

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

Fakulta strojního inženýrství

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Brno, 2018

Bc. Pavel Bábík



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ÚSTAV FYZIKÁLNÍHO INŽENÝRSTVÍ

INSTITUTE OF PHYSICAL ENGINEERING

VÝMĚNY NÁBOJE MEZI PROJEKILEM A TERČEM V REŽIMU NÍZKÝCH ENERGIÍ STUDOVANÉ POMOCÍ HS- LEIS

CHARGE EXCHANGE PROCESSES INVOLVED IN PROJECTILE-TARGET INTERACTION AT LOW ENERGY RANGE STUDIED BY HS-LEIS

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. Pavel Bábík

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

doc. Ing. Stanislav Průša, Ph.D.

BRNO 2018

Zadání diplomové práce

Ústav:	Ústav fyzikálního inženýrství
Student:	Bc. Pavel Bábík
Studijní program:	Aplikované vědy v inženýrství
Studijní obor:	Fyzikální inženýrství a nanotechnologie
Vedoucí práce:	doc. Ing. Stanislav Průša, Ph.D.
Akademický rok:	2017/18

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma diplomové práce:

Výměny náboje mezi projektilem a terčem v režimu nízkých energií studované pomocí HS–LEIS

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Porozumění tvaru píků a jejich poklesů v LEIS spektrech hraje zásadní roli při jejich kvantitativní interpretaci. Zatímco pík vyjadřuje intenzitu rozptylu projektilů, které během kolize nebyly neutralizovány, pokles píků je tvořen signálem neutralizovaných projektilů, které byly před opuštěním povrchu znovu reionizovány. Procesy neutralizace a reionizace jsou ovlivněny konkrétní kombinací částic během srážky, velikostí kinetické energie projektilu a chemickým stavem povrchu.

Mezi ostatními prvky hraje v těchto procesech jedinečnou roli kyslík. Je extrémně reaktivní a tak silně ovlivňuje chemickou strukturu povrchu. Nadto je kyslík velmi efektivní v reionizaci neutralizovaných projektilů.

Reionizační procesy vyžadují určitou minimální kinetickou energii projektilu. Tato energie je označována jako reionizační práh a je charakteristická pro danou kombinaci projektilu a povrchu. Hledáním prvku s vysokou hodnotou reionizačního prahu otvírá cestu k charakterizaci reionizace samotným kyslíkem.

Tento výsledek by výrazně přispěl k validitě kvantitativní interpretace LEIS spekter.

Cíle diplomové práce:

Příprava experimentálního zařízení (Qtac100) pro měření extrémně čistých povrchů kovů (základní tlak v komoře nižší než $3E-10$ mbar).

Nalezení optimálních podmínek odprašování kovových povrchů iontovým svazkem.

Měření LEIS spekter vybraných kovů před a po jejich oxidaci.

Extrakce vlivu kyslíku na výslednou reionizaci v podstatné části energiového rozsahu.

Porovnání experimentálních výsledků a výsledků počítačových simulací v prostředí TRBS.

Seznam doporučené literatury:

RABALAIS, J. W., Principles and Applications of Ion Scattering Spectrometry – Surface Chemical and Structural Analysis, Wiley 2003, ISBN 0-471-20277-0.

Termín odevzdání diplomové práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2017/18

V Brně, dne

L. S.

prof. RNDr. Tomáš Šikola, CSc.
ředitel ústavu

doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D.
děkan fakulty

ABSTRAKT

Tato diplomová práce je zaměřena na studium procesů výměny náboje mezi projektily a terčem s pomocí metody rozptylu nízkoenergiových iontů (LEIS). Zásadním předpokladem pro zkoumání těchto procesů výměny náboje je zvládnutí přípravy čistých povrchů a vhodného nastavení experimentálního zařízení, kterým je Qtac 100 umístěný ve Středoevropském technologickém institutu (CEITEC) v Brně. Míru neutralizace projektilů vyjadřuje tzv. ion fraction. Tento parametr je studován pro čistou a oxidovanou polykrytalickou měď. Neutralizovaný projektil je možno znovu ionizovat před vzdálením se od povrchu. Významnou roli zde hraje přítomný kyslík, který má značný vliv na reionizaci zpětně odražených neutralizovaných projektilů.

KLÍČOVÁ SLOVA

LEIS, rozptyl, oxidace, atomární kyslík, molekulární kyslík, ion fraction, procesy výměny náboje, Augerova neutralizace, reionizace, TRBS program

ABSTRACT

This diploma thesis is focused on the charge exchange processes between projectile and target studied by the Low Energy Ion Scattering (LEIS) technique. Basic premise to investigate charge exchange processes is correct cleaning processes and proper settings of experimental instrument Qtac 100 placed in the Central European Institute of Technology (CEITEC) in Brno. Ion fraction expresses neutralization rate of the projectile. The parametr is investigated for clean and oxidized polycrystalline copper. Oxygen presence performs a significant part of reionization of backscattered neutralized projectiles.

KEYWORDS

LEIS, scattering, oxidation, atomic oxygen, molecular oxygen, ion fraction, charge exchange processes, Auger neutralization, reionization, TRBS programme

BÁBÍK, P.: *Výměny náboje mezi projektilem a terčem v režimu nízkých energií studované pomocí HS-LEIS.*: diplomová práce. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, Ústav fyzikálního inženýrství, 2018. 55 s. Vedoucí práce doc. Ing. Stanislav Průša, Ph.D..

PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že svou diplomovou práci na téma „Výměny náboje mezi projectilem a terčem v režimu nízkých energií studované pomocí HS-LEIS.“ jsem vypracoval samostatně pod vedením vedoucího diplomové práce a s použitím odborné literatury a dalších informačních zdrojů, které jsou všechny citovány v práci a uvedeny v seznamu literatury na konci práce.

Jako autor uvedené diplomové práce dále prohlašuji, že v souvislosti s vytvořením této diplomové práce jsem neporušil autorská práva třetích osob, zejména jsem nezasáhl nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a jsem si plně vědom následků porušení ustanovení § 11 a následujících autorského zákona č. 121/2000 Sb., včetně možných trestněprávních důsledků vyplývajících z ustanovení § 152 trestního zákona č. 140/1961 Sb.

Brno

.....

(podpis autora)

Poděkování

Na tomto místě bych rád poděkoval především svému vedoucímu doc. Ing. Stanislavu Průšovi, Ph.D. za užitečné rady při analýze vzorků a pro obrovskou obětavost při řešení problémů se zařízením Qtac 100. Dále pak profesoru Petru Bauerovi z univerzity Johanna Keplera v Linzi za hlubší vhled do problematiky výměny náboje a profesoru Hidde Brongersmovi za objasnění procesů oxidace polykrystalické mědi.

Tato práce byla provedena za podpory výzkumné infrastruktury CEITEC Nano (ID LM2015041, MŠMT, 2016–2019) , CEITEC Vysoké učení technické v Brně.

Pavel Bábík

OBSAH

Úvod	1
1 LEIS	3
1.1 Základní princip	3
1.2 Popis spekter	3
1.3 Teorie rozptylu iontů	4
1.3.1 Prvkové složení vzorku	4
1.3.2 Vyjádření intenzity rozptýleného signálu	6
1.3.3 Procesy výměny náboje	10
1.4 Matrix efekty	14
1.5 Geometrické efekty	15
1.6 Aplikace	17
2 TRBS	19
2.1 Příklad - Rozptyl α -částic	19
3 Qtac 100	21
3.1 Jednotlivé části	21
3.2 Detekční systém	22
3.3 Parametry zařízení	23
4 Experimentální část	25
4.1 Nastavení zařízení	25
4.2 Výběr vzorku	27
4.3 Čištění	27
4.3.1 Odprašování povrchu vzorku	28
4.3.2 Výskyt „parazitního píku“	31
4.3.3 Čištění atomárním kyslíkem	33
4.4 Ion fraction čisté mědi a instrumentální faktor	34
4.5 Oxidace atomárním vs. molekulárním kyslíkem	37
4.5.1 Expozice atomárním kyslíkem	38
4.5.2 Expozice molekulárním kyslíkem	39
4.6 Ion fraction polykrystalické mědi po expozici molekulárním kyslíkem	42
4.7 Reionizace polykrystalické mědi	45
4.7.1 Propojení TRBS s experimentem	45
5 Závěr	49

Literatura	51
Seznam symbolů, veličin a zkratk	53

ÚVOD

Metoda rozptylu nízkoenergiových iontů, neboli LEIS, vyniká svou povrchovou citlivostí na nejsvrchnější atomární vrstvu povrchu vzorku díky časté neutralizaci projektilů při interakci. Proto lze metodu LEIS s úspěchem využít pro studium 2D struktur, jako je např. grafén.

Kvalitativní analýza povrchu metodou LEIS je snadná a je založena na kinematickém popisu binární interakce mezi projektilem a rozptylovým centrem. Parametr popisující tuto interakci je tzv. kinematický faktor. Oproti tomu kvantitativní analýza je komplexnější a zahrnuje nejrůznější faktory. Kvantitativní analýza se navíc komplikuje přítomností kyslíku, který je běžnou součástí zbytkové atmosféry ve vakuových komorách a který je velmi efektivní v reionizaci neutralizovaných projektilů. Tato reionizace se projevuje zvětšením pozadí ve spektrech v energiích nižších vzhledem k binárnímu píku a tedy ztěžuje odečtení integrálu tohoto píku.

Diplomová práce je proto zaměřena na studium procesů výměny náboje se zaměřením na Augerovu neutralizaci a na reionizaci. Experimentální výsledky lze konfrontovat s výstupy z programu TRBS, jenž slouží k simulacím rozptylů iontů o nízkých energiích pro analýzu povrchů. Program TRBS je založen na Monte Carlo metodě simulací systémů a byl vyvinutý profesorem E. Steinbauerem.

Volba vhodného povrchu pro zkoumání procesů výměny náboje je zásadní. Jednak bude moci následně sloužit jako reference pro analýzy dalších prvků, jednak musí splňovat další kritéria jako je například vyšší hodnota energiového prahu oproti pozici signálu kyslíku. Energiový práh představuje minimální potřebnou hodnotu energie neutralizovaného projektilu pro reionizaci. Hledání prvků s vyšší hodnotou energiového prahu oproti signálu kyslíku otevírá cestu ke studiu reionizačních procesů samotného kyslíku.

1 LEIS

1.1 Základní princip

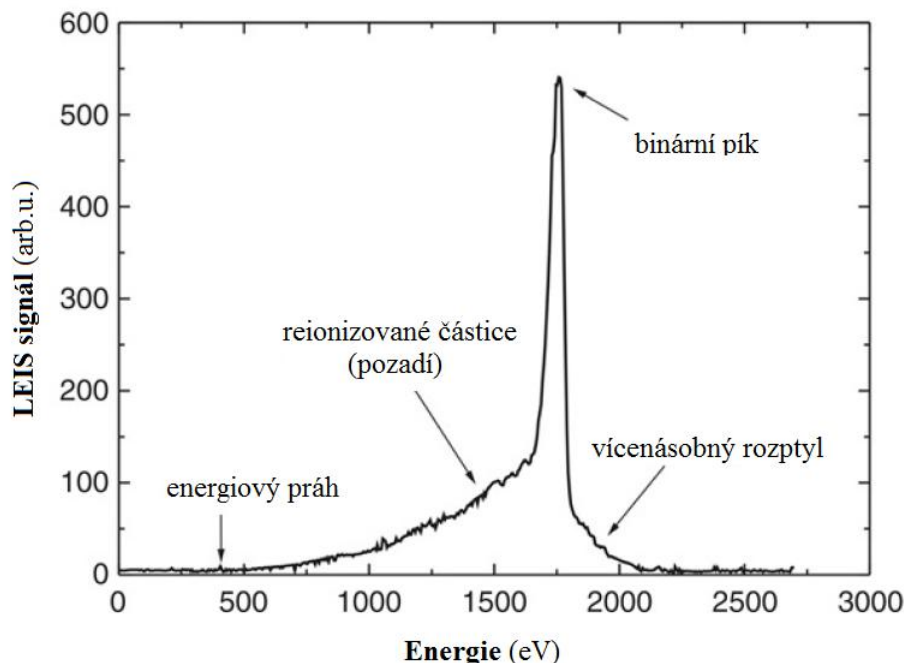
Rozptyl iontů o nízké energii (angl. Low Energy Ion Scattering, zkráceně LEIS) je unikátní nástroj pro analýzu nejsvrchnější atomární vrstvy povrchu pevných látek. Informace o složení povrchu je získávána pomocí zpětně odražených iontů (typicky iontů helia He^+ či neonu Ne^+ o energiích 1 až 10 keV). K analýze těžších prvků lze s výhodou použít také ionty argonu Ar^+ . Použitím svazků iontů neonu a argonu, popřípadě i helia, o vyšších intenzitách slouží k odprašování povrchů za účelem čištění či hloubkového profilování. Signál ze zpětně odražených iontů¹ tvoří spektra, z nichž lze následně analyzovat prvkové složení povrchu a s hlubším využitím znalostí rozptylu lze prvkové složení povrchu také kvantifikovat.

1.2 Popis spekter

Ze zpětně odražených projektilů měřených pomocí experimentálního zařízení jsou komponována spektra. Ve spektrech jsou projektily rozříděny podle jejich energie po rozptylu. Na obrázku lze vidět příklad takového spektra a to konkrétně spektra heliových projektilů odražených na polykrystalickém hliníku (obr. 1.1). Ve spektru jsou označeny jednotlivé komponenty spektra. Výrazný pík představuje binární interakci přímo mezi heliovým projektilem a atomem hliníku z nejsvrchnější vrstvy vzorku. Přestože se jedná o signál projektilů helia odražených na atomech vzorku, označují se z důvodu zjednodušení popisu spekter tyto píky prvkem, na kterém byly ionty odráženy (v tomto případě pík hliníku). Pozadí tohoto píku do nižších energií představuje signál reionizovaných projektilů. To jsou projektily, které ztratili další část své energie vlivem interakcí s dalšími atomy z oblasti pod povrchem [1].

Existuje nejnižší hodnota energie, označována jako energiový práh, pro kterou lze zaznamenat ještě reionizované projektily. Tato hodnota je pro zvolený materiál (prvek) charakteristická. Při interakci projektilů s povrchem je jistá nennulová pravděpodobnost, že dojde k vícenásobné interakci projektilu přímo na nejsvrchnější vrstvě vzorku. Tyto vícenásobné odražené projektily mají vyšší energie než při binární interakci a proto tvoří ve spektru pozadí binárního píku směrem k vyšším energiím. Nicméně studie vícenásobného rozptylu není součástí této práce [1].

¹Ve většině literatury jsou dopadající a zpětně odražené ionty označovány výrazem projektily a atom v povrchu vzorku, na kterém dochází k rozptylu projektilu, pak výrazem rozptylové centrum. Dále se budeme tímto označením řídit.



Obr. 1.1: Spektrum iontů He^+ s primární energií 3 keV rozptýlených na polykrystalickém hliníku. Rozptylový úhel 142° . Převzato a upraveno z [1].

Pro získání co možná nejvíce informací z měřeného spektra, tedy nejen stanovení prvkového složení povrchu, ale i stanovení atomové koncentrace, je zapotřebí zohlednit, jakým způsobem probíhá samotná interakce mezi projektilem a povrchem. Následující podkapitola se touto problematikou zabývá.

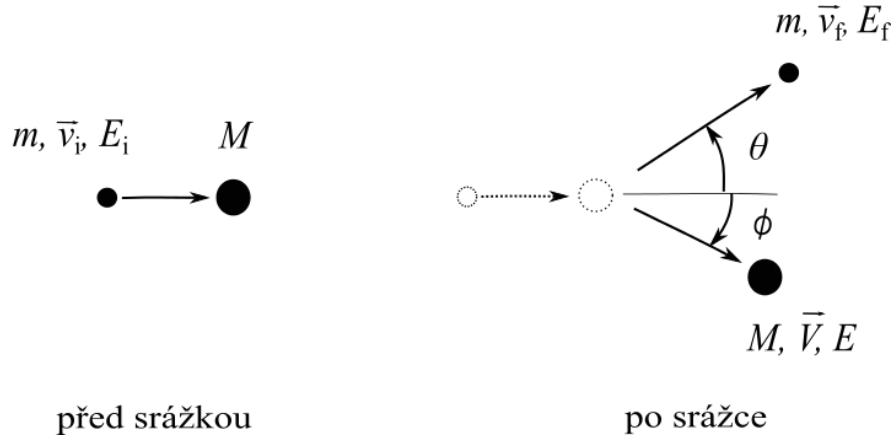
1.3 Teorie rozptylu iontů

1.3.1 Prvkové složení vzorku

První informací, kterou při analýze spekter lze stanovit, je prvkové složení povrchu vzorku. Tuto informaci lze získat z polohy jednotlivých binárních píků ve spektru. Parametr, který určuje poměr finální energie projektilu E_f a počáteční energie projektilu E_i , je označován jako kinematický faktor k :

$$k = \frac{E_f}{E_i}. \quad (1.1)$$

Na obr. 1.2 je schématicky znázorněn takový rozptyl s vyznačením jednotlivých veličin (hmotnost, rychlost, energie) pro každou částici před a po rozptylu. Protože dopadající iontové projektily mají energii řádově jednotky keV, není zapotřebí na rozptyl hledět relativisticky a k prvkové analýze postačí využít zákonů zachování hybnosti a energie [2–5]. Tedy:



Obr. 1.2: **Schéma rozptylu projektilu na rozptylovém centru.** Jednotlivé částice jsou popsány veličinami: hmotnost m , vektor rychlosti \vec{v} a energie E . Převzato z [2].

$$mv_i = mv_f \cos \theta + MV \cos \phi, \quad (1.2)$$

$$0 = mv_f \sin \theta + MV \sin \phi, \quad (1.3)$$

$$\frac{1}{2}mv_i^2 = \frac{1}{2}mv_f^2 + \frac{1}{2}MV^2, \quad (1.4)$$

kde θ je tzv. rozptylový úhel projektilu a ϕ je rozptylový úhel rozptylového centra. Z uvedených rovnic (1.2), (1.3) a (1.4) je vyloučením parametru ϕ možné odvodit kinematický faktor ve tvaru [1–5]:

$$k = \left(\frac{\cos \theta \pm \sqrt{\left(\frac{M}{m}\right)^2 - \sin^2 \theta}}{1 + \frac{M}{m}} \right)^2. \quad (1.5)$$

Jak je z rovnice (1.5) vidno, tento faktor závisí pouze na geometrii rozptylu a na hmotnostech projektilu a rozptylového centra. Z rovnosti rovnic (1.1) a (1.5) a ze znalosti hmotnosti projektilu m a rozptylového úhlu θ lze odvodit hmotnost rozptylového centra M a tím stanovit prvkové složení vzorku.

Na tomto místě je vhodné dodat, že naše zařízení pro měření rozptylů o nízkých energiích (Qtac 100) disponuje zabudovaným softwarem, který umožňuje uživateli lehce určit prvkové složení ze spektra pouhým vyčtením energie binárního píku bez nutnosti kalkulovat kinematický faktor uživatelem.

1.3.2 Vyjádření intenzity rozptýleného signálu

V předcházející analýze prvkového složení vzorku bylo nutno ze spekter vyčíst polohu (energie) jednotlivých binárních piků. Pro hlubší analýzu spekter, vedoucí ke kvantifikaci prvkového složení, se již však neobejdeme bez definování základní rovnice popisující intenzitu měřeného signálu. Signál Y_i^+ zpětně odražených projektilů od i -tého povrchového atomu (rozptylového centra) o hmotnosti m_i je definovaný jako [1]:

$$Y_i^+ = I^+ \cdot N_i \cdot P_i^+ \cdot \frac{d\sigma_i}{d\Omega} \cdot \zeta \cdot R, \quad (1.6)$$

kde I^+ je proud projektilů, N_i je atomová koncentrace prvku na povrchu, P_i^+ je pravděpodobnost, že projektil zůstane po rozptylu v ionizovaném stavu (angl. ion fraction), $\frac{d\sigma_i}{d\Omega}$ je diferenciální účinný průřez, ζ je instrumentální faktor zahrnující účinnost detektoru a průchodnost analyzátoru a R je drsnost povrchu vzorku.

