

ARTICLE

Received 16 Sep 2010 | Accepted 19 Jan 2011 | Published 15 Feb 2011

DOI: 10.1038/ncomms1197

Vibrational dynamics and surface structure of amorphous selenium

T. Scopigno^{1,2}, W. Steurer³, S.N. Yannopoulos⁴, A. Chrissanthopoulos^{4,5}, M. Krisch⁶, G. Ruocco¹ & T. Wagner⁷

¹ Dipartimento di Fisica, Università di Roma 'La Sapienza', Roma I-00185, Italy; ² IPCF-CNR, UOS Roma, c/o Dipartimento di Fisica, Università 'Sapienza', Piazzale Aldo Moro, Roma I-00185, Italy; ³ Institute of Physics, Surface and Interface Physics, Karl-Franzens-Universität Graz, Graz A-8010, Austria; ⁴ Foundation for Research and Technology – Hellas, Institute of Chemical Engineering and High Temperature Chemical Processes (FORT-HICE-HT), P.O. Box 1414, Patras GR-26504, Greece; ⁵ Department of Chemistry, University of Patras, Patras GR-26504, Greece; ⁶ Experiments Division, European Synchrotron Radiation Facility, F-38013 Grenoble Cedex, France; ⁷ Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical-Technology, University of Pardubice, Elgónská square 565, Pardubice 53210, Czech Republic. Correspondence and requests for materials should be addressed to W.S. (email: wolfram.steurer@uni-graz.at) or to S.N.Y. (email: sny@icth.forth.gr).

Publikovaná práce je výsledkem spolupráce mezinárodního týmu odborníků a vědců z Itálie, Rakouska, Řecka, Francie a České republiky.

Vědecký tým profesora Wágnera, který tvoří akademičtí pracovníci Fakulty chemicko-technologické, ale i mladí vědečtí pracovníci a studenti, se podílel zejména na přípravě tenkých vrstev amorfního selenu. Touto problematikou se jeho pracovní skupina dlouhodobě zabývá v rámci projektu Centra základního výzkumu LC523 „Nové a perspektivní anorganické materiály“ a Centra materiálového výzkumu.

O článku

Amorfni pevné látky mají řadu strukturních anomálií ve srovnání s krystalickými pevnými látkami, jejichž strukturní uspořádání na dlouhou vzdálenost je řízeno dynamikou a termodynamikou. Zatímco vztah těchto anomálií v objemu amorfních látek je obecně lépe pochopen, struktura povrchu a související vlastnosti a chování amorfních látek zatím nebyly studovány. Pochopení struktury povrchu amorfních látek je velmi významné např. pro porozumění vlastností nanočástic, kdy poměr mezi strukturou povrchu a objemem hraje naprosto klíčovou roli.

V publikované práci je kombinována experimentální práce při studiu povrchu připravených tenkých vrstev selenu metodou malouhlového neelastického rentgenového rozptylu a teoretického modelování struktury povrchu kvantově chemickými výpočetními metodami. (Selen je využíván v řadě aplikací ve zdravotnictví např. v čidlech počítačových mamografů.) Experimentální metody nejsou zatím schopny podat úplnou informaci o struktuře, proto bylo výhodné využít kombinace s vhodným teoretickým modelem. Používána je především molekulová dynamika (klasická i ab initio) a reverse Monte Carlo.

Kombinace experimentu a teoretického přístupu umožnila popsat rozdíly mezi vibračními vlastnostmi a atomární strukturou, mezi objemem a povrchem (vrstva 5 nm) technologicky významného materiálu. Odlišné chování povrchu bylo přisouzeno přítomností jiných vazebných uspořádání a poruch na povrchu ve srovnání s objemem.

O časopisech vydavatelství Nature Publishing Group

Časopis NATURE je prestižní vědecký časopis vydávaný od roku 1869 ve Velké Británii. Tradičně jsou v něm uveřejňovány důležité vědecké práce ve formě článků i kratších textů z astronomie, biologie, biotechnologie, chemie, fyziky, genetiky a dalších věd.

V časopise Nature publikovali zásadní informace významní představitelé vědeckého pokroku, např. W. C. Röntgen (rentgenové záření), J. D. Watson a F. H. C. Crick (DNA), I. Wilmut (klonování savců), L. Meitnerová, O. R. Frich (radioaktivní štěpení – jaderná reakce).

V současnosti (rok 2011) je časopis NATURE vydáván vydavatelstvím Nature Publishing Group, které kromě základního časopisu NATURE (Volume 471) ještě vydává další asociované časopisy: Nature Chemistry (Volume 3), Nature Physics (Volume 7), Nature Biotechnology (Volume 29), Nature nanotechnology (Volume 6), Nature photonics (Volume 5), Nature materials (Volume 10) atd. a také Nature communications. Asociovaných časopisů majících ve svém názvu Nature + další přívlastek vydává toto renomované vydavatelství Nature Publishing Group celkem 38. Celkový počet časopisů vydávaných tímto vydavatelstvím je 104.

