

Оже микроскопия

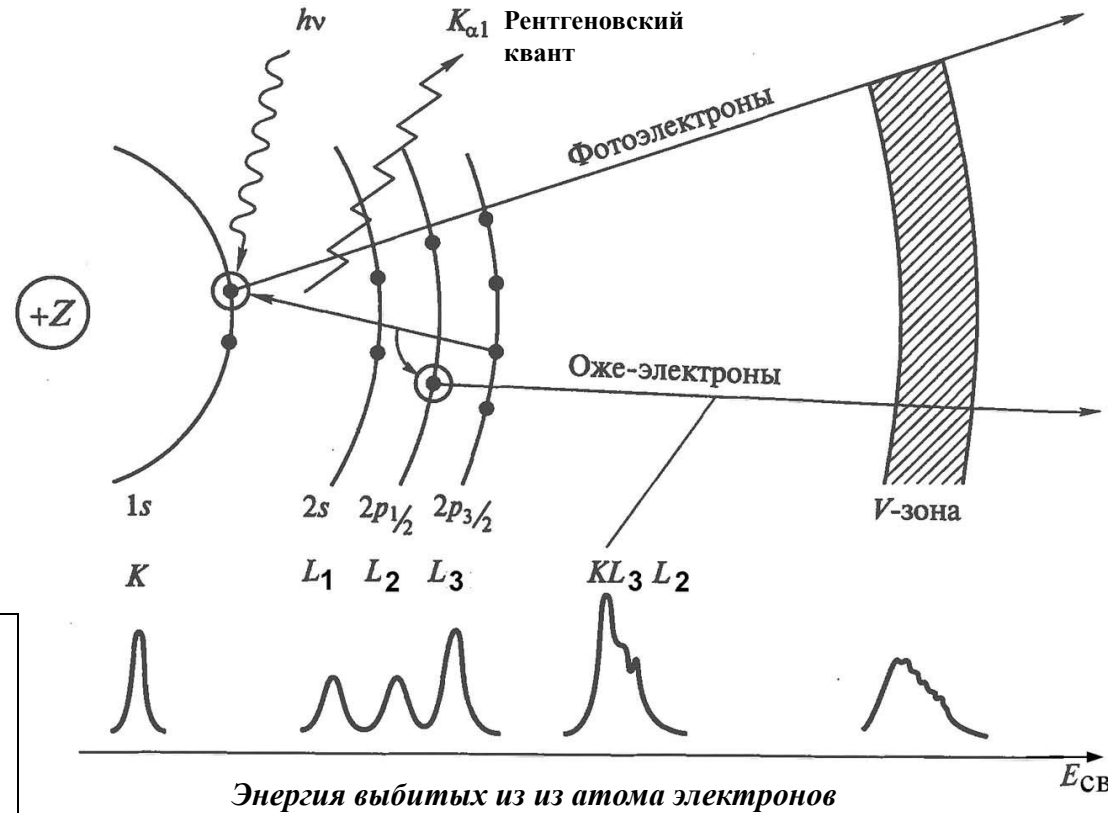
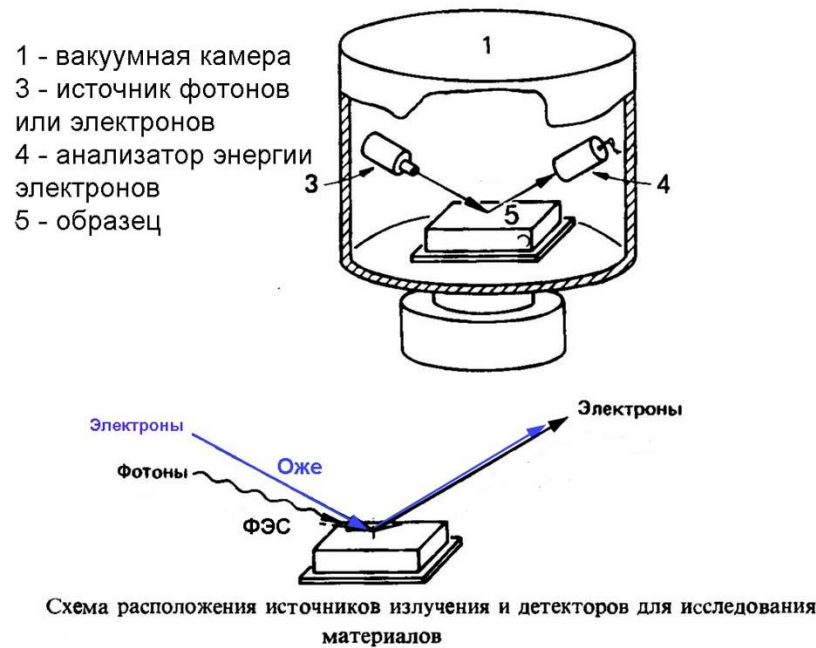


Схема протекающих в атоме процессов при облучении вещества ионизирующим излучением



Квантовые числа, электронные конфигурации обозначения

Для квантовомеханического описания состояния электрона в атоме требуется задать четыре квантовых числа:

главное квантовое число $n = 1, 2, \dots$,

орбитальное квантовое число $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$,

магнитное квантовое число $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$,

спиновое квантовое число $m_s = +1/2, -1/2$.

Как следует из принципа запрета Паули, только один электрон может иметь заданный набор квантовых чисел, т. е. никакие два электрона в атоме не могут соответствовать одному и тому же набору n, l, m и m_s . Если принимать во внимание взаимосвязь между орбитальным моментом и спином (т.е. спин-орбитальное взаимодействие), то возможен другой набор квантовых чисел.

Электрон одновременно имеет орбитальный момент (квантовое число l) и спиновый момент s . Результирующий спиновый плюс орбитальный момент, $j = l + s$, имеет величину

$$A_j = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad \text{для } j = |l \pm 1/2|,$$

а проекция на полярную ось имеет квантованные значения

$$(A_j)_z = m_j \hbar,$$

где m_j принимает целочисленные значения $j, j-1, \dots, -j$. Таким образом, для $j = \frac{3}{2}$, $m_j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$. В спектроскопических обозначениях квантовое число полного момента атомного состояния записывается в виде индекса; так, состояние с главным квантовым числом 2, $l = 1$ и $j = 3/2$, обозначается как $2p_{3/2}$.

При рассмотрении спин-орбитального расщепления соответствующим набором квантовых чисел является

главное квантовое число $n = 1, 2, 3, \dots$,

орбитальное квантовое число $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$,

квантовое число углового момента $j = |l \pm 1/2|$,

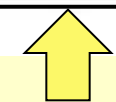
z -проекция квантового числа j $m_j = j, j-1, \dots, -j$.

Квантовые числа j и m_j всегда полуцелые.

