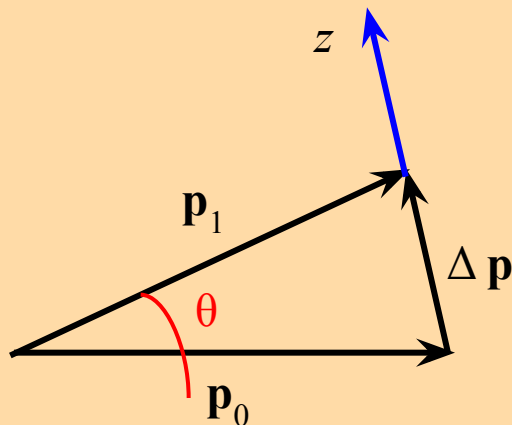


Темы лекции

1. Сечение ударной электронной ионизации.
2. Оже-электроны.
3. Систематика Оже-переходов.
4. Переходы Костера-Кронига.
5. Излучательные переходы.
6. Классификация линий характеристического рентгеновского излучения.
7. Вероятности рентгеновской флуоресценции и Оже-переходов.

При взаимодействии электронов пучка с электронами атомов твердого тела, переданная последним энергия может оказаться больше энергии связи $E_{\text{св}}$ электрона в атоме. В результате такого процесса, который носит название **ударная электронная ионизация**, на одной из оболочек атома образуется вакансия. **Сечение этого процесса $\sigma_{\text{и}}$** будем искать в **малоугловом приближении**.

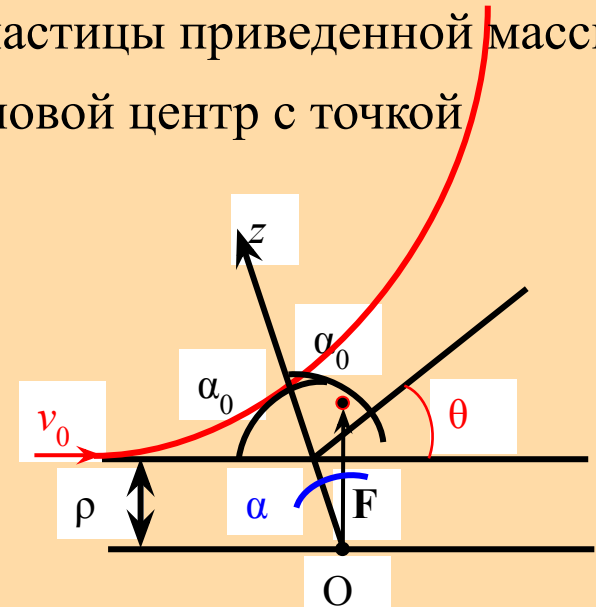


$|\mathbf{p}_0| \cong |\mathbf{p}_1|$, где \mathbf{p}_0 – импульс электрона пучка до процесса рассеяния, \mathbf{p}_1 – после процесса рассеяния. Изменение импульса $|\Delta \mathbf{p}| = 2p_0 \sin(\theta/2)$. Сила, действующая между взаимодействующими электронами, $F = e^2/r$. Так как $d\mathbf{p} = \mathbf{F}dt$, то сила действует вдоль оси z' .

При переходе в с.ц.м. и рассмотрении рассеяния частицы приведенной массы ось z' будет совпадать с прямой, соединяющей силовой центр с точкой наибольшего сближения.

Изменение импульса можно записать в виде

$$\Delta p = \int (dp)_{z'} = \int F \cos \alpha dt = \int F \cos \alpha (dt / d\alpha) d\alpha$$



Поле центральное, сохраняется момент количества движения $m_e v_0 \rho = m_e r^2 (d\alpha/dt)$, поэтому $dt/d\alpha = r^2/v_0 \rho$. Перейдя к переменной интегрирования α

$$\Delta p = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \frac{e^2}{r^2} \cos \alpha \frac{r^2}{\rho v_0} d\alpha = \frac{e^2}{\rho v_0} (\sin \alpha_2 - \sin \alpha_1)$$

$$\alpha_2 = \alpha_0, \alpha_1 = -\alpha_0 \text{ и } \alpha_0 = 90^\circ - \theta/2$$

$$\Delta p = \frac{2e^2}{\rho v_0} \sin \alpha_0 = \frac{2e^2}{\rho v_0} \cos \frac{\theta}{2} \cong \frac{2e^2}{\rho v_0}$$

