

Projekt badawczy ma za zadanie rozwinięcie techniki SIMS poprzez zastosowanie ultracienkich podłoża grafenowych w innowacyjnej geometrii i z wykorzystaniem fulerenowych pocisków klastrowych C<sub>60</sub>. Badania przeprowadzane będą z użyciem symulacji komputerowych metodą dynamiki molekularnej.

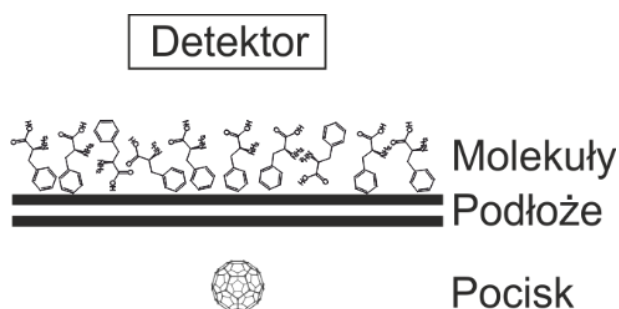
SIMS (z ang. Secondary Ion Mass Spectrometry), czyli Spektrometria Masowa Jonów Wtórnych, jest szeroko stosowaną techniką badawczą. Pozwala ona na wykrywanie składu chemicznego powierzchni próbki w dokładnie określonych jej miejscach. Jej rozdzielczość przestrzenna jest rzędu 50 nm i potrafi wykryć tak małe stężenia jak femtomole związków. Technika ta polega na bombardowaniu powierzchni próbki atomami albo klastrami atomów. Gdy taki pocisk zderza się z próbką atomy znajdujące się na jej powierzchni zostają wyrzucone ponad nią, podobnie jak ziemia i pył przy uderzeniu w planetę asteroidy albo jak kropelki wody po wrzuceniu w nią czegoś ciężkiego. Wyrzucone atomy zostają wykryte i na ich podstawie można stwierdzić jaki jest skład chemiczny próbki.

Technika ta ma jednak pewne wady. Jedną z nich jest trudność w badaniu dużych cząstek. Podczas uderzenia duże związki chemiczne zostają rozerwane na małe fragmenty i dopiero one są wykrywane. Powoduje to trudności w odczytaniu pomiaru i zamyka drogę przed SIMSem do badań biologicznych i biochemicznych. Drugim problemem jest to, że SIMS wykrywa jedynie jony czyli cząstki naładowane elektrycznie. Przy każdym uderzeniu tylko mała część wyrzuconych związków zostaje naładowana, cała reszta pomimo uniesienia się z próbki nie zostaje wykryta. Dlatego też stosuje się najróżniejsze techniki zwiększenia ilości zjonizowanych cząstek opuszczających powierzchnię próbki. Trzecim problemem jest bardzo duży wpływ otoczenia chemicznego wykrywanych cząstek na pochodzący od nich sygnał. Pojedynczy atom tlenu potrafi zmienić wykrywany sygnał o parę rzędów wielkości.

Przedstawiony projekt odpowiada na te problemy. Zaproponowana została w nim nowa geometria dla techniki SIMS. Tzw. geometria transmisyjna polega na uderzeniu w próbkę z jednej jej strony i detekcję po drugiej stronie próbki, zgodnie z rysunkiem 1. Dzięki temu molekuly na badanej powierzchni zostają wypchnięte z niej w stronę detektora a przekaz energii jest bardziej bezpośredni. Zastosowanie ekstremalnie cienkiego podłoża grafenowego, składającego się z paru warstw grafenowych, może pozwolić pociskowi na jego przebicie, wtedy badane związki zostają bezpośrednio uderzone przez pocisk, albo tylko na odkształcenie się i wyrzucenie badanych związków jak z trampoliny. Efekty te pozwalają mieć nadzieję na łagodniejszą interakcję pocisku z powierzchnią a więc uniesienie z niej dużych związków bez ich rozerwania.

Aby zlikwidować problem otoczenia chemicznego zaproponowano naniesienie na powierzchnię pojedynczych badanych cząstek tak oddalonych od siebie aby nie „odczuwały” siebie nawzajem. Tego typu rozwiązania są już stosowane jednak ich wadą jest unosząca się duża ilość atomów pochodzących od podłoża. Zaciemniają one obraz utrudniając znalezienie pojedynczych cząstek. Proponowane podłoża grafenowe, dzięki swoim małym grubościom, same w sobie zawierają mało atomów a więc nie mogą wprowadzić ich za dużo do analizowanych wyników. Ponadto grubsze podłoża, które można nazwać już grafitem, wykazują ciekawą właściwość „łapania” w swoją strukturę atomów pocisku. Z nich też nie unosi się zbyt dużo atomów. Wszystko to w dużym stopniu zmniejsza „zabrudzenie” wyników niepożądanymi danymi.

Projekt także odpowiada na trzecią potrzebę SIMSu – zwiększenie stopnia jonizacji – poprzez dwa różne podejścia. Jednym z nich jest zastosowanie dodatkowej cienkiej warstwy złota, która, jak od dawna wiadomo, zwiększa sygnał tej techniki badawczej. Nie ma jednak zgody co do mechanizmu, który jest odpowiedzialny za takie zjawisko. Poprzez możliwość zbadania nietypowego układu możliwe jest znalezienie argumentu za jedną z dwóch aktualnie rozważanych teorii. Drugim podejściem do problemu jonizacji jest użycie rzadko spotykanego jak na razie pocisku typu „hollow atom”. Jest to szczególnie wysoce naładowany atom poruszający się powoli w kierunku próbki. Atom ten, poprzez swój ładunek, gwałtownie oddziałuje z powierzchnią wyrzuwając jej fragmenty. Ponieważ sam pocisk posiada bardzo duży ładunek możliwe jest, że ułatwi on zjonizowanie się unoszących się z powierzchni cząstek.



Rysunek 1 – Model stosowanej orientacji transmisyjnej (elementy nie w skali).