Таблица 1 . Атомные и рентгеновские обозначения

Квантовые числа			Атомные обозначения	Число электр. на уровне	Рентг. термы	Электр. конфигур.
n	l	j				
3	2	5/2	3d _{5/2}	6	M ₅	3d ¹⁰ (M _{4,5})
		3/2	3d _{3/2}	4	M ₄	
	1	3/2	3p _{3/2}	4	M ₃	3p ⁶ (M _{2,3})
		1/2	3p _{1/2}	2	M ₂	
	0	1/2	3s	2	M ₁	3s ² (M ₁)
2	1	3/2	2p _{3/2}	4	L ₃	2p ⁶ (L _{2,3})
		1/2	2p _{1/2}	2	L ₂	
	0	1/2	2s	2	L ₁	2s ² (L ₁)
1	0	1/2	1s	2	K	1s ² (K)

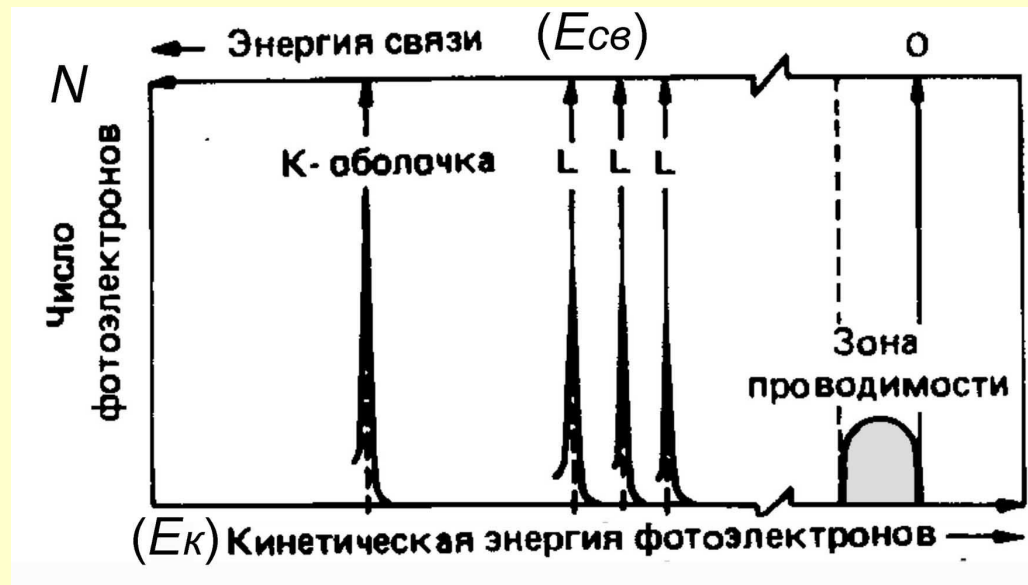
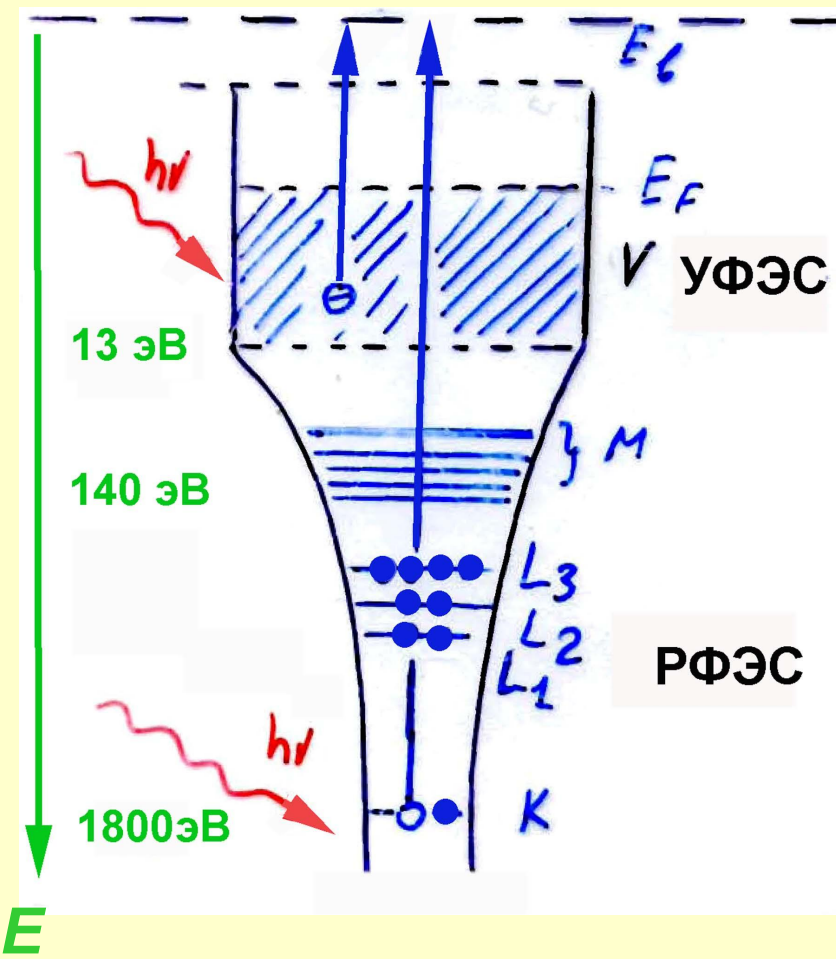
E



nlj

Число электронов на уровне = $2j + 1$

Схема формирования фотоэлектронных спектров



$$E_K = h\nu - E_{св}$$

Источники возбуждающего монохроматического излучения

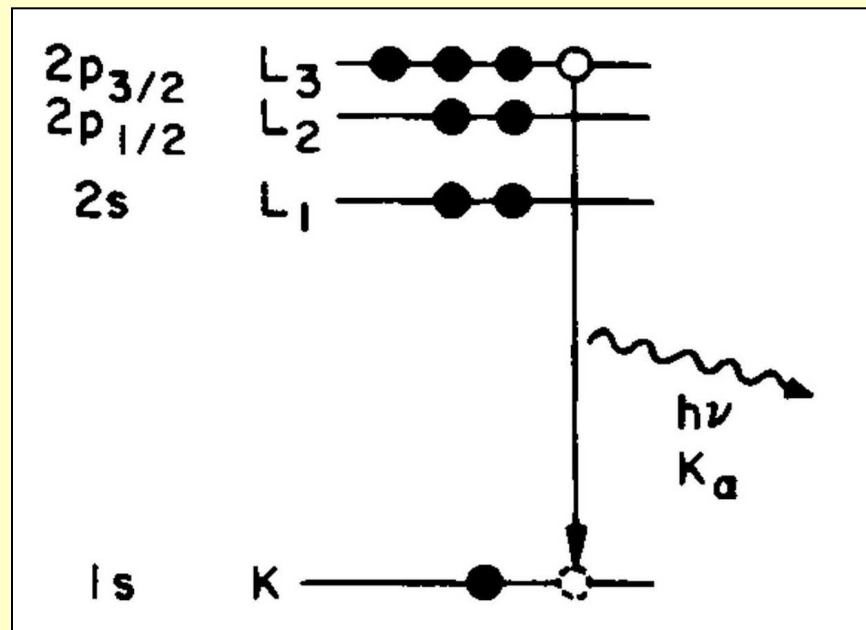
УФЭС: Газовый разряд в He
21,2 эВ; 40,8 эВ