Энергия, переданная атомному электрону

$$T = \frac{(\Delta p)^2}{2m_e} = \frac{4e^4}{2m_e \rho^2 v_0^2} = \frac{e^4}{\rho^2 E_0}$$

E_0 – энергия электрона пучка перед процессом взаимодействия с атомным электроном.

Следовательно $\rho^2 = (e^4/E_0)/T$ $2\rho d\rho = -(e^4/E_0)(dT/T^2)$.

Дифференциальное сечение ударной электронной ионизации

$$d\sigma_{\text{и}} = |2\pi\rho d\rho| = \frac{\pi e^4}{E_0} \frac{dT}{T^2}$$

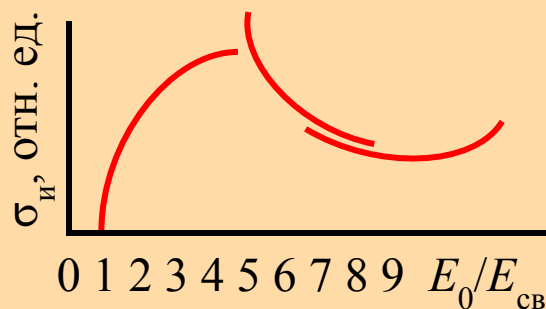
Чтобы получить $\sigma_{\text{и}}$ необходимо проинтегрировать по всем возможным переданным энергиям от $T_{\text{min}} = E_{\text{св}}$ до $T_{\text{max}} = E_0$.

$$\sigma_{\text{и}} = \int_{E_{\text{св}}}^{E_0} \frac{\pi e^4}{E_0} \frac{dT}{T^2} = \frac{\pi e^4}{E_0} \left(\frac{1}{E_{\text{св}}} - \frac{1}{E_0} \right)$$

Если $E_0 \gg E_{св}$, то $\sigma_{и} = \pi e^4 / E_0 E_{св} = \pi e^4 / (E_{св})^2 x$, где $x = E_0 / E_{св}$.

При $x \leq 1$ процесс ударной электронной ионизации невозможен и, следовательно, $\sigma_{и} = 0$.

С другой стороны при больших x величина $\sigma_{и} \sim 1/x$, следовательно, $\sigma_{и}(x)$ должно иметь максимум.



Более детальный расчет показывает, что **сечение ударной электронной ионизации имеет максимум при $E_0 = (3-4) E_{св}$**

Для описания состояния отдельного электрона в атоме необходимо задать четыре квантовых числа:

главное квантовое число $n = 1, 2, 3, \dots, 7$ – определяет основное значение энергии электрона в атоме, которое в первом приближении есть $-13,6Z^2/n^2$ эВ;

орбитальное квантовое число l при заданном n может принимать значения $0, 1, 2, \dots, n - 1$, определяет угловой орбитальный момент электрона;

квантовое число углового момента j при заданном l может принимать значения $|l \pm 1|$, характеризует полный угловой момент электрона, складывающийся из орбитального углового момента и спина;

магнитное квантовое число m_j при заданном j может принимать все полуцелые значения от $-j$ до $+j$, определяет проекцию полного углового момента электрона на заданное направление.

