

Strukturní stabilita Si nanočástic studovaná metodami rozptylu rentgenového záření

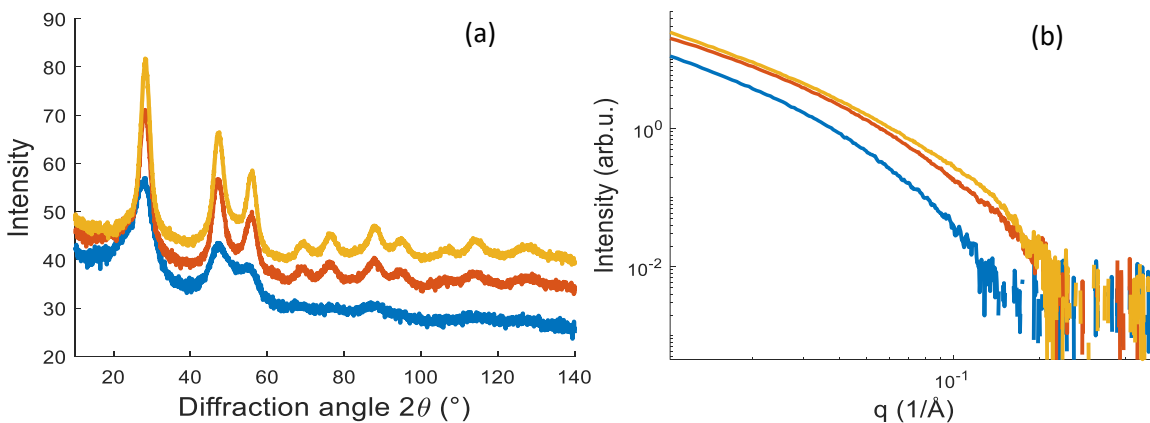
Školitel: RNDr. Milan Dopita, Ph.D. (dopita@gmail.com)

Katedra fyziky kondenzovaných látek

Abstrakt:

Nanokrystaly křemíku jsou, z aplikačního hlediska, velmi zajímavé materiály emitující světlo. Křemík má mezi ostatními polovodivými materiály mnoho výhod. Je levný, je ho dostatek a i v nanokrystalické formě je relativně málo toxický. Ačkoli je schopnost křemíku ve formě nanokrystalů emitovat světlo známá již více než 25 let, základní výzkum stále nezískal odpovědi na všechny otázky týkající se původu jejich světelné emise, a na všechny vlivy, které tuto světelnou emisi ovlivňují.

Náplní práce tohoto projektu bude experimentální studium série nanokrystalických křemíkových materiálů (s různými velikostmi nanočástic) pomocí metod rozptylu rentgenového záření: i) malouhlového rozptylu rentgenového záření (SAXS, z anglického small angle x-ray scattering) podávajícího informace o velikosti nanočástic, jejich tvaru, jejich rozděleních a také vzájemných interakcích, a ii) rentgenového rozptylu a difrakce, umožňující určit frakci krystalické fáze vzorku, detaily o struktuře materiálu, velikosti a rozdělení koherentně difraktujících částic a typy a frekvence defektů krystalové mřížky přítomných ve vzorcích.



Obrázek 1. Měřené rtg. difrakční záznamy tří nanokrystalických Si vzorků s různou velikostí koherentně difraktujících částic (a). Měřené rtg. malouhlové záznamy (SAXS) Si nanokrystalických vzorků s rozdílnou velikostí částic.

Experimentální měření (SAXS, rtg. difrakce) bude doplněno vytvořením mikrostrukturních modelů různě velikých a porušených nanokrystalických Si materiálů, simulacemi rozptylu rentgenového záření na těchto strukturách a fitováním naměřených dat. Následně proběhne studium vývoje a změn struktury a reálné struktury těchto materiálů v závislosti na čase při pokojové teplotě a normální atmosféře a v toluenové lázni.

Zásady pro vypracování

1. Studium doporučené odborné literatury, literaturní rešerže.
2. Rentgenografická měření vzorků. Maloúhlový rozptyl rtg. záření (SAXS), rtg. difrakční měření.
3. Simulace rtg. rozptylu na nanokrystalických Si materiálech.
4. Fitování měřených dat, určení mikrostrukturních parametrů vzorků z rtg. měření.
5. Korelace mikrostrukturních parametrů určených z rtg. měření s výsledky získanými pomocí dalších komplementárních metod.
6. Popis vývoje a změn struktury a reálné struktury těchto materiálů v závislosti na čase.
7. Vytvoření fyzikálních modelů mikrostruktury studovaných materiálů.

Literatura:

1. K. Kůsová, Silicon Nanocrystals: From Indirect to Direct Bandgap, Phys. Status Solidi A 2018, 215, 1700718
2. M. Zacharias et al., Size-controlled highly luminescent silicon nanocrystals: A SiO/SiO₂/SiO/SiO₂ superlattice approach Appl. Phys. Lett., 2002, 80, 661
3. J. Heitmann et al., Silicon Nanocrystals“ Size Matter, Adv. Matter., 2005,17, 795
4. L. Mangolini, Synthesis, properties and applications of silicon nanocrystals, J. Vac., Sci. And Technol., B31, 2013, 020801