Diferenciální účinný průřez

Diferenciální účinný průřez charakterizuje prostorové rozložení rozptýlených projektilů. Je definován jako podíl počtu rozptýlených projektilů do prostorového úhlu a počtu projektilů dopadajících na jednotku plochy na povrchu [5]. V odborné literatuře se zpravidla používá následující forma diferenciálního účinného průřezu: [5]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{p}{\sin \theta} \left| \frac{dp}{d\theta} \right|, \quad (1.7)$$

kde p je dopadový parametr (angl. impact factor) a θ je rozptylový úhel definovaný jako [2, 3, 5]:

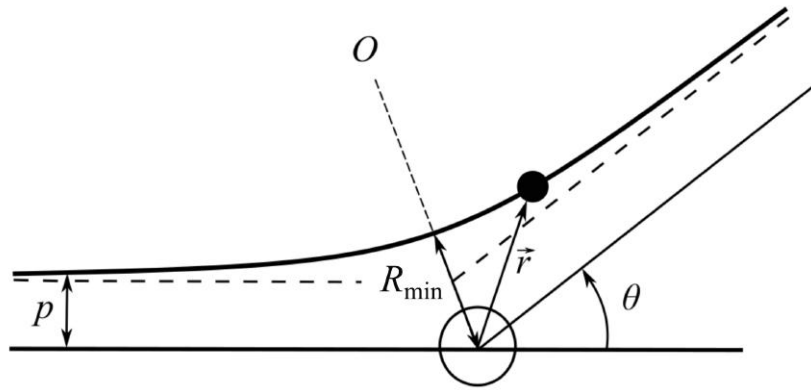
$$\theta = \pi - \int_{R_{\min}}^{\infty} \frac{2pdr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{p^2}{r^2}}}, \quad (1.8)$$

kde R_{\min} je největší přiblížení projektilu a rozptylového centra, p je dopadový parametr, E je počáteční energie projektilu a $V(r)$ je centrální potenciálové pole se středem v rozptylovém centru. Pro coulombovský potenciál $V_C(r)$ je dopadový parametr p určen jako [6]:

$$p(\theta) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E} \cdot \cot \frac{\theta}{2}. \quad (1.9)$$

Diferenciální účinný průřez pak má tvar [6]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{2Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (1.10)$$



Obr. 1.3: Průběh rozptylu projektilu v potenciálovém poli rozptylového centra. p představuje dopadový parametr, R_{\min} vzdálenost největšího přiblížení projektilu a rozptylového centra, θ rozptylový úhel, vektor \vec{r} aktuální polohu projektilu a O osu symetrie rozptylu. Převzato a upraveno z [3].

Průběh rozptylu projektilu na rozptylovém centru je schématicky znázorněn na obr. 1.3. V oblasti rozptylu vysokoenergiových iontových projektilů (angl. Rutherford backscattering, RBS) se jako vhodná volba centrálního potenciálového pole jeví coulombovská odpudivost $V_C(r)$ mezi projektilem a jádrem rozptylového centra, přičemž se zanedbává působení okolních elektronů. V oblasti nízkoenergiových rozptylů (LEIS) je vliv elektronů na trajektorii iontových projektilů větší a právě z toho důvodu se zavádí tzv. stíněný potenciál $V(r)$, který bere v potaz tento vliv. Definuje se jako coulombovský potenciál $V_C(r)$ násobený tzv. stínící funkcí $\Phi(r/a)$ (angl. screening function) [1–3]. Tedy:

$$V(r) = V_C(r) \cdot \Phi(r/a) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \cdot \Phi(r/a), \quad (1.11)$$

kde Z_1 a Z_2 jsou protonové čísla částic, které se účastní interakce, e je elementární náboj, ϵ_0 je permitivita vakua, r je vzájemná vzdálenost částic a a je tzv. stínící délka (angl. screening length). Pro stínící funkci neexistuje analytické vyjádření, používají se proto různé aproximace tvořené řadou exponenciálních funkcí. Dvě nejpoužívanější aproximace jsou Thomas-Fermi-Molierova stínící funkce, založená na Thomas-Fermiho modelu atomu (TFM), a „univerzální“ stínící funkce (ZBL, Ziegler-Biersack-Littmark) [2, 3].

Thomas-Fermi-Molierova stínící funkce má předpis [2, 3]:

$$\Phi(x) = 0,35e^{-0,3x} + 0,55e^{-1,2x} + 0,1e^{-6x}, \quad (1.12)$$

kde $x = r/a$. Stínící délka pro tuto aproximaci je:

$$a = 0,88534a_0 \left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2} \right)^{-2/3}, \quad (1.13)$$

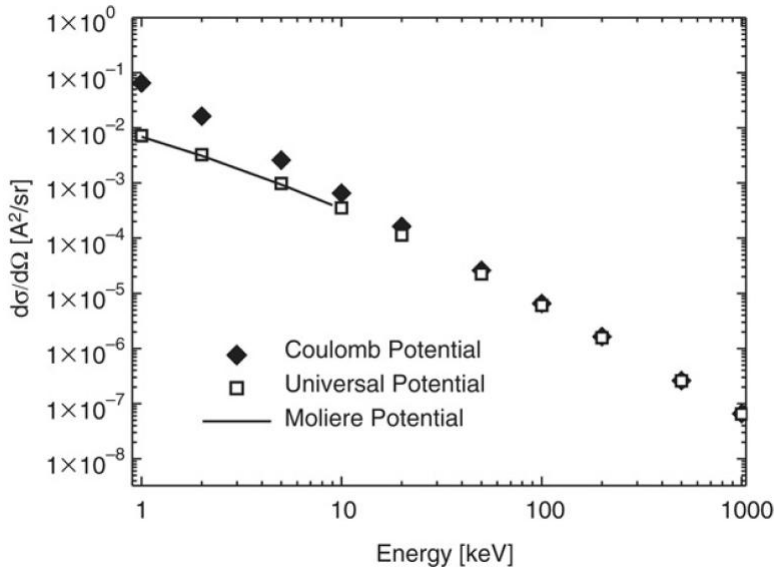
kde a_0 je Bohrov poloměr a Z_1 a Z_2 jsou protonové čísla částic.

Ziegler-Biersack-Littmarkova stínící funkce má předpis tvořený čtyřmi exponenciálními členy [2, 3]:

$$\Phi(x) = 0,1818e^{-3,2x} + 0,5099e^{-0,9423x} + 0,2802e^{-0,4029x} + 0,02817e^{-0,2016x}, \quad (1.14)$$

kde platí stejná substituce parametru x jako na předchozích řádcích a stínící délka pro tuto stínící funkci má tvar:

$$a = 0,88534a_0 (Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23})^{-1}. \quad (1.15)$$



Obr. 1.4: Diferenciální účinný průřez pro rozptyl helia na mědi při rozptylovém úhlu 129° pro různé interpretace potenciálového pole. Převzato z [1].

Obr. 1.4 zobrazuje tři zmiňované interpretace potenciálového pole (Coulomb, TFM, ZBL) vzhledem k diferenciálnímu účinnému průřezu pro různé energie. Z obrázku je patrné, že v oblasti nízkých energií se TFM a ZBL ve velké míře shodují [1].

Ion fraction

Ion fraction² je tedy pravděpodobnost setrvání projektilu v ionizovaném stavu. Ion fraction lze definovat jako [1]:

$$P^+ = \frac{A^+}{A^+ + A^0}, \quad (1.16)$$

²Pojem ion fraction se do češtiny ve většině literatury nepřekládá. Proto v následujícím textu budeme tento pojem dále používat.

kde A^+ představuje množství odražených iontových projektilů a A^0 představuje množství zneutralizovaných projektilů.³ Parametr ion fraction je zásadním parametrem pro prvkovou kvantifikaci spekter. Pro každou kombinaci projektilu a rozptylového centra je odlišný a proto je zásadní stanovit ion fraction pro jednotlivé prvky. V neposlední řadě umožní také stanovit instrumentální faktor používaného zařízení.

Určit ion fraction přímo z definice (1.16) není možné prostřednictvím typu zařízení ESA-LEIS (viz kapitola 2), používaného v této práci. Důvodem je nemožnost detekovat zneutralizované projektily z důvodu principu funkce použitého analyzátoru. Proto na následujících řádcích provedeme stanovení ion fraction pomocí základní rovnice (1.6) [1].

V prvním kroku z rovnice (1.6) lze vyjádřit ion fraction jako [1]:

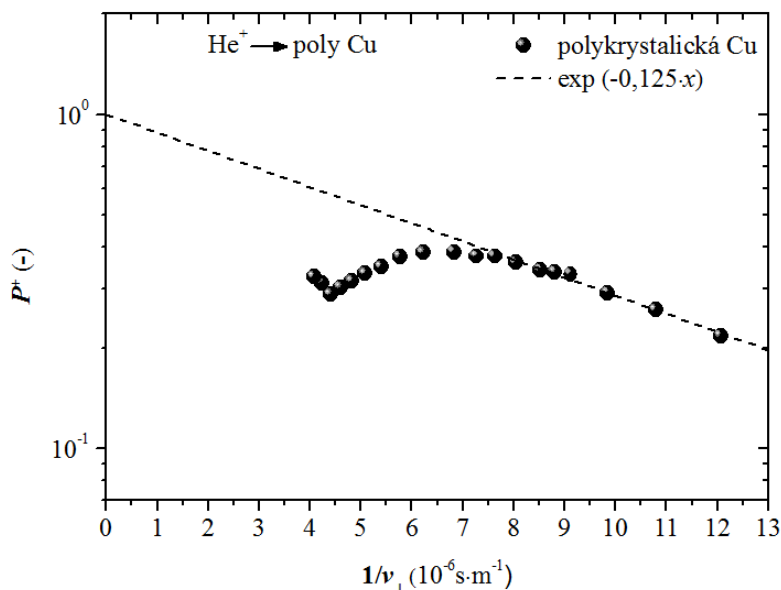
$$P^+ = \frac{Y^+}{I \cdot N \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot \zeta \cdot R}, \quad (1.17)$$

kde pro zjednodušení se již nepíšou indexy u parametrů, neboť je předpokládáno, že povrch je tvořen atomy jednoho prvku. Předpokládá se také dostatečně rovný povrch ($R = 1$) a že ion fraction bude úměrné exponenciálnímu poklesu ve tvaru [1]:

$$P^+ = \exp \left[-\frac{v_c}{v_\perp} \right], \quad (1.18)$$

kde v_c se označuje jako charakteristická rychlost a v_\perp jako celková kolmá složka (vzhledem k povrchu vzorku) rychlosti projektilu. Charakteristická rychlost je určena kombinací projektilu a rozptylového centra. Exponenciální pokles ion fraction v sobě zohledňuje závislost intenzity neutralizace na době, kterou projektil stráví v blízkosti povrchu vzorku (rozptylového centra), který poskytuje elektron pro neutralizaci projektilu. Bližší pohled na tvar ion fraction bude diskutován později v části věnované Augerově neutralizaci. Obě rovnice (1.17) a (1.18) jsou si rovny. Ion fraction se na závěr vynáší do grafu v logaritmickém měřítku z dat získaných z rovnice (1.17) v závislosti na $\frac{1}{v_\perp}$. Jako příklad je zde uveden ion fraction heliových projektilů dopadající na atomy mědi viz obr. 1.5. Následující část je zaměřena na objasnění vlivu výměny nábojů při interakci iontového projektilu s povrchem na ion fraction [1].

³Parametr A^+ , popř. A^0 , představuje integrál binárního píku obsaženého ve spektrech. Oproti tomu parametr Y^+ , popř. Y^0 představuje signál detekovaný na detektoru a tvořící spektra. Někteří autoři toto rozdělení nerozlišují a značí je stejně. Pro naše účely však budeme dodržovat tuto konvenci.



Obr. 1.5: **Ion fraction heliových projektilů dopadajících na atomy mědi.** Směrnice odpovídá charakteristické rychlosti v_c z rovnice (1.18) a to konkrétně $1,25 \cdot 10^5$ m/s.

1.3.3 Procesy výměny náboje

Procesy výměny náboje se odehrávají během interakcí projektilů s povrchem. V nízkoenergiovém režimu jde o dynamický proces. To znamená, že stav náboje projektilu se mění vlivem procesů zachycení a uvolnění elektronů podél trajektorie pohybu projektilu látkou. Projektil nejprve prochází skrze elektronový plyn na povrchu, následně je zpětně rozptýlen na rozptylovém centru a vychází znovu skrze elektronový plyn pryč z povrchu směrem k analyzátoru. V následující části budou diskutovány jednotlivé typy procesů výměny náboje a budou vysvětleny převážně na příkladu interakce heliového projektilu s rozptylovým centrem. Procesy budou rozděleny na rezonanční procesy, Augerovy procesy a procesy indukované srážkou a bude popsán jejich vliv na ion fraction P^+ [1].

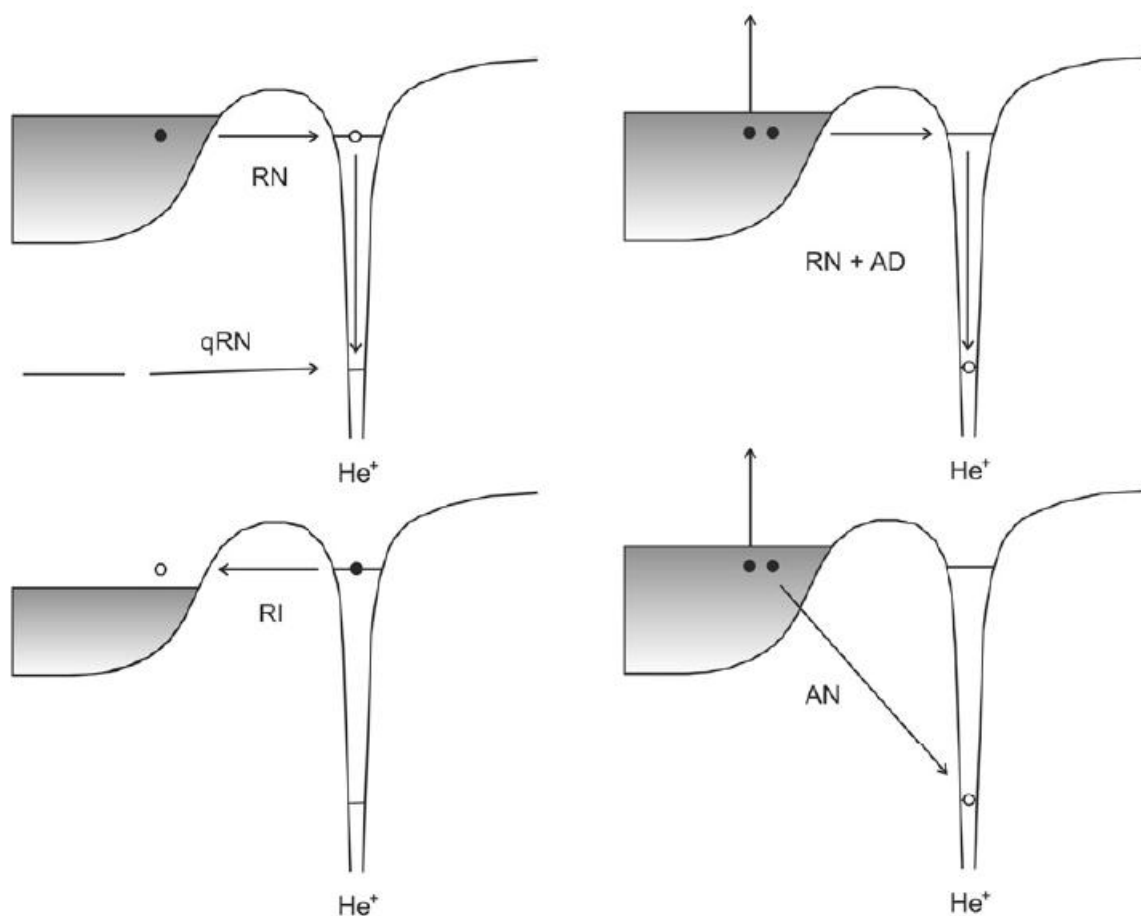
Rezonanční procesy

Rezonanční procesy jsou jednoelektronové procesy zprostředkované mezi energiovými stavy ve vodivostním pásu rozptylového centra a slabšími vazebnými stavy projektilu. Při přiblížení energiových stavů projektilu k vodivostnímu pásu rozptylového centra existuje jistá pravděpodobnost, že dojde k tunelování elektronu z vodivostního pásu k projektilu za vzniku tzv. **rezonanční neutralizace** (RN proces). Obráceným směrem tunelování pak může dojít ke vzniku tzv. **rezonanční ionizace** (RI proces). Rezonanční procesy jsou vlivem tunelování elektronu silně závislé

na vzdálenosti mezi projektilem a rozptylovým centrem a na vazebních energiích. Z toho důvodu se definuje tzv. míra přechodu $\frac{1}{\tau_r(z)}$ (ang. transition rate), což je pravděpodobnost přechodu za jednotku času. Tato číselná hodnota je úměrná hustotě zúčastněných energiových stavů. Závislost $\frac{1}{\tau_r(z)}$ na vzdálenosti z od povrchu je popsána rovnicí [1]:

$$\frac{1}{\tau_r(z)} = A_r \cdot \exp(-a_r z), \quad (1.19)$$

kde A_r odpovídá charakteristické míře přechodu pro případ $z = 0$ a a_r odpovídá reciproké interakční délce. Na obr. 1.6 vlevo jsou znázorněny rezonanční procesy, kdy dochází k tunelování elektronu buď do iontového projektilu (RN proces), nebo do vodivostního pásu rozptylového centra (RI proces). Na obrázku je znázorněn také proces tzv. **kvazi-rezonance** (qRN proces), při které dochází k přechodu elektronu z vnitřních slupek. Proces je možný jen pro určité prvky obsahující elektronové stavy při vhodných energiích. Tento proces byl poprvé pozorován Ericksonem a Smithem ionty helia na atomech olova [7] či Brongersmou ionty neonu na atomech zlata [8].



Obr. 1.6: Rezonanční a Augerovy procesy. Převzato z [1].

Augerovy procesy

Stejně jako pro rezonanční neutralizaci, tak také Augerovy procesy jsou zprostředkované předáním elektronu mezi vodivostním pásem a projektilem. Oproti již popsaným procesům jsou však tyto Augerovy procesy dvouelektronové. V následující části budou popsány tři jednotlivé typy Augerových procesů přispívající do celkové míry přechodu Augerovými procesy $\frac{1}{\tau_a}$ [1].

Prvním procesem je tzv. **přímá Augerova neutralizace** (AN proces), kdy dochází k neutralizaci iontu helia do základního stavu přijetím elektronu z vodivostního pásu rozptylového centra a k následné excitaci jiného elektronu či plazmonu z tohoto pásu. Míra přechodu je označena jako $\frac{1}{\tau_{DA}}$ [1].

Dalším procesem je tzv. **přímá Augerova de-excitace** (AD proces), při kterém dochází v první fázi k vytvoření metastabilního stavu atomu helia prostřednictvím tunelováním elektronu v RN procesu z vodivostního pásu rozptylového centra. Následně přejde atom helia do základního stavu a zároveň jiný elektron nebo plazmon se z vodivostního pásu excituje. Míra přechodu v tomto případě je označena jako $\frac{1}{\tau_{AD}}$ [1].

Posledním procesem je tzv. **nepřímá Augerova de-excitace** (iAD proces), kdy helium je excitované do tripletu. Příchozí elektron z atomu povrchu zaplní díru ve stavu $1s$ v atomu helia a následně se uvolní elektron z atomu helia ze stavu $n = 2$ [1].

Proces iAD je velmi vzácný a ve většině případů se uskutečňují pouze předchozí dva Augerovy procesy. Na obrázku obr. 1.6 vpravo jsou znázorněny schématicky AN a AD procesy. Výsledná celková míra přechodu Augerovými procesy je pak součtem jednotlivých procesů [1]. Tedy:

$$\frac{1}{\tau_a(z)} = \frac{1}{\tau_{DA}(z)} + \frac{1}{\tau_{AD}(z)}. \quad (1.20)$$

Závislosti $\frac{1}{\tau_a(z)}$ na vzdálenosti z od povrchu bude mít stejný průběh s exponenciálním poklesem jako v případě rovnice (1.19). Protože se však Augerových procesů účastní dva elektrony, míra přechodu je v porovnání s rezonančními procesy nižší. Což odpovídá i nižší charakteristické míře přechodu A_a [1]. Tedy:

$$\frac{1}{\tau_a(z)} = A_a \cdot \exp(-a_a z). \quad (1.21)$$

Z míry přechodu lze získat pro Augerovy procesy a pro RN procesy tzv. pravděpodobnost přechodu $dP_{i,t}$. Pravděpodobnost přechodu v časovém intervalu dt ve vzdálenosti z je dána vztahem [1]:

$$dP_{i,t} = \frac{dt}{\tau(z)} = \frac{dz}{\tau(z)} \cdot \frac{1}{v_{i,\perp}(z)}, \quad (1.22)$$

kde index i buď odpovídá označení pro trajektorii příchozí (před rozptylem, in), nebo pro trajektorii odchozí (po rozptylu, out). Pravděpodobnost „přežití“ $P_{\text{surv},i}^+$, tj. že

iontový projektil nebude neutralizován při cestě před rozptylem nebo po rozptyle, je pak rovna [1]:

$$P_{\text{surv},i}^+ = \exp \left[- \int dP_{i,t} \right] = \exp \left[- \frac{1}{v_{i,\perp}} \int_0^\infty dz \frac{1}{\tau(z)} \right] = \exp \left[- \frac{v_c}{v_{i,\perp}} \right]. \quad (1.23)$$

Z rovnice (1.23) vyplývá, že charakteristická rychlost je rovna $v_c = A/a$. Celková pravděpodobnost P^+ podél celé trajektorie odpovídající ion fraction pro Augerovy a RN procesy ze základní rovnice (1.6) je pak rovna [1]:

$$P^+ = P_{\text{surv},\text{in}}^+ \cdot P_{\text{surv},\text{out}}^+ = \exp \left[- \frac{v_c}{v_{\text{in},\perp}} - \frac{v_c}{v_{\text{out},\perp}} \right] = \exp \left[- \frac{v_c}{v_\perp} \right], \quad (1.24)$$

kde $1/v_\perp = 1/v_{\text{in},\perp} + 1/v_{\text{out},\perp}$. Rovnice (1.24) s typickým exponenciálním poklesem je právě ta rovnice (1.18), jejíž tvar byl předpokládán již dříve části věnované ion fraction.

Procesy indukované srážkou

Je zřejmé, že výměna nábojů je možná také při samotné kolizi projektilu s rozptylovým centrem. Vlivem kolize může dojít k neutralizaci projektilů a také k jejich opětované reionizaci. Protože se jedná o procesy indukované srážkou, budou se označovat jako **neutralizace indukovaná srážkou** (CIN proces) a **reionizace indukovaná srážkou** (CIR proces). Dále se budeme zabývat především CIR procesem, protože CIN je jeho komplementární proces [1].

CIR proces bude vysvětlen interakcí projektilu helia s povrchem. CIR proces je způsoben překryvem 1s slupky atomu helia s valenčním pásem atomu z povrchu jako důsledek ne vazebné interakce mezi 1s stavem atomu helia s vnitřními stavy rozptylového centra. Při přiblížení zneutralizovaného projektilu k rozptylovému centru dojde vlivem interakce tohoto projektilu s vnitřními stavy rozptylového centra k ionizaci atomu helia. Schématicky lze proces zapsat jako $\text{He}^0 \rightarrow \text{He}^+ + e^-$. Obdobně obrácený proces, tj. CIN, pak lze schématicky zapsat jako $\text{He}^+ + e^- \rightarrow \text{He}^0$. Pro tyto případy existuje kritická vzdálenost R_c , pro kterou k reionizaci, potažmo k neutralizaci, může docházet. Kritická vzdálenost R_c se odvozuje z energiového prahu ze spekter E_{th} [1].

V případě procesů indukovaných srážkou se ion fraction P^+ odvíjí od dvou příspěvků. Prvním příspěvkem je vliv nezneutralizovaných projektilů ($\text{He}^+ \rightarrow \text{He}^+$), druhým pak vliv reionizovaných projektilů ($\text{He}^+ \rightarrow \text{He}^0 \rightarrow \text{He}^+$) [1]. Tedy:

$$P^+ = P_{\text{in}}^+ \cdot (1 - P_{\text{CIN}}) \cdot P_{\text{out}}^+ + (1 - P_{\text{in}}^+) \cdot P_{\text{CIR}} \cdot P_{\text{out}}^+, \quad (1.25)$$

kde P_{CIN} , popř. P_{CIR} , je pravděpodobnost neutralizace, popř. reionizace indukované srážkou a P_{in}^+ a P_{out}^+ mají stejný význam jako v případě AN procesů.

V případě, je-li energie projektilů nižší než energiový práh ($E < E_{\text{th}}$), nedochází k CIN a CIR procesům, neboť projektily nemají dostatečnou energii k dosažení oblasti, definované kritickou vzdáleností R_c , ve které může dojít k procesům indukovaným srážkou. Pak platí, že $P_{\text{CIN}}^+ = P_{\text{CIR}}^+ = 0$ a rovnice (1.25) přejde do tvaru $P^+ = P_{\text{in}}^+ \cdot P_{\text{out}}^+$, což odpovídá známé rovnici (1.24) pro AN, potažmo RN procesy. Z toho tedy vyplývá, že pro energie nižší než je energiový práh se uplatňují pouze tyto procesy neutralizace. Tento fakt lze doložit na grafu závislosti P^+ na $\frac{1}{v_{\perp}}$ viz obr. 1.5. Pro energie nižší než je energiový práh (pro měď je $E_{\text{th}} = 2100$ eV [9]) experimentální data odpovídají lineární závislosti popsané rovnicí (1.18) [1].

Pro hodnoty energií projektilů nad energiový práh ($E > E_{\text{th}}$) se již projevují vlivy CIR a CIN procesů. Na obr. 1.5 to odpovídá poklesu hodnot P^+ pod lineární závislost (oblast energií vyšších než 2100 eV).

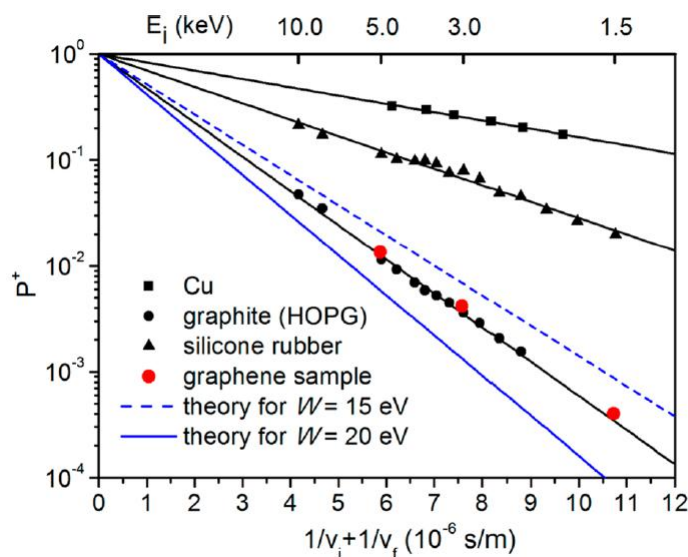
Dále se již jen krátce zmíníme o dalších efektech, které mají také vliv na výsledný signál spekter získaný z povrchu vzorků.

1.4 Matrix efekty

Matrix efekty⁴ jsou souhrnně nazývány efekty, které vznikají vlivem vazeb okolních atomů s rozptylovým centrem. Toto působení ovlivňující potenciálové pole kolem rozptylového centra má v konečném důsledku vliv na výsledný získaný signál ve spektrech.

Příkladem, na kterém lze demonstrovat vliv vazeb ve struktuře vzorku, je práce věnovaná studiu grafénových vrstev pomocí metody LEIS [11]. Pomocí metody LEIS bylo možné rozlišit atomy uhlíku obsažené v grafénové vrstvě s sp^2 hybridizací od uhlíku obsaženém v silikonové gumě typicky s sp^3 hybridizací. Obr. 1.7, převzatý z tohoto článku, ukazuje porovnání ion fraction v závislosti na $\frac{1}{v_{\perp}}$ především pro uhlík z pyrolytického grafitu (HOPG) s rovněž sp^2 hybridizací, grafénový uhlík a uhlík obsažený v silikonové gumě. Pomocí rozdílných směrníc (charakteristická rychlost v_c) tak bylo možné rozlišit různé typy uhlíkových vazeb. Graf je doplněn navíc o ion fraction polykrystalické měděné fólie sloužící jako referenční vzorek a o kalkulaci ion fraction pro grafénový uhlík s různou šířkou hustoty valenčních stavů (15 nebo 20 eV).

⁴Pojem matrix efekt se standardně používá i v česky psané literatuře a proto nebude překládán. To samé platí i pro některé další pojmy diskutované dále.



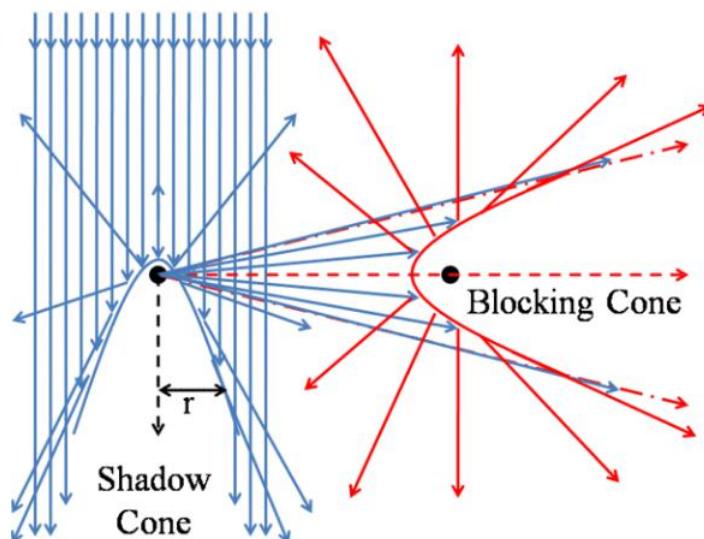
Obr. 1.7: Ion fraction pro atomy uhlíku s různým typem hybridizace. Signál pro grafénový uhlík koresponduje s uhlíkem z pyrolytického grafitu (oba s sp^2 hybridizací). Oproti tomu stojí negrafitický uhlík v silikonové gumě s sp^3 hybridizací. Graf obsahuje také signál od měděné fólie (reference) a kalkulaci grafénové uhlíku s různou šířkou hustoty valenčních stavů. Převzato z [11].

1.5 Geometrické efekty

Vliv na výsledný signál zpětně odražených projektilů má v neposlední řadě i krystalické uspořádání vzorku. Dopadá-li svazek iontů na povrch vzorku, projektily se od rozptylového centra rozptylují do různých úhlů vlivem potenciálového pole. Vlivem přítomnosti tohoto pole vznikne oblast kolem rozptylového centra, ze které nelze pomocí projektilů získat informaci. Tato oblast je tzv. stíněna a efekt se proto nazývá **shadowing** efekt. Oblast stínění má tvar rotačního paraboloidu (kužele, angl. cone viz obr. 1.8) a může obsahovat i jednotlivé další atomy. Poloměr tohoto paraboloidu je nepřímo úměrný energii dopadajícího projektilu [12].

Z toho vyplývá, že při zvyšující se energii projektilů je poloměr r nižší a iontové projektily se tak mohou dostat hlouběji do vzorku. To koresponduje s použitím metody LEIS, používající jednotky keV, a RBS, používající až MeV. LEIS s ohledem na nižší energie projektilů umožňuje studování jedné až dvou nejsvrchnějších vrstev povrchu oproti RBS, která získává informaci z hloubky až desítek vrstev.

Průnik do hloubky vzorku silně ovlivňuje také krystalické uspořádání vzorku. Pro případ pravidelně uspořádané krystalové mřížky a kdy zároveň projektily dopadají pod „správným“ úhlem, mohou projektily „protunelovat“ hlouběji do vzorku. Tento efekt se nazývá **channeling** a lze takto získat informaci z hlubších vrstev, nicméně za cenu nižšího signálu z nejsvrchnější vrstvy. Vliv channelingu je



Obr. 1.8: Schéma shadowing a blocking efektů. Převzato z [12].

zde ukázán například v práci W. Turkenburga pro analýzu Cu(110) a Ni(110) ionty vodíku [13]. U typů vzorků, které jsou uspořádáním polykrystalické se tento efekt neprojevuje, protože neexistují globální preferované směry v takto uspořádané struktuře, které by umožnily channeling [13].

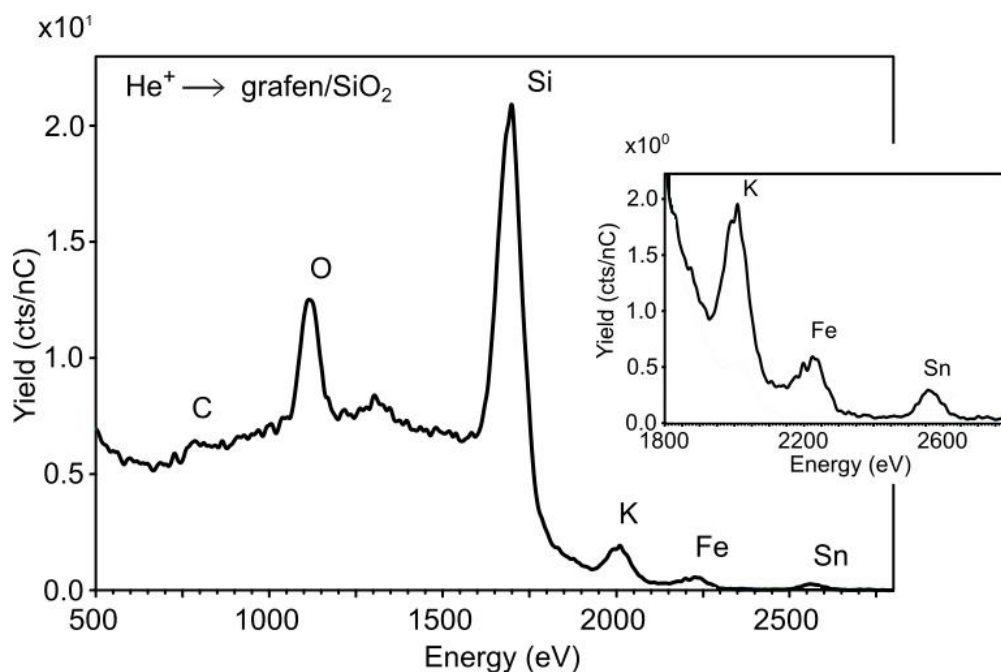
Posledním efektem, který zde bude zmíněn, související se shadowing efektem je **blocking** efekt. Jde o případ, kdy pohyb iontových projektilů, které byly rozptýleny na rozptylovém centru do různých směrů, je „blokován“ dalšími rozptylovými centry ve vzorku, na kterých jsou poté znovu rozptylovány [13]. Na obr. 1.8 lze vidět jednak shadowing efekt a jednak blocking efekt pohybu projektilů. V obrázku si lze všimnout rozdílných šířek paraboloidů po prvním a následujícím rozptylu, jenž jsou způsobeny energiovými ztrátami projektilu [12].

1.6 Aplikace

Metoda rozptylu nízkoenergiových iontů nachází díky své výjimečné povrchové citlivosti uplatnění v řadě aplikací. Jako příklad je zde uvedeno použití metody LEIS k analýze 2D struktur (například grafen). Pomocí metody LEIS lze stanovit poškození grafenové vrstvy či určit kontaminace obsažené v grafenové vrstvě viz obr. 1.9 [2].

Metodu LEIS lze s úspěchem použít také ke studiu nanočástic. Jako příklad je zde uvedena studie zlatých nanočástic týmem z nizozemského Eindhovenu pod vedením H. H. Brongersmy a J. Duponta [14].

Na závěr zmíníme studium fázových přeměn v magnetických strukturách železa-rhodia (FeRh) studované skupinou magnetiků na Ústavu fyzikálního inženýrství v Brně. Jedná se o přeměny z antiferomagnetické fáze do feromagnetické fáze této sloučeniny vlivem zahřívání. Metoda LEIS může být zde vhodným nástrojem pro stanovení procentuálního zastoupení rhodia v sloučenině FeRh, kdy oblast zájmu vědců je při poměru obou složek 48:52 (Rh:Fe) s odchylkou ± 1 %, což lze pomocí metody rozptylu nízkoenergiových iontů pro danou odchylku stanovit [15].



Obr. 1.9: Rozptyl iontů helia He^+ o energii 3 keV na grafenu umístěném na SiO_2 . Rozptylový úhel 145° . Ve výřezu grafu jsou identifikované kontaminace obsažené v grafenové vrstvě. Převzato a upraveno z [2].

2 TRBS

Program TRBS, vyvinutý rakouským vědcem Erichem Steinbauerem, je vhodným nástrojem pro simulace rozptylů iontových projektilů na povrchu vzorků. Ačkoliv program TRBS byl původně vyvinut pro studium rozptylů iontových projektilů o vyšších energiích (RBS), může být použit i pro rozptyl v nízkoenergiovém režimu, dojde-li k přechodu potenciálu z coulombovského $V_C(r)$ na stíněný potenciál $V(r)$. Tento program se používá výhradně pro simulace polykrystalických povrchů. Pro simulace systémů se symetrickým krystalografickým uspořádáním je tento program nevhodný. Program TRBS je založen na Monte Carlo metodě simulace systémů.

Obecně je Monte Carlo metoda (metody) určená k numerickému řešení fyzikálních a matematických problémů pomocí matematické statistiky (náhodné čísla, rozptyl, odhad atd.) [16].

Metoda Monte Carlo se začala rozvíjet již od druhé poloviny 19. století. Metoda však byla i při řešení jednoduchých úloh v té době příliš zdlouhavá, neboť k přesnějším odhadům bylo zapotřebí zpracovávat široký soubor dat. Plného rozmachu se tato metoda dočkala až s rozvojem počítačové techniky. Rozsah využití Monte Carlo metody v současné době je od klasických pravděpodobnostních úloh až po řešení složitějších úloh typu modelů pohybu částic, vzájemných srážek, stanovení účinného průřezu atd. [16].

2.1 Příklad - Rozptyl α -částic

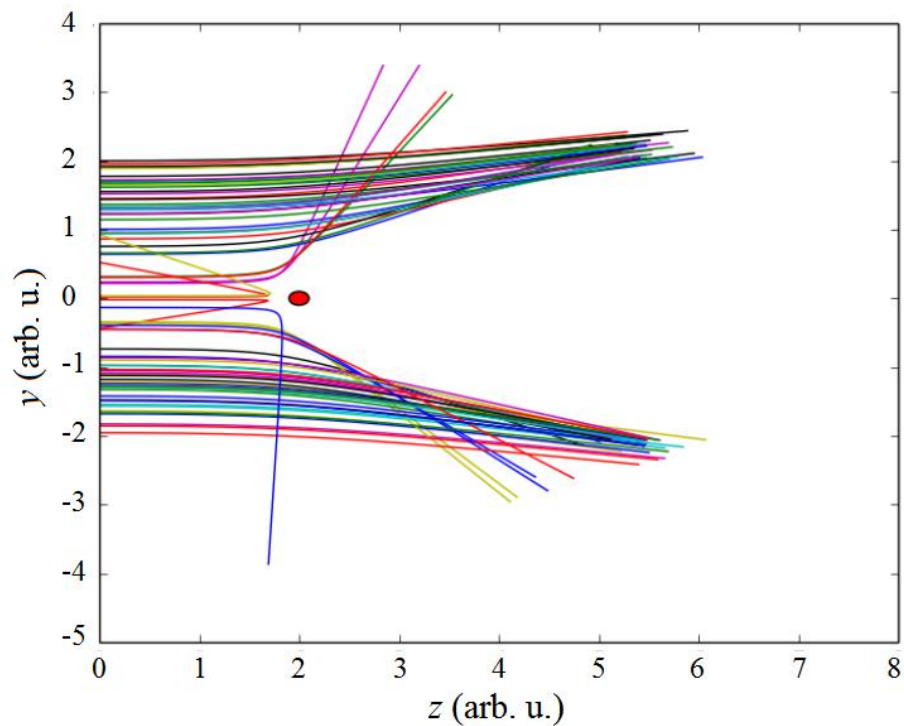
Jako příklad použití metody je zde uveden rozptyl α -částic na rozptylovém centru [17]. Předpokládá se pouze coulombovská interakce mezi α -částicí a rozptylovým centrem V_C a Gaussova distribuce energie emitovaných částic. Tedy [17]:

$$E \propto \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(x-E_0)^2}{2\sigma^2}}, \quad (2.1)$$

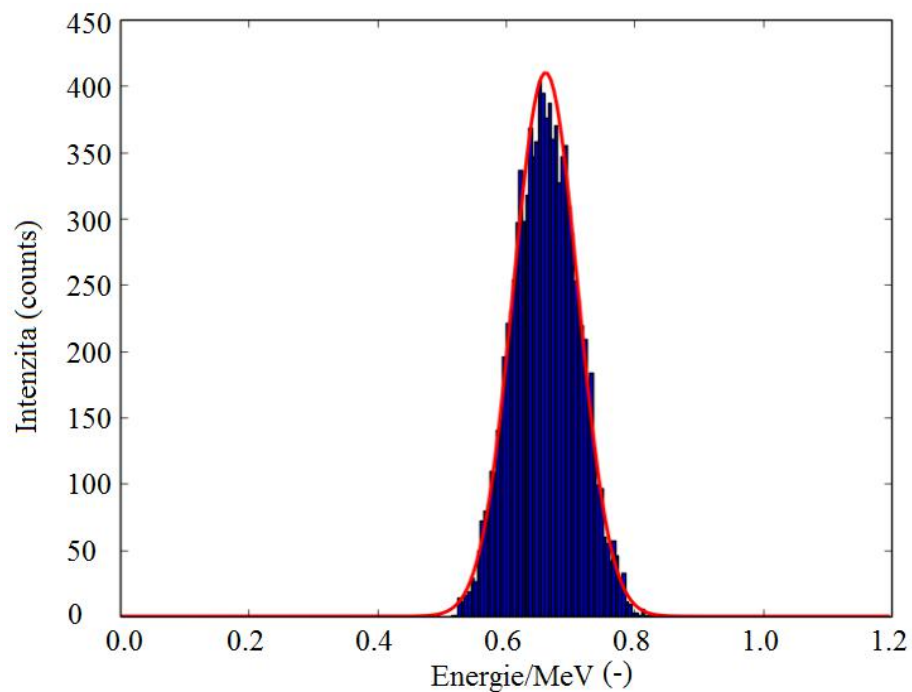
kde E_0 je střední hodnota energie a σ je směrodatná odchylka. Tvar diferenciálního účinného průřezu zohledňující coulombovskou interakci je viz rovnice (1.10).

Na obr. 2.1 lze pozorovat provedenou simulaci trajektorií α -částic na rozptylovém centru. Simulace odpovídá schématicky výsledkům experimentu získaným Ernestem Rutherfordem při rozptylu α -částic na zlaté fólii.

Pro soubor s vysokým počtem částic pak lze také pozorovat tvořící se Gaussovu distribuci energie emitovaných α -částic viz obr. 2.2.



Obr. 2.1: Simulace rozptylu α -částic na rozptylovém centru. Převzato a upraveno z [17].