Электроны, занимающие в атоме энергетические уровни с одинаковым главным квантовым числом n , образуют оболочку. Максимальное число электронов в оболочке $2n^2$, так как в соответствии с принципом Паули в каждом состоянии может находиться один электрон. Электронные оболочки с различными значениями n обозначают заглавными латинскими буквами следующим образом:

n	1	2	3	4	5	6
символ оболочки	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>O</i>	<i>P</i>

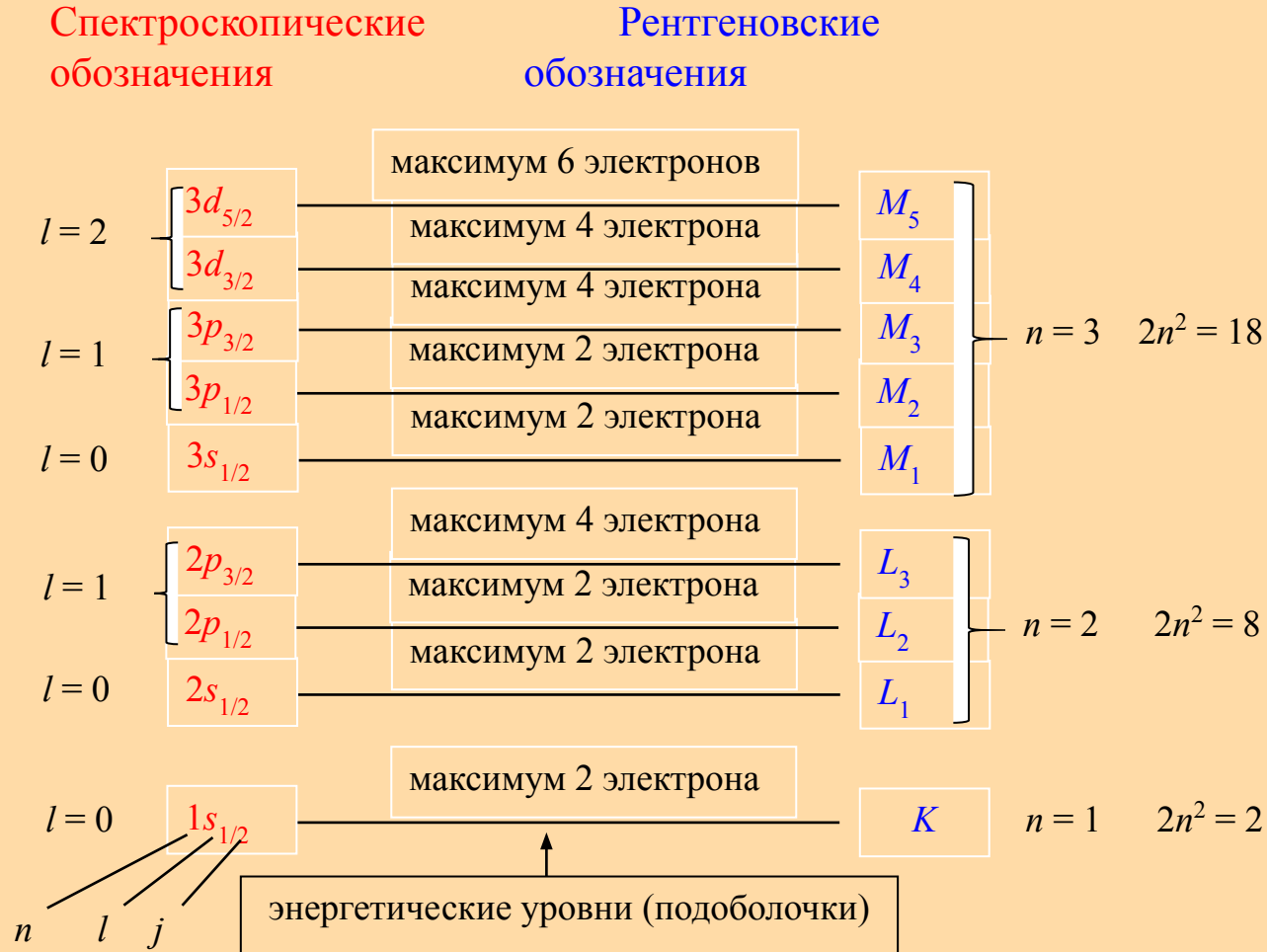
Состояния с различными значениями l имеют следующие спектроскопические обозначения:

