si:H. Měření v subnanosekundové oblasti, při nízkých teplotách a při extrémních elektrických polích umožnilo pochopit mechanismus transportu a to i „horkých elektronů“, ale také povahu bimolekulární rekombinace v a-Si:H [G. Juška, J. Kočka, M. Viliunas, K. Arlauskas, Phys. Rev. B **51**, 16668 (1995)], která je „motorem“ jeho světlem indukované degradace, kritické pro fotovoltaické články.

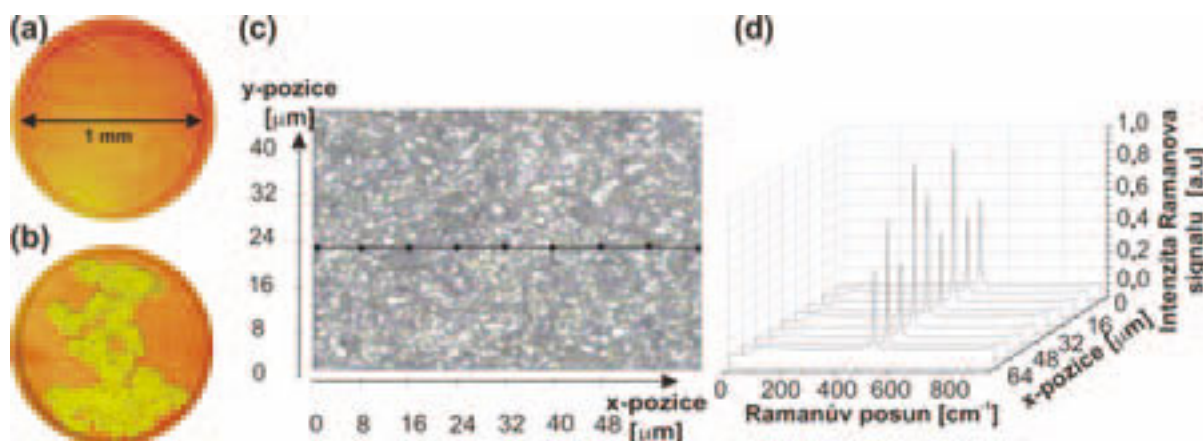
V několika společných pracích s Janem Taucem, který na Brownově universitě v Providence rozvinul

fotomodulační spektroskopii, byla tato metoda použita pro studium metastabilních stavů v dopovaném i nedopovaném a-Si:H. Využití rubínového laseru ke zrychlené degradaci nám umožnilo porovnat mnoho vzorků a-Si:H z různých laboratoří a ilustrovat vliv posuvů Fermiho meze.

Zkušenosti s transportními vlastnostmi a-Si:H a silná fotoluminiscence tzv. porézního křemíku při pokojové teplotě, objevená L. Canhamem, nás vedly k navržení a získání projektu Evropského Společenství „Non-Conventional Preparation of Light-Emitting Silicon, its Transport and Optical Properties“ (1993), který na řadu let ovlivnil zaměření skupiny. Provedli jsme měření na široké škále vzorků porézního Si, získaných od partnerů v projektu ES, ale také vyrobených v Oddělení polovodičů FZÚ. Množství nashromážděných experimentálních dat a zejména využití samonosných vrstev umožnilo vytvořit jednoduchý model transportu v porézním Si. Tento model byl na požádání prezentován na konferenci v Kóbe (1995) a později jako kapitola [I. Pelant, A. Fejfar a J. Kočka, *Transport Properties of Porous Silicon*] v monografii *Structural and Optical Properties of Porous Silicon Nanostructures*, Gordon and Breach Sci. Publ., Amsterdam 1997.