РФЭС: излучение рентгеновской
трубки

линия $MgK\alpha$ – 1254 эВ

линия $AlK\alpha$ – 1487 эВ

Синхротронное излучение – до
10 КэВ



Принципы работы анализаторов энергии электронов

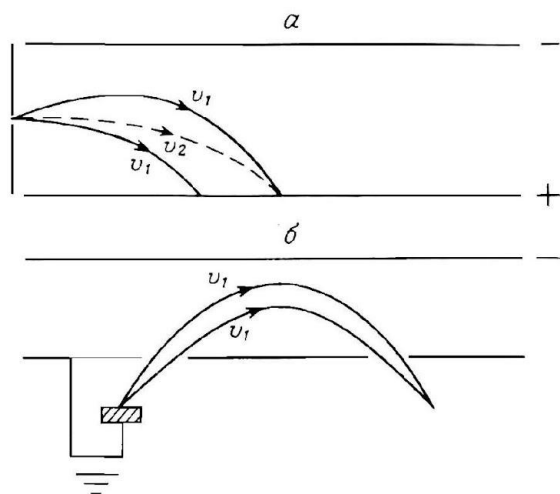


Рис. 3.6. Траектории электронов в плоском конденсаторе. *a* — электроны инжектируются вдоль силовых линий перпендикулярно полю. Электроны со скоростью $v_2 > v_1$ отклоняются заметно меньше. Однако электроны с начальной скоростью v_1 могут попасть в ту же точку, если они будут инжектироваться под необходимым углом к главному направлению. *б* — схема плоского зеркального анализатора, используемого в фокусирующей конфигурации.

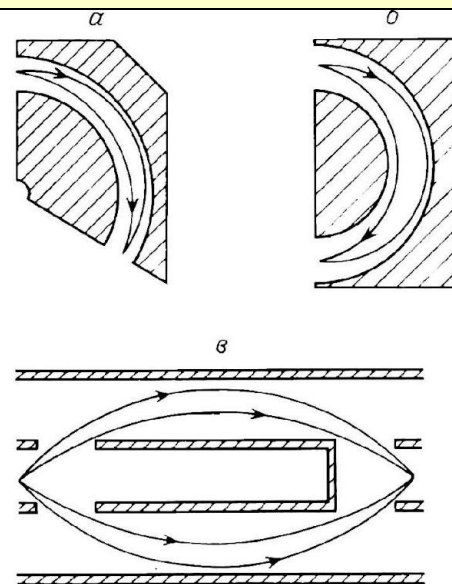


Рис. 3.7. Схема геометрии анализатора и траектории электронов в 127° -ном анализаторе: *a* — цилиндрические электроды, 180° -ный сферический сектор или концентрический полусферический анализатор (ПСА); *б* — анализатор типа «цилиндрическое зеркало» (АЦЗ) с электродами сферического сектора; *в* — анализатор типа «цилиндрическое зеркало», обладающий цилиндрической симметрией.

Схема фотоэлектронного спектрометра

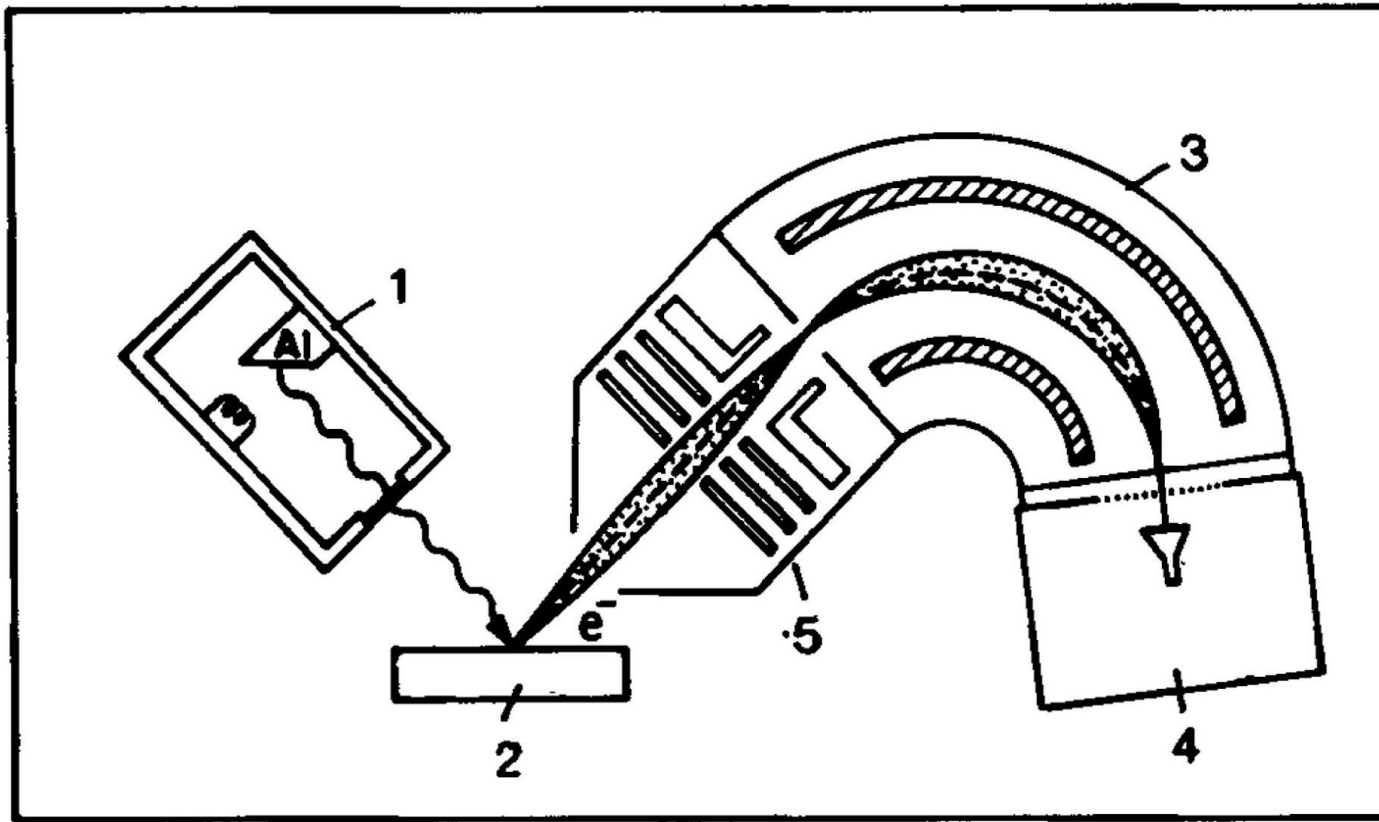


Рис. 9.2. Схема важнейших приборов, используемых в рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Рентгеновское излучение возникает на алюминиевом аноде (1) при бомбардировке электронами, испускаемыми нитью накала. Падая на образец (2), рентгеновское излучение вызывает появление фотоэлектронов, которые после прохождения электроинтерференционного анализатора энергии (3) и электронно-оптической системы (5) регистрируются детектором (4).

