



## STRUČNÝ PROFIL ODDĚLENÍ STRUKTURNÍ ANALÝZY NA KATEDŘE FYZIKY ELEKTRONOVÝCH STRUKTUR MFF UK V PRAZE

V. Valvoda

*Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy, 121 16 Praha 2, Ke Karlovu 5*

### Organizační začlenění a personálie

Rentgenová strukturní analýza byla jednou ze základních aktivit katedry fyziky pevných látek již od založení Matematicko-fyzikální fakulty v roce 1951. Tehdejšími vedoucími katedry byl prof. Miloslav Valouch, který se zaměřoval na výzkum fyziky kovů a rentgenografické oddělení měl na starosti doc. Josef Šedivý. Náplň práce navazovala na dřívější úspěšné působení prof. Adély Kochanovské ve Fyzikálním ústavu Univerzity Karlovy v oblasti studia mikrostruktury polykrystalických materiálů (tehdy se používal poetický termín jemná struktura). Oddělení strukturní analýzy přetrvává na Matematicko-fyzikální fakultě dodnes, i když se pak v průběhu let ještě dvakrát změnil název a složení katedry, přes katedru fyziky polovodičů až po dnešní katedru fyziky elektronových struktur. Tyto organizační změny také zčásti poznamenaly náplň práce oddělení, hlavně volbou materiálů a navazující fyzikální problematikou. Nicméně hlavní orientace na polykrystalické a práškové materiály zůstala zachována, jednak z historických důvodů, v návaznosti na předchozí zkušenosti, a také z důvodů čistě technických, neboť instrumentální vybavení tohoto oddělení se po léta budovalo právě s tímto zaměřením.

V současné době v oddělení pracují doc. Radomír Kužel, Jan Matlák (technik), doc. David Rafaja (vedoucí laboratoře), dr. Hana Šichová a prof. Václav Valvoda (vedoucí oddělení). V oddělení dále pracovali dr. Radovan Černý, ing. Ludmila Dobiášová, doc. Pavla Čapková, ing. Jitka Vacínová, dr. Jiří Neid a technička paní Irena Ejemová.

### Výuka

Hlavním úkolem univerzitních pracovišť je především vychovávat studenty, nové mladé odborníky, a není tomu jinak ani v našem případě. Členové oddělení strukturní analýzy zajišťují výuku krystalografie a strukturní analýzy v oboru fyzika pevných látek, částečně též v dalších oborech (biofyzika, chemická fyzika, fyzika polymerů, elektronika). K tomu slouží povinná kursovni přednáška *Struktura látek a difrakce záření* s navazujícím cvičením a řada výběrových přednášek zaměřených na studium reálné struktury látek a na aplikace strukturní analýzy v jiných oborech. Tři výběrové přednášky zajišťují naši kolegové z Fyzikálního ústavu AV ČR v Praze, dr. Zbyněk Sourek (difrakce na dokonalých krystalech), dr. Václav Petříček (řešení struktur monokrystalů) a dr. Igor Bartoš (fyzika povrchů). Součástí výuky jsou i experimentální úlohy z rtg strukturní analýzy, které se v současné době provádějí formou demonstračních úloh a semestrálních prací. Z minulých let je však k dispozici patnáct praktických úloh v rentgenové laboratoři, včetně materiálů, návodů, vyhod-

nocovacích pomůcek (nyní převážně počítačových programů) a vzorových úloh. Pro zkvalitnění výuky bylo také nutné připravit v dřívější době neexistující pomůcky a proto bylo značné úsilí věnováno psaní učebnic a skript (viz odkazy 1 - 5), spojené s vytvářením a doplňováním české odborné terminologie.

### Zaměření vědecké práce

Teprve s odstupem času se vyjevují vůdčí témata, která se vinou v historii výzkumné činnosti oddělení jako červená niť. Například při studiu teplotních kmitů atomů v čistých kovech a jejich slitinách jsme narazili na zajímavé karbidy a nitridy přechodových kovů. Cílem bylo najít vztah mezi jejich vysokými teplotami tání, meziatomovými vazbami a teplotními kmity. V podstatě šlo o studium smíšených vazeb v těchto látkách. Od teplotních kmitů byl pak již jen krůček ke studiu deformačních elektronových hustot, které vystihují meziatomové vazby lépe než teplotní kmity atomů. Dále se naše aktivity ubíraly dvěma směry, jeden pokračoval v detailním studiu anizotropních (a v případě CuCl i antisymetrických) kmitů atomů, druhý směr se držel zvolených materiálů a jejich aplikací v práškové metalurgii. Tento úkol vyžadoval podrobnější studium reálné struktury látek, včetně analýzy mikroskopických napětí, určování velikosti částic a jejich přednostní uspořádání ve vzorku (textura). Všechny tyto zkušenosti jsme pak uplatnili v následném výzkumu struktury tenkých vrstev z tvrdých materiálů (např. TiN). Uplatnili jsme jak zkušenosti s tímto materiálem v objemových vzorcích, tak i metodické dovednosti se studiem mikrostruktury polykrystalických látek. Totéž se pak opakovalo při přechodu ke studiu struktury kovových multivrstev s významnými magnetickými vlastnostmi. V té době byly prováděny především výzkumy struktury mnohem dokonalejších polovodičových nebo optických multivrstev a problémy difrakce na polykrystalických a méně dokonalých kovových multivrstevách byly řešitelné na základě předchozí zkušenosti s těmito materiály v podobě objemových vzorků nebo jednoduchých vrstev. Jednou z postranních větví tohoto výzkumu bylo také zaměření na studium difúzních procesů difrakčními prostředky a výzkum kvarternárních intermetalických sloučenin připravovaných jako materiály s funkčním gradientem chemického složení a struktury. Metodické poznatky jsme pak dále uplatňovali například v rozvoji metod studia polykrystalických a práškových materiálů zatížených výraznou přednostní orientací krystalitů (apikace se však uplatnily i při studiu epitaxních vrstev supravodivých oxidů nebo v kvantitativní fázové analýze texturovaných tenkých vrstev a objemových vzorků). Další aplikace detailní analýzy difrakčních profilů se pak uplatnily při studiu deformova-

ných anizotropních materiálů nebo při výzkumu mikrostruktury nanokompozitů. V tomto krátkém přehledu není možné vypočítávat všechny materiály nebo všechny fyzikálně chemické problémy, kterými jsme se v průběhu let zabývali. Vzpomeňme alespoň některé další látky jimž jsme se také věnovali: interkaláty, fullerény, kapalně krystaly, uhlíkové kompozity, ferroelektrika, polovodiče apod. V současné době se náš výzkum tenkých vrstev orientuje též na povrchové nanostruktury jako jsou kvantové tečky a kvantové jámy a z objemových vzorků pak na intermetalické magnetické sloučeniny (v součinnosti s další skupinou naší katedry, která se zaměřuje na elektronovou a magnetickou strukturu těchto materiálů). Tento výzkum přispěl k urychlenému vybudování nízkoteplotních difrakčních zařízení, s možností měřit teplotní změny struktury do teplot kapalného helia.

Při této příležitosti bych rád ještě připomenul dva pracovníky naší fakulty, kteří se významnou měrou zasloužili o rozvoj čs. krystalografie. Na naší katedře dříve působil vynikající pedagog dr. Václav Frei, který se aktivně a úspěšně věnoval bádání v oblasti teorie krystalografických grup. V matematické sekci pak pracuje doc. Boris Gruber, jehož práce věnované definici tzv. redukované buňky našly odezvu v nejprestižnějších krystalografických kruzích editorů Mezinárodních krystalografických tabulek. Do těchto tabulek jsme později také přispěli krátkou kapitolou, věnovanou přehledu difrakčních metod z hlediska fyzikálních interakcí elektromagnetického záření a toků částic s materiály a významu těchto interakcí pro strukturní výzkum v rámci zobecněné krystalografie (odkaz 6).