Pro praktické využití například ve svítivých diodách je třeba zvládnout elektroluminiscenci, u které na rozdíl od fotoluminiscence (buzené světlem) je podstatný právě transport nosičů. Podařilo se vybudovat vysoce citlivou aparaturu pro měření kvantové účinnosti elektroluminiscence (s citlivostí 10^{-10} %). Hned jedny z prvních výsledků na této aparatuře získané byly velmi zajímavé. Elektroluminiscenční diody, připravené v *Royal Institute of Technology* ve Stockholmu, měly na světě mezi prvky z porézního Si nejvyšší účinnost (cca 0,2%), detailní studium však odhalilo jejich časovou nestabilitu. To byl jeden z důvodů, proč se náš zájem soustředil na jinou formu světloemittujícího křemíku, a-Si:H s vysokým obsahem vodíku (20-45 at. % H). Po vyhodnocení detailních měření se ukázalo, že ani tento materiál není aplikačně zajímavý jako luminofor, ale byla objevena jeho jiná, velmi zajímavá vlastnost - schopnost okamžité krystalizace vlivem elektrického pole za pokojové teploty [P. Fojtík, K. Dohnalová, T. Mates, J. Stuchlík, I. Gregora, J. Chval, A. Fejfar, J. Kočka a I. Pelant, Phil. Mag. B **82**, 1785 (2002)].

Již několik let jsou jako nejperspektivnější materiál pro emisi světla studovány ve spolupráci s MFF UK a pracovišti ve Strasbourgu, Vilniusu, resp. Stockholmu křemíkové nanokrystaly. Ať už byly vzorky připraveny v *Australian National University* (Canberra) implantací Si^+ iontů do křemenného skla nebo zabudováním Si nanokrystalů do SiO_2 matice (tzv. sol-gel metodou, používanou i u nás),



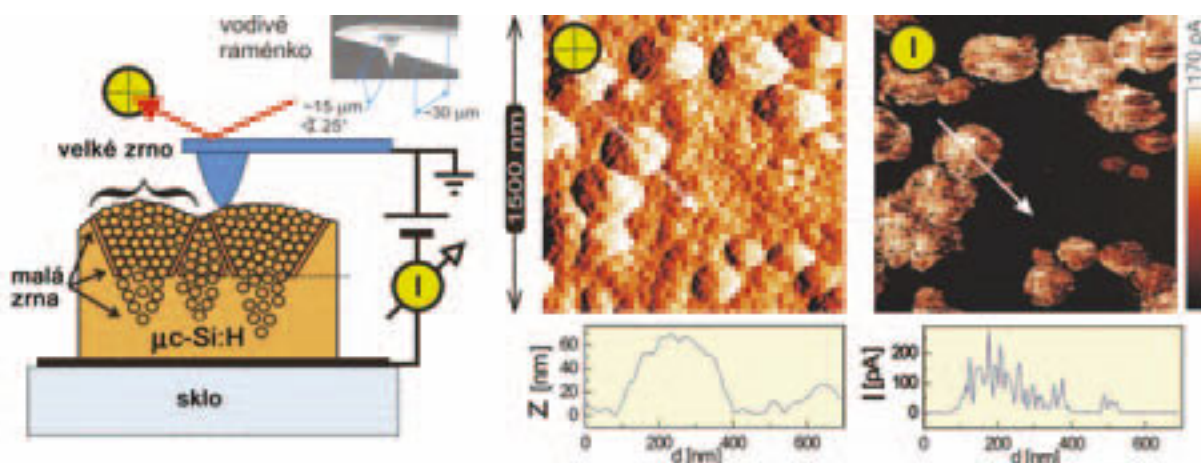
1/ Vzorek $a\text{-Si:H}$ s vysokým obsahem vodíku na skleněné podložce pokryté vodivým a průhledným kontaktem (ITO) s horním Ni kontaktem před (a) a po aplikaci elektrického pole (b). Optický mikrograf (c) s vyznačenými body, kde byla měřena Ramanova spektra (d) ilustrující homogenitu vzniklého polykrystalického Si.

předběžná měření na těchto vzorcích naznačují možnost optického zisku [J. Valenta, K. Luterová, R. Tomasiunas, K. Dohnalová, B. Honerlage, I. Pelant: *Optical gain measurements with variable stripe length technique*, in *Towards the first silicon laser*, Ed. by L. Pavesi, S. Gaponenko and L. Dal Negro, NATO Science Series II. Mathematics, Physics and Chemistry - Vol. 93, Kluwer Academic Publishers Dordrecht 2003, s. 223]. Pokud se tyto výsledky potvrdí, otevřela by se cesta ke křemíkovému laseru a revolučním změnám v elektronice.