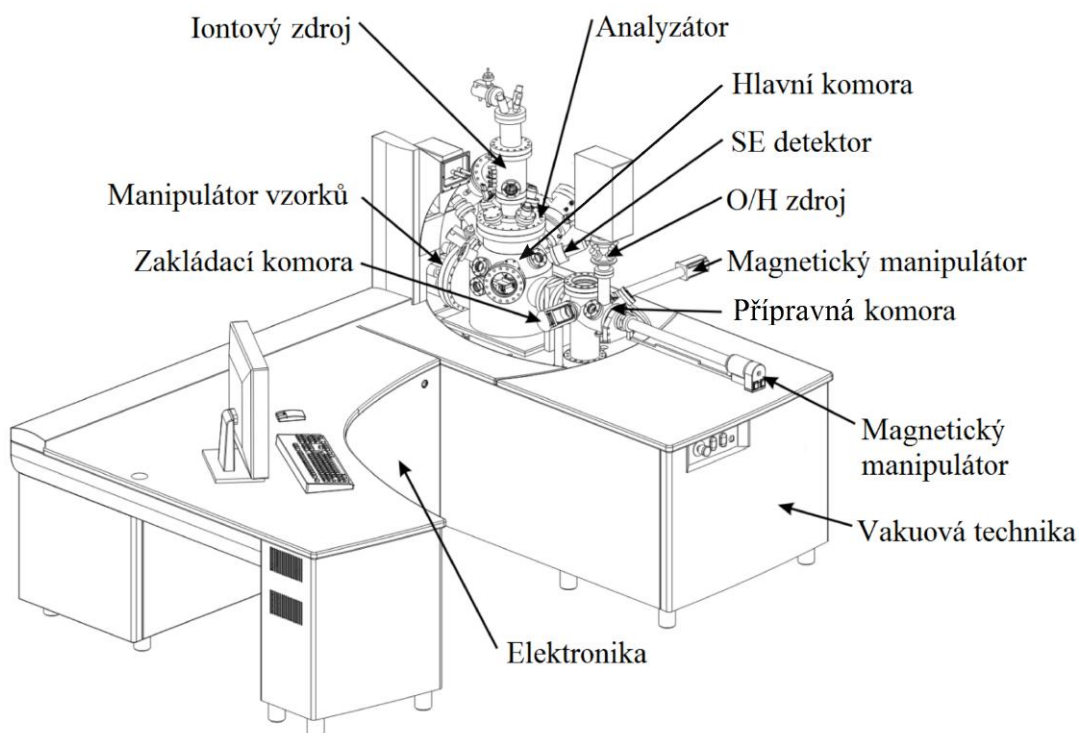
Obr. 2.2: Simulace Gaussovy distribuce emitovaných α -částic. Celkem modelováno 10000 částic. Převzato a upraveno z [17].

3 QTAC 100

Experimentální zařízení Qtac 100 od německé firmy ION-TOF je zařízení určené výhradně k analýze povrchů pomocí rozptylu nízkoenergiových iontů. Je umístěno ve Středoevropském technologickém institutu CEITEC v Brně.

3.1 Jednotlivé části

Na obr. 3.1 se nachází kompletní zařízení Qtac 100 umístěné ve Středoevropském technologickém institutu CEITEC v Brně⁵. Z vnějšku se vakuová aparatura skládá ze tří komor: základací, přípravné a hlavní komory. Iontový zdroj je umístěn svisle nad hlavní komorou spolu s detektorem a analyzátozem.

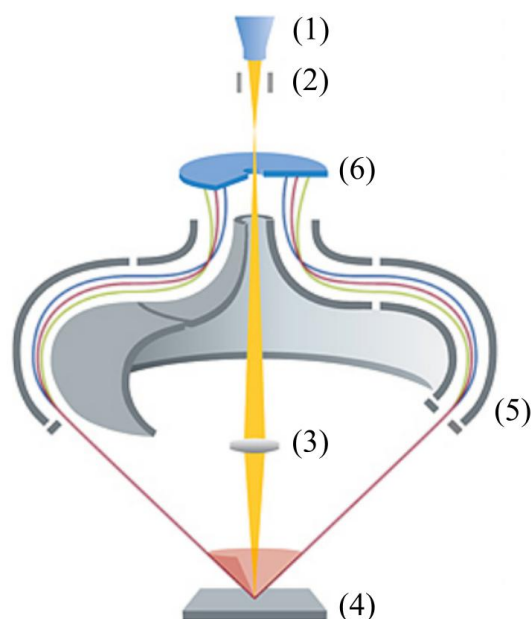


Obr. 3.1: Zařízení Qtac 100 umístěné v CEITECu v Brně. Převzato a upraveno z [18]

⁵Umístění elektroniky zařízení je v reálném případě z důvodu ušetření místa řešeno jinak než viz obr. 3.1. Nicméně konstrukční řešení hlavních částí je identické.

V hlavní komoře probíhá samotný rozptyl projektilů na vzorku. Je zde umístěn držák pro uchycení celkem osmi vzorků. Dvě pozice je možné využít k zahřívání vzorků (s použitím speciální paletky). Druhá komora slouží k vložení vzorků do hlavní komory a k přípravě vzorků pomocí atomárního a molekulárního kyslíku a vodíku. Poslední komora slouží k vkládání vzorků do zařízení.

3.2 Detekční systém



Obr. 3.2: **Schéma detekčního systému zařízení Qtac 100.** (1) Ionový zdroj, (2) pulzní systém, (3) fokusační optika, (4) vzorek, (5) toroidální analyzátor, (6) detektor. Převzato z [19].

Samotný detekční systém zařízení Qtac 100 je na obr. 3.2. Jako iontový zdroj se používá klasické wolframové vlákno. Ionový zdroj elektronově srážkového typu vytváří kontinuální nebo pulzní svazek, který prochází centrálním otvorem v detektoru a energiovém analyzátoru. Rozptýlené iontové projektily pak putují směrem k analyzátoru. Toroidální analyzátor propustí jen ty iontové projektily, pro které budou nastaveny vhodné potenciály na elektrodách. Z geometrie analyzátoru vyplývá, že pouze ionty (nikoliv však neutrální částice) mohou dosáhnout detektoru. Proto se takto uspořádaná sestava označuje ESA - LEIS (angl. zkratka Electrostatic Analyzer Low Energy Ion Scattering). Existuje ještě typ ToF - LEIS (angl. zkratka Time of Flight Low Energy Ion Scattering), který umožňuje analýzu nejenom zpětně odražených

iontových projektilů, ale i zpětně odražených neutralizovaných projektilů. Výhodou ToF - LEIS sestavy je získání celkového vyššího signálu či možnost získat ion fraction přímo z definičního vztahu viz rovnice (1.16). Nevýhodou je nutnost separace signálů a samotné rozměry zařízení.

3.3 Parametry zařízení

Zařízení Qtac 100 umožňuje měření pomocí iontových projektilů o energiích od 1 do 10 keV. Rozptylový úhel je 145° a je fixní. Zaostření vzorku pro předepsaný rozptylový úhel je prováděno pomocí laseru změnou vertikální polohy vzorku. Vzorky v komoře lze naklánět či rotovat vzhledem k iontovému zdroji. K měření proudů dopadajících projektilů se používá tzv. Faraday sonda (angl. Faraday Cup), tedy součástka umístěná v držáku paletky uvnitř hlavní komory, do níž skrze malý otvor v držáku mohou dopadat projektily a jsou zde zachyceny. Zachycením projektilů se tak získá informace o aktuálním proudu ve svazku. Rozsah užitého proudu je od 1 nA do stovek nA, s ohledem na velikost spotu a použití svazku iontů (analýza, odprašování). Standardní velikost spotu je $100 \mu\text{m}$ až jednotky mm. Pro kvantitativní analýzu povrchů je zásadní používat stabilizovaný a fokusovaný svazek.

Při analýze povrchů se zpravidla začíná rozptylem iontových projektilů helia o kinetické energii 3 keV. Vzniklé spektrum poskytuje cenný přehled o rozsahu hmotností atomů tvořících povrch. Těžší prvky, které nelze tímto svazkem spolehlivě identifikovat, konkretizuje analýza pomocí iontů neonu (typicky 5 keV), případně iontů argonu.

Svazek iontů neonu a argonu se využívá také k čištění povrchu, nebo k hloubkovému profilování. Typicky se používá energie 5 keV s proudem desítek nA pro případ odprašování ionty neonu. Pro ionty argonu určené k odprašování se používá energie 8 keV s proudem stovek nA.

4 EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

Následující sekce se zabývá diskuzí nad naměřenými daty a jejich zpracováním s využitím poznatků z teoretické části této práce. Všechna data byla naměřena ve Středoevropském technologickém institutu CEITEC v Brně. Postup vyhodnocování dat byl vytvořen ve spolupráci s profesorem P. Bauerem během studijního pobytu na univerzitě Johanna Keplera v Linzi.

4.1 Nastavení zařízení

Analýza čistých povrchů hraje důležitou roli při stanovení základních parametrů rozptylu, jako například ion fraction. Proto je velice důležité dosáhnout velmi nízkých základních a pracovních tlaků v hlavní komoře. V komerčně vyráběném zařízení Qtac 100 je doporučeno dodržovat limity tlaků dané výrobcem a předepsané postupy k jejich dosažení. Jednotlivé používané tlaky v hlavní komoře a iontovém zdroji jsou zapsány v následující tabulce:

Tab. 4.1: Používané rozsahy tlaků v hlavní komoře a iontovém zdroji pro správnou funkci zařízení Qtac 100.

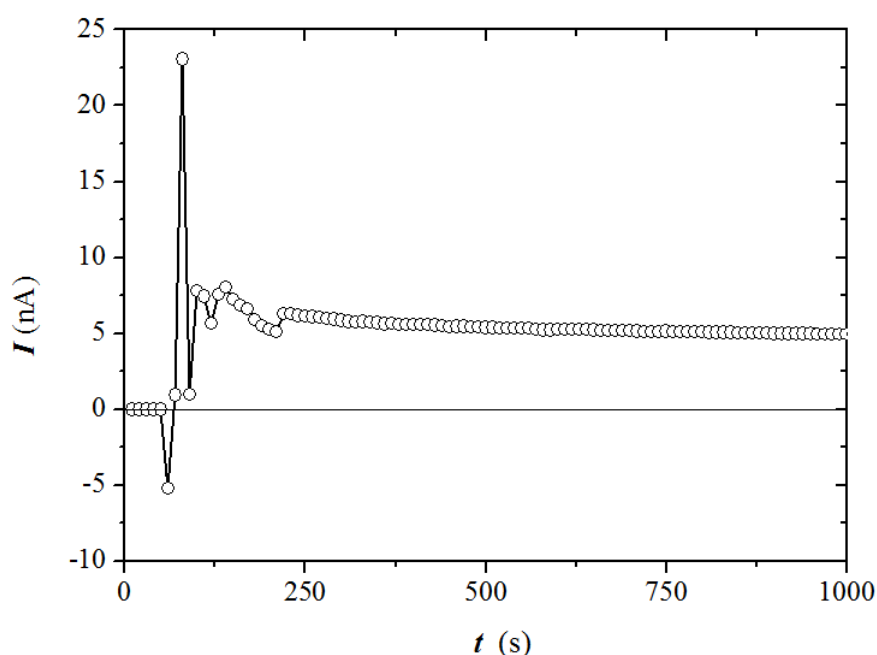
	základní tlak [mbar]	pracovní tlak [mbar]	iontový zdroj [mbar]
tlak	$10^{-11} - 10^{-10}$	$10^{-9} - 10^{-8}$	10^{-5}

Při tlacích výrazně vyšších než jsou ty uvedené v tab. 4.1 dochází k zanesení povrchu kontaminacemi (vodík, kyslík, uhlík atd.). Bylo rovněž pozorováno, že tlak v hlavní komoře se výrazně zhoršuje vlivem pohybu držáku paletky. Na tlak v hlavní komoře má také vliv zahřívání vzorku. Zahříváním vzorku se do komory dostávají uvolněné částice z povrchu, které výrazně zvyšují tlak v hlavní komoře a proto je potřeba korigovat míru emise částic pomocí regulace teploty vzhledem k tlaku uvnitř komory. V neposlední řadě je zapotřebí při manipulaci se vzorky a se zařízením dodržovat také zásady vakuové hygieny, tzn. používat rukavice při manipulaci se vzorky či vypékat komory po jejich zavzdušnění atd.

Další faktor, který je velmi důležitý pro správnou analýzu vzorků a tedy možnost reprodukovat výsledky, je stabilita iontového svazku a s tím související nastavení iontového zdroje a fokusační optiky mezi iontovým zdrojem a vzorkem. Všechna měřená spektra (intenzity signálů) jsou kalibrována na jednotku expozičního proudu ve

svazku (1 nC). To je velice výhodné pro pozdější porovnávání spekter a kvantifikaci výsledků. Spektra měřená svazkem s nestabilním proudem není možné věrohodně kvantifikovat.

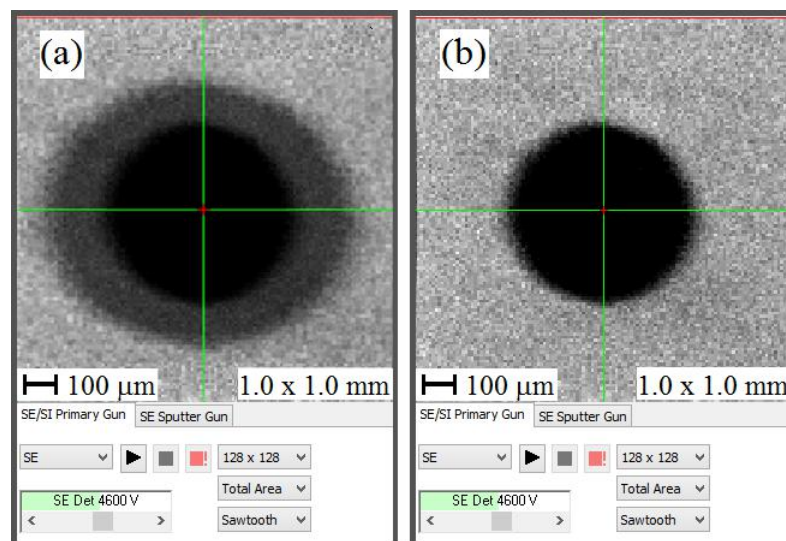
Stabilitu svazku lze rozdělit na krátkodobou a dlouhodobou. Krátkodobá stabilita je ovlivněna řadou vlivů. Obr. 4.1 zobrazuje průběh proudu ve svazku v závislosti na čase expozice. Data byla získána po instalaci nového vlákna v iontovém zdroji, kdy výrazné kolísání proudu je v časovém intervalu přibližně v rozsahu do 260 s. Následně na to dochází k pozvolnému poklesu proudu (viz oblast $t > 260$ s). Pro již zaběhlá vlákna se oblast výrazného kolísání proudu a tedy i potřebný čas pro získání stabilního svazku prodlužuje.



Obr. 4.1: Proud svazku I v závislosti na čase expozice t .

Dlouhodobá stabilita je definována především stavem vlákna v iontovém zdroji. Životnost vlákna je typicky v rozmezí 200 až 500 hodin a během ní se proud ve svazku pozvolna mění. Tato nestabilita zpravidla není vzhledem k době trvání jedné experimentální série podstatná.

Vlivem krátkodobé nestability svazku je doporučeno vyčkat 20 až 30 minut než se svazek ustálí a až poté je možné nastavit vhodné parametry fokusační optiky za cílem dosáhnout co nejvíce stabilního a symetrického svazku. Kvalita fokusace svazku se stanovuje pomocí měření sekundárních elektronů na definovaném místě (například v místě Faraday Cupu, nebo zlatá mřížka). Na obr. 4.2 lze vidět rozdíly v kvalitě spotu svazku pro nesprávně a správně nastavené parametry svazku.



Obr. 4.2: **Spot svazku.** (a) Nevhodně nastavený, (b) vhodně nastavený svazek. Kvalita dopadajícího svazku se stanoví pomocí měření sekundární elektronů na definované struktuře (zde Faraday Cup). Velikost zobrazené plochy je 1 x 1 mm.

4.2 Výběr vzorku

Jako vzorek pro naši analýzu, prostřednictvím metody LEIS, byla vybrána polykrystalická měděná fólie. Praktickým důvodem tohoto výběru je skutečnost, že polykrystalická měď slouží jako vhodná reference pro správné nastavení zařízení a pro stanovení instrumentálního faktoru ζ .

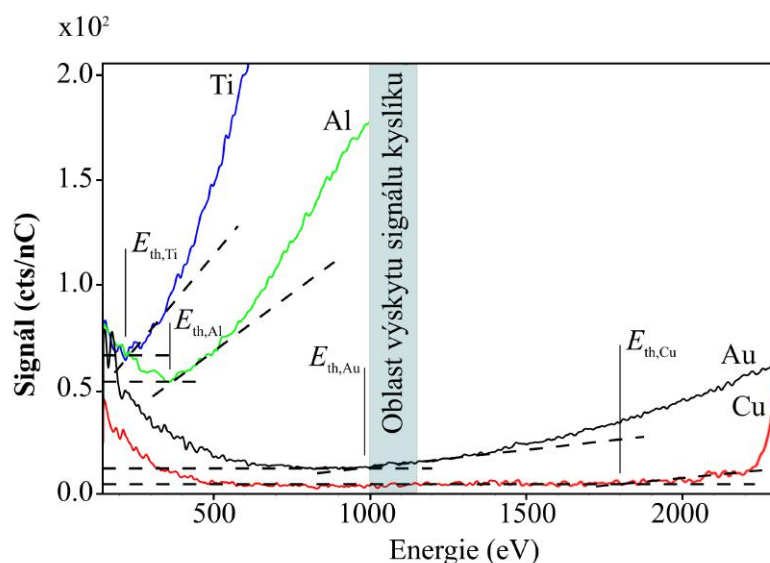
Druhým (fyzikálním) důvodem je vysoká hodnota energiového prahu E_{th} pro měď, umístěná relativně blízko binárnímu píku mědi mimo oblast výskytu píku kyslíku pro běžně používané primární energie svazku. Naším cílem je nemíchat reionizační signály od příslušných prvků.

Z odborné literatury je již známo, že energiový práh pro polykrystalickou měď je $E_{th} = 2100$ eV [9]. Obr. 4.3 zobrazuje naměřené spektra čistých povrchů několika vybraných prvků a porovnává je s hodnotami z článku [1] (data uvedena v tab. 4.2). Studované prvky byly (po řadě): titan, hliník, zlato a polykrystalická měď.

Tab. 4.2 potvrzuje, že vhodným kandidátem s ohledem na hodnotu energiového prahu a polohu signálu kyslíku (oblast 1000 až 1150 eV pro primární energii 3 keV) je skutečně polykrystalická měď.

4.3 Čištění

Protože metoda LEIS je povrchově citlivá metoda, je nutno v prvním kroku provést čištění měděné fólie. Obecně čištění, tj. odstranění kontaminace ze vzorku, lze provést



Obr. 4.3: **Energiový práh pro vybrané prvky.** Spektra měřena ionty helia o energii 3 keV. Vzorky čištěny kombinací atomárního kyslíku a argonového odprašování.

Tab. 4.2: **Energiové prahy pro vybrané prvky.** Porovnání hodnot dle [1] (metoda 2) a hodnot stanovených z naměřených spekter na zařízení Qtac 100.

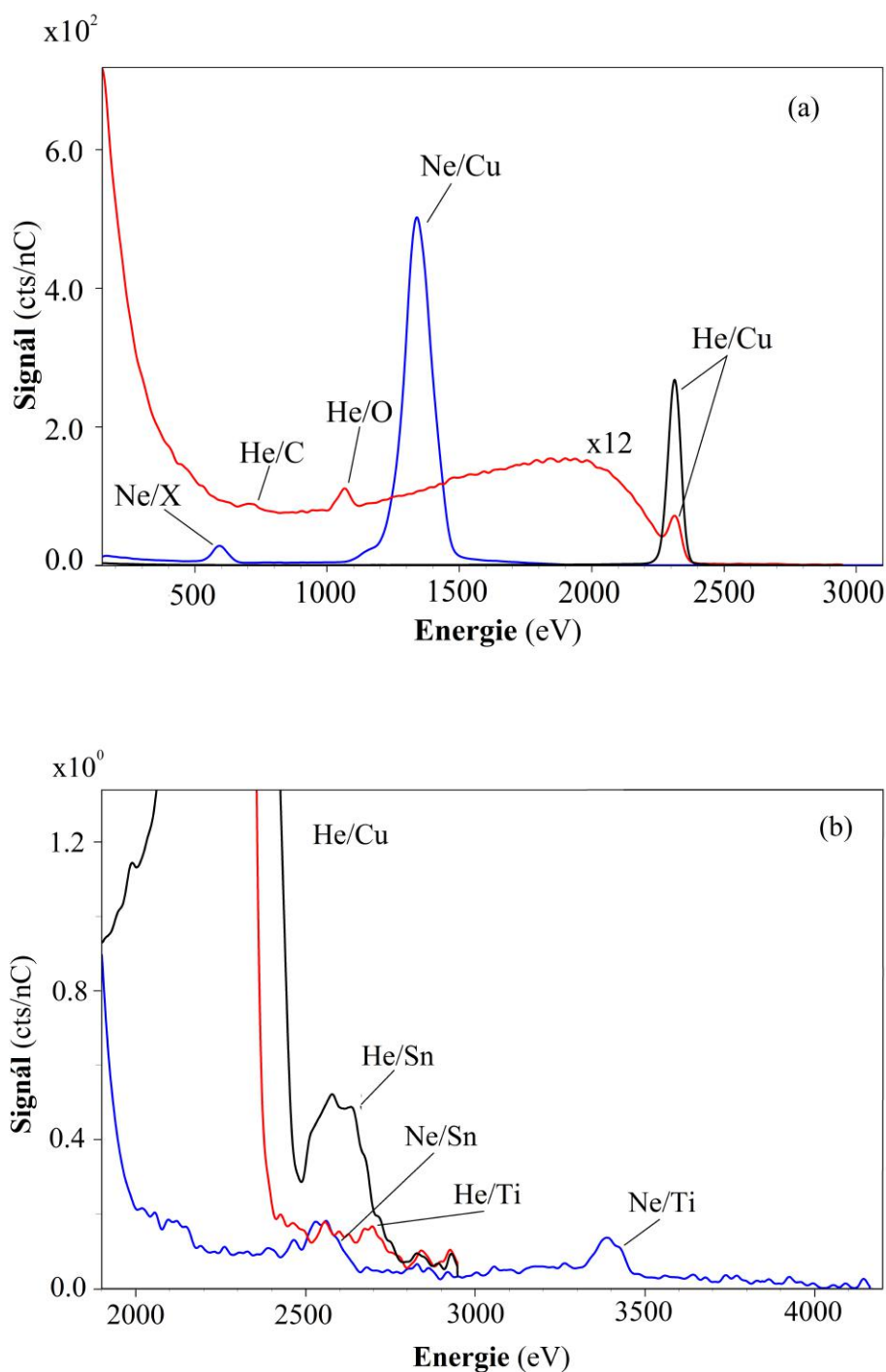
Prvek	Hodnoty E_{th} dle [1] [eV]	Stanovené hodnoty E_{th} [eV]
-		
titan	≤ 200	225
hliník	≤ 500	360
zlato	≤ 1000	980
měď	≥ 2000	1800

několika způsoby; od odprašování povrchu ionty argonu či neonu až po čištění atomárním kyslíkem. Tyto jednotlivé způsoby čištění byly vyzkoušeny a jejich vlivy na výsledný povrch budou ukázány níže. Často je vhodné použít kombinaci více způsobů čištění.

