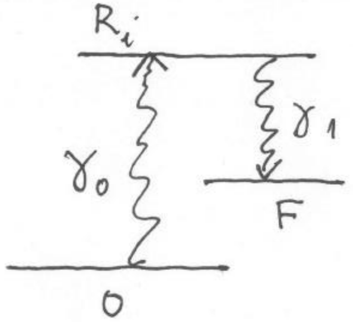
PHOTON IN – PHOTON OUT

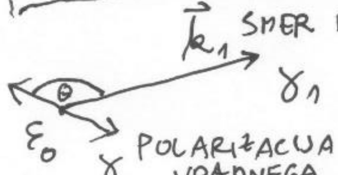
R.N. Zare: ANGULAR MOMENTUM Wiley, NY 1988

0

KAKŠNA JE KOTNA PORAZDELITEV IZSEVANIH FOTONOV?



$$\boxed{\frac{d\sigma^r_{iF}}{d\Omega_1} = \frac{\sigma^r_{iF}}{4\pi}\left(1+\beta_{iF}P_2(\hat{k}_1\cdot\hat{\varepsilon}_0)\right)} \quad *$$



$\vec{k}_1$ SMER IZSEVANEGA FOTONA

ε_0 γ_0 POLARIZACIJA VPADNEGA FOTONA

PRESEK ZA ABSORPCIJO FOTONA γ_0

$$\sigma^r_{iF} = \sigma_i \frac{\Gamma^r_{iF}}{\Gamma^a_i + \Gamma^r_i}$$

VERJETNOST ZA SEVALNI RAZPAD V $|F\rangle$ γ_1

Γ^a_i: VERJETNOST/s ZA PREHOD (NESEVALNI)

Γ^r_i: VERJETNOST/s ZA SEVALNI RAZPAD R_i

$$\frac{d\sigma^r_{iF}}{d\Omega_1} \propto \frac{1}{2J_0+1}\sum_{M_0,M_F,r}\Big|\sum_{M_i}\langle \alpha_F J_F M_F|\hat{\varepsilon}^r_1\cdot\sum_i \vec{r}_i|\alpha_i J_i M_i\rangle \times \langle \alpha_i J_i M_i|\hat{\varepsilon}_0\cdot\sum \vec{r}_i|\alpha_0 J_0 M_0\rangle\Big|^2$$

PREVEDEMO NA OBLIKO * IN PREBEREMO β_{iF}

PRIMER: He

$$1s^2(^1S_0) + \gamma_0 \rightarrow R_i \rightarrow 1s(ns, nd) + \gamma_1$$

$$J_0 = 0 \rightarrow J_i = 1 \longrightarrow J_F = 0 \quad \beta_0 = -1$$

$$J_F = 1 \quad \beta_1 = \frac{1}{2}$$

$$J_F = 2 \quad \beta_2 = -\frac{1}{10}$$

$$\beta_{iF}(J_0, J_i, J_F) = \frac{\begin{Bmatrix} J_i & 2 & J_i \\ 1 & J_0 & 1\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} J_i & 2 & J_i \\ 1 & J_F & 1\end{Bmatrix}}{\begin{Bmatrix} J_i & 0 & J_i \\ 1 & J_0 & 1\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} J_i & 0 & J_i \\ 1 & J_F & 1\end{Bmatrix}}$$

VEZANA IN PROSTA (KONTINUUMSKA) STANJA

– Dosedaj smo gledali stanja atoma v katerih so e^- vezani v orbitalah

$$|n l m_l m_s\rangle = \frac{1}{r} P_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta,\varphi) \chi_{m_s}(\tfrac{1}{2})$$

Kjer je radialna funkcija lokalizirana: $\lim_{r\to\infty} P_{nl}(r) = 0$

V resnici gre P_{nl} proti nič eksponentno:

$$* \quad \left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + V_{ef}(r)\right]\phi(r) = E\,\phi(r)$$

, $E < 0$ NEGATIVNA ENERGIJA: VEZANO STANJE

$l = 0$! $V_{ef}(r) = 0 \quad r > r_0$

RADIALNO SIMETRIČNI EFEKTIVNI POTENCIAL KRATKEGA DOSEGA

REŠITEV V ZUNANJEM PODROČJU:

$$-\frac{d^2\phi}{dr^2} = -k^2\phi \;, \quad k = +\sqrt{2|E|}$$

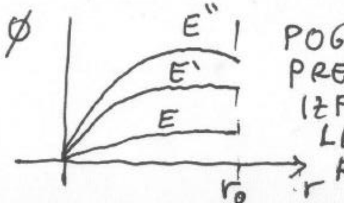
$$\phi_\pm(r) = e^{\pm kr}$$ ← REŠITEV e^{kr} ODPADE!

NOTRANJE PODROČJE: $\phi_{r<r_0}(0) = 0$ TA ROBNI POGOJ LE DELNO DOLOČA REŠITEV ENAČBE* (DO MULTIPLIKATIVNEGA FAKTORJA)

PREHOD $r = r_0$

$$\phi_{r<r_0}(r_0) = C e^{-kr_0}$$ ZVEZNOST ϕ , $$\phi'_{r<r_0}(r_0) = -kCe^{-kr_0}$$ ZVEZNOST ODVODA

$$\rightarrow \frac{\phi'_{r<r_0}(r_0)}{\phi_{r<r_0}(r_0)} = -k = -\sqrt{2E}$$ ← POGOJ JE IZPOLNJEN LE ZA DOLOČENE NEGATIVNE VREDNOSTI ENERGIJE



POGOJ NA PREHODU JE IZPOLNJEN LE ZA REŠITEV Z $E = E_1, E_2 \ldots$

ISTI ZAKLJUČKI VELJAJO ČE $V_{ef}(r>r_0) \neq 0$

- $l \geq 1 \qquad V_{ef} = \dfrac{l(l+1)}{2r^2} \qquad r > r_0$

REŠITEV V ZUNANJEM PODROČJU: $\phi_+ = \sqrt{kr}\, I_{l+1/2}(kr)\,, \quad \phi_- = \sqrt{kr}\, K_{l+1/2}(kr)$

I, K modificirani Besselovi f.

$\cancel{\phi_+(r)} \propto e^{kr}\left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{kr}\right)\right)$ ZAVRŽEMO

$$\phi_- = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\, e^{-kr} \sum_{\lambda=0}^{l} \frac{(l+\lambda)!}{\lambda!\,(l-\lambda)!} (2kr)^{-\lambda}$$

, OBDRŽIMO EXP. PADAJOČO REŠITEV

ROBNI POGOJ NA STIKU JE IZPOLNJEN LE ZA DOLOČENE VREDNOSTI k:

$$\frac{\phi'_{r<r_0}(r_0)}{\phi_{r<r_0}(r_0)} = \frac{\phi'_-(r_0)}{\phi_-(r_0)} = -\frac{l}{r_0} - k\,\frac{K_{l-1/2}(kr_0)}{K_{l+1/2}(kr_0)}$$

(UPORABILI SMO: $\frac{d}{dz}K_{l+1/2} = \frac{l+1/2}{z}K_{l+1/2} - K_{l-1/2}$)

- ČE DODAMO ŠE COULOMBSKI POTENCIAL V ZUNANJEM PODROČJU:

$$V_{ef} = \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{C}{r} \qquad r \geq r_0$$

REŠITEV V ZUNANJEM PODROČJU, KI PADA EKSPONENTNO JE WHITTAKERJEVA f.

$$\phi_-(r) = W_{\gamma,\,l+1/2}(2kr)\,, \quad \gamma = \frac{C}{k}$$

$\leftarrow$ PARAMETER OPISUJE RELATIVNO JAKOST COUL. POTENCIALA.

$$\propto e^{-kr}(2kr)^{\gamma}\left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{kr}\right)\right).$$

PODOBNO KOT ZGORAJ, ROBNI POGOJ NA PREHODU DOVOLJUJE LE IZBRANE NEGATIVNE VREDNOSTI ENERGIJE E STANJA ϕ.

$\boxed{E > 0}$ POZITIVNA ENERGIJA → PROSTA STANJA (NELOKALIZIRANA) ③

- ZUNANJE PODROČJE:

$$\frac{d^2\phi}{dr^2} + k^2\phi = 0 \qquad k = \sqrt{2E} \qquad \phi_s(r) = \sin kr, \; \phi_c(r) = \cos kr$$

- ČE JE $V_{ef} = 0$ REŠI $\phi_s(r)$ SCHRÖDINGERJEVO ENAČBO ZA $\forall r$ IN USTREZA TUDI R.P. V IZHODIŠČU $\phi(0) = 0$.
  ↑ REGULARNA REŠITEV

- ČE JE $\boxed{V_{ef} \neq 0}$ SE REGULARNI REŠITVI NA ZUNANJEM PODROČJU PRIMEŠA ϕ_c (NEREGULARNA REŠITEV).

$$\phi_{r<r_0}(r_0) = A\phi_s(r_0) + B\phi_c(r_0), \quad \phi'_{r<r_0}(r_0) = A\phi'_s(r_0) + B\phi'_c(r_0)$$

V ZUNANJEM PODROČJU STA VELJAVNI OBE REŠITVI. ZA VSAKO VREDNOST $E > 0$ TOREJ LAHKO ZMEROM DOLOČIM A IN B TAKO DA R.P. NA PREHODU VELJA.

$$\phi(r) = A\phi_s(r) + B\phi_c(r) \qquad r \geq r_0$$

ϕ_s, ϕ_c STA OMEJENI, VENDAR NE GRESTA PROTI NIČ.

ČE JE V_{ef} REALEN POTENCIAL, LAHKO NAJDEMO REALNO REŠITEV ϕ IN TEDAJ STA TUDI A IN B REALNI ŠTEVILI.

$$\phi(r) = \sqrt{A^2+B^2}\left(\cos\delta\,\phi_s(r) + \sin\delta\,\phi_c(r)\right) \qquad r \geq r_0$$

$$\sin\delta = \frac{B}{\sqrt{A^2+B^2}}, \quad \cos\delta = \frac{A}{\sqrt{A^2+B^2}}$$

$$\to \sqrt{A^2+B^2}\,\sin(kr+\delta)$$

KONSTANTI A IN B DOLOČATA AMPLITUDO IN FAZO VALOVNE F. V ZUNANJEM PODROČJU. AMPLITUDA JE ODVISNA ŠE OD NORMALIZACIJE, FAZA PA NI POLJUBNA: $\tan\delta = B/A$!

FAZA POVE, KAKŠEN DELEŽ NEREGULARNE REŠITVE PRIMEŠA V_{ef} REGULARNI REŠITVI (KI JE REŠITEV ZA $V_{ef}=0$). V_{ef} POVZROČI FAZNI PREMIK REGULARNE REŠITVE.

4

- $V_{ef} = \dfrac{\ell(\ell+1)}{2r^2}$ SFERIČNA BESSELOVA IN NEWMANNOVA f.

$$\phi_s = kr\, j_\ell(kr), \quad \phi_c = kr\, n_\ell(kr) \qquad r \geq r_0$$

$$\phi_s(r) = \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)\left[1 + O\left(\frac{1}{r}\right)\right]$$

$$\phi_c(r) = \cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)\left[1 + O\left(\frac{1}{r}\right)\right]$$

$\to \phi(r) \propto \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right) \quad r > r_0$, če je $V_{ef} \neq 0$ PRI $r \leq r_0$ (RAZEN CENTRIF. POTENCIALA)

δ_ℓ JE FAZNA RAZLIKA ZARADI PRISOTNOSTI DODATNEGA POTENCIALA KRATKEGA DOSEGA.

- $V_{ef} = \dfrac{\ell(\ell+1)}{2r^2} - \dfrac{C}{r}$

$$\phi_s = F_\ell(\eta, kr), \quad \phi_c = G_\ell(\eta, kr) \qquad r \geq r_0 \qquad \eta = -\frac{C}{k} \quad \left(-\frac{1}{k} \text{ ZA VODIK}\right)$$

REGULARNA IN NEREGULARNA COULOMBSKA FUNKCIJA

$$F_\ell(\eta, kr) = 2^\ell e^{-\frac{1}{2}\pi\eta} \frac{|\Gamma(\ell+1+i\eta)|}{(2\ell+1)!} e^{-ikr} (kr)^{\ell+1} F(\ell+1-i\eta, 2\ell+2; 2ikr)$$

KONFLUENTNA HIPERGEOMETRIJSKA FUNKCIJA

$$F(a,b;z) \equiv \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+m)\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b+m)} \frac{z^m}{m!}$$

ASIMPTOTSKI OBLIKI COULOMBSKIM FUNKCIJ:

$$F_\ell(\eta, kr) = \sin\left(kr - \eta \ln(2kr) - \frac{\ell\pi}{2} + \sigma_\ell\right) \qquad \sigma_\ell = \mathrm{Arg}\left[\Gamma(\ell+1+i\eta)\right]$$

$$G_\ell(\eta, kr) = \cos\left(kr - \eta \ln(2kr) - \frac{\ell\pi}{2} + \sigma_\ell\right)$$

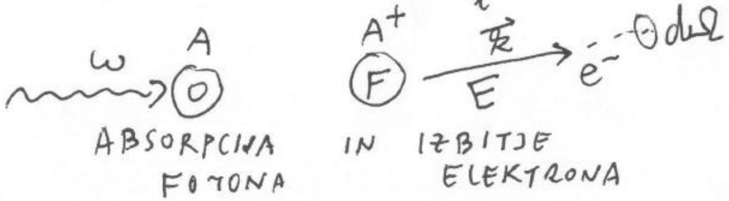
COULOMBSKA FAZA.

"NESKONČNI" DOSEG COULOMBSKE INTERAKCIJE SE KAŽE V LOGARITEMSKO NARAