

Název: Studium struktury a teplotní stability nanokrystalických tenkých vrstev oxidu titaničitého

Autorka: Lea Chlanová

Katedra: Katedra fyziky kondenzovaných látek

Vedoucí práce: Prof. RNDr. Radomír Kužel, CSc., Katedra fyziky kondenzovaných látek

Abstrakt: Tenké vrstvy TiO_2 mohou vykazovat fotokatalytickou aktivitu a fotoindukovanou superhydrofilicitu (smáčivost) v závislosti na krystalinitě, fázovém složení a mikrostruktuře vrstev. Tyto parametry byly studovány pomocí rtg difrakce a reflektivity pro magnetronově naprášené amorfní a nanokrystalické vrstvy, zejména jejich teplotní i časový vývoj. V případě nanokrystalických vrstev byl ukázán pozitivní vliv vyššího parciálního tlaku kyslíku. Malé krystality anatasu (okolo 10 nm) byly stabilní do teplot minimálně 450 °C. Hlubkové profilování rtg difrakcí ukázalo, že fáze rutilu se vyskytuje vždy jen v blízkosti substrátu. Pro amorfní vrstvy byla nalezena výrazná závislost krystalizace na tloušťce vrstev a byla velmi pomalá pro velmi tenké vrstvy. časový vývoj intenzit difrakčních maxim anatasu mohl být dobře popsán modifikovanou Avramiho rovnicí. Rtg difrakční profily byly relativně úzké od samotného počátku krystalizace při cca 220 °C, což indikuje velikost krystalitů větší než asi 100 nm, a tedy nanokrystalické vrstvy nelze jednoduše připravit vhodným žíháním vrstev amorfních. Posuny difrakčních píků s časem poukázovaly vznik tahových zbytkových napětí. Tato napětí v krystalizovaných vrstvách byla detailně studovaná za pokojové teploty po žíhání. Byla nalezena a interpretována poměrně výrazná elastická anizotropie. Tahová zbytková napětí generovaná během krystalizačního procesu se rychle zvyšují se zmenšující se tloušťkou vrstvy a brání další krystalizaci. V důsledku toho klesá rychlost krystalizace se zmenšující se tloušťkou vrstvy. Za významný výsledek práce lze také považovat stimulování dalšího vývoje softwaru pro aproximaci (fitování) celého difrakčního záznamu najednou a to zejména zahrnutí efektu anizotropní elastické deformace ve vrstvách.

Klíčová slova: oxid titaničitý, tenká vrstva, rentgenová difrakce, reflektivita, textura, zbytkové napětí, hydrofilicita