Lze předpokládat, že se na povrchu vzorku měděné fólie bude vyskytovat kontaminace v podobě uhlíku a kyslíku.

4.3.1 Odprašování povrchu vzorku

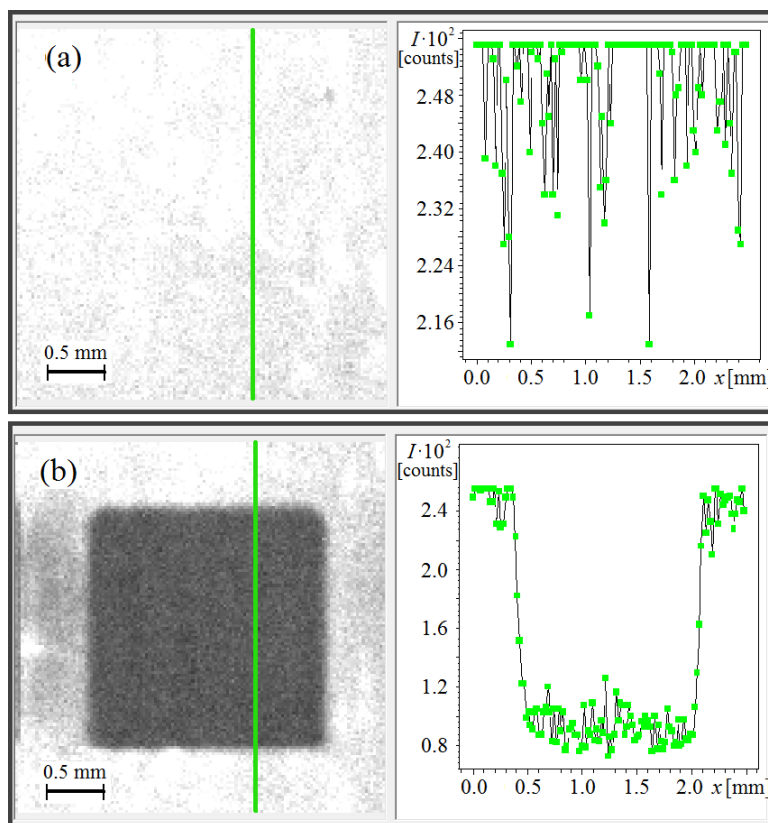
Odprašování je klasická metoda čištění, kdy se významnou dávkou projektilů odprašuje povrch vzorku. Typicky v případě čištění měděné fólie, která byla na začátku silně pokryta kontaminací v podobě uhlíku a kyslíku, lze dávkou $2,5 \cdot 10^{16} \text{ Ar}^+/\text{cm}^2$ iontů



Obr. 4.4: Spektra 3 keV He^+ a 5 keV Ne^+ rozptýlené na polykrystalické mědi před a po odprašování ionty argonu o energii 8 keV . Celková dávka odprašování byla $2,5 \cdot 10^{16} \text{ Ar}^+/\text{cm}^2$. Spektrum nečistěného povrchu mědi (červené spektrum (a)) je zvětšeno faktorem 12. Černé spektrum představuje čistou měď měřenou ionty helia, modré spektrum ionty neonu. Dolní graf (b) je zaměřen na kontaminace těžších prvků.

argonu o energii 8 keV výrazně redukovat kontaminace viz obr. 4.4(a). Takto vysoká dávka je dána tím, že uhlík se špatně odprašuje. Povrch se vlivem odprašování výrazně modifikuje, ale protože se nejedná o studium krystalické podoby mědi, není potřeba povrch rekonstruovat. Po odprašování byly zjištěny také kontaminace těžšími prvky viz obr. 4.4(b). Kontaminace cínu je typická pro používanou měděnou fólii a vzniká v průběhu výroby dané fólie. Kontaminace atomy titanu zjištěná ve spektrech s největší pravděpodobností souvisí s měřením vzorku titanu, který se nacházel na vedlejší pozici na manipulátoru v hlavní komoře. Tento vzorek titanu se měřil v předcházející části a byl za účelem získání čistého povrchu čištěn atomárním kyslíkem a následně odprašován ionty argonu. I po odprašování povrchu mědi zůstalo významné množství atomů titanu ve vzorku.

Obr. 4.5 zobrazuje povrch vzorku pomocí sekundárních elektronů před a po odprašování. Z obrázku lze získat profil kráteru vytvořeného iontovými projektily argonu. Odprašená plocha kráteru je $1,5 \times 1,5 \text{ mm}^2$.

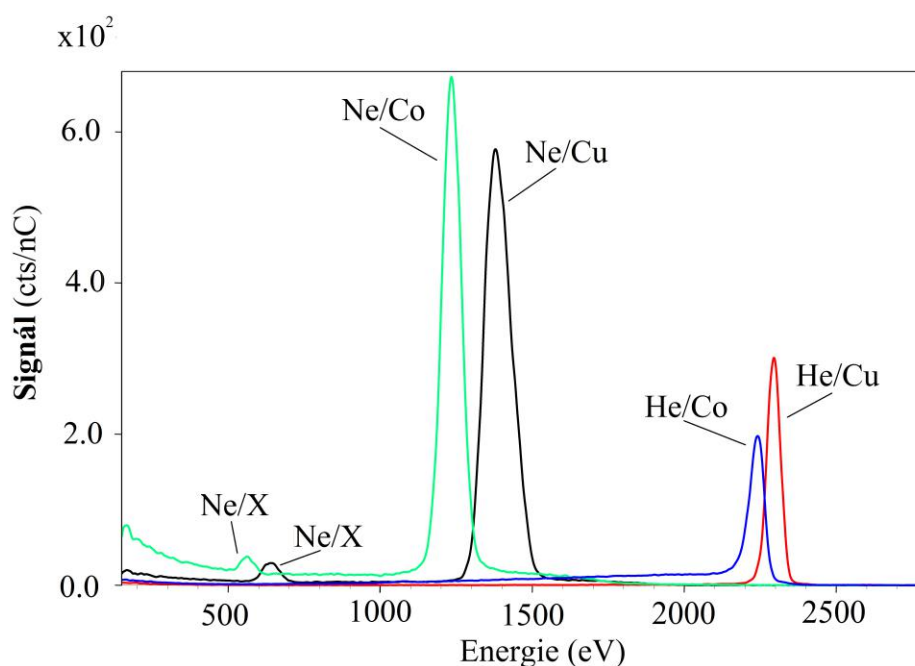


Obr. 4.5: **Zobrazení povrchu sekundárními elektrony.** (a) Před odprašováním, (b) po odprašování iontovými projektily argonu. Odprašená plocha je $1,5 \times 1,5 \text{ mm}^2$. Vpravo je zobrazena intenzita detekovaných elektronů (v countech) v místě zelených linií.

4.3.2 Výskyt „parazitního píku“

Pík nacházející se v oblasti kolem 600 eV (viz obr. 4.4(a)) se zdá být „normálním“ píkem v porovnání s jinými píky obsaženými ve spektru. Vyskytuje se však pouze při analýze povrchu iontovými projektily neonu, popř. argonu, nemá však paralelu při analýze iontovými projektily helia. Proto nelze tvrdit, že tento pík odpovídá neznámému prvku obsaženému na povrchu. Tento pík byl pracovním názvem nazván parazitní pík.

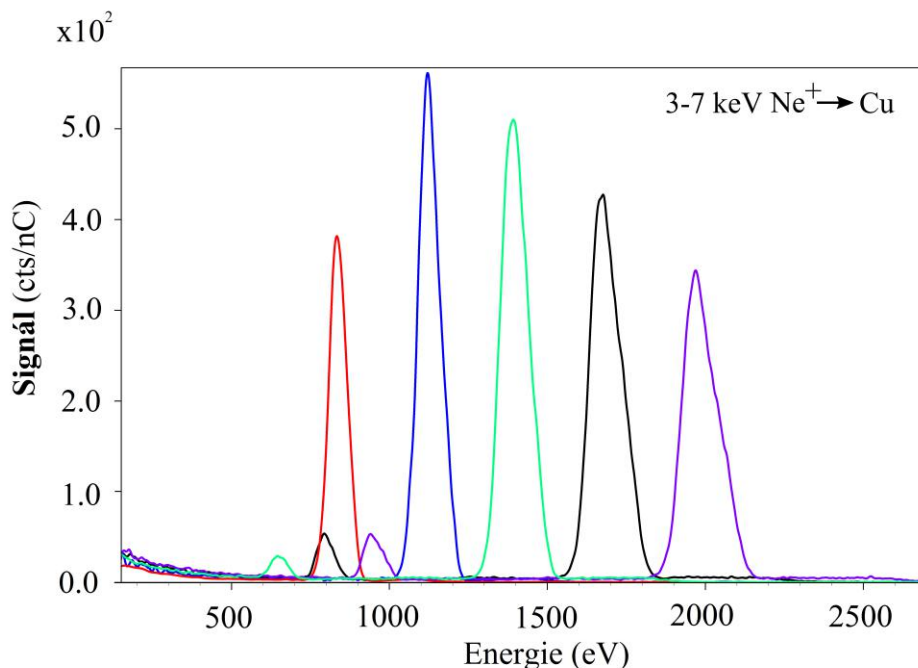
Na existenci tohoto parazitního píku nemá vliv rovněž druh vzorku, což je doloženo na obr. 4.6 spektry polykrystalické měděné a kobaltové fólie. Obě tyto fólie byly čištěny ionty argonu o energii 8 keV celkovou dávkou $7,5 \cdot 10^{16} \text{ Ar}^+/\text{cm}^2$. V obou spektrech byly detekovány parazitní píky. Důležitým faktem je, že poloha těchto píků je přibližně v polovině energie píku odpovídajícího signálům od mědi, popř. kobaltu (binární píky).



Obr. 4.6: Spektra iontů 3 keV He^+ a 5 keV Ne^+ rozptýlených na čistých površích měděné a kobaltové fólie. V energiích odpovídajících polovině energie binárních píků (v případě analýzy neonem) byly detekovány parazitní píky.

Při analýze ionty neonu o různých počátečních energiích (3 až 7 keV) bylo zjištěno, že tvar parazitního píku koresponduje s tvarem píku odpovídající binárnímu píku mědi viz obr. 4.7. Tuto korespondenci lze dobře pozorovat na tvaru parazitního a binárního píku pro energii 7 keV. Kombinace iontů neonu s atomy mědi o takto

vysoké energii již nevytváří zcela typický tvar píku, ale obsahuje již i výraznější vliv izotopů mědi při interakci s ionty neonu.



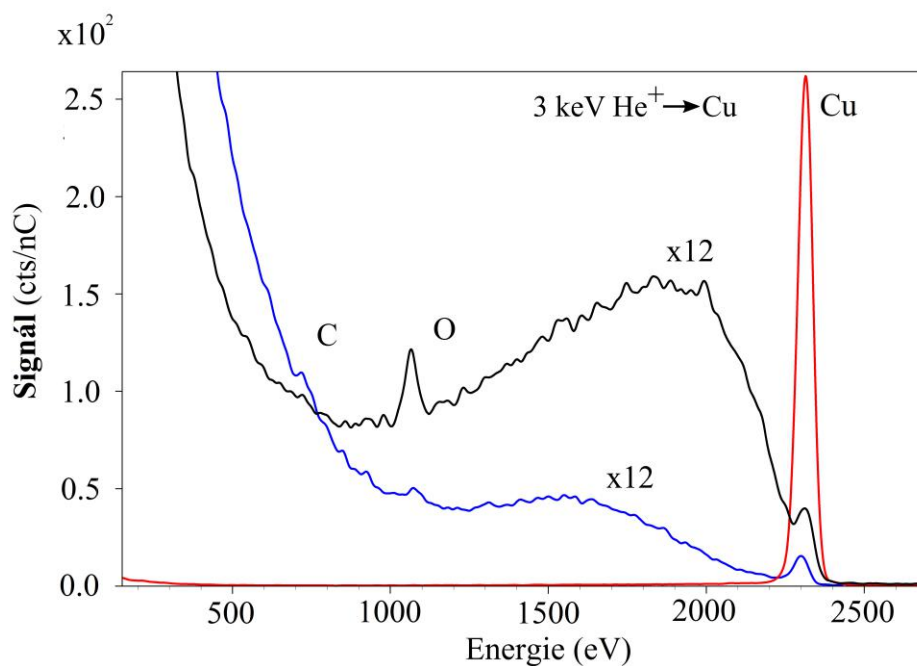
Obr. 4.7: Spektra iontů neonu o energii v rozsahu 3 až 7 keV rozptýlených na polykrystalické mědi. Porovnání tvaru binárního píku mědi a parazitního píku vzhledem k různým počátečním energiím svazku iontů.

Protože dochází ke korespondenci tvaru mezi píkem mědi (binární pík) a parazitním píkem, docházíme k závěru, že na vzniku píku se podílí spíše analyzátor a detektor sestavy, než pouze samotný povrch. Bylo zjištěno, že tento parazitní pík vzniká v důsledku dvojnásobné ionizace iontů neonu při rozptylu na povrchu vzorku. Analyzátozem jsou pak tyto ionty identifikovány v přibližně poloviční energii oproti binárnímu píku viz obr. 4.7. Tato dvojnásobná ionizace se uskutečňuje pouze pro ionty neonu, popř. argonu. Signál ve spektrech se poté objeví v polovině energie hlavního píku. Stále však odpovídá rozptylu iontů neonu na atomech mědi a proto při kvantitativní analýze takových spekter je nutno integrály pod parazitním píkem a binárním píkem sečíst.

Tato část zabývající se parazitním píkem ve spektrech není zcela důležitá pro další analýzu, nicméně ukazuje, že interpretace signálů ve spektrech může být komplikovanější a je nutno dávat pozor i na takové případy jako je dvojnásobná ionizace.

4.3.3 Čištění atomárním kyslíkem

Čištění atomárním kyslíkem v kombinaci s nízkou dávkou odprašování ionty argonu je pravděpodobně nejlepší způsob čištění povrchu. Atomární kyslík je velmi reaktivní s povrchem a okamžitě se naváže na atomy uhlíku do podoby CO_2 a uvolní se z povrchu. Na následné odprašování kyslíku poté již není potřeba vysoká dávka iontů argonu jako pro čištění pouhým odprašováním. Na obr. 4.8 lze pozorovat takto provedené čištění; 5 minut čištění atomárním kyslíkem a následně odprašování ionty argonu o energii 8 keV relativně nízkou dávkou $2 \cdot 10^{16} \text{ Ar}^+/\text{cm}^2$. Spektra nečištěného (modré spektrum) a oxidovaného (černé spektrum) povrchu byla analyzována ionty helia o energii 3 keV a pro větší názornost kontaminací uhlíkem a kyslíkem byla násobena faktorem 12. Červené spektrum představuje finální verzi čistého vzorku mědi.



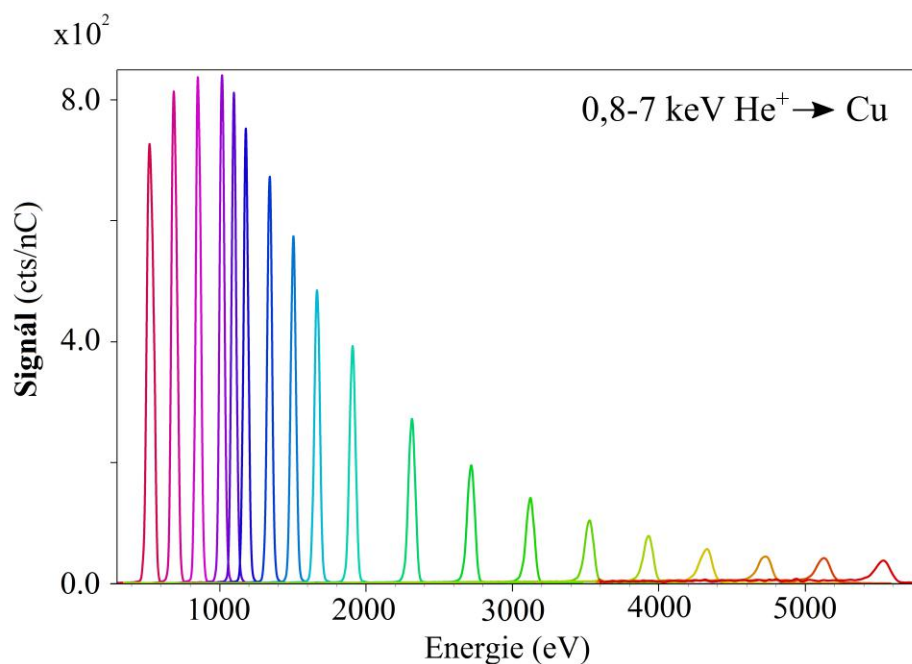
Obr. 4.8: **Čištění atomárním kyslíkem.** Spektra 3 keV He^+ rozptýlených na polykrystalické mědi před a po oxidaci atomárním kyslíkem a následným odprašováním ionty argonu o energii 8 keV a dávce $2 \cdot 10^{16} \text{ Ar}^+/\text{cm}^2$. Červené spektrum představuje finální analýzu čisté mědi. Spektrum nečištěného (modré spektrum) a oxidovaného (černé spektrum) povrchu bylo násobeno faktorem 12.

Pro přípravu povrchu vzorků s ohledem na možné způsoby čištění byla zvolena jako nejlepší varianta kombinace čištění atomárním kyslíkem a odprašování ionty

argonu. Tato varianta je obzvlášť vhodná pro čištění nových vzorků. Jako udržovací čištění však stačí použít pouze čištění pomocí odprašování ionty argonu nebo neonu.

4.4 Ion fraction čisté mědi a instrumentální faktor

Poté, co byl vzorek mědi očištěn atomárním kyslíkem a následným odprašením ionty argonu od kontaminací především v podobě uhlíku a kyslíku, bylo provedeno měření ion fraction. Měření ion fraction vychází z analýzy heliových projektilů o různých energiích rozptýlených na povrchu očištěné měděné fólie. V tomto experimentu bylo možné využít rozsahu energií daných zařízením Qtac 100 od 0,8 do 7 keV. Na obr. 4.9 lze vidět vývoj jednotlivých spekter pro vybrané energie.

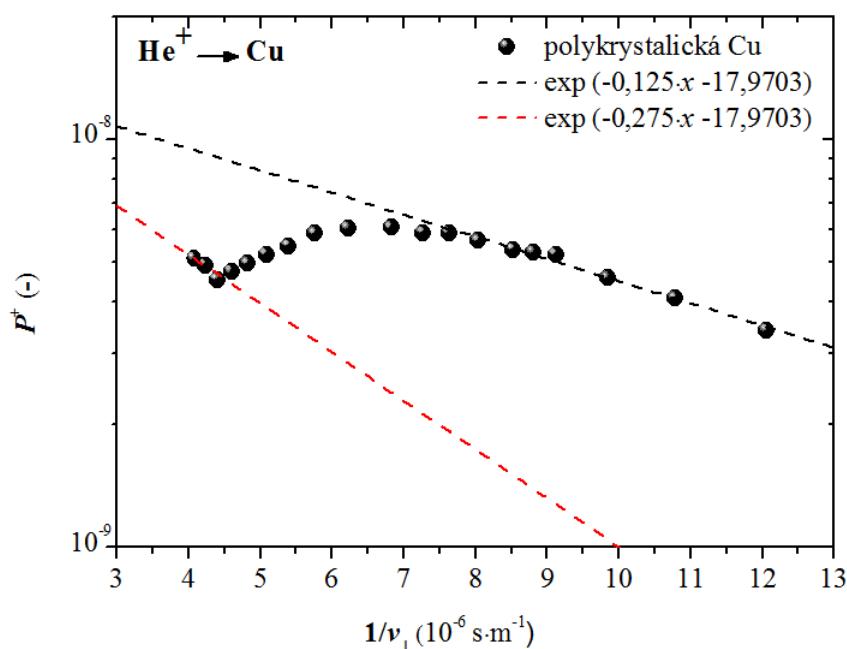


Obr. 4.9: Spektra iontů helia o různých počátečních energiích v rozsahu 0,8 až 7 keV rozptýlených na polykrystalické mědi. Dávka heliových projektilů určená k měření byla pro jednotlivé spektra $3 \cdot 10^{14}$ He⁺/cm².