Řadu změn v oddělení vyvolala v roce 1997 instalace vysokovakuového mikroskopu firmy Omicron, využívajícího meziatomových sil a tunelového jevu (tzv. AFM / STM - Atomic Force Microscope / Scanning Tunneling Microscope). Jedním z netradičních

záměrů je snaha využít hrotu STM k injekci elektronů a studiu elektroluminiscence s vysokým prostorovým rozlišením. Podařilo se zabudovat do STM citlivý optický sběrný systém a získat první „fotonové mapy“, tj. dvourozměrné zobrazení spektrálně integrované intenzity luminiscence z povrchu stříbra s rozlišením několika nanometrů [viz Čs. čas. fyz. 52, 4 (2002)].

Zatímco dopovaný $\mu\text{c-Si:H}$ byl řadu let využíván jako součást $a\text{-Si:H}$ fotovoltaických článků, teprve pracovníci univerzity v Neuchatel ukázali roku 1994, že nedopovaný $\mu\text{c-Si:H}$ může sám být fotocitlivou částí těchto článků. Skutečnost, že na rozdíl od $a\text{-Si:H}$ při silném osvětlení nedegraduje, vyvolala celosvětový zájem o tento materiál. Složitá struktura $\mu\text{c-Si:H}$, který je tvořen jak krystalky křemíku



2/ Princip kombinovaného AFM měření, kde je také naznačena struktura $\mu\text{c-Si:H}$ vzorku, složená z malých krystalických zrn (~ 10 nm) uspořádaných do velkých zrn (~ 100 nm) oddělených hranicemi zrn nebo amorfni mezifází. Vodivé AFM raménko, jehož tvar a rozměry jsou zobrazeny na vloženém snímku z řádkovacího elektronového mikroskopu, rastruje po povrchu a záznam jeho výchylky vytváří topografickou mapu. Nezávisle lze zaznamenávat i proud vyvolaný napětím přiloženým mezi vodivý hrot a spodní NiCr elektrodu. Na profilu topografie podél naznačené šipky lze rozlišit malé krystalické zrno (pozice 500 nm) podle signálu v lokálním proudu od struktury v amorfni oblasti (pozice 650 nm), kde proud zůstává nízký. Podle [B. Rezek, J. Stuchlík, A. Fejfar, J. Kočka, *Appl. Phys. Lett.* 74, 1475 (1999)].

(c-Si), tak zbytky amorfního Si a také hranicemi c-Si zrn, vyvolala řadu otázek a problémů. Vzhledem k relativně vysoké vodivosti $\mu\text{c-Si:H}$ bylo obtížné použít metodu TOF, a proto byla, opět ve spolupráci s Gytisem Juškou, navržena nová metoda [G. Juška, K. Arlauskas, M. Viliunas a J. Kočka, Phys. Rev. Lett. **84**, 4946 (2000)] určování pohyblivosti nosičů označená jako CELIV (Carrier Extraction in Linearly Increasing Voltage), jež využívá odezvu na lineárně rostoucí napětí.

Právě instalovaný AFM mikroskop umožnil určit topografii $\mu\text{c-Si:H}$. Využili jsme rozdílů ve vodivosti $\mu\text{c-Si:H}$ a a-Si:H a upravili AFM mikroskop tak, že umožňoval současně měření topografie i lokálních proudů s nanometrovým rozlišením. To umožnilo provést jednoznačnou identifikaci i těch nejmenších zrn c-Si (viz obrázek a referenci v něm) a postupně pochopit mechanismus růstu i transportu v $\mu\text{c-Si:H}$.