l	0	1	2	3	4	5
символ	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h</i>

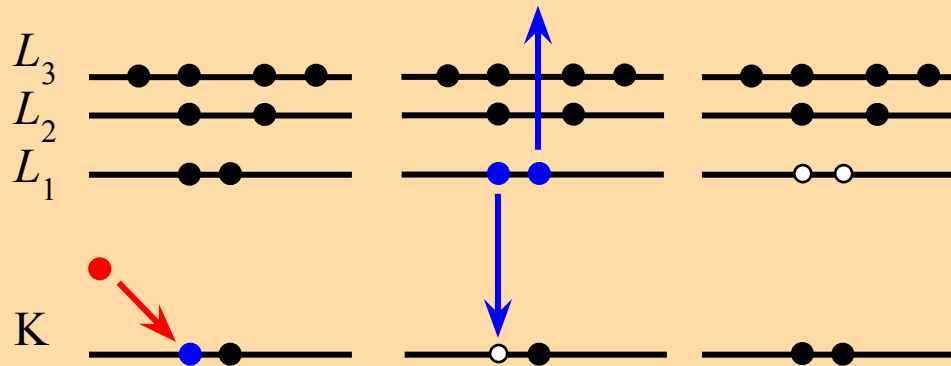
Число состояний с одинаковыми n , l и j равно $2j + 1$.

Совокупность электронов с такими квантовыми числами - **подоболочка, на которой может быть до $2j + 1$ электронов**, различающихся значениями m_j .

Существует два способа обозначения энергетических уровней в атоме: спектроскопическое и рентгеновское.



Оже-процесс



испущенный атомом электрон – **Оже-электрон**

Данный переход обозначается KL_1L_1

на первом месте символ оболочки/подоболочки, где произошла ударная электронная ионизация,

на втором – символ подоболочки, с которой произошел переход электрона на образовавшуюся в результате ионизации вакансию,

на третьем – символ подоболочки, с которой произошел выход Оже-электрона из атома.

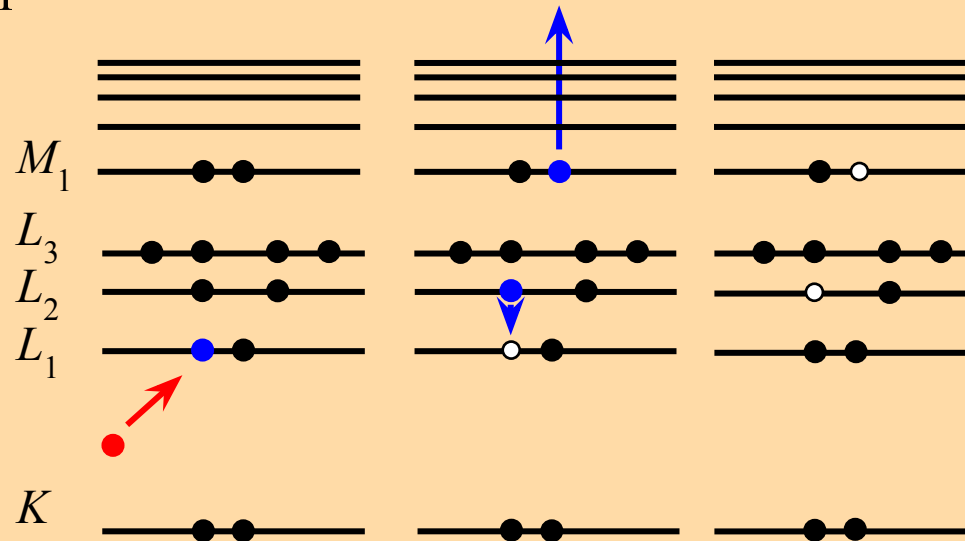
Полное обозначение Оже-перехода включает также конечное состояние атома в спектроскопических обозначениях. Рассмотренный переход оставляет пустой оболочку $2s$ и полностью заполненными оболочки $2p$, поэтому **полное обозначение данного перехода** $KL_1L_1 (2s^02p^6)$.

