



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 třídímných ostrůvků. Z tohoto hlediska je rozhodujícím parametrem frekvence přeskoků atomů mezi jednotlivými vrstvami. Přejít 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 mikrokrytalického 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

center, kde bylo dosaženo zásadně nových výsledků [E. Mihoková, M. Nikl, K. Polák a kol., Phys. Rev. Letters **88**, 224101 (2002)]. Interakce materiálu s dopadajícím zářením a související procesy přenosu energie se efektivně studují s pomocí měření dynamiky luminiscence v časovém intervalu od subnanosekund až po milisekundy, kde pro mnohé materiálové systémy byly vytvořeny komplexní fenomenologické modely [M. Nikl, E. Mihoková a kol., Phys. Rev. B **66**, 184101 (2002)]. Tyto informace jsou významné pro aplikaci materiálů např. ve scintilátorech, které přeměňují energii dopadajícího ionizujícího záření nebo urychlených částic na světelné záblesky a spolu s následným detektorem světla slouží pro jejich registraci v nejrůznějších aplikacích v průmyslu, lékařství, bezpečnostních a kontrolních systémech aj. V oddělení jsou studovány metodami optické spektroskopie a elektronové paramagnetické rezonance především scintilátory na bázi anorganických krystalů, což navazuje na dlouhodobé studium základních vlastností defektů v iontových krystalech. Významných výsledků v posledních 10 letech bylo dosaženo na materiálových systémech na bázi CsI, CeF₃ a dalších Ce-dopovaných komplexních fluoridech a oxidech. Dosažené výsledky a trendy v předních laboratořích v tomto oboru za posledních cca 10 let byly shrnuty ve vyžádaném přehledovém článku [M. Nikl, Phys. Stat. Sol. (a) **178**, 595 (2000)]. Především byly ale studovány scintilátory na bázi PbWO₄, které jsou pro svou rychlost a radiační odolnost vybrány pro novou generaci detektorů ve fyzice vysokých energií. Vzhledem k zásadním dosaženým výsledkům při charakterizaci a optimalizaci tohoto materiálu byl



1/ Krystaly CsPbCl₃ (vlevo) a PbCl₂ (vpravo) připravené růstem z taveniny Bridgmanovou metodou

kolektiv vedený Martinem Niklem oceněn v roce 2003 cenou akademie věd.

Dlouhodobě jsou studovány scintilátory na bázi Ce-dopovaných perovskitů (Y_xLu_{1-x}AlO₃) a granátů (Y₃Lu_{3-x}Al₅O₁₂) [J. Mareš, M. Nikl a kol., Nucl. Instr. Meth. Phys. Research A **498**, 312 (2003)]. Jsou to rychlé scintilátory s vysokým světelným výtěžkem až 25 000 fotonů/MeV a jejich výzkum probíhá v součinnosti s firmou Crytur, s. r. o. v Turnově, která je jejich etablovaným výrobcem. Používají se např. pro detekci elektronů v elektronových mikroskopech či v lékařství jako multidetektory v gamma zobrazovacích kamerách.



2/ Aparatura Aixtron na depozici diamantových vrstev

Efektivní základní výzkum vyžaduje přípravu dobře charakterizovaných modelových materiálů. Mezi takové patří monokrystaly binárních resp. ternárních halogenidů. Vzhledem k dlouhodobé tradici a zkušenostem laboratoře růstu krystalů v oddělení je příprava těchto krystalů zvládnuta na vysoké úrovni [K. Nitsch, K. Polák a kol., Prog. Crystal Growth and Charact. **30**, 1 (1995)]. Byly tak připraveny krystaly binárních a komplexních chloridů, bromidů a jodidů alkalických, těžkých a přechodových kovů (Pb, Bi, Cu, Zn, Cd, Mn, Co), např. CsPbCl₃, CsPbBr₃, KPb₂Cl₅, RbPb₂Br₅, jak čisté, tak i dotované. Specialitou je příprava modelových krystalů se zmíněnými nanofázemi, kde je nutné přesně optimalizovat proces růstu a porůstového zpracování vysokoteplotním žíháním včetně způsobů dotace. V rámci oddělení se připravují také alkalicko-gadolinitá fosfátová skla, jako alternativní materiál ke krystalickým scintilátorům, kde byl uskutečněn zcela nový koncept přenosu energie k emisním centrům pomocí podmřížky tvořené specifickým iontem ze skupiny vzácných zemin [M. Nikl, K. Nitsch, E. Mihoková a kol., Appl. Phys. Lett **77**, 2159 (2000)]. Příprava kvalitních krystalů a skel vyžaduje i dobrou přípravu výchozích surovin



3/ Měřicí aparatura FTPS (*Fourier Transform Photocurrent Spectroscopy*)

a hluboké pochopení procesu růstu krystalů z taveniny (rozložení teplotních polí či závislost tvaru fázového rozhraní při Bridgmanově metodě), příp. formování skelné fáze a souvisejících rekrytalizačních procesů. V tomto ohledu nejsystematičtěji testované modelové materiály byly monokrystalové PbCl_2 a PbBr_2 , kde dosažené výsledky ukázaly např. vliv tepelné historie taveniny na počáteční fázi krystalizace [P. Demo, K. Nitsch a kol., *J. Phys. Chem.* **77**, S17 (2003)].