Po proměření daných energií bylo provedeno vyhodnocení odpovídajících binárních píků mědi. Vývoj spekter pro jednotlivé energie měl očekávaný průběh. S rostoucí energií se množství rozptýlených iontů postupně snižovalo. K vyhodnocení integrálu binárních píků byl použit program v rámci softwaru zařízení Qtac 100. Tím bylo zaručeno, že integrály binárních píků budou vyhodnocovány stejným způsobem.

Protože zařízení Qtac 100 je typ ESA-LEIS (viz kapitola 3.: Qtac 100), stanovení ion fraction vychází ze základní rovnice (1.6), popřípadě z již upraveného tvaru rovnice (1.17). Atomová koncentrace polykrystalické mědi byla stanovena na $1,76 \cdot 10^{15}$ atomů/cm². Kinematický faktor pro rozptyl projektilů helia na měděné fólii s rozptylovým úhlem 145° byl pomocí LEIS kalkulátoru stanoven na $k = 0,79$. Použitý software byl vyvinut na Technické univerzitě ve Vídni pro výpočet vybraných parametrů rozptylu iontů a je k dispozici na webu příslušného ústavu [20]. Diferenciální účinný průřez byl určen taktéž pomocí LEIS kalkulátoru pro jednotlivé proměřované energie.

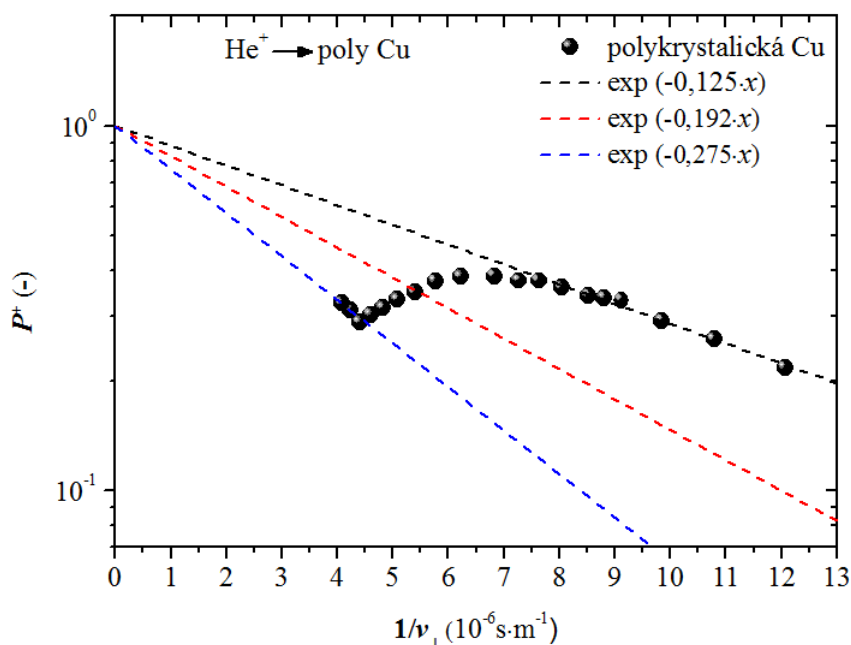
V této první fázi byl nejprve zanedbán vliv tzv. instrumentálního faktoru ζ . Pomocí výše uvedených parametrů s naměřenými hodnotami integrálů pro jednotlivé energie byla vytvořena závislost ion fraction P^+ na převrácené hodnotě kolmé složky rychlosti v_{\perp} (viz obr. 4.10). Závislost má očekávaný průběh. Pro hodnoty odpovídající nižším primárním energiím než 2100 eV (teoretická hodnota energiového prahu) je závislost lineární. Směrnice lineární závislosti, neboli charakteristická rychlost v_c , v tomto nízkoenergiovém režimu byla určena jako $1,25 \cdot 10^5$ m/s. Pro hodnoty odpovídající vyšším primárním energiím se při výměnách náboje již uplatňují krom AN procesů také CIR a CIN procesy a dochází k odklonu ion fraction od lineární závislosti.



Obr. 4.10: Ion fraction P^+ polykrystalické mědi před modifikací instrumentálním faktorem ζ . Graf byl doplněn o lineární fit pro nízkoenergiový režim (do 2100 eV) a pro vysokoenergiový režim (od 6000 eV).

Zajímavý vývoj nastává při energii v rozsahu 6 keV a vyšší, kdy opět data mají zřejmou lineární tendenci. Vývoj ion fraction v tomto vysokoenergiovém režimu byl očekáván a byl způsoben výměnami náboje mezi projektilem a rozptylovým centrem na nižších energetických hladinách oproti předcházejícím procesům. Směrnice této lineární závislosti je přibližně dvojnásobná (konkrétně $2,75 \cdot 10^5$ m/s) oproti směrnici pro nízkoenergiový režim. V dalších částech se již zaměříme pouze na vývoj směrnice v nízkoenergiovém režimu (do 2100 eV).

V takto komponovaném grafu závislosti ion fraction P^+ na převrácené hodnotě kolmé složky rychlosti v_{\perp} dále obecně platí, že pro maximální možnou hodnotu počáteční energie projektilu ($E_i \rightarrow \infty$, tj. $\frac{1}{v_{\perp}} \rightarrow 0$) je ion fraction P^+ pro všechny prvky rovno 1.



Obr. 4.11: Ion fraction P^+ polykrystalické mědi s již uvažovaným instrumentální faktorem ζ . Graf byl doplněn o lineární fit pro nízkoenergiový režim (do 2100 eV) a pro vysokoenergiový režim (od 6000 eV). Navíc byla vložena i teoretická závislost pro obecně používanou hodnotu charakteristické rychlosti $v_c = 1,92 \cdot 10^5$ m/s [10].

Ze znalosti právě jednoho bodu v grafu ($P^+ = 1$) a směrnice (charakteristická rychlost v_c) lze pracovaná data v grafu „posunout“ tak, aby protínala horizontální osu v grafu v bodě pro P^+ v rámci změny ve výpočtu P^+ . To znamená podělit stávající ion fraction hodnotou $\exp(-17,9703)$, která byla nalezena proložením dat v nízkoenergiovém režimu (do 2100 eV) viz obr. 4.10. Toto posunutí odpovídá právě

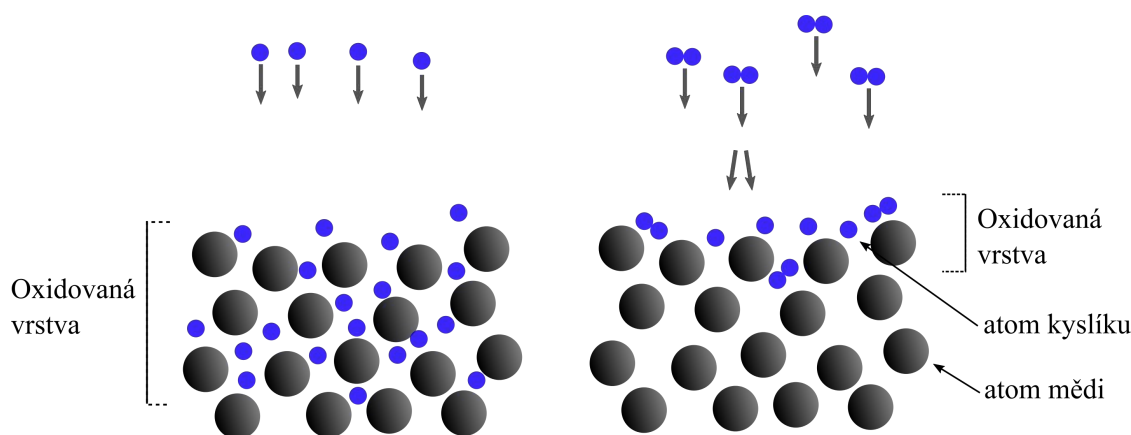
instrumentálnímu faktoru ζ pro zařízení Qtac 100. Hodnota instrumentálního faktoru byla takto stanovena na:

$$\zeta = \exp(-17,9703) = 1,57 \cdot 10^{-8}. \quad (4.1)$$

Obr. 4.11 již reflektuje započtení vlivu instrumentálního faktoru ζ na ion fraction. Do grafu byla taktéž přidána i teoretická lineární závislost odpovídající charakteristické rychlosti $v_c = 1,92 \cdot 10^5$ m/s [10], která se nejčastěji vyskytuje v člancích věnovaných stanovení ion fraction P^+ projektilů helia rozptýlených na polykrystalické mědi. V současné době neznáme přesný důvod, který vede k poklesu námi stanovené směrnice na hodnotu $v_c = 1,25 \cdot 10^5$ m/s.

4.5 Oxidace atomárním vs. molekulárním kyslíkem

V následující části budou diskutovány dvě možnosti oxidace čistých povrchů. Obr. 4.12 znázorňuje rozdílný proces oxidace atomárním a molekulárním kyslíkem.



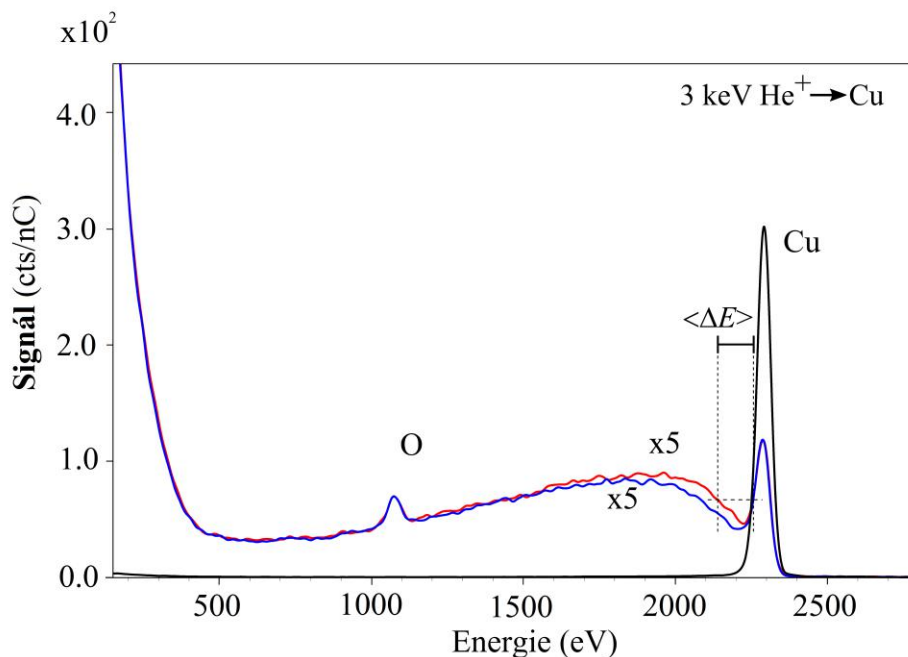
Obr. 4.12: Schéma expozice měděné fólie atomárním (vlevo) a molekulárním kyslíkem (vpravo).

První možností je oxidace pomocí atomárního kyslíku, který je primárně určen pro čištění povrchů. Zařízení Qtac 100 obsahuje plasmatický zdroj, který z molekulárního kyslíku vytváří atomární kyslík, který je velmi reaktivní a který na povrchu váže kontaminace (především uhlík za vzniku CO_2), které se následně z povrchu uvolní. Atomární kyslík nicméně oxiduje do velké hloubky v závislosti na expozičním čase za vzniku oxidované vrstvy viz obr. 4.12(vlevo).

Druhou možností je oxidace molekulárním kyslíkem přímo z kyslíkové nádoby. Tento proces je méně reaktivní. Molekula kyslíku může difundovat do vzorku mědi, ale vlivem větších rozměrů samotné molekuly oproti jednotlivým atomům kyslíku je

hloubka penetrace výrazně menší a tím i proces oxidace do hloubky vzorku výrazně pomalejší oproti první variantě. Lze tedy konstatovat, že při vhodně nastaveném čase expozice molekulárním kyslíkem se oxidovaná vrstva tvoří pouze na nejsvrchnější vrstvě vzorku.

4.5.1 Expozice atomárním kyslíkem



Obr. 4.13: **Expozice měděné fólie atomárním kyslíkem.** Černé spektrum odpovídá čisté měděné fólii. Červené spektrum je oxidovaný povrch po 10 minutách. Modré spektrum je pak oxidovaný povrch po 20 minutách. Obě oxidované spektra byly vynásobeny faktorem 5.

Na obr. 4.13 lze vidět vývoj spekter před a po oxidaci atomárním kyslíkem. Signály (spektra) obou expozic jsou vynásobeny faktorem 5. Expozice atomárním kyslíkem je velmi rychlý proces. V obr. 4.13 lze vidět, že při 10ti minutové expozici dochází ve spektru k vytvoření „propadliny“ v rozmezí energií 2000 až 2300 eV. Tento jev indikuje tvorbu oxidované vrstvy mědi. Ze spektra je možné odhadnout tloušťku takto vytvořené vrstvy pomocí znalosti brzdných účinků S pro kombinaci projektilu a vzorku. Experimentálně stanovená střední hodnota poklesu (změna) energie $\langle \Delta E \rangle$ projektilu v průběhu interakce s povrchem je rovna integraci brzdných účinků S (kladné číslo) po dráze x , kterou projektil projde [21].

Střední hodnota změny energie $\langle \Delta E \rangle$ je tedy rovna:

$$\langle \Delta E \rangle = \int_x -S(E, x) dx. \quad (4.2)$$

Pro kombinaci helium-měď při energii projektilu 3 keV je hodnota brzdného účinku stanovena na 29,5 eV/nm. Tato hodnota byla získána ze souboru konfiguračních dat pro TRBS simulace helium-měď. K brzdným účinkům dochází v LEIS režimu vlivem elektronového plynu. Pro odhad tloušťky vrstvy využijeme aproximace, že interakční dráha x představuje součet drah dopadajícího projektilu a projektilu opouštějícího povrch s přihlédnutím na rozptylový úhel $\theta = 145^\circ$. Tloušťku oxidované vrstvy mědi d_{oxid} při této aproximaci lze stanovit dle vztahu:

$$d_{\text{oxid}} = \frac{x}{1 - \frac{1}{\cos \theta}} = x \cdot \frac{\cos \theta}{\cos \theta - 1}. \quad (4.3)$$

Na obr. 4.13 je znázorněno odečtení $\langle \Delta E \rangle$ pro jedno spektrum. Po další expozici (celkem 20 minut) vzorku atomárním kyslíkem byl očekáván další růst oxidované vrstvy mědi, což koresponduje s naměřeným spektrem (modré spektrum).

Tab. 4.3: **Odhadovaná tloušťka oxidované vrstvy d_{oxid} po expozici atomárním kyslíkem pro různé časy expozice.**

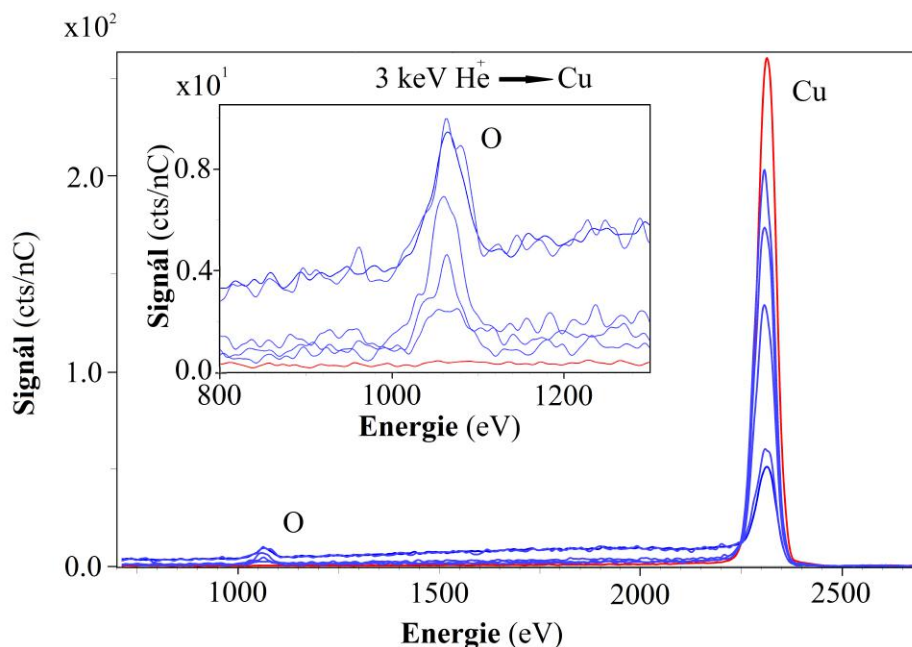
Expozice [min]	$\langle \Delta E \rangle$ [eV]	Odhad d_{oxid} dle vztahu 4.3 [nm]
10	116	1,8
20	152	2,3

4.5.2 Expozice molekulárním kyslíkem

Expozice molekulárním kyslíkem je oproti expozici atomárním kyslíkem méně reaktivní a tím je oxidace výrazně pomalejší. Oxidovaná vrstva mědi je lokalizovaná na povrchu, což bude potvrzeno naměřenými spektry a jejich porovnáním s výslednými spektry pro expozici atomárním kyslíkem.

Naším cílem bylo měřit vývoj oxidace. Z důvodu nemožnosti měřit spektra v průběhu expozice (expozice se uskutečňuje v preparační komoře) byl zvolen jiný postup. Nejprve byla provedena silná oxidace molekulárním kyslíkem a následně byl povrch odprašován pomocí iontových projektilů helia o energii 3 keV. Expozice kyslíkem probíhala přibližně 25 minut. Poté bylo načteno celkem 600 spekter. Dávka pro jednotlivé spektra byla $2 \cdot 10^{14} \text{ He}^+/\text{cm}^2$. Obr. 4.14 zobrazuje pouze několik vybraných spekter pro ukázkou změn signálů binárních píků mědi a kyslíku při

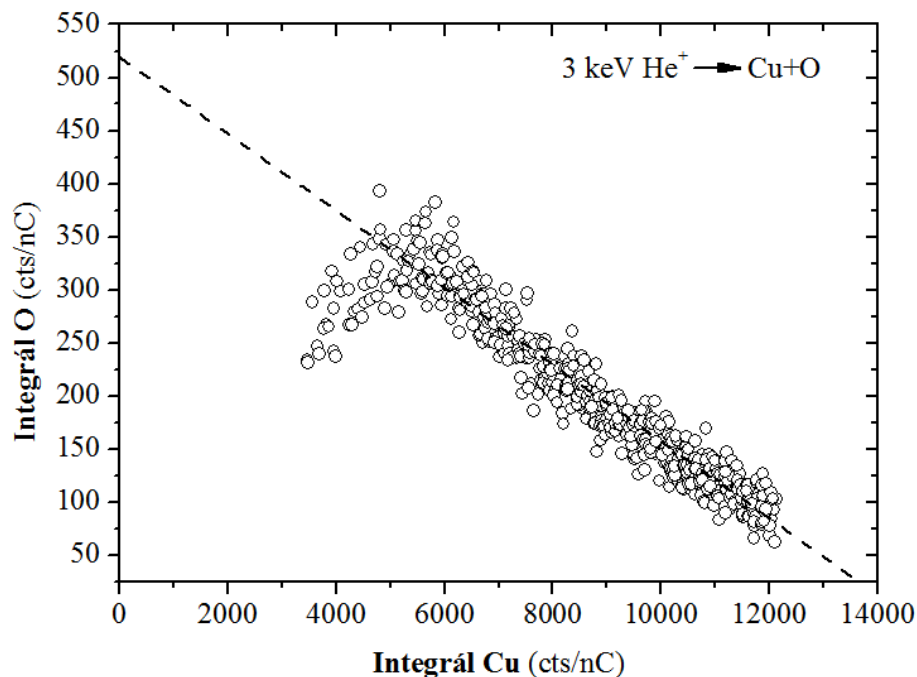
odprašování. Jako reference slouží spektrum pro čistý vzorek mědi bez přítomnosti kyslíku (červené spektrum).



