



Warszawa, 29 czerwca 2016

Bliżej rzeczywistości: Co naprawdę widać, gdy patrzymy na próbkę?

Bez szczegółowej wiedzy o właściwościach używanych materiałów dzisiejsza technika nie mogłaby ani funkcjonować, ani się rozwijać. Nowy opis rozpraszania elektronów w powierzchniowych warstwach próbek, zaproponowany przez Instytut Chemii Fizycznej PAN w Warszawie, znacząco przyspiesza analizy materiałowe i pozwala lepiej zrozumieć, co naprawdę widać w badanej próbce.

We współczesnych badaniach materiałowych próbki często bombarduje się elektronami. Niektóre elektrony odbijają się wtedy od powierzchni – i to właśnie one niosą cenne informacje o właściwościach materiału. Tylko czy tak zebrane dane są rzeczywiście wiarygodne i na pewno związane z badaną próbką, a nie np. z podłożem, na którym ta się znajduje? Nowy opis rozpraszania wstecznego elektronów, właśnie zaproponowany przez prof. dr. hab. Aleksandra Jabłońskiego z Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk (IChF PAN) w Warszawie, zwiększa pewność interpretacji danych pomiarowych i jednocześnie znacząco skraca czas analiz.

„W trakcie badań spektroskopowych elektrony wnikają w materiał na głębokość rzędu nanometrów, uczestnicząc po drodze w całym szeregu elastycznych zderzeń. Pod względem obliczeniowym opis teoretyczny tego procesu można określić krótko: to najwykleszy koszmar”, wyznaje prof. Jabłoński.

Energie elektronów, którymi są bombardowane próbki w trakcie pomiarów materiałowych, nie mogą być zbyt duże, bo elektrony powinny oddziaływać tylko z kilkoma najbardziej zewnętrznymi warstwami atomowymi materiału. Jednak właśnie takie elektrony świetnie wyczuwają strukturę elektronową materiału, w którym się poruszają. Rozwiązania równań stają się wtedy bardzo skomplikowane i trzeba ich szukać metodami numerycznymi.

„Problem wygląda tak: mam próbkę, strzelam w nią elektronami, rejestruję te, które z niej wyleciały i na tej podstawie staram się coś powiedzieć o materiale. Jednak ze wszystkich elektronów wystrzelonych w kierunku materiału wstecz odbijają się tylko niektóre! Na dodatek mój detektor nie wychwyci ich wszystkich, zareaguje tylko na te, które w niego trafiają. Jeśli więc teraz chcę zinterpretować dane eksperymentalne poprzez porównanie ich z wynikami symulacji trajektorii elektronów, to muszę tych symulacji przeprowadzić bardzo, bardzo dużo, niekiedy dziesiątki milionów. Wtedy stają się naprawdę istotne, czy pojedyncza symulacja liczy się przez jedną dziesiątą, czy przez jedną setną sekundy”, tłumaczy prof. Jabłoński.

Nowy opis teoretyczny rozpraszania wstecznego elektronów znacząco redukuje czasochłonność obliczeń dzięki analitycznym wzorom zawierającym pewne stałe. Wyliczenie tych stałych trwa tygodniami, jednak dla poszczególnych pierwiastków i energii użytych elektronów należało je wyznaczyć tylko raz. Obecnie są one już powszechnie dostępne w bazach danych amerykańskiego National Institute of Standards and Technology (NIST).

Prof. Jabłoński dodaje, że narzędzia teoretyczne, używane w spektroskopiach powierzchniowo czynnych, potrafią niekiedy wykazywać ogromną 'złośliwość'. W wielu analizach ważną rolę odgrywa funkcja Chandrasekhara, zależność wyprowadzona w 1950 roku przez Subramanyana Chandrasekhara, słynnego indyjskiego astrofizyka i matematyka, w trakcie prób opisu rozpraszania światła w atmosferach planet gazowych. W trakcie analiz spektralnych wartości tej funkcji trzeba wyznaczać wielokrotnie i żeby uniknąć błędów zaokrągleń, należy to robić z dużą dokładnością. Dotychczas była to katorżnicza, długotrwała praca numeryczna, która znacząco ograniczała liczbę możliwych do przeprowadzenia symulacji, co z kolei odbijało się na jakości interpretacji danych eksperymentalnych.