DIAMANT DEPONOVANÝ Z PLYNNÉ FÁZE (CVD)

Klasické použití diamantu (šperkařství, obráběcí nástroje, broušení a řezání, optické prvky) využívá extrémních vlastností tohoto materiálu, jako je největší tvrdost, vysoký index lomu a propustnost světla ve velmi širokém spektrálním oboru. Krystaly jsou buď přírodní či syntetizované za extrémně vysokých tlaků a teplot.

Diamant syntetizovaný za nízkých tlaků a teplot v rozmezí 700-1000 °C rozkladem methanu (CVD diamant) je nový materiál a můžeme ho zařadit ke

slibným materiálům 21. století. Vykazuje extrémní kombinaci fyzikálně-chemických a tepelně-elektrických vlastností s rozličným použitím počínaje ochrannými povlaky v tribologii (vysoká tvrdost a Youngův modul pružnosti), pokračuje k optickým aplikacím jako jsou okénka a čočky pro výkonové lasery a pasivní chladiče polovodičových laserů (optická propustnost od ultrafialové po infračervenou oblast, nejvyšší tepelná vodivost), až realizací výkonových, vysokofrekvenčních polovodičových prvků (vysoká saturační rychlost, tepelná vodivost, průrazné napětí) či polovodičových laserů pro ultrafialovou oblast konče. Biokompatibilita a netoxičita diamantu představuje základní předpoklad pro aplikaci diamantu v lékařství jako biosenzorů. Díky svým vlastnostem mohou diamantové součástky pracovat za extrémních podmínek, (tj. např. vysoká pracovní teplota nad 300 °C, v agresivních prostředích včetně kyselin a hydroxidů, za zvýšené radiace atd.) a zpracovávat přímo „in vitro“ a „in vivo“ snímané fyzikální veličiny ve formě elektrického signálu, případně zabezpečovat i zpětnou odezvu a regulaci systému v závislosti na aktuálních podmínkách měřeného procesu.

Optickou a fotoelektrickou spektroskopii bodových poruch v diamantu - jako v širokopásmovém polovodiči - jsme se zabývali už od poloviny 90. let [M. Nesládek, M. Vaněček, J. Rosa a kol., Phys. Rev. B **54**, 5552 (1996)]. V roce 2002 byla založena Laboratoř růstu diamantových vrstev s cílem aktivně se podílet na základním výzkumu v oblasti růstu diamantových CVD vrstev, studia jejich optických a elektrických vlastností a testování možností jejich použití v optice, elektronice a biologii. Uvedená laboratoř disponuje mikrovlnným CVD depozičním systémem firmy AIXTRON, který používá elipsoidní mikrovlnný rezonátor. Díky tomuto rezonátoru systém pracuje při relativně vysokých výkonech mikrovlnného pole (6 kW) a umožňuje studovat růst diamantových tenkých vrstev na velkých plochách (o průměru 5-6 cm) a dosáhnout i vysokou rychlost růstu vrstvy (1-4 $\mu\text{m}/\text{hod}$) bez degradace jejich fyzikálně-chemických vlastností.

FOTOVOLTAICKÉ ČLÁNKY

Tato tematika, řešená společně s Oddělením tenkých vrstev, představuje významný krok k realizaci výroby elektrické energie z čistých a obnovitelných zdrojů v celosvětovém měřítku. V oboru výzkumu optických vlastností amorfního a mikrokrystalickeho křemíku navazujeme na světové úspěchy našeho pracoviště ve Střešovicích, popsané v historické části (Tauc, Velický, Závětová). Vytvoříme nové experimentální metody studia defektů v těchto materiálech vyznačující se extrémní citlivostí a velkou rychlostí měření [M. Vaněček, A. Poruba, Appl. Phys. Letters. **80**, 719 (2002)]. Vytvořili jsme původní

optický teoretický model multispektrálních (složených) tenkovrstvých slunečních článků na bázi různých forem křemíku (Springer, A. Poruba, M. Vaněček, plenární pozvaná přednáška na 3. světovém fotovoltaickém kongresu, Ósaka 2003). Tato oblast výzkumu přitahuje řadu studentů a doktorandů; vedle našeho tradičního studia křemíku v různých formách a tenkovrstvých složených článků na jejich bázi začínáme výzkum nových, netradičních slunečních článků; v současné době se objevila řada nových fyzikálních principů a patentů.

Charakteristickým rysem moderního materiálového výzkumu jsou efektivně organizované mezinárodní spolupráce. Všechny tři výše uvedené tematické okruhy jsou řešeny v rámci projektů Evropského společenství či NATO („Science for peace“), což pomáhá částečně řešit problém velké finanční náročnosti materiálového výzkumu. Spolupráce však není omezena pouze na Evropu, ale zahrnuje i Japonsko a USA. V současné době pokračuje systematická spolupráce s více jak deseti zahraničními laboratořemi, naše oddělení školí v rámci evropské Research Training Network zahraniční doktorandy a postdoktorandy ze zemí Evropské unie a kandidátských zemí. Některé projekty cíleného výzkumu (fotovoltaické sluneční články) vstupují již do fáze průmyslové realizace (u našich partnerů v Německu, Švýcarsku a Francii). Výroba scintilačních materiálů má významné realizační pracoviště v České republice (Crytur, s.r.o. Turnov). Naproti tomu studium unikátních povrchových vlastností diamantu či biosenzory na bázi diamantu jsou zatím v počátečním stádiu základního výzkumu.