При ионизации K -оболочки возможны также переходы $KL_1L_{2,3}$ с конечным состоянием $(2s^12p^5)$, $KL_2L_{2,3}$ и KL_3L_3 с конечным состоянием $(2s^22p^4)$, т.е. всего 6 переходов. **Наибольшую интенсивность имеет переход KL_2L_3 .**

Если ударная электронная ионизация произошла на L -оболочке, то вакансию заполняет электрон с M -оболочки, а другому электрону M -оболочки передается избыток энергии и он выходит из атома. Обозначения подобных переходов LMM .

Переходы Костера-Кронига

Если в конечном состоянии одна из вакансий находится в той же оболочке (но не в той же подоболочке), которая была ионизована в результате электронного удара.



Скорости переходов Костера-Кронига намного больше скоростей Оже-переходов.

Если первичная вакансия в K -оболочке, то переход Костера-Кронига невозможен.

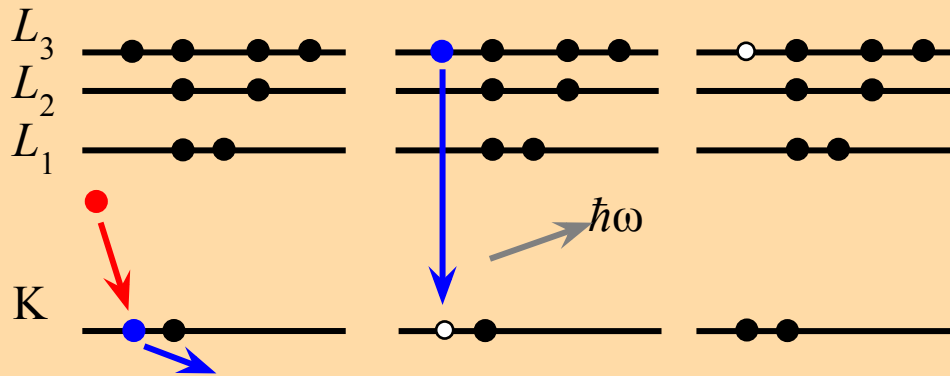
Энергия Оже-электрона в первом приближении может быть вычислена исходя из энергий связи электронов, участвующих в Оже-процессе. В частности, для перехода KL_2L_3

$$E_A = E_{\text{св}}^K - E_{\text{св}}^{L_2} - E_{\text{св}}^{L_3}$$

Это выражение не учитывает наличие вакансий, которое немного изменяет энергии связи. Точные значения E_A приведены в справочниках.

Так как энергии связи разные для разных элементов, то, определив энергию Оже-электрона, можно сказать, каким элементом испущен данный электрон. На этом основан **метод Оже-электронной спектроскопии**, который будет подробно рассмотрен в следующем семестре.

При образовании первичной вакансии за счет ионизации электронным ударом конкурирующим с Оже-процессом будет **излучательный переход с испусканием кванта характеристического рентгеновского излучения.**



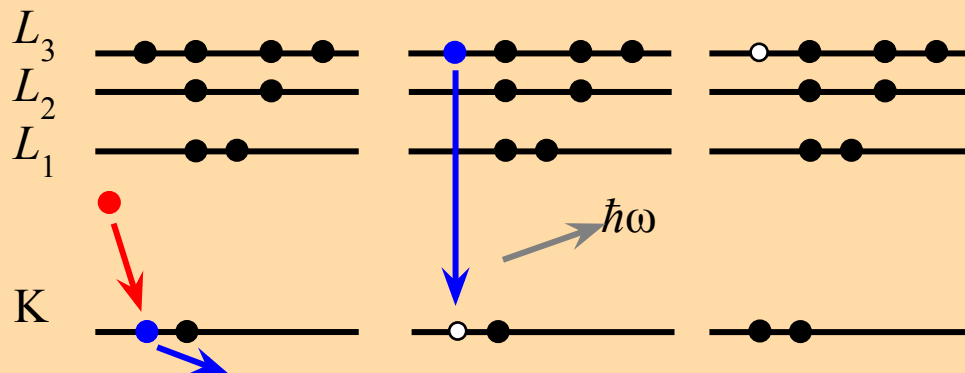
Возможен переход электрона также с L_2 подболочки.