W ostatnim czasie prof. Jabłońskiemu udało się nie tylko zaproponować nową teorię rozpraszania wstecznego elektronów, ale również nowe, tym razem analityczne metody wyznaczania wartości funkcji Chandrasekhara. Raptem się okazało, że zamiast skomplikowanych całek do wyliczenia są zwykłe szeregi i wartość funkcji można bez większych problemów wyznaczyć ze standardową precyzją do 20 miejsc po przecinku, a niekiedy nawet do 35!

„W świetle dotychczasowych praktyk prawdziwie ironiczne było jednak odkrycie, że w całkiem użytecznym zakresie parametrów zagadnienie można zredukować wręcz ekstremalnie. Wzór pozwalający wyznaczyć wartość funkcji Chandrasekhara z dokładnością do kilkunastu miejsc po przecinku daje się bowiem sprowadzić do banalnie prostych operacji matematycznych! Mówiąc obrazowo: właśnie zauważyliśmy, że żeby przedostać się w Warszawie z Pragi Północ na Pragę Południe wcale nie trzeba kupować biletów lotniczych przez Pekin, wystarczy przez chwilę używać nóg. Takie odkrycia naprawdę uczą pokory wobec własnych wcześniejszych dokonań”, mówi prof. Jabłoński.

W opisie teoretycznym zjawisk istotnych w spektroskopiach powierzchniowych przyjmuje się, że powierzchnia badanego materiału jest płaska. Wiele materiałów trudno jednak wypolerować tak, żeby były one rzeczywiście płaskie (na poziomie atomowym). Dlatego materiały często napyla się na gładkie podłoże, którym zazwyczaj jest monokryształ krzemu. Pojawia się tu jednak pytanie: jak gruba powinna być napyłona warstwa, żebyśmy mieli pewność, że badamy ją, a nie podłoże? Bezpieczną grubość warstwy można wyliczyć, gdy znana jest średnia droga swobodna elektronu w materiale. To m.in. właśnie ten parametr badacze na całym świecie będą teraz mogli wyznaczać szybciej i dokładniej dzięki teorii rozpraszania wstecznego elektronów z Instytutu Chemii Fizycznej PAN w Warszawie.

Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk (<http://www.ichf.edu.pl/>) został powołany w 1955 roku jako jeden z pierwszych instytutów chemicznych PAN. Profil naukowy Instytutu jest silnie powiązany z najnowszymi światowymi kierunkami rozwoju chemii fizycznej i fizyki chemicznej. Badania naukowe są prowadzone w dziewięciu zakładach naukowych. Działający w ramach Instytutu Zakład Doświadczalny CHEMIPAN wdraża, produkuje i komercjalizuje specjalistyczne związki chemiczne do zastosowań m.in. w rolnictwie i farmacji. Instytut publikuje około 200 oryginalnych prac badawczych rocznie.

KONTAKT:

prof. dr hab. **Aleksander Jabłoński**
Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie
tel.: +48 22 3433331
email: ajablonski@ichf.edu.pl

PUBLIKACJE NAUKOWE:

„Surface sensitivity of elastic peak electron spectroscopy”; A. Jabłoński; Applied Surface Science 378 (2016) 87–101;
DOI:10.1016/j.apsusc.2016.03.176

POWIĄZANE STRONY WWW:

<http://www.ichf.edu.pl/>

Strona Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk.

<http://www.ichf.edu.pl/press/>

Serwis prasowy Instytutu Chemii Fizycznej PAN.

<http://www.ichfdlafirm.pl/>

Oferta Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk skierowana do przedsiębiorców i przemysłu.

MATERIAŁY GRAFICZNE:

ICHF160629b_fot01s.jpg

HR: http://ichf.edu.pl/press/2016/06/ICHF160629b_fot01.jpg

Prof. dr hab. Aleksander Jabłoński przy aparaturze do spektroskopii powierzchni. (Źródło: IChF PAN, Grzegorz Krzyżewski)

ICHF160629b_fot02s.jpg

HR: http://ichf.edu.pl/press/2016/06/ICHF160629b_fot02.jpg

Wsteczne rozpraszanie elektronów to fundament spektroskopii powierzchni. To samo zjawisko z udziałem fotonów, zachodzące w grubych i gęstych atmosferach innych planet, pozwala nam wieczorem obserwować Wenus, Jowisza czy Saturna. (Źródło: IChF PAN, jch)