Экспериментальные фотоэлектронные спектры

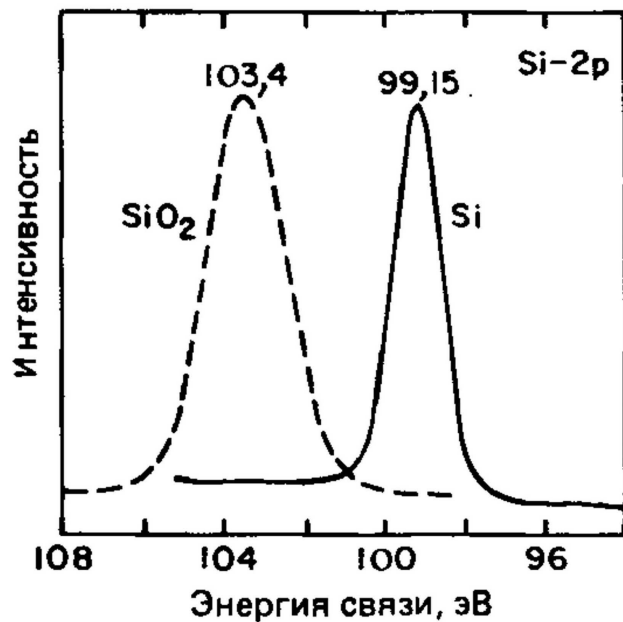


Рис. 9.11. Химический сдвиг энергии связи линии Si 2p в кремнии и SiO₂. Спектры получены с помощью излучения AlK_α

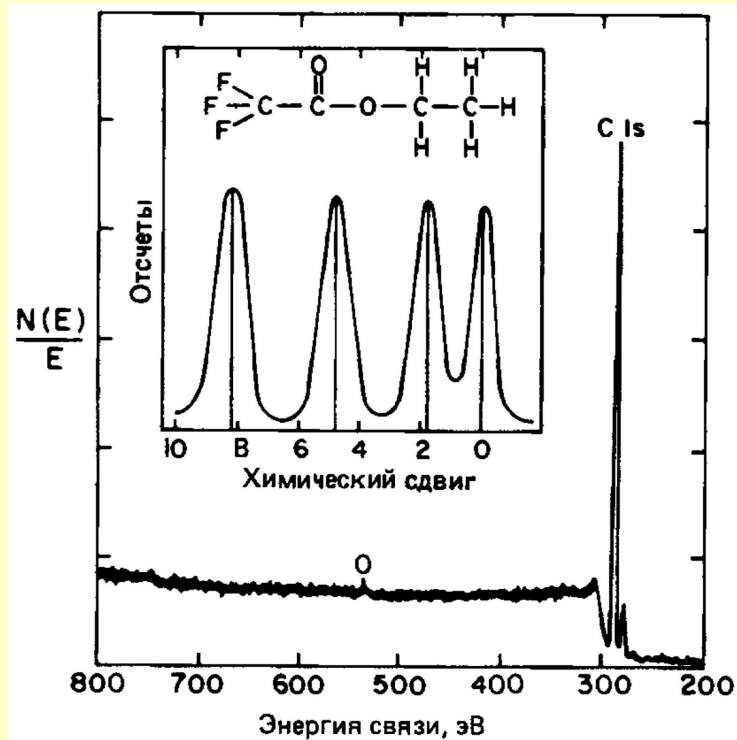


Рис. 9.12. Химический сдвиг в атоме углерода, входящем в состав трифторацетата. Четыре углеродные линии соответствуют четырем атомам углерода в молекуле