Излучательный переход с L_1 запрещен **правилами отбора**

$$\Delta l = \pm 1; \Delta j = 0, \pm 1.$$

На Оже-переходы данные правила отбора не распространяются.

Схема излучательного перехода при заполнении вакансии с подоболочки

 L_3 

Энергия рентгеновского кванта определяется разностью энергии связи оболочки, ионизованной электронным ударом и подоболочки с которой на образовавшуюся вакансию перешел электрон. Для рассмотренного излучательного перехода точное значение энергии рентгеновского кванта

$$\hbar\omega = E_{CB}^K - E_{CB}^{L_3}$$

По энергии кванта ХРИ можно сказать в каком элементе произошел излучательный переход. На этом основан **электронный микроанализ**,

Система обозначений для излучательных переходов (**линии ХРИ**)

Переход	Линия	Переход	Линия	Переход	Линия	Переход	Линия
$K - L_1$	$K\alpha_3$	$L_1 - M_5$	$L\beta_9$	$L_2 - N_4$	Lo	$L_3 - N_{6,7}$	Lu
$K - L_2$	$K\alpha_2$	$L_1 - N_2$	$L\gamma_2$	$L_2 - O_1$	$L\gamma_8$	$L_2 - O_1$	$L\beta_7$
$K - L_3$	$K\alpha_1$	$L_1 - N_3$	$L\gamma_3$	$L_2 - O_4$	$L\gamma_6$	$L_3 - O_{4,5}$	$L\beta_5$
$K - M_2$	$K\beta_3$	$L_1 - N_5$	$L\gamma_2$	$L_3 - M_1$	Ll	$M_3 - N_5$	$M\gamma$
$K - M_3$	$K\beta_1$	$L_1 - O_{2,3}$	$L\gamma_4$	$L_3 - M_2$	Lt	$M_4 - N_2$	$M\xi_2$
$K - M_{4,5}$	$K\beta_5$	$L_1 - P_{2,3}$	$L\gamma_{13}$	$L_3 - M_3$	Ls	$M_4 - N_3$	$M\delta$
$K - N_{2,3}$	$K\beta_2$	$L_2 - M_1$	$L\eta$	$L_3 - M_4$	$L\alpha_2$	$M_4 - N_4$	$M\beta$
$K - N_{4,5}$	$K\beta_4$	$L_2 - M_3$	$L\beta_{17}$	$L_3 - M_5$	$L\alpha_1$	$M_4 - O_{2,3}$	$M\eta$
$L_1 - M_2$	$L\beta_4$	$L_2 - M_4$	$L\beta_1$	$L_3 - N_1$	$L\beta_6$	$M_5 - N_4$	$M\xi_1$
$L_1 - M_3$	$L\beta_3$	$L_2 - N_1$	$L\gamma_5$	$L_3 - N_4$	$L\beta_{15}$	$M_5 - N_4$	$M\alpha_2$
$L_1 - M_4$	$L\beta_{10}$	$L_2 - N_4$	$L\gamma_1$	$L_3 - N_5$	$L\beta_2$	$M_5 - N_7$	$M\alpha_1$

Наиболее интенсивные линии : $|\Delta l| = 1$; $|\Delta j| = 0$, $|\Delta j| = 1$.

Выход рентгеновской флуоресценции - вероятность заполнения вакансий в той или иной оболочке или подоболочке при переходе, сопровождаемом выходом ХРИ.

Сумма вероятностей выхода рентгеновской флуоресценции и Оже-электронов равна единице.

Зависимости вероятности выхода

рентгеновской флуоресценции

(вероятность фотоэффекта)

от атомного номера для *K*-оболочки

и для *L*-оболочки

(усредненная по трем подоболочкам).

для элементов с малым атомным номером

преобладают Оже-переходы,

для более тяжелых элементов преобладающим механизмом является рентгеновская флуоресценция.