Vybuďovali jsme dvě metody určování tzv. difuzní délky (L_d), která charakterizuje vzdálenost do běhu fotogenerovaných nosičů před jejich „zánikem“ rekombinací. Nejprve metodu SSPG (Steady State Photocarrier Grating) umožňující určovat L_d podél substrátu s tzv. koplanárními kontakty a poté metodu SPV (Surface Photo-Voltage), využívající tzv. „sendvič“ geometrie pro určení L_d kolmo k substrátu. Zejména u SPV metody se podařilo zvýšit citlivost této jinak standardní metody, rozšířit její spektrální obor a rozvinout podrobné modelování. Porovnání těmito metodami získaných hodnot L_d jasně indikovalo anizotropii transportních vlastností v některých vzorcích $\mu\text{c-Si:H}$. Využitím zkušeností se střídavou elektrickou vodivostí na chalkogenních sklech, která dovoluje vyloučit jinak obtížně odstranitelný vliv kontaktů v „sendvič“ geometrii a jejím porovnáním se stejnosměrnou elektrickou vodivostí, měřenou s koplanárními kontakty (neovlivňujícími měření), se podařilo anizotropii transportu jednoznačně potvrdit.

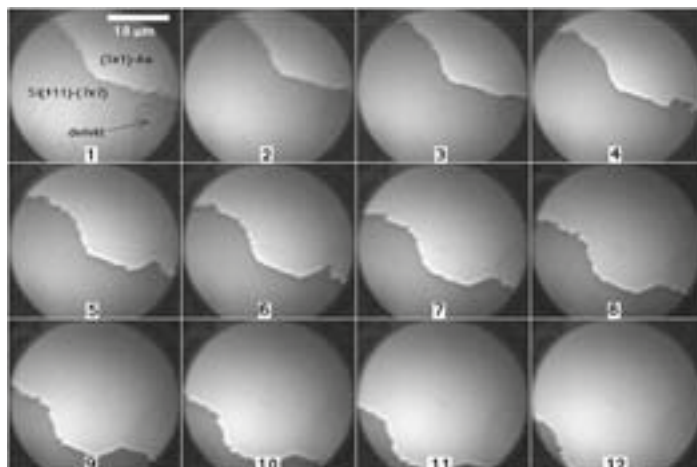
Z měření teplotní závislosti vodivosti byly získány hodnoty aktivační energie (E_a) a tzv. předfaktoru (σ_0). Jejich korelace s krystalickým podílem a velikostí krystalických zrn, jejichž růst byl popsán pomocí tzv. „Voronoi sítě“, umožnila vytvořit model transportu v $\mu\text{c-Si:H}$ [J. Kočka, H. Stuchlíková, J. Stuchlík, B. Rezek, V. Švrček, P. Fojtík, I. Pelant, A. Fejfar, Solid State Phenomena V **80-81**, 213 (2001)]. Ten je založen na mikroskopickém pozorování jak tzv. „malých“ zrn (10-30 nm), tak jejich agregátů, kterým říkáme „velká zrna“ (100-300 nm). Právě hranice mezi „velkými zrny“ jsou spojeny s potenciálovými bariérami, způsobujícími posuv transportní dráhy. Velká zrna mají většinou sloupcovitý tvar a jsou příčinou anizotropie transportu. V některých případech, například u a-Si:H/ $\mu\text{c-Si:H}$ supermřížek, jsou i tato zrna izotropní, což bylo určitým překvapením. V posledních letech se

skupina soustředila na zkoumání vlastností $\mu\text{c-Si:H}$, připraveného při teplotách podložky $T_s \leq 100$ °C. Optimalizace vlastností $\mu\text{c-Si:H}$ při těchto teplotách umožní využít jako substrát flexibilní polymery, čímž se otevřou nové možnosti jeho praktického využití („rolety“ s displeji či fotovoltaickými články).

TVORBA ROZHŘANÍ KOV-POLOVODIČ: STRUKTURA, ELEKTRONOVÉ STAVY A DYNAMIKA

Prvé roky existence skupiny struktury a dynamických vlastností povrchů byly věnovány vymezení nového programu, který byl založen především na široké mezinárodní spolupráci. Byl vypracován společný projekt s *Fritz Haber Institut der Max Planck Gesellschaft* na sledování difuze a dynamiky alkalických a plyných adsorbátů na kovových substrátech pomocí fotoelektronového emisního mikroskopu (PEEM). Díky mezoskopickému rozlišení mikroskopu (~ 100 nm) byla ukázána role defektů povrchu na značném rozptylu experimentálních hodnot povrchového difuzního koeficientu. Experimentální práce probíhaly v oddělení fyziky povrchů FHI a v rámci projektu zde byly rovněž vypracovány tři disertační práce studentů z Prahy. Důležitost výsledků vyplývá z faktu, že difuze hraje určující roli v procesech růstu, katalýze a jiných reakcích na povrchu pevných látek. Při makroskopickém měření je hodnota difuzního koeficientu dána především morfologií povrchu a hustota defektů určuje výsledek. Pokud technologie pracuje se submikronovými vzdálenostmi, dominuje příspěvek difuze na neporušeném povrchu, který se obvykle řádově odlišuje. Při běžném vyhodnocení experimentu je povrch považován za útvar, který má pouze jednu energetickou bariéru, kterou musí pohyblivý elektron překonávat. Mikroskopická pozorování a teoretické výpočty ukazují na přítomnost minimálně dvou bariér na geometricky ideálním povrchu. Proto bylo v rámci uvedeného projektu přistoupeno v našem oddělení k formulaci nového modelu pro výpočty povrchového difuzního koeficientu v přítomnosti dvou neekvivalentních adsorpčních center. Byla ukázána silná závislost difuze na pokrytí i pro systémy bez interakce mezi adsorbovanými atomy. Jako funkce pokrytí má difuzní koeficient skokový průběh a pro některé systémy vykazuje lokální extrémy, zcela ve shodě s výsledky experimentů [Z. Chvoj, H. Conrad, V. Cháb, Surf. Sci. **442**, 455 (1999)].

Experimentální určení difuzního koeficientu je podstatně složitější pro povrchy polovodičů. Faktory, které komplikují přímou interpretaci interakce mezi adsorbáty a substrátem, je přítomnost chemických reakcí a závislost atomové struktury povrchu na pokrytí. Přes svou extrémní důležitost pro technologii je množství údajů o difúzi na



3/ Záznam šíření (5x1) struktury Au na povrchu Si(111)-7x7 v reálném čase pomocí PEEMu v kombinaci se SZ. K difuzi atomů Au dochází v přítomnosti uspořádané fáze bez viditelné přítomnosti gradientu koncentrace.

povrchů polovodičů mizivé. Základní mechanismy tepelně stimulované difuze na povrchu polovodiče byly demonstrovány v rámci spolupráce oddělení s PEEM laboratoří u zdroje synchrotronového záření (SZ) ELETTRA v Terstu. Podrobná studie systému Au/Si(111) ukázala preferenční šíření uspořádaných fází na povrchu, tj. extrém difuzního koeficientu při odpovídajícím pokrytí [J. Slezák, M. Ondřejček, Z. Chvoj, V. Cháb, H. Conrad, S. Heun, Th. Schmidt, B. Ressel, K. C. Prince, Phys. Rev. B **61** (2000-I) no. 23]

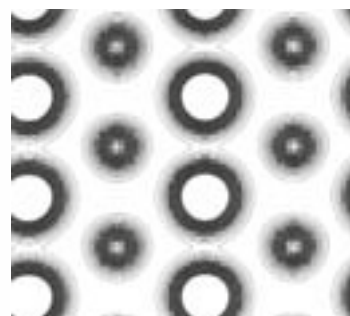
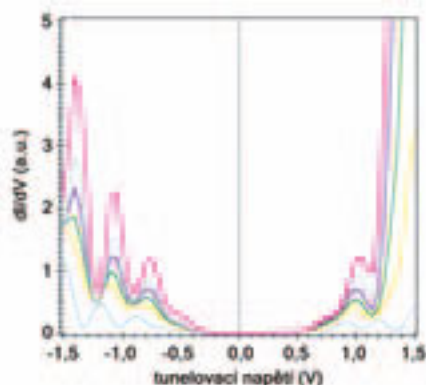
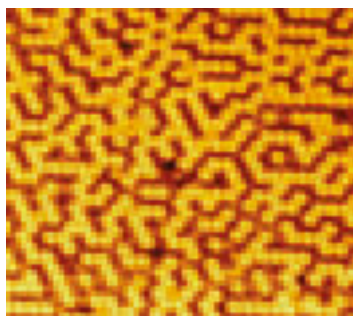
Podobné problémy byly rovněž řešeny teoreticky. Pomocí metody renormalizační grupy byly studovány uspořádané fáze v systému adsorbovaných atomů na povrchu se dvěma adsorpčními centry. Výsledky potvrzují, že difuzní koeficient v oblasti uspořádaných fází obvykle nabývá extrémních hodnot. Pro tyto systémy se ukázaly zajímavé fázové diagramy vzniku uspořádaných dvourozměrných fází při nízkých teplotách. Závislost kritické teploty na pokrytí má nemonotónní průběh [A. A. Tarasenko, Z. Chvoj, L. Jastrabík, F. Nieto, C. Uebing, Phys. Rev. B **63**, 165423 (2001)]. Obrázky získané pomocí PEEMu ukazují, že v prostoru difuzní zóny na rozhraní mezi Au a Si může být přítomný velký gradient koncentrace v podobě skokového rozdělení atomů na povrchu. Takový systém je daleko od rovnováhy. Analytické výpočty difuzních koeficientů v nerovnovážných systémech ukázaly na odchylky od rovnovážných hodnot a na jejich časovou závislost. Tento jev je důsledek nelinearity chování systému s velkým gradientem pokrytí [M. Mašín, I. Vattulainen, T. Ala-Nissilä, Z. Chvoj, Surf. Sci. **529**, L256 (2003)].

Výsledky obou projektů měření difuzního koeficientu na površích pevných látek ukazují na nezbyt-

nost využití dvou experimentálních nástrojů pro správnou interpretaci makroskopických dat. Prvým je určení mechanismu difuze na mikroskopické úrovni, tj. počet energetických bariér na povrchu, jejich výška a symetrie rozložení, morfologie, přítomnost poruch. Vhodným nástrojem pro tyto účely jsou rastrovací sondové mikroskopy, jako STM. Druhým faktorem je získání informací o struktuře a o chemickém stavu povrchu během difuzního procesu. Ideálním přístrojem je kombinace PEEMu a SZ. Přístupu k SZ je věnován zvláštní článek, proto následující část bude věnována aplikaci STM ve studiu struktury, dynamiky a elektronových stavů adsorbátů a adsorbovaných vrstev.

Systematicky je studován povrch monokrystalického křemíku, který je stále technologicky nejdůležitějším polovodičem. Hlavní snahou je prokázat, že jeho uplatnění bude pokračovat i při postupující miniaturizaci, s použitím nanotechnologií. Vlastnosti látek se výrazně mění při přechodu od atomu k makroskopickému objemu. Při rozměrech řádově nanometrů se především uplatňují kvantové efekty. Při depozici malého množství kovu vznikají nanodrátky, klastry a jiné objekty s rozměry ideálními pro kvantový režim. V naší laboratoři je studována tvorba rozhraní mezi Si(111) a třemi různými kovy, Pb, Au, Cu a jejich případnou kombinací. Výběr kovů je dán reaktivitou s povrchem. Reaktivní kovy (Cu) mají tendenci tvořit malé klastry na rozdíl od nereagujících kovů (Pb), které vytvářejí nanoobjekty často s vlastnostmi kvantového charakteru. Na obrázcích je mozaiková struktura Pb na povrchu Si(111), kde atomy olova vytvářejí řetízky. V pravé části obrázku je experimentálně určená lokální hustota stavů (LDOS) na řetězcích, která má zřetelně kvantový charakter [B. Ressel, J. Slezák, K. C. Prince, V. Cháb, Phys. Rev. B **66**, 035325 (2002)].

Rastrovací tunelová spektroskopie STS je přirozenou součástí STM. Během sběru topografického obrázku se sonda může zastavit na kterémkoli místě a proměřit I/V křivku, obvykle v rozsahu od -2 do +2 V. Derivace křivky je přímo LDOS v místě polohy hrotu. STS se proto používá ke zjišťování charakteru vrstvy (mozaiková vrstva je polovodičového charakteru, jak je patrné z pásu zakázaných energií) a je to veličina přímo srovnatelná s teoretickými výpočty. Tímto způsobem lze částečně odstranit nevýhodu STM - nemá možnost přímé chemické identifikace prvků - a porovnáním naměřené a vypočtené LDOS lze dosáhnout prvkové identifikace objektů na povrchu. Z těchto důvodů byla v našem oddělení vytvořena výpočetní a simulační skupina, která používá výpočetní kód CRYSTAL 98. Elektronová struktura je studována na základě DFT-LCAO formalismu a STM obrázky jsou simulovány pomocí Tersoffova-Hammanova modelu.



4/ Mozaiková struktura atomů izoelektronových kovů na povrchu Si(111). V levé části je STM obrázek obsazených stavů (cca 30 x 30 nm). V prostřední části jsou STS spektra LDOS olova snímané na řetězcích. Jednotlivé barvy představují různé vzdálenosti hrotu od povrchu během měření. Simulovaný STM obrázek (cca 1,3 x 1,5 nm) mozaikové struktury cínu na Si(111) povrchu je v levé části, větší kruhové objekty představují řady atomů cínu, které se střídají s řadami atomů Si.

Výsledek je vidět v podobě simulovaného STM obrázku mozaikové struktury Sn na Si(111) povrchu.

Zárodky nových objektů na povrchu mohou mít tvar dvou- nebo třídídimenzionálních ostrůvků. Z tohoto hlediska je rozhodujícím parametrem frekvence přeskoků atomů mezi jednotlivými vrstvami. Přechod atomů je dán dodatečnou energetickou bariérou (Ehrlichova-Schvöblava bariéra) jejíž určení pro konkrétní materiály je technologicky velmi důležité. V oddělení tenkých vrstev byla vypracována mikroskopická teorie, která umožňuje ana-

lyzovat experimentální data a odstraňuje rozdíly v interpretaci experimentů za různých teplot. Test byl proveden pro případ systému Ag/Ag(111) [Z. Chvoj, M. Tringides, Phys. Rev. B **66**, 035419 (2002)].

Mezinárodní uznání práce skupiny se odráží mimo jiné v rozhodnutí pořádat v roce 2003 vrcholnou evropskou konferenci o fyzice povrchů (ECOSS22) v Praze. Od roku 1995 pořádáme také pravidelné workshopy s bohatou mezinárodní účastí, jež jsou věnované dynamice adsorbovaných atomů.

OPTICKÉ KRYSTALY

Milan Vaněček, Jan Rosa, Martin Nikl

Oddělení optických krystalů navazuje na bývalé oddělení materiálového výzkumu. Materiálový výzkum v našem oddělení se dělí do tří částí: 1) technologie přípravy nových materiálů, 2) jejich experimentální charakterizace a 3) teoretické objasnění procesu růstu a optických a elektronických vlastností. Tematicky to představuje přípravu a charakterizaci nových perspektivních materiálů pro fotoniku a fotovoltaiku v kombinaci základního badatelského výzkumu a cíleného výzkumu.

Studují se 3 základní tematické okruhy:

- scintilátory (cílené pro lékařské aplikace a detektory užívané ve fyzice vysokých energií),
- CVD diamantové vrstvy (cílené pro elektronické a biologické aplikace),
- sluneční články na bázi amorfního, nanokrystalického a mikrokrystalického křemíku.

SCINTILÁTORY

Optické vlastnosti materiálů se širokým zakázaným pásem jsou základní informací pro většinu aplikačních směrů, jako jsou paměťové elementy, modulátory, lasery, sensory, scintilátory apod. Mnohé materiály jsou nyní připravovány jako heterosystémy se samoorganizovanou nanoskopickou složkou (s rozměry jednotek až stovek nanometrů), která má unikátní luminiscenční charakteristiky. Tvorba, stabilita a specifické vlastnosti této nanoskopické mikrofáze jsou systematicky studovány od poloviny devadesátých let, přičemž byl v oddělení vyvinut originální materiálový systém na bázi dopovaných monokrystalů CsCl a CsBr [M. Nikl, K. Nitsch, K. Polák a kol., Phys. Rev. B **51**, 5192 (1995)]. V souvislosti s tímto výzkumem probíhá teoretické zpracování dynamiky excitovaných stavů emisních