Химический сдвиг

Экспериментальные фотоэлектронные спектры

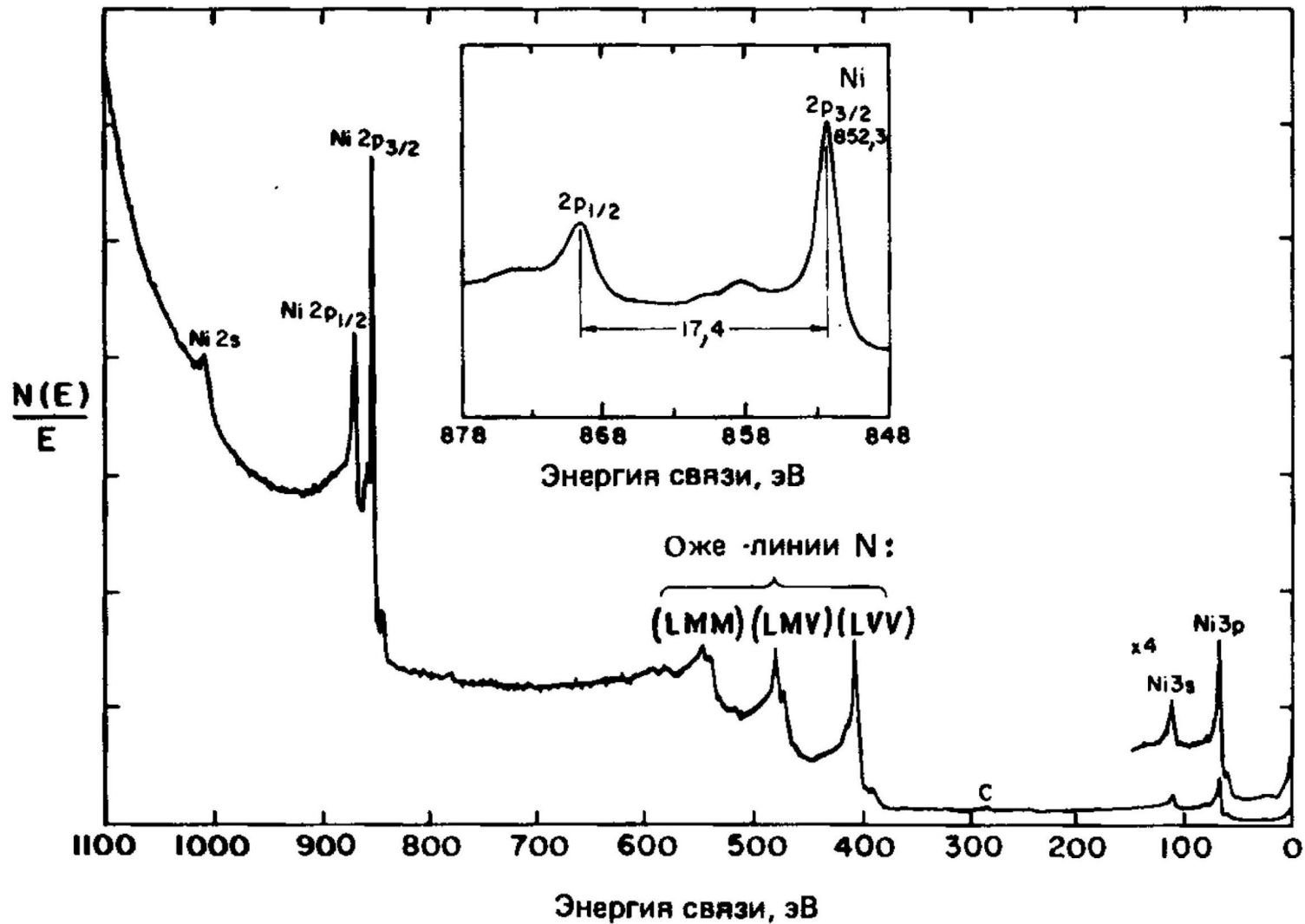


Рис. 9.7. Энергетический спектр электронов, выбитых из никеля при облучении фотонами $Mg(K_{\alpha})$ с энергией 1,25 кэВ. На энергетической шкале приведена энергия связи, т. е. $h\nu - E_{кин}$. Значения на вертикальной шкале, представленные в виде $N(E)/E$, отражают убывание восприимчивости спектрометра по закону $1/E$ [17].

Изучения адсорбции

Адсорбция бензола на Ni

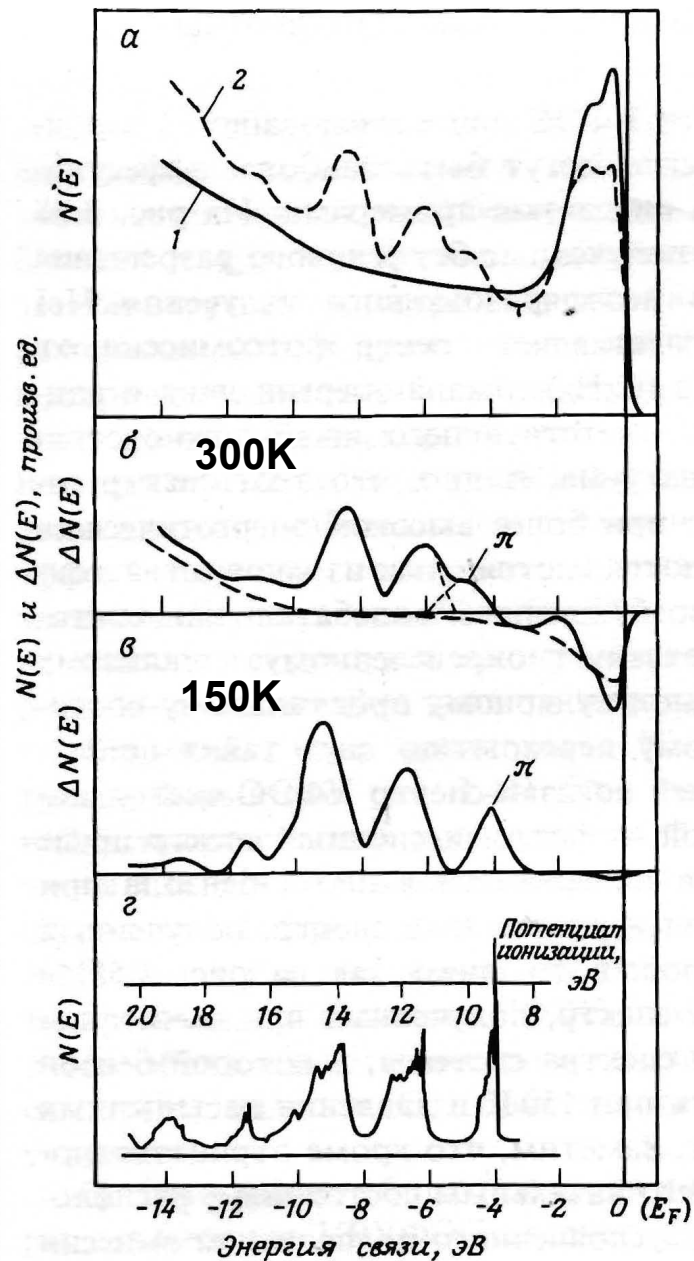


Рис. 3.58. *a* — УФЭС-спектры чистой поверхности Ni{111} и той же поверхности со слоем хемосорбированного бензола (энергия падающих фотонов 21,2 эВ); *б* — спектр, представляющий разность этих спектров; *в* — разностный спектр после конденсации слоя бензола на поверхность; *г* — УФЭС-спектр бензола в газовой фазе (из работы [80]), смещенный относительно верхних спектров для сопоставления относительного расположения пиков [81]. 1 — чистая поверхность; 2 — поверхность после адсорбции бензола при экспозиции 2,4 Л.