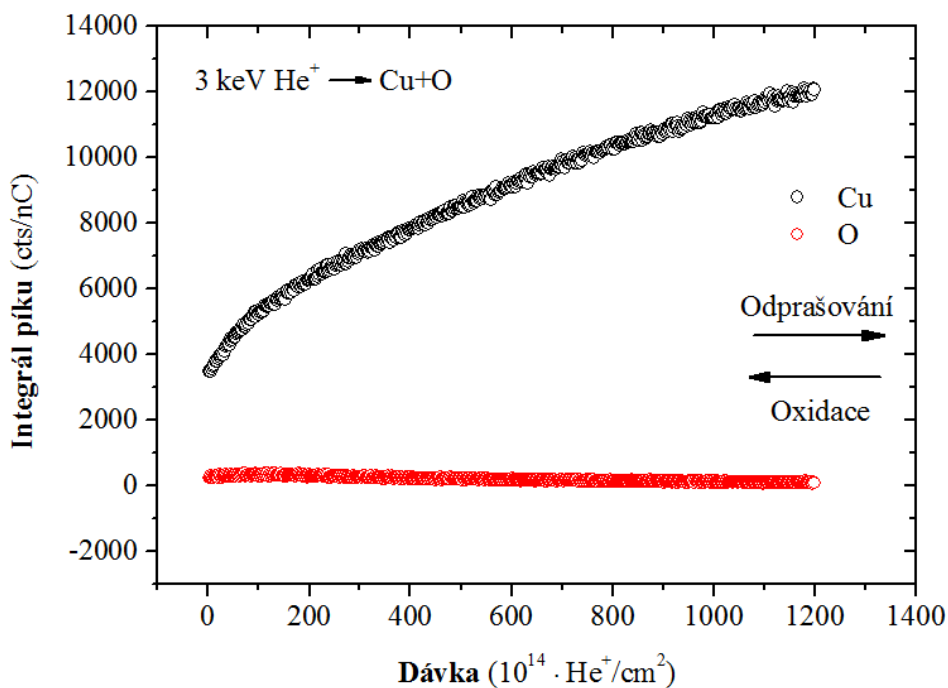
Obr. 4.14: **Expozice měděné fólie molekulárním kyslíkem.** Z důvodu přehlednosti byla vybráno pouze několik spekter z celkového počtu 600. Jednotlivé spektra byla vytvořena projektily helia o energii 3 keV dávkou $2 \cdot 10^{14} \text{ He}^+/\text{cm}^2$.

Spektra (viz obr. 4.14) mají rozdílný průběh oproti spektrům měřeními po expozici atomárním kyslíkem. Povrch vzorku je sice oxidován, ale oxiduje pouze v tenké vrstvě (vzhledem k době expozice), což je doloženo absencí „propadliny“ v energiích pod binárním píkem mědi. Při vyhodnocení integrálů jednotlivých binárních píků bylo možné navzájem porovnat vývoj kyslíkového píku a měděného píku. Tento vývoj je zobrazen na obr. 4.15. Průběh závislosti (lineární tendence) indikuje absenci matrix efektu.

Při analýze expozice kyslíku na čisté kovy je vhodné zobrazovat také závislost velikosti binárních píků kyslíku a kovu vůči expozici. V našem případě byla zobrazena závislost velikosti binárních píků mědi a kyslíku vzhledem k dávce odprašování. Jedná se o reverzní vývoj vůči expozici kyslíku. Obr. 4.16 znázorňuje naměřená data z průběžného odprašování. Data byla extrahována z celkem 600 spekter pro každý binární pík. S rostoucí dávkou iontových projektilů (jednotlivý krok $2 \cdot 10^{14} \text{ He}^+/\text{cm}^2$) se signál kyslíku postupně snižuje, signál mědi naopak roste.



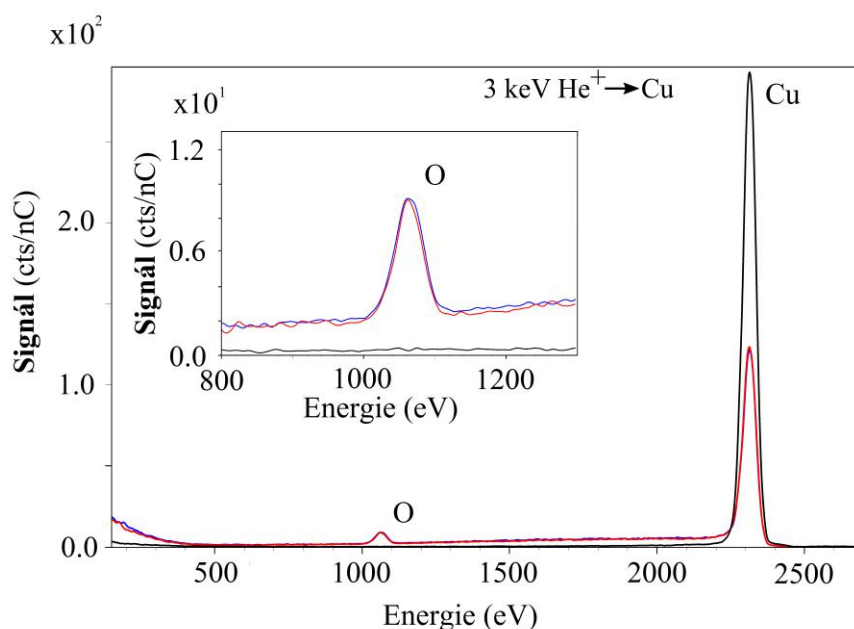
Obr. 4.15: Vývoj nárůstu a poklesu píků kyslíku a mědi. Data byla získána z celkem 600 spekter pro píky mědi a kyslíku. Jednotlivé spektra byla vytvořena projektily helia o energii 3 keV dávkou $2 \cdot 10^{14} \text{ He}^+/\text{cm}^2$.



Obr. 4.16: Závislost velikosti binárního píku na odprašovací dávce. Data byla získána z celkem 600 spekter pro píky mědi a kyslíku. Jednotlivé spektra byla vytvořena projektily helia o energii 3 keV dávkou $2 \cdot 10^{14} \text{ He}^+/\text{cm}^2$.

Interpretace spekter pro expozice atomárním a molekulárním kyslíkem koresponduje s předpokládaným průběhem oxidace povrchu mědi (viz obr. 4.12). Expozice atomárním kyslíkem vytváří i při relativně krátké době expozice silnou oxidovanou vrstvu mědi a další expozicí tloušťka této vrstvy roste. Expozice molekulárním kyslíkem vytváří tenkou vrstvu kyslíku na povrchu mědi v porovnání s atomární expozicí při srovnatelném čase expozice.

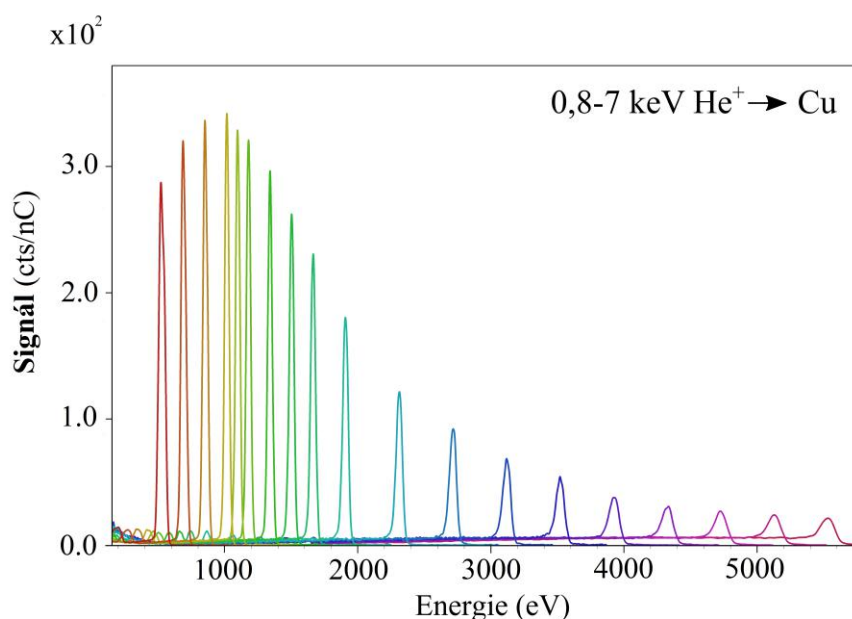
4.6 Ion fraction polykrystalické mědi po expozici molekulárním kyslíkem



Obr. 4.17: **Potvrzení stability povrchu.** Spektra 3 keV He^+ rozptýlených na polykrystalické mědi před a po expozici molekulárním kyslíkem (1 a 2 minuty expozice).

Nyní se budeme zabývat změnou ion fraction polykrystalické mědi vlivem expozice molekulárním kyslíkem. V první fázi byla měď čištěna již klasickým (udržovacím) způsobem, tj. iontovými projektily argonu o energii 8 keV o dávce $5 \cdot 10^{16} \text{ Ar}^+/\text{cm}^2$, s cílem odprášit kontaminace z povrchu vzorku.

Po odprašování projektily argonu, byla dalším krokem expozice molekulárního kyslíku. Expozice probíhala v preparační komoře. Pro analýzu exponovaného povrchu bylo nutno vzorek přesouvat z preparační komory do hlavní komory. Bylo zjištěno, že již při 2 minutách expozice molekulárním kyslíkem dochází k vytvoření



Obr. 4.18: Soubor naměřených spekter ionty helia pro energie v rozsahu 0,8 až 7 keV rozptýlených na polykrystalické mědi exponované molekulárním kyslíkem. Dávka pro jednotlivá spektra byla s ohledem na možnost odprašování povrchu volena $5 \cdot 10^{13} \text{ He}^+/\text{cm}^2$.

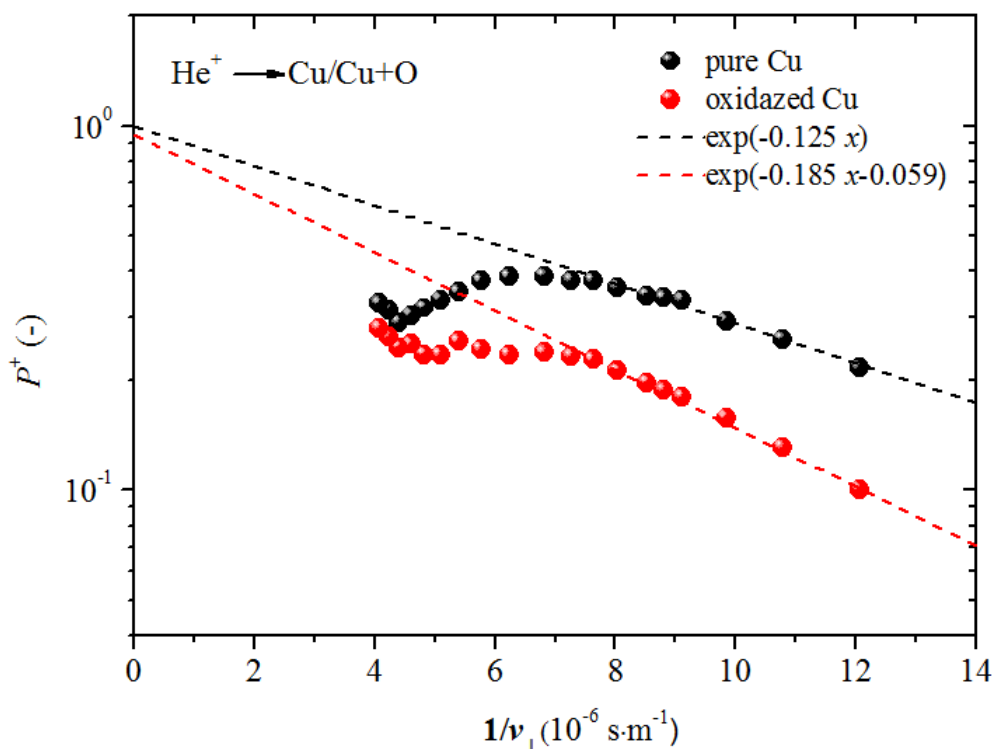
stabilní vrstvy kyslíku, což je doloženo stabilitou (stálostí) binárních píků mědi a kyslíku mezi měřeními viz obr. 4.17.

Samotné měření ion fraction bylo provedeno opět jako v předchozím měření iontovými projektily helia o energiích v rozsahu 0,8 až 7 keV. Dávka pro jednotlivé spektra musela být však upravena, resp. snížena, z důvodu možného odprašování vrstvy kyslíku z povrchu. Toto snížení dávky vede k zhoršení statistiky binárních píků. Byly vytvořeny spektra pro jednotlivé energie. Soubor těchto spekter je možné vidět na obr. 4.18. Vývoj binárních píků vzhledem k rostoucí energii naplnil očekávání. Oproti předchozímu souboru spekter pro čistou měděnou fólii, jsou také detekovány binární píky kyslíku, které mají výrazně nižší signál oproti silným signálům mědi.

Pro zpracování dat (integrálů jednotlivých binárních píků mědi a kyslíku) byl použit stejný způsob zpracování jako pro čistou měď. Z analýzy čisté mědi již byl znám instrumentální faktor $\zeta = 1,57 \cdot 10^{-8}$. Zpracování ion fraction pro polykrystalickou měď, na níž byl exponován molekulární kyslík, je na obr. 4.19.

Do grafu byla přidána také zpracovaná data pro čistou polykrystalickou měď pro možnost vzájemného porovnání. Po expozici molekulárním kyslíkem došlo k poklesu ion fraction vzhledem k čisté mědi. Tento pokles byl očekáván, neboť signál mědi

byl redukován přítomností kyslíku na povrchu vzorku. Překvapivým výsledkem je porovnání směrnic ze získaných dat v nízkoenergovém režimu před a po expozici. Rozdílnost směrnic indikuje vliv matrix efektů při oxidaci povrchu vzorku mědi, což odporuje závěrům z obr. 4.15, jež přítomnost matrix efektu nepodporuje. Zjištěná směrnice pro polykrystalickou měď po expozici molekulárním kyslíkem je rovna $v_c = 1,85 \cdot 10^5$ m/s.

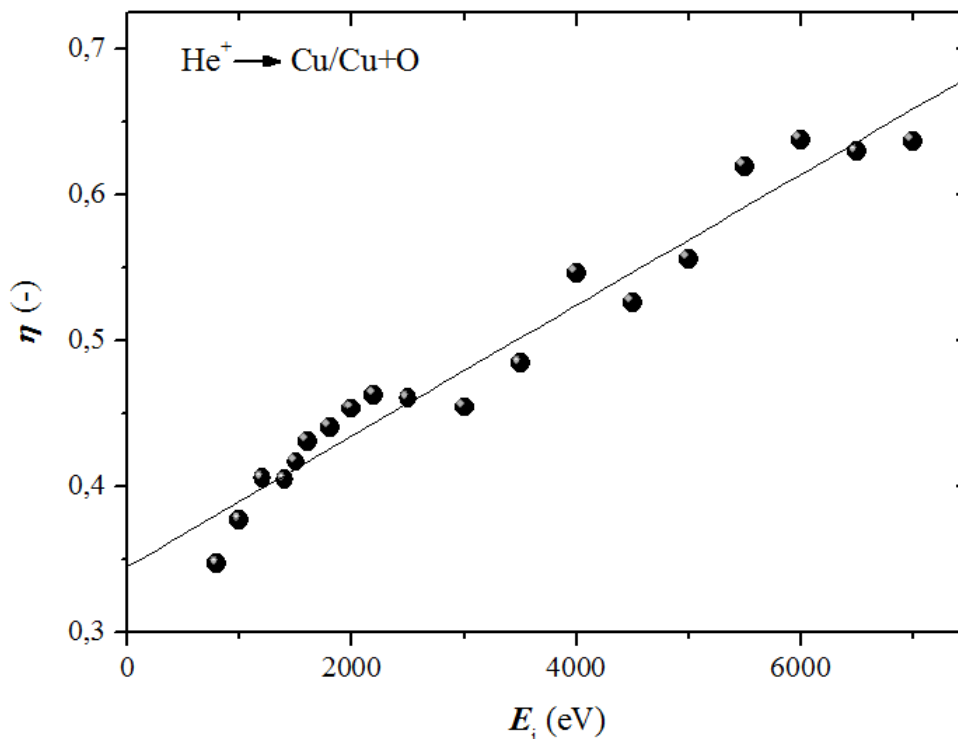


Obr. 4.19: P^+ polykrystalické mědi měřené ionty helia před a po expozici molekulárním kyslíkem. Graf je doplněn o lineární fit pro nízkoenergový režim.

Míra pokrytí povrchu mědi η (angl. surface coverage) při expozici molekulárním kyslíkem je dána poměrem signálů mědi v oxidovaném ($A_{\text{Cu,oxid}}$) a čistém stavu ($A_{\text{Cu,Cu}}$) [1]. Tedy:

$$\eta = \frac{A_{\text{Cu,oxid}}}{A_{\text{Cu,Cu}}}. \quad (4.4)$$

V obr. 4.20, jež odpovídá závislosti míry pokrytí η na počáteční energii, lze identifikovat rostoucí lineární závislost, jež koresponduje s přítomností vlivů matrix efektu. V případě, že by byla zjištěna konstantní lineární závislost míry pokrytí mědi η vzhledem k počáteční energii, analýza povrchu by vykazovala absenci matrix efektu [1].



Obr. 4.20: Závislost míry pokrytí vzorku η na počáteční energii E_i . Rostoucí lineární závislost implikuje vliv matrix efektu.

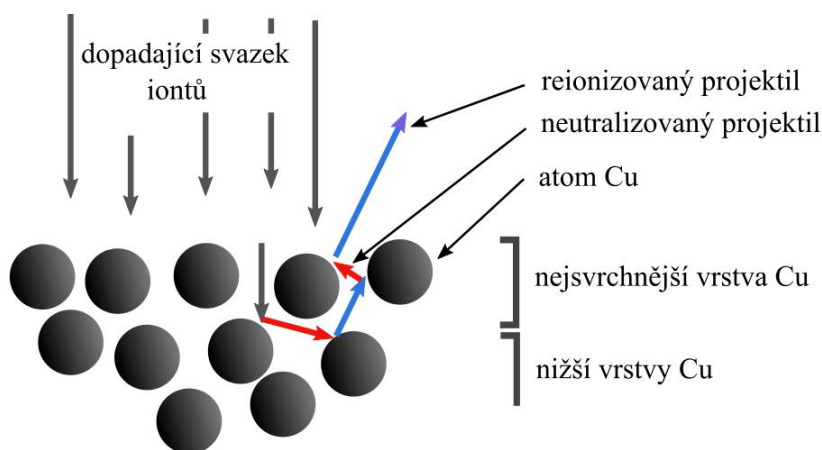
4.7 Reionizace polykrystalické mědi

Další část této diplomové práce je zaměřena na proces reionizace polykrystalické mědi. Budou použita data získaná z měření ion fraction pro čistou měď a tato experimentální data pak budou porovnána s daty získanými ze simulací v programu TRBS. Nejdříve však bude vysvětlen princip, kterým se propojí experiment se simulacemi.

4.7.1 Propojení TRBS s experimentem

Pro stanovení reionizace na povrchu vzorku se vychází z teorie reionizace. Předpokládá se, že projektil proniká pod povrch, zpětně se odráží neelasticky od rozptylového centra (v tomto případě od atomu mědi) a zneutralizuje se. Při průchodu ven ze vzorku může dojít k reionizaci vlivem atomů tvořících povrchovou vrstvu. Tuto situaci zobrazuje obr. 4.21.

Pro možnost propojit TRBS simulace s experimentálními daty bylo využito simulace signálu z různých vrstev mědi. Bylo tak možné získat signál z jedné monovrstvy (1ML) polykrystalické mědi, což v experimentu přibližně odpovídá signálu binárního



Obr. 4.21: Schéma reionizačního procesu polykrystalické mědi.

píku. Rovněž bylo možné simulovat signál z hlubších vrstev Cu, což odpovídá v experimentu reionizovaným projektilům (pozadí). Následující dvě rovnice dávají do rovnosti právě simulace pro binární pík a pozadí s experimentálními daty. Tedy:

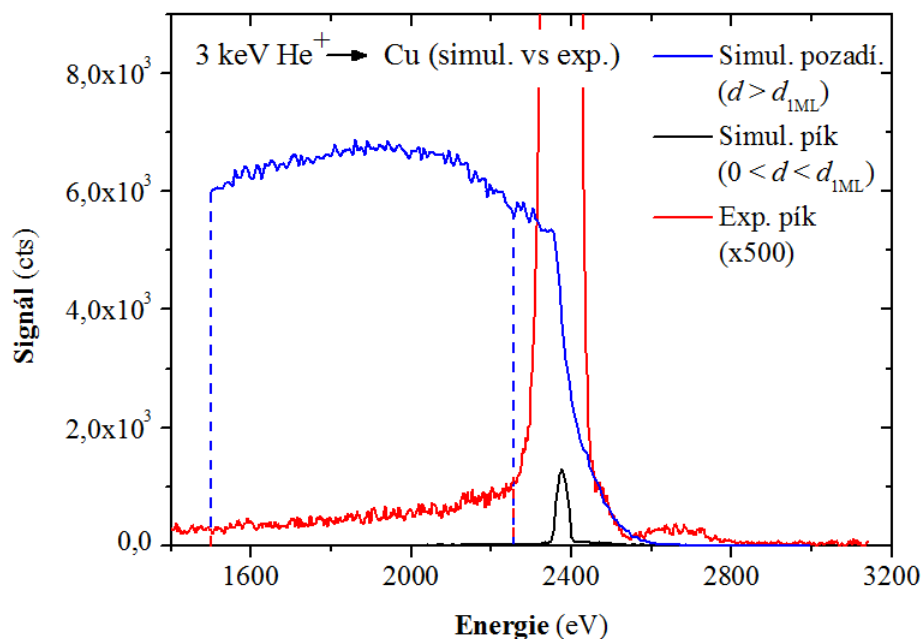
$$A_{1ML}^{TRBS} \cdot P_{Cu}^+ \cdot C_{TRBS} = A_{peak}^{exp}, \quad (4.5)$$

$$A_{subsurface}^{TRBS} \cdot P_{RI,Cu}^+ \cdot C_{TRBS} = A_{background}^{exp}, \quad (4.6)$$

kde A_{1ML}^{TRBS} odpovídá signálu Cu (integrál) nasimulovanému programem TRBS odpovídající první monovrstvě čisté polykrystalické mědi. Je známo, že jedna monovrstva polykrystalické mědi má tloušťku $d_{1ML} = 2,35 \text{ \AA}$ [9]. A_{peak}^{exp} odpovídá signálu (integrálu) binárního píku získaného z experimentu. P_{Cu}^+ je ion fraction čisté mědi pro vybranou energii a konstanta úměrnosti mezi experimentem a simulací je označena C_{TRBS} . Druhá rovnice je principiálně stejná, pouze parametry odkazují na signál z pozadí. Veličina $P_{RI,Cu}^+$ pak označuje pravděpodobnost reionizace projektilu atomy mědi a jedná se o pravděpodobnost procesů výměny náboje v hlubších vrstvách vzorku s následnou reionizací na poslední nejvyšší atomární vrstvě, kdy projektil opouští povrch. Podstatné je, že konstanta úměrnosti C_{TRBS} je pro obě rovnice (4.5) a (4.6) stejná a tedy se znalostí signálů z nejvyšší vrstvy a z pozadí Cu, lze určit právě pravděpodobnost reionizace $P_{RI,Cu}^+$.