Posledně jmenovaný **časopis Nature communications**, v němž byl publikován i spoluautorský příspěvek profesora Wágnera z Fakulty chemicko-technologické, je nový multidisciplinární časopis založený respektovaným vydavatelstvím Nature Publishing Group v roce 2010 a je zaměřený na vysoce kvalitní vědecké výsledky z mezioborových oblastí biologie, fyziky a chemie. Články uveřejněné v tomto časopise musí splňovat, obdobně jako u dalších z řady Nature, velmi přísná vědecká i inovační kritéria nastavená velmi přísným oponentním řízením a samotným vydavatelstvím. Jelikož patří mezi nové časopisy, nemá a nemůže mít proto ještě určené některé parametry, např. tzv. „impact factor“, jehož hodnota zohledňuje citovanost časopisu.

Podle Essential Science Indicators (Thomson-Reuters) patří např. časopis NATURE k nejvíce citovaným vědeckým časopisům v řadě oborů.

Podle impaktního faktoru za posledních 5 let, stanovovaného americkým Institutem pro vědecké informace, se řadí na desáté místo z celkového počtu přibližně 7 380 vědeckých časopisů uvedených v databázi Web of Science společnosti Thomson Reuters. Podle celkové citovanosti zaujímá časopis dokonce místo první.

Vědecký článek publikovaný v časopisech Nature je dle Metodiky hodnocení výsledků výzkumných organizací platné v České republice pro roky 2010 a 2011 hodnocen vedle patentu udělovaného EPO* nebo USPTO** nejvyšším možným počtem bodů (500).

(Pozn. * European Patent Organisation, ** United States Patent and Trademark Office)

Impaktní faktory Nature a asociovaných časopisů jsou uvedeny v níže uvedené tabulce, která uvádí rovněž počty publikací v roce 2010, na nichž se podíleli **autoři z České republiky**. Celkem bylo takto **publikováno za rok 2010 24 prací**. Pouze u čtyř prací z toho počtu je prvním autorem pracovník z instituce působící na území ČR, z toho pouze u jedné práce byl autorem akademický pracovník z veřejné vysoké školy (Univerzity Palackého v Olomouci).

Časopis	Impact factor	Publikace z ČR (2010)
Nature	34,480	7
Nature chemistry	-	0
Nature physics	15,491	2
Nature biotechnology	29,495	1
Nature nanotechnology	26,309	1
Nature photonics	22,869	0
Nature materials	29,504	3

Nature cell biology	19,527	1
Nature genetics	29,768	5
Nature structural and molecular biology	12,273	1
Nature protocols	6,335	1
Nature review genetics	27,822	1
Nature review clinical oncology	-	1
Nature communications	bude stanoven až v roce 2012***	0 + 1 nová publikace spoluautora z UPa

Pozn.: *** Impact factor (The Thomson Reuters, formerly ISI, Impact factor for Nature communications is due in 2012.) <http://www.nature.com/ncomms/index.html>

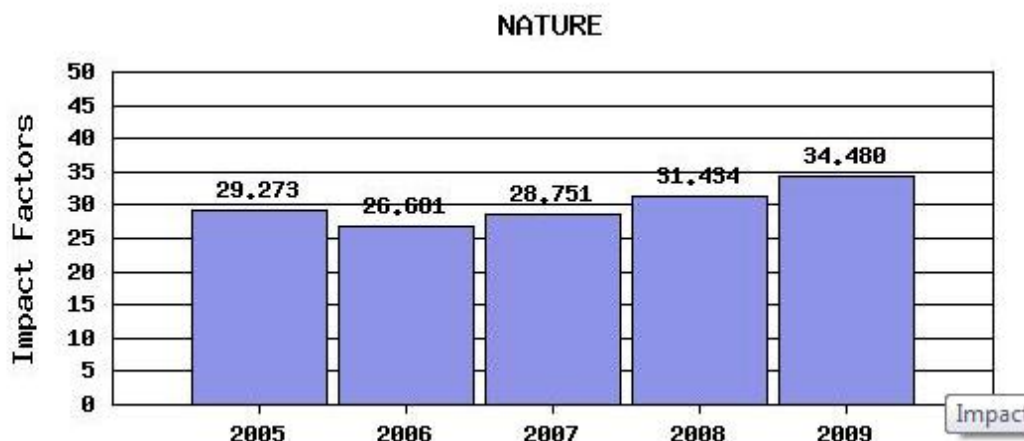
Za posledních deset let časopisy Nature uveřejnily celkem 134 článků, jejichž autoři nebo spoluautoři pocházejí z České republiky a v první trojce nejvíce publikujících institucí se nachází: Akademie věd ČR, Univerzita Karlova a Univerzita Palackého v Olomouci. Ročně je do časopisů zařazeno průměrně 13 článků publikovaných českými autory.

Univerzita Pardubice a Fakulta chemicko-technologická se zveřejněním článku profesora Wágnera v časopise Nature communications zařadila mezi nevelkou skupinu českých veřejných vysokých škol, které v posledních deseti letech v těchto prestižních časopisech za ČR publikují.

Např. ve vlastním časopise Nature to je pouze Univerzita Karlova, Univerzita Palackého v Olomouci, Masarykova univerzita, Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích, České vysoké učení technické v Praze, Ostravská univerzita v Ostravě.

Je zřejmé, že v těchto prestižních a odbornou veřejností velmi sledovaných časopisech zatím publikuje pouze malá část českých badatelů. Přejme si, aby v blízké budoucnosti se našli následovníci tohoto odborného počínu a rozšířili tak mezinárodní povědomí o úspěších české vědy.

Vývoj impakt faktoru časopisu Nature v posledních pěti letech



Mgr. Ivana Švecová
vedoucí Oddělení pro vzdělávání a výzkum