Схемы Оже переходов

$$E_{kin} = E_K - E_{L_1} - E_{L_1}$$

Энергия возбуждающего Оже переходы электронного пучка – около 1КэВ

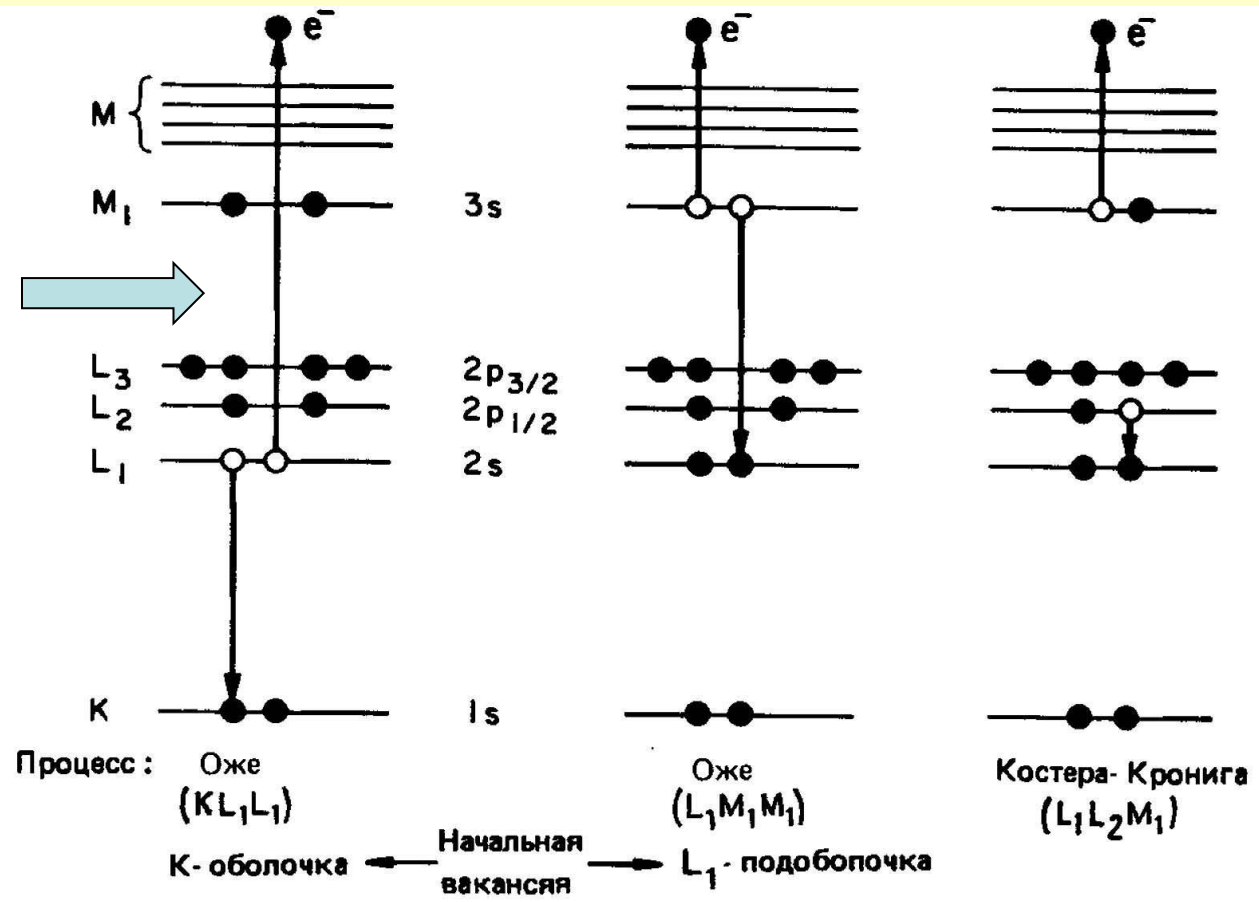


Рис. 11.1. Схематическое представление различных двухэлектронных процессов снятия возбуждения. Оже-переход KL_1L_1 соответствует первоначальной дырке в K -оболочке, которая заполняется электроном с L_1 -оболочки, и одновременно другой L_1 -электрон выбрасывается в вакуум. Оже-переход LM_1M_1 соответствует процессу с первоначальной $2s$ -вакансией. Переход Костера — Кронига $L_1L_2M_1$ отвечает первоначальной дырке в L_1 -оболочке, которая заполняется электроном с той же самой оболочке (но другой подоболочки L_2).

Оже-линии кремния

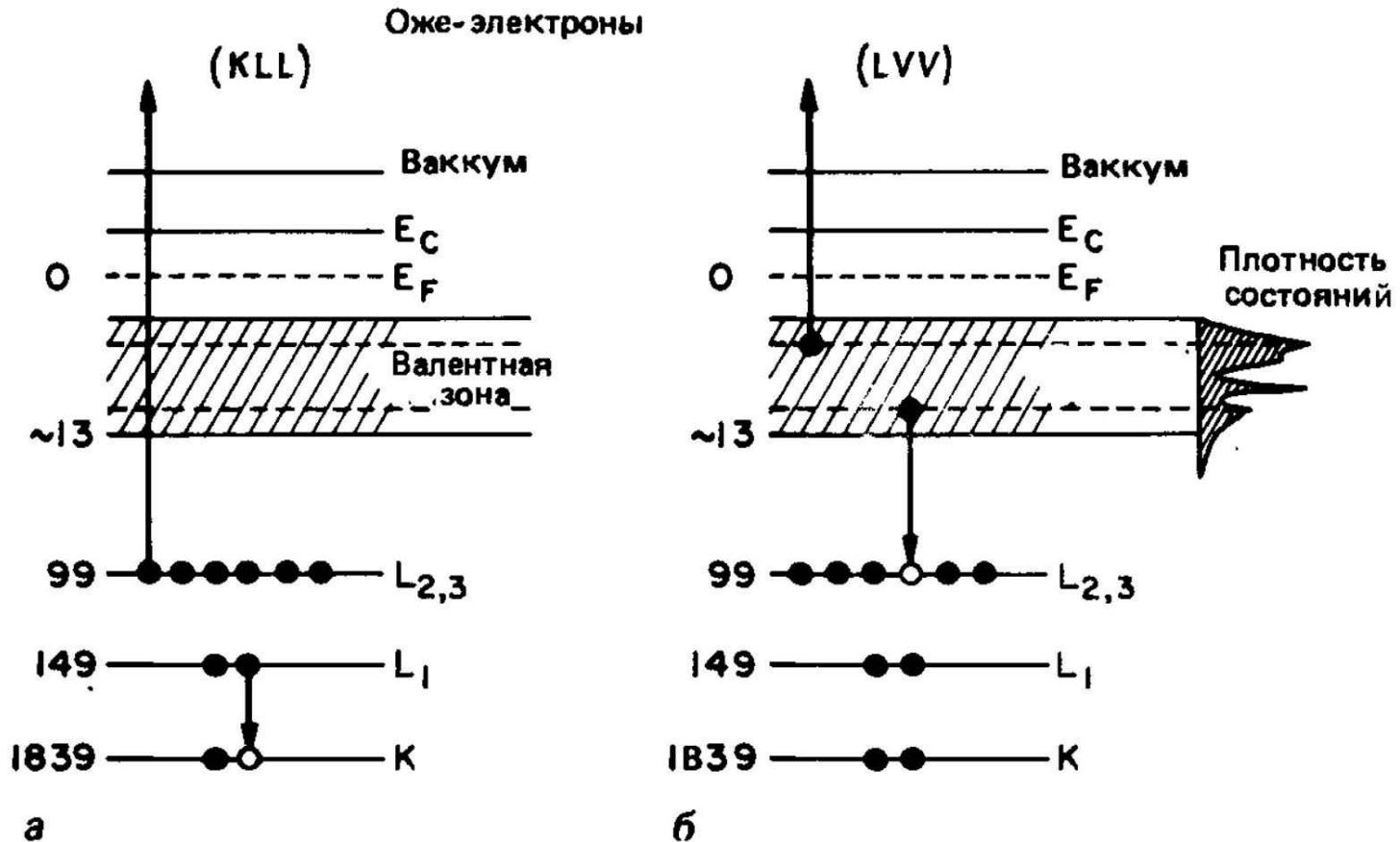
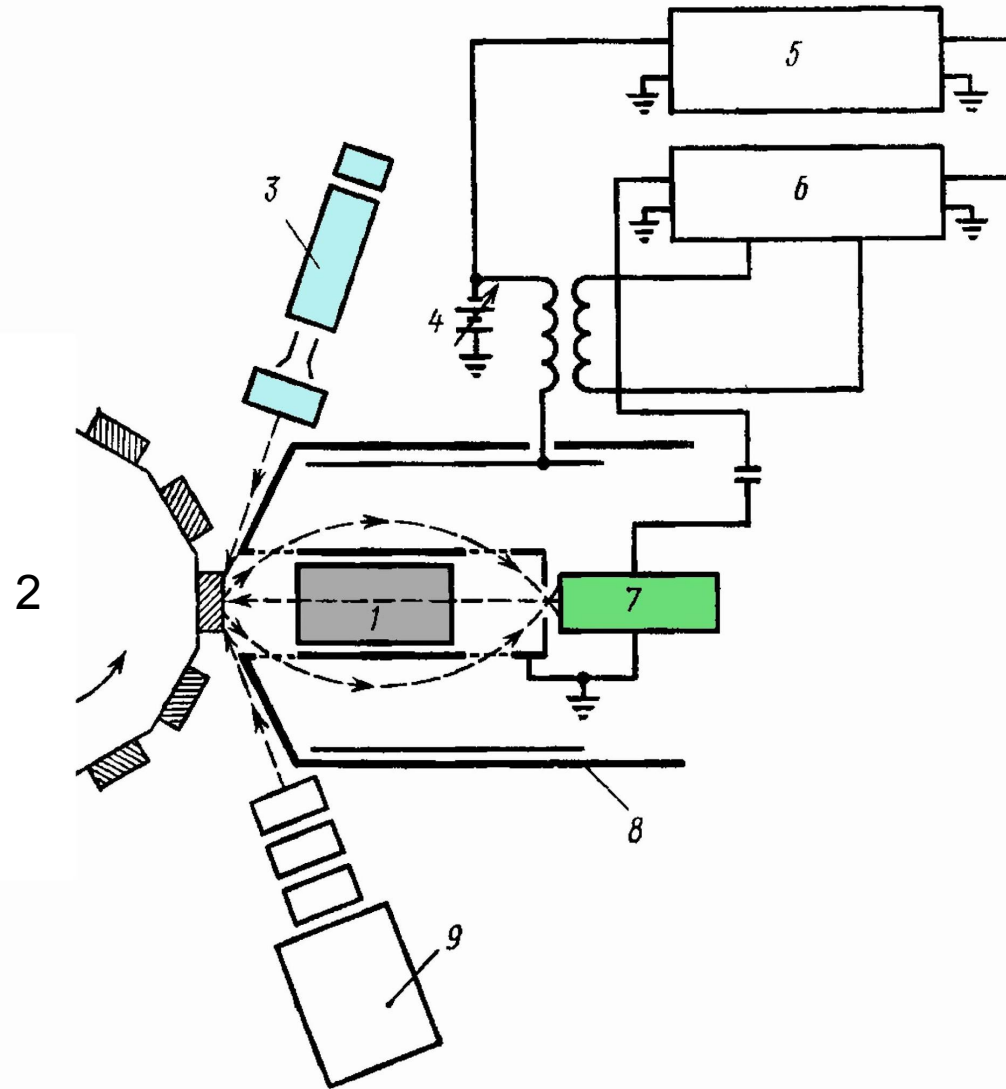