TRBS simulace bere v potaz také detekci neutrálních částic. Tento vliv lze pozorovat na příkladu simulace rozptylu iontových projektilů helia o energii 3 keV na polykrystalické mědi viz obr. 4.22, který zobrazuje výrazně silný signál pozadí (signál z nižších vrstev než z první monovrstvy) oproti typickému pozadí experimentálních spekter. Právě tento rozdíl je vyjádřen pomocí $P_{RI,Cu}^+$. Dále graf obsahuje také binární pík mědi taktéž nasimulovaný programem TRBS. Poměr velikosti binárních píků v experimentu a v simulaci vyjadřuje P_{Cu}^+ . Pohledem na jednotlivé

simulace spekter pro binární pík a pozadí je potvrzen správný výběr tloušťky první monovrstvy, která byla pro simulaci stanovena $d_{\text{IML}} = 2,35 \text{ \AA}$.



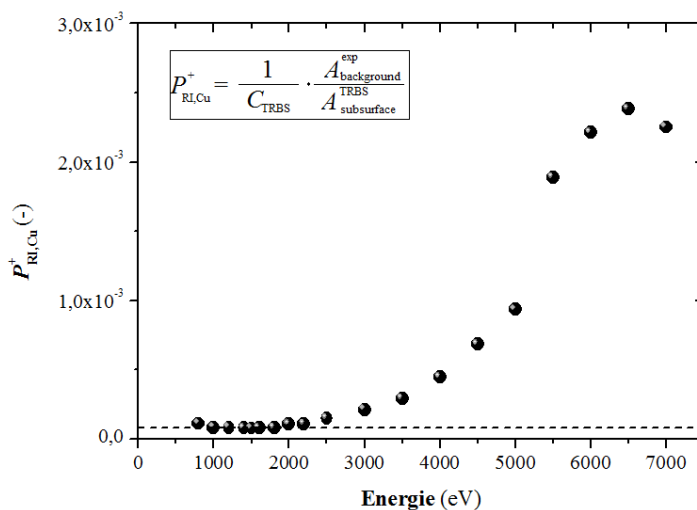
Obr. 4.22: **Simulace rozptylu 3 keV iontových projektilů helia na polykrystalické mědi.** V grafu jsou zobrazeny simulace binárního píku odpovídající signálu z tloušťky d z intervalu $0 < d < d_{\text{IML}}$ a simulace pozadí odpovídající signálu z $d > d_{\text{IML}}$. Spektrum experimentálně zpracované mědi (červené spektrum) bylo pro větší názornost násobeno faktorem 500.

Vyhodnocení pravděpodobnosti reionizace mědi $P_{\text{RI,Cu}}^+$ viz obr. 4.23 je zpracováno s využitím naměřených dat v rámci zpracování ion fraction pro čistou polykrystalickou měď v energiovém rozsahu 0,8 až 7 keV. Exponenciální nárůst při rostoucí hodnotě energie byl očekáván. Překvapivým průběhem je oblast energií v rozsahu 5500 až 7000 eV, kde je zaznamenán pokles oproti předchozí exponenciální tendenci.

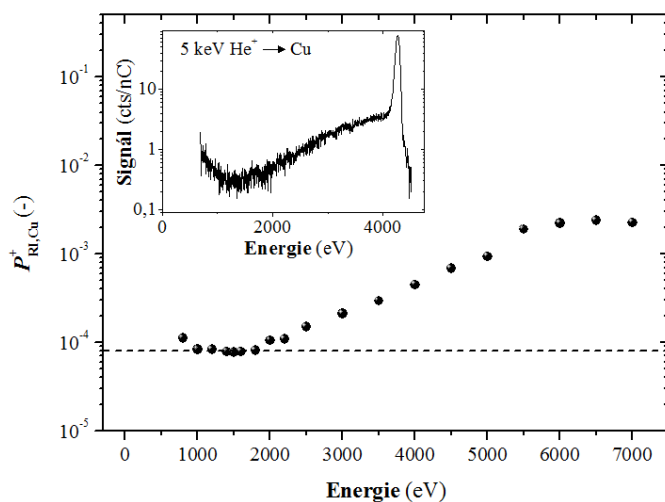
Při analýze grafu 4.23 byla taktéž zaznamenána nenulová minimální hodnota $P_{\text{RI,Cu}}^+$ (800 až 1800 eV), což souvisí s existencí nenulového pozadí ve spektrech v daném energiovém intervalu. $P_{\text{RI,Cu}}^+$ začíná exponenciálně růst od energie 1800 eV. Tato hodnota ($E = 1800 \text{ eV}$) koresponduje s již dříve stanoveným energiovým prahem E_{th} přímo ze spekter.

Zpracováním závislosti v logaritmickém měřítku názorněji ukazuje vývoj $P_{\text{RI,Cu}}^+$ v závislosti na energii (obr. 4.24). Graf při porovnání s experimentálním výsledkem koresponduje s tvarem pozadí (reionizované projektily) i polohou energiového prahu. Jako příklad je zde porovnání tvaru a polohy pravděpodobnosti reionizace se spektrem tvořeného ionty helia o energii 5 keV.

Z výsledků popsaných v obr. 4.23 a 4.24, jež korespondují s experimentálně naměřenými daty (poloha energiového prahu E_{th} a tvar reionizační závislosti) vyplývá, že naše úvaha s využitím kombinace programu TRBS a experimentálních dat je korektní a lze ji využít k dalšímu studiu povrchů.



Obr. 4.23: Pravděpodobnost reionizace $P_{RI,Cu}^+$ polykrystalické mědi v závislosti na energii.



Obr. 4.24: Pravděpodobnost reionizace $P_{RI,Cu}^+$ polykrystalické mědi v porovnání s naměřeným spektrem 5 keV He^+ (logaritmické měřítko).

5 ZÁVĚR

Tato diplomová práce je zaměřena na studium procesů výměny náboje během interakce mezi projektilem a povrchem vzorku. Pro studium těchto procesů je zásadní správné nastavení experimentálního zařízení (stabilní fokusovaný svazek, nízké hodnoty tlaků uvnitř komor - používaný rozsah základního tlaku v hlavní komoře 10^{-11} až 10^{-10} mbar).

Další fází bylo hledání vhodného kandidáta pro studium procesů výměny náboje. Z hlediska možného míchání signálů ve spektrech byl hledán prvek s vyšším energiovým prahem mimo možnou oblast výskytu signálu kyslíku. Ze čtyř studovaných prvků byla vybrána polykrystalická měď. Praktický důvodem pro tento výběr byl také ten, že polykrystalická měď slouží ke kalibraci zařízení a jako vhodná reference k analýze dalších prvků.

Ion fraction bylo zpracováno pro iontové projektily helia v rozsah energií od 0,8 až 7 keV. Bylo zpracováno jednak pro očištěnou (atomárním kyslíkem a odprašováním ionty argonu) polykrystalickou měď i pro měď oxidovanou. Předpokládaná shoda v hodnotě charakteristické rychlosti (směrnice lineární závislosti v nízkoenergiovém režimu) pro obě tyto ion fraction nebyla potvrzena. Rozdílnost směrnic indikuje vliv matrix efektu. Tento vliv byl také demonstrován závislostí míry pokrytí povrchu vzorku η vzhledem k počátečním energiím. Taktéž při porovnání s literatury již známou hodnotou charakteristické rychlosti nebyla nalezena shoda s vyhodnocenými daty, což doposud nebylo zdůvodněno.

Vliv kyslíku na spektra byl diskutován pro případ oxidace pomocí atomárního kyslíku a molekulárního kyslíku. Atomární kyslík je více reaktivní a oxiduje do hloubky vrstvy. Oproti tomu molekulární kyslík reaguje s povrchem pomaleji a vytváří se pouze tenká vrstva oxidu při povrchu vzorku. Zpracování signálů kyslíku a mědi při molekulární oxidaci indikuje absenci matrix efektu, což je v kontrastu s výsledky pro ion fraction a míry pokrytí. Objasnění důvodu rozdílů těchto výsledků bude dále zkoumáno.

Na závěr byl studován reionizační proces pro čistou polykrystalickou měď s využitím naměřených dat a TRBS programu pro simulaci teoretických výsledků. Byla stanovena tzv. pravděpodobnost reionizace mědi $P_{\text{RI,Cu}}^+$. Jedná se o pravděpodobnost procesů výměny náboje v hlubších vrstvách vzorku s následnou reionizací na poslední nejsvrchnější atomární vrstvě vzorku. V nízkoenergiovém režimu (do 5000 eV) data odpovídají očekávané exponenciální závislosti. Průběh a tvar této pravděpodobnosti reionizace $P_{\text{RI,Cu}}^+$ spolu s polohou energiového prahu, koresponduje s experimentálně naměřeným pozadím spekter.

LITERATURA

- [1] BRONGERSMA, H. H., et al.: Surface composition analysis by low-energy ion scattering. *Surface Science Reports* [online]. 2007, **62**, 63-109. Dostupné z: www.sciencedirect.com
- [2] BÁBÍK, P.: *Analýza grafenových vrstev připravených metodou CVD pomocí rozptylu nízkenergiových iontů*. [Bakalářská práce]. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, Ústav fyzikálního inženýrství, 2016. 43 s.
- [3] PRŮŠA, S.: *Rozptyl nízkenergiových iontů LEIS - nástroj pro zkoumání povrchů pevných látek*. [Habilitationní práce]. Brno: Vysoké učení technické v Brně. Fakulta strojního inženýrství, 2011. ISBN 978-80-214-4278-8.
- [4] SAMAVAT, F., KING, B. V., O'CONNOR, D. J.: Low energy ion scattering. *Surface Review* [online]. 2007, **14**(1), 31-41. ISSN 0218625X. Dostupné z: <http://web.a.ebscohost.com.ezproxy.lib.vutbr.cz/ehost/pdfviewer/pdfviewer?sid=b802123b-5db0-4d48-a394-05fd3182cd6d%40sessionmgr4002&vid=1&hid=4207>.
- [5] RABALAIS, J. W.: *Principles and applications of ion scattering spectrometry - Surface chemical and structural analysis*. Wiley-Interscience, 2003, 306. ISBN 0-471-20277-0.
- [6] BAUER, P., SUN, L.: *Nano-characterization II*. [Text k přednáškám]. Linz: Johannes Kepler Univerzity. 2017.
- [7] ERICKSON, R. I., SMITH, D. P.: Oscillatory Cross Sections in Low-Energy Ion Scattering from Surfaces. *Physical Review Letters* [online]. 1975, **34**(297). Dostupné z: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.34.297>.
- [8] BRONGERSMA, H. H., BUCK, T.M.: Selected topics in low-energy ion scattering: Surface segregation in Cu/Ni alloys and ion neutralization. *Surface Science* [online]. 1975, **53**(1), 649-658. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0039602875901612>
- [9] KOUACHE, K., et al.: Charge exchange processes in He⁺/Cu scattering at low energy. *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, B* [online]. 2016, **382**, 11-14. DOI: 10.1016/j.nimb.2016.04.046. ISSN 0168-583X. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X16301495?via%3Dihub>.

- [10] PRIMETZHOFFER, D., et al.: Analysis of the Auger neutralisation of He⁺ at Cu surfaces in low energy ion scattering. *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, B* [online]. 2009, **267**, 575-577. Dostupné z :[https://www.sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S016858308011993](https://www.sciencedirect.com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S016858308011993).
- [11] PRŮŠA, S., et al.: Highly sensitive detection of surface and intercalated impurities in graphene by LEIS. *Langmuir* [online]. 2015, **31**, 9628-9635. Dostupné z: <https://pubs-acsc-org.ezproxy.lib.vutbr.cz/doi/abs/10.1021/acs.langmuir.5b01935>.
- [12] *wikipedia* [online]. Dostupné z <https://en.wikipedia.org/wiki/Low-energy-ion-scattering>.
- [13] TURKENBURG, W.: *Surface layer analysis by medium energy ion scattering*. Amsterdam, 1976. Dostupné z: http://www.iaea.org/inis/collection/NCLCollectionStore/_Public/08/302/8302275.pdf
- [14] KAILING, A., et al.: Surface composition/organization of ionic liquids with Au nanoparticles revealed by high-sensitivity low-energy ion scattering *Langmuir* [online]. 2013, **29**(46), 14301-6. DOI: 10.1021/la403388b. Dostupné z: <https://pubs-acsc-org.ezproxy.lib.vutbr.cz/doi/pdf/10.1021/la403388b>.
- [15] SCHÁNILEC, V.: *Magnetická fázová přeměna v prostorově omezených strukturách*. [Bakalářská práce]. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2016. 36 s.
- [16] DŘÍMAL, J., TRUNEC, D., BRABLEC, A.: *Úvod do metody Monte Carlo*. Brno, 2006. Dostupné z: <http://www.physics.muni.cz/trunec/mc.pdf>.
- [17] HOU, R.: *Rutherford scattering simulation and analysis with Monte Carlo method*. Nanjing: Southeast University, 2006. Dostupné z: <http://hpc.seu.edu.cn/dong/class/2016-Hourui.pdf>
- [18] *Iontof*. [Manuál k zařízení]. Brno: Středoevropský technologický institut. 2018
- [19] *Iontof* [online]. Dostupné z: <https://www.iontof.com/energy-analyser-qtac-leis.html>.
- [20] SCHMID, M.: IAP/TU Wien Surface Physics Group, [online]. 2002-2013. Dostupné z: <https://www.iap.tuwien.ac.at/www/surface/leis>.
- [21] SIGMUND, P.: *Stopping of Heavy Ions - A Theoretical Approach*. Heidelberg: Springer, 2004. ISBN: 3-540-22273-1.

SEZNAM SYMBOLŮ, VELIČIN A ZKRATEK

E	- Energie částice (<i>Energy of Particle</i>).
v	- Rychlost částice (<i>Velocity of Particle</i>).
m, M	- Hmotnosti částic (<i>Mass of Particles</i>).
k	- Kinematický faktor (<i>Kinematic Factor</i>).
θ	- Rozptylový úhel (<i>Scattering Angle</i>).
ϕ	- Úhel ϕ (<i>Angle ϕ</i>).
$V(r)$	- Centrální potenciálové pole (<i>Central Potential Field</i>).
V_c	- Coulombovský potenciál (<i>Coulomb Potencial</i>).
p	- Dopadový parametr (<i>Impact Parametr</i>).
R_{\min}	- Největší přiblížení (<i>Closest Approach</i>).
Φ	- Stínící funkce (<i>Screening Function</i>).
a	- Stínící délka (<i>Screening Length</i>).
\vec{r}	- Polohový vektor (<i>Position Vector</i>).
Z	- Protonové číslo (<i>Atomic Number</i>).
e	- Elementární náboj (<i>Elementary Charge</i>).
ϵ_0	- Permittivita vakua (<i>Vacuum Permittivity</i>).
$\frac{d\sigma}{d\Omega}$	- Diferenciální účinný průřez (<i>Differential Scattering Cross Section</i>).
P_i^+	- Ion fraction (<i>Ion Fraction</i>).
I	- Proud (<i>Current</i>).
Y^+	- Signál zpětně odražených iontů (<i>Yield</i>).
N	- Atomová koncentrace (<i>Atomic Concentration</i>).
ζ	- Instrumentální faktor (<i>Instrumental Factor</i>).
A^+	- Množství detekovaných iontů (<i>Amount of Detected Ions</i>).

A^0	- Množství detekovaných neutrálů (<i>Amount of Detected Neutrals</i>).
A_i	- Charakteristická míra přechodu (<i>Characteristic Transition Rate</i>).
a_i	- Reciproká interakční délka (<i>Reciprocal Interaction Length</i>).
$dP_{i,t}$	- Pravděpodobnost přechodu (<i>Transition Probability</i>).
$P_{\text{surf},i}^+$	- Pravděpodobnost přežití (<i>Survival Probability</i>).
R	- Drsnost (<i>Roughness</i>).
v_c	- Charakteristická rychlost (<i>Characteristic Velocity</i>).
v_{\perp}	- Kolmá složka celkové rychlosti (<i>Perpendicular Velocity</i>).
$\frac{1}{\tau_i}$	- Míra přechodu (<i>Transition Rate</i>).
P_{CIN}	- Pravděpodobnost CIN procesů (<i>Probability of CIN Processes</i>).
P_{CIR}	- Pravděpodobnost CIR procesů (<i>Probability of CIR Processes</i>).
E_{th}	- Energetický práh (<i>Energy Threshold</i>).
σ	- Směrodatná odchylka (<i>Standard Deviation</i>).
t	- Čas (<i>Time</i>).
$\langle \Delta E \rangle$	- Střední hodnota ztráty energie (<i>Mean Value of Energy Loss</i>).
S	- Brzdný účinek (<i>Stopping Power</i>).
x	- Integrovaná cesta (<i>Integrated Path</i>).
d_{oxid}	- Tloušťka oxidované vrstvy (<i>Thickness of Oxidized Layer</i>).
η	- Míra pokrytí (<i>Surface Coverage</i>).
$A_{\text{Cu,Cu}}$	- Signál píku mědi ve vzorku mědi (<i>Area of Cu in sample Cu</i>).
$A_{\text{Cu,oxid}}$	- Signál píku mědi z oxidované vrstvy (<i>Area of Cu from Oxidized Layer</i>).
$A_{\text{IML}}^{\text{TRBS}}$	- Signál simulace monovrstvy Cu (<i>Simulated Area of Cu Peak</i>).
$A_{\text{peak}}^{\text{exp}}$	- Signál binárního píku Cu (<i>Area of Cu Peak</i>).
$A_{\text{subsurface}}^{\text{TRBS}}$	- Signál simulace pozadí Cu (<i>Simulated Subsurface of Cu</i>).

$A_{\text{background}}^{\text{exp}}$	- Signál pozadí Cu (<i>Background of Cu</i>).
C_{TRBS}	- Konstanta úměrnosti (<i>Proportionality Constant</i>).
$P_{\text{RI,Cu}}^+$	- Pravděpodobnost reionizace mědi (<i>Probability of Reionization of Cu</i>).
$d_{1\text{ML}}$	- Tloušťka monovrstvy Cu (<i>Thickness of Cu Monolayer</i>).
TFM	- Thomas-Fermi-Molierův model (<i>Thomas-Fermi-Moliere Model</i>).
ZBL	- Ziegler-Biersack-Littmarkův model (<i>Ziegler-Biersack-Littmark Model</i>).
RN	- Rezonanční neutralizace (<i>Resonant Neutralization</i>).
RI	- Rezonanční ionizace (<i>Resonant Ionization</i>).
q-RN	- Kvazi-rezonanční neutralizace (<i>Quasi-Resonant Neutralization</i>).
AN	- Augerova neutralizace (<i>Auger Neutralization</i>).
AD	- Přímá Augerova de-excitace (<i>Direct Auger De-excitation</i>).
iAD	- Nepřímá Augerova de-excitace (<i>indirect Auger De-excitation</i>).
CIN	- Neutralizace indukovaná srážkou (<i>Collision Induced Neutralization</i>).
CIR	- Reionizace indukovaná srážkou (<i>Collision Induced Reionization</i>).
LEIS	- Rozptyl nízkoenergiových iontů (<i>Low Energy Ion Scattering</i>).
ESA - LEIS	- Rozptyl nízkoenergiových iontů s elektrostatickým analyzátozem (<i>Electrostatic Analyzer Low Energy Ion Scattering</i>).
ToF - LEIS	- Rozptyl nízkoenergiových iontů s Time of Flight analyzátozem (<i>Time of Flight Low Energy Ion Scattering</i>).
RBS	- Rozptyl vysokoenergiových iontů (<i>Rutherford Backscattering Spectrometry</i>).
HOPG	- Vysoce uspořádaný pyrolitický grafit (<i>Highly Oriented Pyrolytic</i>

Graphite).

CEITEC - Středoevropský technologický institut (*Central European Institute of Technology*).

TRBS - Program TRBS (*TRBS Programme*).