### Organizace krystalografických akcí

Oddělení strukturní analýzy se pravidelně zapojuje i do organizační práce při přípravě seminářů, konferencí a mezilaboratorních testů. Například v letech 1987 a 1990 to bylo vedení programového výboru mezinárodních konferencí Advanced Methods in X-ray and Neutron Structure Analysis of Materials, v roce 1995 vedení organizačního výboru mezinárodní konference Size Strain I, v roce 1996 spolupráce při zajištění akce ICDD Workshop v Praze a jako prozatím nejvýznamnější akce, na níž jsme se podíleli, bylo vedení organizačního výboru konference 18<sup>th</sup> European Crystallographic Meeting v Praze a příprava doprovodné výstavy Struktura mikrosvěta v Národním muzeu. V letech 1994 – 1996 jsme organizovali tři mezilaboratorní testy typu Round Robin v České republice a na Slovensku, s cílem testovat citlivost rtg difraktometrů, přesnost měření intenzit a přesnost určování struktur pomocí Rietveldova programu. Od roku 1985 se výrazně podílíme na organizaci Rozhovorů Krystalografické společnosti a na přípravě každoročních kolokvií.

### Spolupráce

Vysoké náklady na pořízení drahých difrakčních přístrojů nám nedovolují současně budovat další experimentální laboratoře, včetně technologických. Na druhou stranu nám naše poměrně pokročilá specializace umožňuje přijímat nabídky na řešení strukturních a fyzikálně-chemických

problémů při výzkumu nových materiálů formou spolupráce. Další spolupráce jsou někdy vyvolány potřebou odborného kontaktu s kolegy z jiných pracovišť, ať již se jedná o teoretické, experimentální nebo technologické záležitosti. Neúplný přehled našich spolupracovníků a jejich pracovišť je následující:

Fyzikální ústav AV ČR v Praze (V. Syneček, J. Musil, J. Kub, Z. Šourek, J. Petzelt, V. železný, M. Polcarová, E. Hulicius), Přírodovědecká fakulta UK v Praze (D. Havlíček, I. Císařová), Přírodovědecká fakulta MU v Brně (V. Holý), VUT v Brně (T. Šíkola), ZČU v Plzni (J. Musil, J. Vlček), SHM a Pramet Šumperk (M. Šíma, A. Suchá) a HVM Plasma Praha (J. Vyskočil). Dále se jedná o spolupráci s univerzitami, například v Helsinkách, Vídni, Freibergu, Regesburku, Paříži, Římě, Lovani, Amsterodamu, San Diegu, Sheffieldu a v mnoha dalších místech.

### Experimentální vybavení pracoviště

- Přístroj Mikrometa pro fotografickou registraci difrakčního obrazu, včetně kamery typu Polaroid, Guinierovou komorou (Enraf Nonius) a Laueho mikro-komorou (Rigaku Denki)
- Šest zdrojů vysokého napětí (Philips 2x, Seifert, Iris, Tur, Siemens).
- Difraktometr Philips s vertikálním práškovým goniometrem.
- Difraktometr Hilger & Wats s vertikálním práškovým goniometrem (pouze Co anoda).
- Difraktometr Seifert XRD-7 pro práškovou difrakometrii a pro tenké vrstvy (nástavec pro paralelní svazek).
- Difraktometr Huber pro tenké vrstvy se Seemanovou-Bohlinovou fokusací, texturním nástavcem a vysokoteplotní komorou do 900°C.
- Difraktometr HZG-3 pro práškovou difrakci při teplotách kapalného dusíku a vysokých teplotách do 2500°C (komory MRC).
- Difraktometr Siemens D500 s polohově citlivým detektorem pro vysokoteplotní difrakci (kamera Paar do 2500°C) a pro nízkoteplotní difrakci do teplot kapalného helia (kamera Oxford Instruments).
- Difraktometr HZG-4 s Eulerovou kolébkou pro měření zbytkových napětí a textur.

### Odkazy:

1. V. Valvoda, M. Polcarová, P. Lukáč: Základy strukturní analýzy (učebnice), Karolinum, Praha 1992.
2. V. Valvoda: Základy krystalografie (skripta), SPN, Praha 1974.
3. V. Valvoda: Rentgenografické difrakční metody (skripta), SPN, Praha 1979.
4. V. Valvoda: Rentgenová strukturní analýza (skripta), SPN, Praha 1982.
5. H. Šichová, V. Valvoda, P. Čapková: Rentgenografické praktikum (skripta), SPN Praha 1982.
6. V. Valvoda: Radiations Used in Crystallography. In: A.J.C. Wilson (Ed.), International Tables for Crystallography, Vol. C, Chapter 4.1., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 1992.