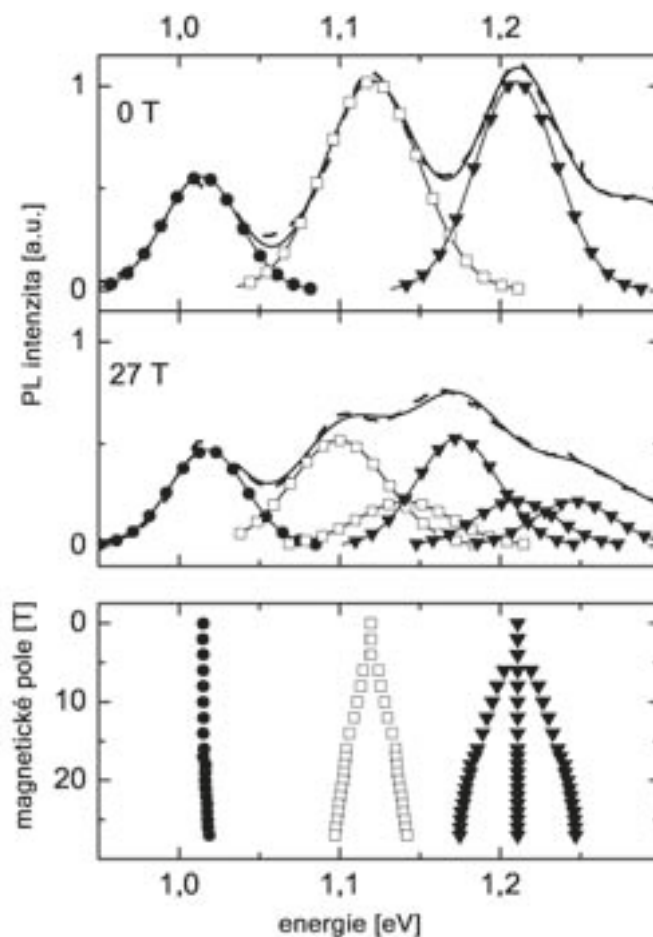


InAs v GaAs. U obou systémů se předpokládá aplikace pro optoelektronické součástky s velkou účinností do vysokých teplot. Tyto systémy jsou připravovány metodou MOVPE v oddělení polovodičů a proto máme unikátní možnost studia elektronové struktury v závislosti na technologických parametrech. Protože se jedná o velmi komplexní studium, používáme řadu velmi náročných experimentálních metod, jako například magnetoluminiscenci ve vysokých magnetických polích do 28 T. Tyto experimenty byly prováděny v laboratoři vysokých magnetických polí v Grenoblu. Jako příklad jsou na obrázku 2 ukázána luminiscenční spektra kvantových teček pro magnetické pole 0 a 28 T. Díky sejmutí degenerace je možné rozlišit S, P a D stavy kvantových teček. U S stavů je pozorován diamagnetický posuv s rostoucím magnetickým polem úměrný  $B^2$ . P stav se štěpí na dva a D na tři luminiscenční pásy s rostoucím magnetickým polem.

Kromě toho se skupina zabývala i nanokrystalickou modifikací křemíku - porézním křemíkem. Porézní křemík představoval první systém na bázi křemíku s vysokou fotoluminiscencí. Byl prvním impulsem pro rozvoj optoelektroniky na křemíku, která by byla kompatibilní s křemíkovou elektronikou. Ve skupině luminiscence byl studován mechanismus fotoluminiscence a vliv podmínek přípravy na její účinnost. Byly připraveny elektroluminiscenční prvky na bázi porézního křemíku, ale s velmi malou účinností ve srovnání s komerčně vyráběnými svítícími diodami na bázi  $A^{III}B^V$ .



2/ Luminiscenční spektra struktur s kvantovými tečkami

## STUDIUM POVRCHŮ A ROZHRANÍ

*Pavel Svoboda, Tomáš Jungwirth*

Oddělení povrchů a rozhraní Sekce pevných látek (<http://www.fzu.cz/oddeleni/povrchy/>) vzniklo v dnešní podobě až v roce 1990. Spojilo se v něm několik pracovních skupin, které byly původně součástí jiných vědeckých oddělení FZÚ, resp. ÚFPL. Pojítkem byl úmysl věnovat se intenzivně tématice elektronových vlastností polovodičových vrstevnatých struktur s dvourozměrným elektronovým plynem, která je stále jedním z nejperspektivnějších oborů fyziky pevných látek, rozhodujícím impulsem pak instalace technologické aparatury KRYOVAK pro přípravu potřebných vzorků metodou tzv. epitaxy z molekulárních svazků (MBE - **M**olecular **B**eam **E**pitaxy). Tato unikátní aparatura, stále jediná svého druhu v ČR, byla zakoupena v r. 1989 a po diskusích uvnitř tehdejšího

Oddělení polovodičů vyčleněna k pěstování heterostruktur na bázi GaAs. Již v roce 1990 aparatura vyprodukovala první vzorky modulačně dotovaných heterostruktur GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$  s dostatečně vysokou pohyblivostí nositelů řádu  $10 \text{ T}^{-1}$  (tj.  $10^5 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ), na kterých mohlo být zahájeno také experimentální studium kvantového Hallova jevu (KHJ) a efektů s ním spojených.

Za těchto okolností tedy vzniklo dnešní Oddělení povrchů a rozhraní a to spojením tří pracovních skupin. První, převážně technologická, se zázvěním a zkušenostmi s vakuovou technikou, vzešla s původního Oddělení vazeb a struktur ÚFPL a převzala do své péče provoz aparatury MBE. Druhá, specializovaná na základní výzkum fyziky povrchů, se oddělila od tehdejšího Oddělení

polovodičů, aby mohla plně profitovat z technologických možností, poskytovaných aparaturou MBE. Jádrem oddělení se stala skupina elektronového transportu, která se v té době rovněž vyčlenila z Oddělení polovodičů, kam přešla krátce předtím (v r. 1989) z Oddělení nízkých teplot. Její motivací byla snaha propojit teorii transportu v dvourozměrných elektronových systémech, v té době již poměrně pokročilou a mezinárodně uznávanou (což je možno ilustrovat např. faktem, že se dodnes objevují publikace s termínem „*Kubo-Streda formula*“ v názvu), s vlastními experimenty na strukturách připravených technologií MBE. Spojení těchto tří skupin se ukázalo být plodným a trvá dosud.

## TECHNOLOGIE

Technologie epitaxního růstu z molekulárních svazků (MBE) se stala hlavní metodou přípravy tenkých vrstev různých materiálů s dokonalou kontrolou růstového procesu na úrovni atomárních vrstev. Princip metody, která je vlastně moderní verzí klasického vakuového napařování tenkých vrstev, byl již v tomto časopise popsán v článku M. Heniniho [Čs. čas. fyz. **48**, 119 (1998)]. V našem oddělení je technologie MBE využívána k přípravě tenkovrstvých polovodičových struktur s nízkorozměrnými elektronovými systémy. Typické rozměry těchto struktur (tloušťky vrstev) podmiňují výrazně kvantový charakter jejich transportních i optických vlastností.

První heterostrukтуры vypěstované již v r. 1990 obsahovaly jednu kvantovou jámu (QW - z anglického **Quantum Well**) na rozhraní dvou polovodičů s různou šířkou zakázaného pásu, v našem případě GaAs a  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  ( $x \approx 0,3$ ). Elektronové, pocházející z vhodných dotujících příměsí (Si) a lokalizované v této jámě, vytvářejí dvourozměrný elektronový plyn (2DEG); jedním z projevů jeho existence je např. kvantový Hallův jev (KHJ). Struktury tohoto typu sloužily především k základnímu výzkumu KHJ, byly však také vypěstovány heterostrukтуры specifických vlastností, které vyhovují požadavkům kladeným na národní kvantové etalony elektrického odporu na bázi KHJ.

V druhé polovině 90. let se výzkum přesunul od jednoduchých kvantových jam k dvojitým (DQW - **Double Quantum Wells**) a mnohonásobným (MQW - **Multi Quantum Wells**) kvantovým jamám, určeným jak pro optická, tak i pro transportní měření. Byly rovněž vypěstovány tzv. supermřížky (SL - **Superlattice**) tvořené řádově desítkami ekvidistantních QW s možností tunelování elektronů potenciálovými bariérami, oddělující jednotlivé QW od sebe. Všechny tyto struktury mohou - ve spojení s litografickými technikami - být použity k výrobě moderních a perspektivních kvantových součástek a nanostruktur.



1/ Pohled na centrální část aparatury MBE firmy Kryovak. Vpravo je růstová komora (1) s 15keV elektronovým dělem pro RHEED (2) a rotačním [x, y, z] substrátovým manipulátorem (3). Vlevo je analytická komora (4) vakuově propojená s růstovou a vybavená ohřevem vzorku (5) a analytickým systémem LEED / AES / EELS (6). Stínítko LEED je na odvrácené straně komory.

V posledních letech se objevila nová třída polovodičových materiálů s mimořádně zajímavými fyzikálními vlastnostmi a fascinujícími možnostmi praktických aplikací - zředěné feromagnetické polovodiče. Příprava těchto materiálů znamená modifikovat podmínky růstu MBE a zvládnout metodiku dotování GaAs magnetickými příměsí Mn. Toto je aktuální výzva pro naši technologii MBE v nejbližším období.

Aparatura KRYOVAK byla v průběhu let mnohokrát upravována a vylepšována a dnes se již v mnoha aspektech značně liší od své původní podoby. Je stále v provozu, zdá se však, že bylo dosaženo meze jejich fyzických možností a že další rozšíření oboru pěstovaných struktur, resp. další zlepšování parametrů těch stávajících vyžaduje zásadní inovaci. K té by mělo dojít ještě do konce roku 2003, kdy bude instalována nová moderní aparatura MBE fy VEECO.

Litografické techniky (maskování, leptání) spolu s navazujícími technikami montáže a kontaktování tvoří mezistupeň mezi strukturou, vypěstovanou MBE, a skutečným experimentálním vzorkem požadované geometrie. Litografická laboratoř je nejnovější součástí Oddělení povrchů a rozhraní: stavební úpravy vyčleněných prostor byly zahájeny v r. 1999 a litografie monolitických struktur je v provozu od srpna 2000.

V možnostech litografické laboratoře, které se průběžně rozšiřují a přizpůsobují požadavkům experimentátorů, je mj.:

- vytváření topologických návrhů jednodušších struktur jako podkladů pro externí výrobu litografických masek;
- chemické leptání a zpracování substrátů z polovodičových i jiných materiálů;
- montáž a kontaktování experimentálních vzorků včetně ultrazvukového pájení mikrodrátků.

V současné době se pracuje na rozšíření možností laboratoře o metodiku vakuové depozice kovových vrstev naparováním i naprašováním.

## TEORIE

Teorie elektronového transportu v kvantových jámách, resp. nízkorozměrných elektronových systémech se začala rozvíjet již od počátku 80. let minulého století, krátce po zveřejnění objevu KHJ v r. 1980. Práce teoretické skupiny v tomto oboru přispěly k objasnění podstaty celočíselného KHJ a dosáhly již tehdy značného mezinárodního ohlasu [viz např. P. Středa, J. Phys. C: Solid. St. Phys. **15**, L717 (1982) nebo A. H. MacDonald, P. Středa, Phys. Rev. B **29**, 1616 (1984)]. Skupina od počátku úzce spolupracovala a i nadále spolupracuje s předními světovými pracovišti; výsledkem spolupráce jsou společné publikace v nejrenomovanějších fyzikálních časopisech [viz např. V. Piazza, V. Pellegrini, F. Beltram, W. Wegscheider, T. Jungwirth, A. H. MacDonald, Nature **402**, 638 (1999)].

V 90. letech se teoretické práce věnovaly především výpočtům energetického spektra struktur, které se v té době začaly zkoumat i experimentálně. Byla mj. vypracována selfkonzistentní procedura založená na efektivní hmotnosti a Hartreeho aproximaci. Tyto výpočty byly velmi užitečné při navrhování struktur požadovaných vlastností a byly použity pro různé typy struktur, např. heterostrukury s jednou QW, systémy s dvojitou kvantovou jámou (DQW) nebo struktury s kovovým hradlem umožňujícím ovládat koncentraci nositelů náboje.

Přítomnost silných magnetických polí, orientovaných rovnoběžně s rovinou 2DEG, modifikuje jak energetické spektrum elektronů, tak i tvar potenciálové jámy na rozhraní. Tento druh změn byl teoreticky studován v asymetrických DQW, tvořených úzkou, téměř pravouhloú QW na rozhraní AlGaAs/GaAs, oddělenou tenkou potenciálovou bariérou (AlGaAs) od další, trojúhelníkové QW v GaAs. Jsou-li obě QW obsazeny elektrony, teorie předpověděla, že s rostoucím paralelním magnetickým polem systém přejde od režimu svázané DQW (s tunelováním elektronů mezi oběma QW) do režimu dvou oddělených, „nekomunikujících“ kvantových jam. Při ještě silnějších paralelních polích se může trojúhelníková QW zcela vyprázdnit a systém se vrátí do režimu jedné, tentokrát ale již jen jednoduché QW. Tento typ chování vede k singula-

ritám v hustotě elektronových stavů, které by se měly projevit i v podélné vodivosti struktury. Tato předpověď byla nedávno experimentálně ověřena měřeními na vzorcích, připravených technologií MBE v našem oddělení [P. Svoboda, Y. Krupko, L. Smrčka, M. Cukr, T. Jungwirth a L. Jansen, Physica E **12**, 315 (2002)].

Vliv podélného magnetického pole na stupeň vazby mezi sousedními QW byl teoreticky zkoumán i v supermřížkách, v nichž soustava QW na ekvidistantních rozhraních vytváří periodický systém ve směru růstu vrstev. Tato nová periodicitu modifikuje energetické spektrum a vede ke vzniku dodatečných pásů zakázaných energií, tzv. minigapů. V případě dostatečně silné vazby mezi jednotlivými QW se pak systém, ač tvořen soustavou dvourozměrných elektronových vrstev (2D), chová téměř jako trojrozměrný (3D). Podobně jako u výše zmíněných DQW, i zde by přiložení vnějšího magnetického pole mělo potlačovat vazbu mezi sousedními QW a vlastně snímat kvazi 3D chování struktury. Teoretické i experimentální zkoumání takto definovaného 3D-2D přechodu pod vlivem magnetického pole je jedním z aktuálních směrů dalšího studia polovodičových supermřížek v našem oddělení.

Teoreticky byl zkoumán i poněkud jiný druh periodicity - chování 2DEG, v němž je hustota elektronů periodicky modulována např. litografickým vytvářením vhodných kovových hradel [viz např. G. Müller, D. Weiss, K. von Klitzing, P. Středa a G. Weimann, Phys. Rev. B **51**, 10236 (1995)]. Teoreticky lze v limitním případě získat při jednosměrné modulaci soustavu jednorozměrných vodivých kanálů (tzv. kvantových drátů), při modulaci ve dvou směrech dokonce soustavu ostrůvků s omezenou možností pohybu elektronů ve všech 3 směrech (tzv. kvantové tečky). Výpočty se zabývaly vysvětlením jevu tzv. magnetického průrazu (*magnetic breakdown*) a předpověděly řadu singularit a anomálií v transportních vlastnostech takových struktur, jejich experimentální ověření však bylo a je mimo možnosti naší optické litografie.

Jedním z nových témat, kterým se v oddělení věnuje v poslední době velká pozornost, jsou feromagnetické polovodiče a spintronické součástky. Tento obor, který se v posledních dvou letech zařadil mezi nejstudovanější v oblasti fyziky pevných látek, je založen na kombinaci polovodičových technologií, které umožnily vznik dnešní informační společnosti, a tzv. spinové elektroniky (spintroniky), která využívá nejen kontrolovaného toku náboje, ale i spinu elektronů v součástce. Předpokládá se, že se polovodičová spintronika stane základem celé řady nových mikroelektronických a optoelektronických aplikací, jako např. magnetických operačních pamětí a že umožní výrazný pokrok v integraci a rychlosti konvenčních součástek. Feromagnetické

polovodičové struktury mohou být připravovány s atomovou přesností z hlediska jejich chemického složení, střídání vrstev různých materiálů, litografie nebo napětí v krystalové mříži a představují tak jeden z typických oborů, pro které se vžilo označení nanotechnologie.

Jedním ze základních problémů ve vývoji feromagnetických polovodičových materiálů je dosažení kritické teploty feromagnetického přechodu nad pokojovou teplotou. U nejstudovanějších systémů typu III-Mn-V (např. Ga-Mn-As) se podařilo v posledním roce zvýšit kritické teploty o téměř 100 K a dosahují nyní hodnot blízkých 200 K. Je pravděpodobné, že se během několika let podaří dosáhnout pokojové teploty feromagnetického přechodu zlepšenou krystalickou kvalitou vzorků a optimálním dopováním magnetických i nemagnetických příměsí, které se mohou nacházet obecně v různých krystalových rovinách. Měření na současných systémech v různých světových laboratořích již ukázala mnoho nových jevů, které jsou výsledkem kombinace magnetických a polovodičových vlastností, jako je například opticky vyvolaný přechod do feromagnetického stavu nebo změny magnetických vlastností způsobené přiloženým elektrickým napětím.

Teoretický výzkum v našem oddělení je zaměřen na vytvoření uceleného kvantitativního popisu feromagnetických polovodičů a jejich spintronických funkcí; popis je založen na modelu magnetické interakce mezi lokálními příměšovými spiny zprostředkované pohyblivými nosiči ve valenčním pásu polovodiče. Tento model je vhodný zejména pro studium Mn-dopovaných III-As a III-Sb polovodičů. Postupně je formulována metodika a vytvářeny knihovny programů na výpočet magnetických, transportních a optických vlastností jednoduchých feromagnetických polovodičových vrstev i komplikovanějších heterostruktur a kvantových struktur. Tyto programy umožní kvantitativní modelování spintronických funkcí spojených s jevy, jako je gigantická magnetorezistence, proudem indukovaná změna magnetizace, Kerrova a Faradayova rotace a mnoha dalších. Předběžné výpočty ukazují, že v polovodičích mohou být tyto jevy i o několik řádů silnější, než v klasických kovových feromagnetických materiálech.

Výsledky naší práce jsou vedle publikací v odborných časopisech a monografiích [např. J. König, J. Schliemann, T. Jungwirth a A. H. MacDonald, v knize *Electronic Structure and Magnetism of Complex Materials* (ed. D. J. Singh a D. A. Papaconstantopoulos, Springer Verlag 2003)] také archivovány pomocí centrální databáze, která rovněž obsahuje experimentální data světových laboratořích a další odkazy a která je zprostředkována odborné veřejnosti na interaktivních webových stránkách

<http://unix12.fzu.cz/ms>. Toto úsilí je dále podtrženo spoluprací se skupinou kvantového transportu v polovodičových heterostrukturách a s experty na *ab initio* výpočty elektronové struktury feromagnetických polovodičů z Teoretického oddělení Fyzikálního ústavu.

Teoretické práce v oblasti elektronové struktury povrchů po roce 1990 se dají shrnout do tří tématických skupin:

- Interpretace náročných měření intenzit elektronových svazků difraktovaných od povrchů Cu(111) a Ag(111) při velmi nízkých energiích (VLEED) a nehomogenita tlumení v neobsažených elektronových stavech umožňující kanálování elektronů.
- Vliv okrajových podmínek na hranové stavy dvojrozměrného elektronového plynu (2DEG) v kolmém magnetickém poli a na jednoduché modely prostorového rozložení elektronů mezi okrajem a vnitřkem vzorku.
- Využití jednostupňového modelu úhlově rozlišené fotoemise na elektronovou strukturu rekonstruovaného povrchu  $c(4 \times 4)$  GaAs (100) a supermřížek GaAs/AlAs s velmi tenkými vrstvami [T. Strasser, C. Solterbeck, W. Schattke, I. Bartoš, M. Cukr, P. Jiříček, C. S. Fadley a M. A. van Hove, Phys. Rev. B **63**, 195321 (2001)].

Aktuální téma výzkumu spadá právě do poslední jmenované skupiny. Zde byl předpovězen nový typ lokalizace elektronů (*confinement*) a výrazné změny energie povrchových stavů v tzv. minigapech (oblastech zakázaných energií ve spektru supermřížek), závislé na tloušťce povrchové vrstvy supermřížky. Všechny tyto práce probíhaly a probíhají v rámci mezinárodní spolupráce [viz např. práce: I. Bartoš, T. Strasser, W. Schattke, Surf. Sci. **507-510**, 160 (2002)].

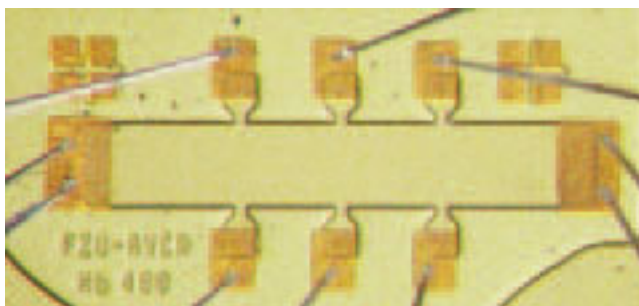
Za zmínku rovněž stojí, že skupina fyziky povrchů již dlouhá léta (od r. 1971) organizuje v tříletém cyklu velmi úspěšná mezinárodní Symposia o fyzice povrchů (SSP - Symposium on Surface Physics); zatím poslední z nich se konalo v r. 2002.

## EXPERIMENT

S přechodem do nově ustaveného Oddělení povrchů a rozhraní se laboratoř elektronového transportu přeorientovala z experimentálního studia galvanomagnetických vlastností kovů a polokovů (Bi) na výzkum elektronového transportu v nízkorozměrných polovodičových strukturách. V souvislosti s tím se jednak přemístila do nově vybudovaných prostor, jednak se postupně podstatně zdokonalilo její experimentální vybavení. To dnes pokrývá obor pracovních teplot od 0,35 K do cca 200 K, přičemž tato měření je možno provádět v dutině supravodičového magnetu generujícího magnetická pole do 14 T.

Pracuje se na zprovoznění komerčního rozpouštěcího refrigeratoru  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$ , který by dále rozšířil obor dosažitelných pracovních teplot pod 0,1 K. K dispozici jsou počítačem řízené měřicí systémy pro stejnosměrná i střídavá měření elektrických veličin.

První experimentální práce na systémech s 2DEG, vypěstovaných vlastní technologií MBE, se týkaly některých aspektů KHJ, konkrétně chování elektronů v přechodových oblastech mezi kvantovanými úrovněmi Hallova odporu v podmínkách KHJ [např. P. Svoboda, P. Středa, G. Nachtwei, A. Jaeger, M. Cukr, M. Lázníčka, Phys. Rev. B **45**, 8763 (1992)].



2/ Vzorek pro studium KHJ v geometrii „Hall bar“ s šířkou vodivého kanálu 400  $\mu\text{m}$  a třemi ekvidistantními páry potenciálových kontaktů (rozteč 500  $\mu\text{m}$ ) podél kanálu. Tvar i rozměry vzorku jsou typické pro struktury používané v metrologii pro realizaci primárního kvantového etalonu elektrického odporu.

V první polovině 90. let byla tato laboratoř - svým experimentálním vybavením a se svým technologickým i teoretickým zázemím - jediným pracovištěm v ČR schopným realizovat kvantový etalon elektrického odporu na bázi KHJ. Za tímto účelem vznikla v r. 1995 Společná laboratoř FZÚ AV ČR, FEL ČVUT a Českého metrologického institutu (ČMI), která měla vybudovat v prostorách našeho oddělení český národní etalon odporu. Produktem tohoto úsilí byla jednak speciální měřicí aparatura pro vysoce přesná stejnosměrná měření kvantovaných hodnot Hallova odporu s relativní nejistotou  $\Delta R_H/R_H \leq 10^{-7}$ , jednak zahájení výzkumu podmínek metrologického využití střídavého KHJ v oboru frekvencí do 10 kHz. I když práce tohoto druhu dnes pokračují na jiných pracovištích v FEL, resp. ČMI, děje se tak stále v úzké součinnosti s naší skupinou. Stojí za zmínku, že plodem této spolupráce byla i příprava speciálních heterostruktur GaAs/AlGaAs, určených právě pro metrologické aplikace KHJ; jejich kvalita byla úspěšně testována na předních světových metrologických pracovištích (PTB Braunschweig a BNM Paris).

V druhé polovině 90. let se experimentální výzkum přesunul od jednoduchých heterostruktur s jednou QW, resp. jednou vrstvou 2DEG k slo-

žitějším strukturám. Jednalo se nejprve o asymetrické dvojité kvantové jámy (DQW), kde byla předmětem studia vazba mezi jednotlivými QW resp. kvantový přenos náboje mezi nimi pod vlivem silného magnetického pole orientovaného paralelně s rovinou 2DEG. Výzkum tohoto typu předpokládá měření v extrémně silných magnetických polích nedostupných v ČR, a proto je část experimentů uskutečňována ve spolupráci se zahraničním pracovištěm (GHMFL Grenoble). V poslední době se výzkum přesouvá k supermřížkám (SL), strukturám s 20-30 nezávisle dotovanými QW s různou intenzitou vazby mezi nimi. Cílem je experimentálně ověřit teoretické předpovědi o snímání vazby mezi jednotlivými vrstvami SL pod vlivem silné paralelní složky vnějšího magnetického pole.

V letošním roce se rozšíří studium feromagnetických polovodičů v Oddělení povrchů a rozhraní i o experimentální část. Plánovaný nákup MBE zařízení pro růst III-Mn-V materiálů umožní ve světě neobvyklé propojení experimentálního a teoretického výzkumu feromagnetických polovodičů a spintronických součástek.

Na konci 80. let se i naše laboratoř elektronového transportu zapojila do celosvětového boje, vyvolaného senzačním objevem vysokoteplotní supravodivosti (VTS) v r. 1986. V krátké době bylo vybudováno zařízení, umožňující v širokém oboru teplot měřit jak elektrický odpor, tak i magnetickou susceptibilitu (pomocí miniaturního SQUIDového susceptometru vlastní konstrukce) keramických sintrovaných vzorků, chrlených tehdy několika technologickými skupinami ve FZÚ, VŠCHT Praha i jinde. Po opadnutí módní vlny se výzkum prohloubil a specializoval, část této problematiky je však v naší laboratoři studována dodnes.

Aktuálním tématem je dnes transport v blízkém okolí kritické teploty  $T_c$  různých typů VTS ( $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ,  $\text{YBaCuO}$ ,  $\text{MgB}_2$ ), konkrétně experimentální studium podélných a příčných napětí (odporů) ve vnějším magnetickém poli i bez něho. Pozorované jevy souvisejí s pohybem vortexů ve smíšeném stavu VTS a experimentální data slouží jako podklad pro diskusi modelů popisujících jejich chování [viz např. P. Vašek, Physica C **364**, 194 (2001)].

Laboratoř spektroskopie pevných látek disponuje fotoelektronovým spektrometrem ADES 400 a aparaturou pro difrakci pomalých elektronů LEED - SPECS a pracuje v úzké součinnosti s aparaturou MBE. Zabývá se problémy, spadajícími do dvou oblastí základního výzkumu:

- systematické studium jevů rozptylu elektronů při povrchích vybraných pevných látek a
- výzkum nových materiálů.

Nejvýznamnější skupinu studovaných materiálů tvoří monokrystalické vrstvy a struktury (super-



3/ Pohled do komory fotoelektronového spektrometru ADES 400: 1 - analyzátor energie elektronů; 2 - část optiky zařízení pro studium difrakce pomalých elektronů (LEED); 3 - zdroj iontů; 4 - zdroj rentgenového záření; 5 - zdroj ultrafialového záření používaný ke studiu degradace polymerů; 6 - mechanické zařízení (tzv. „pružná ruka“) sloužící k manipulaci se vzorky.

mřížky) na bázi GaAs a AlGaAs, připravené metodou MBE a přenesené z technologické laboratoře do elektronového spektrometru pomocí speciálně sestaveného zařízení pod ultravysokým vakuem. Pro určování povrchové krystalografie se používá difrakce pomalých elektronů (LEED - Low Energy Electron Diffraction); při detailní interpretaci se vychází z naměřených intenzit difraktovaných svazků. Významná jsou i studia povrchů polymerů, zejména polyanilínu a polysilylénu, připravovaného v ÚMCH AV ČR.

Cenné výsledky byly dosaženy i při studiu rozptylu elektronů, zejména v případě měření tzv. hloubkové rozdělovací funkce fotoelektronů, při měření střední neelastické volné dráhy elektronů a při prokázání vlivu neelastických povrchových excitací na měřený proud elektronů. Z významných publikací z poslední doby je možno jmenovat např. práci: [W. S. M. Werner, C. Eisenmenger-Sittner, J. Zemek, P. Jiříček, Phys. Rev. B **67**, 155412 (2003)].

## STRUKTURNÍ ANALÝZA

*Ctirad Novák, Ladislav Červinka, Antonín Šimůnek a Karel Jurek*

Na počátku 90. let mělo Oddělení strukturní analýzy, dříve Oddělení vazeb a struktur, pět pracovních skupin. Laboratoře vedené Václavem Petříčkem a Ladislavem Červinkou se zabývaly strukturní analýzou, třetí, vedená Antonínem Šimůnkem, elektronovými stavy a rtg. emisními a absorpčními spektry. Laboratoře vedené Karlem Jurkem a Zbyňkem Šourkem měly servisní charakter. Po nákupu rtg. zařízení s rotační anodou, které bylo umístěno na Slovance, se skupina rtg. topografie vedená Z. Šourkem stává v roce 1995 součástí nově vzniklé laboratoře ROTAN. Významným doplněním statutární laboratoře pro elektronovou mikroskopii a rtg. mikroanalýzu vedené K. Jurkem, byl v roce 1999 nákup AFM mikroskopu pro měření povrchových struktur v nevakuovém prostředí. V Oddělení strukturní analýzy nyní pracuje celkem deset vědeckých pracovníků, z nichž sedm je ve věku 28-42 let, vedoucí laboratoří jsou ve věku 55-60 let.

### LABORATOŘ RTG. STRUKTURNÍ ANALÝZY

Jak vyplývá z charakteru strukturní analýzy, je její rozvoj silně závislý na výpočetní technice, neboť

krystalografové běžně řeší vzájemně provázané problémy. Mezi ně patří optimální využívání výpočetní techniky, vlastní tvorba programů pro strukturní analýzu a těmito programy řešit stále obtížnější struktury, tj. analyzovat rozsáhlé soubory naměřených difrakčních dat. Řešení struktur obvykle spočívá v měření difrakčních dat a jejich počítačovému zpracování. Laboratoř ve FZÚ od svého založení Allanem Línkem souběžně a systematicky rozvíjela oba směry.

#### a) Vývoj programů pro krystalografii - strukturní analýzu

Laboratoř od svého vzniku počátkem 50. let využívala kromě vlastních již zmíněných jednoúčelových strojů *ELIŠKA* a *SuperELIŠKA* veškerou dostupnou výpočetní techniku (viz kroniku výpočetní techniky v ústavu). Skutečnost, že od počátku byl přístup ke zdrojovým kódům vlastních programů, měla zásadní význam pro další činnost skupiny, protože to umožnilo přizpůsobovat programy vždy novým požadavkům. Jako příklad můžeme uvést přizpůsobení systému pro řešení struktur meroedrických dvojčat. Tyto úpravy, provedené v roce 1979 Václavem Petříčkem ve spolupráci se Ctíradem Novákem a Ivanou Císařovou, umožnily