Рис. 11.2. Схема оже-процессов $KL_1L_{2,3}$ (а) и LVV (б) при снятии возбуждения в кремнии. Значения энергий связи показаны слева. В процессе $KL_1L_{2,3}$ энергия оже-электрона приблизительно равна 1591 эВ, а оже-электрон $L_{2,3}VV$ имеет энергию около 90 эВ.

Схема Оже спектрометра



Фиг. 8 Оже-спектрометр с анализатором типа цилиндрического зеркала.

1—электронная пушка, 2—поворотный многопозиционный держатель образцов, 3—электронная пушка, 4—источник пилообразного напряжения; 5—двухкоординатный самописец или осциллограф, 6—синхронный детектор, 7—электронный умножитель, 8—магнитный экран, 9—нонная пушка для распыления

Оже спектры

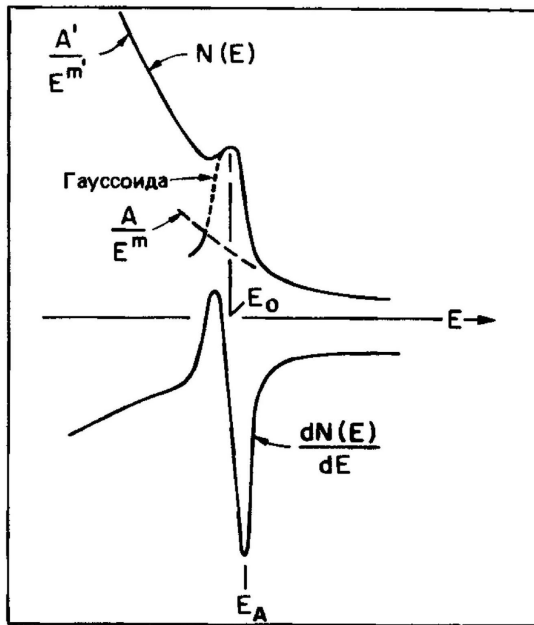
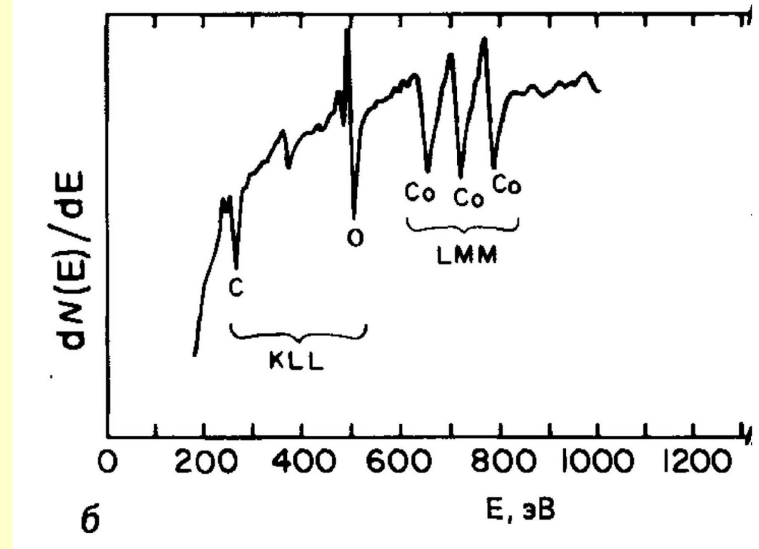
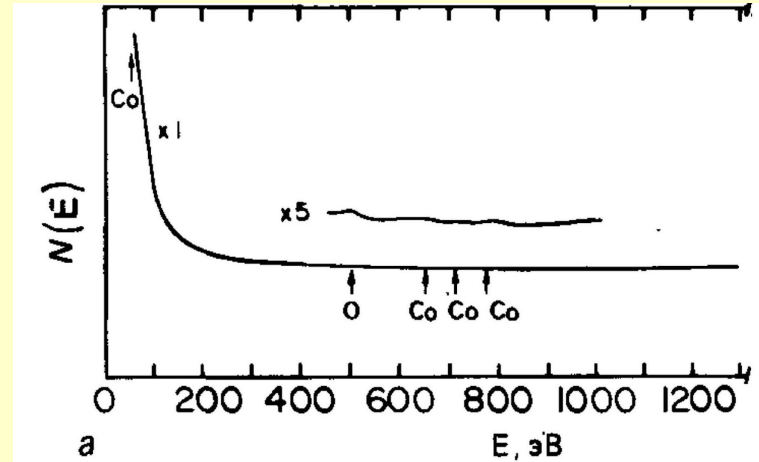
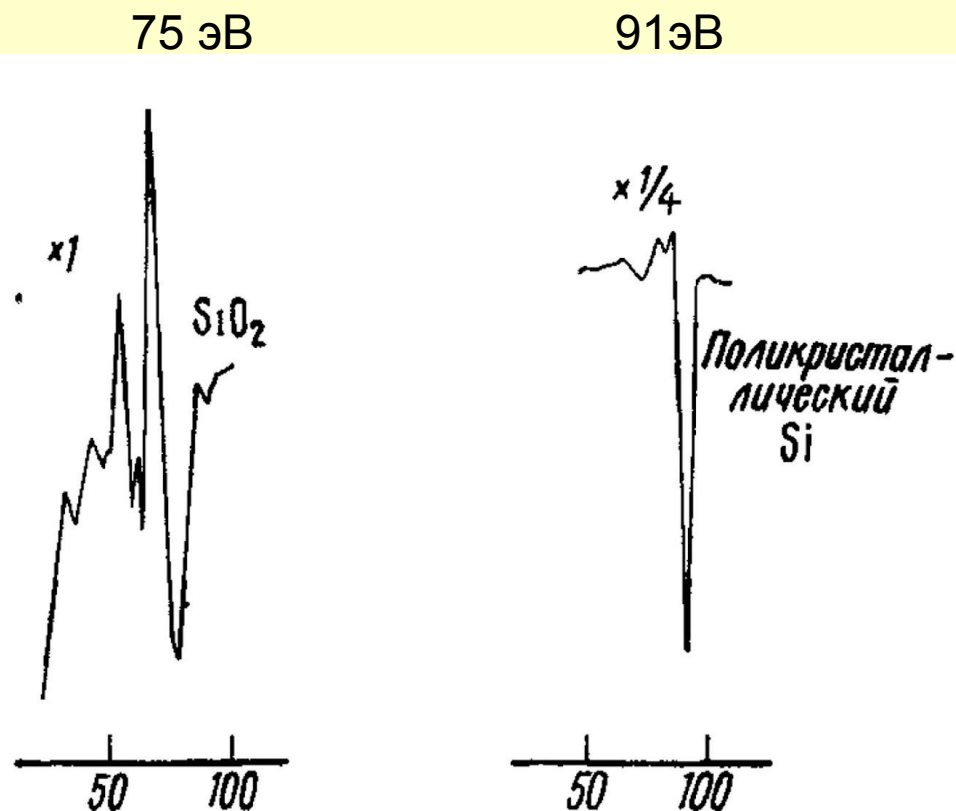


Рис. 11.10. Гипотетический спектр $N(E)$, содержащий медленно меняющийся фон AE^{-m} , гауссов пик и низкоэнергетичную ступеньку вида $A'E^{-m}$. Виизу приведена производная спектра по энергии. Обратите внимание на то, что энергия E_A , соответствующая нижнему выбросу производной, соответствует области наибольшего наклона $N(E)$.



Химический сдвиг Оже линии кремния



Фиг 5 Спектры оже-электронов, соответствующие переходу LVV для SiO₂ и чистого поликристаллического кремния.

Регистрация адсорбированного кислорода на Si

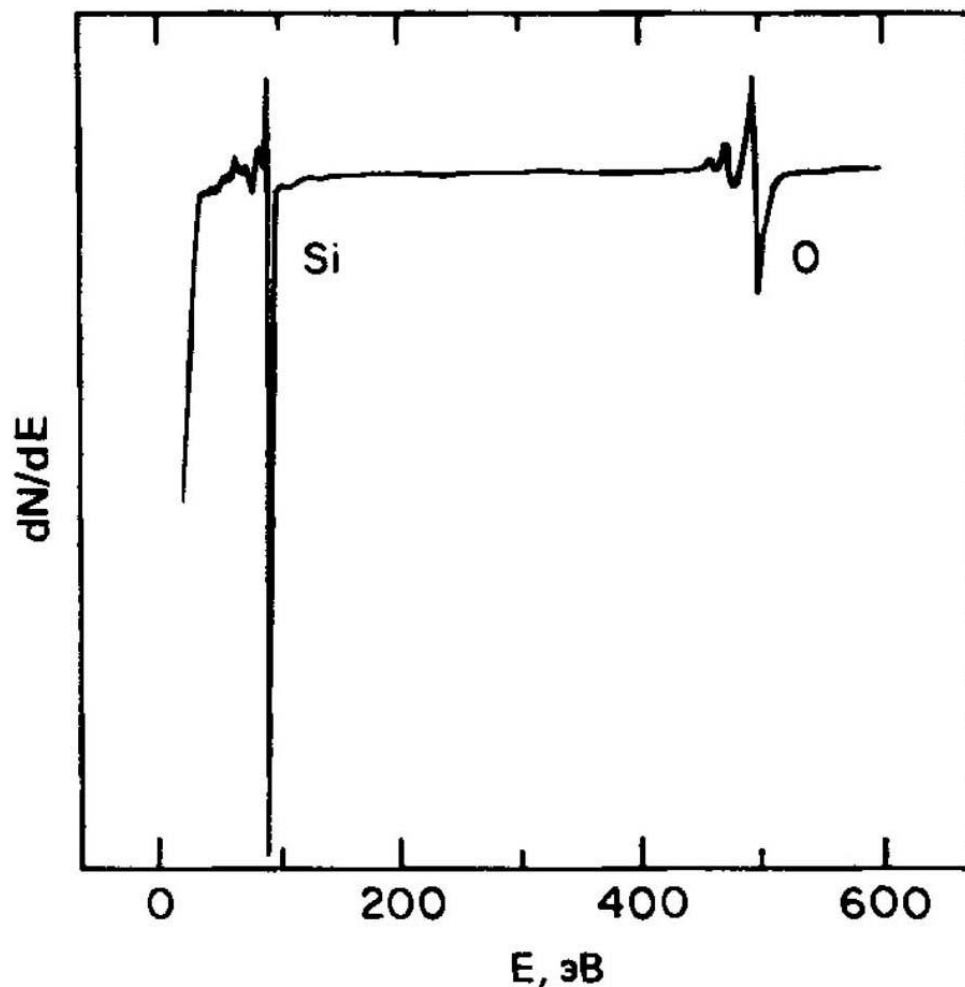


Рис. 11.12. Оже-спектры dN/dE от монокристалла Si (111) после адсорбции $\sim 0,5$ монослоя атомов кислорода.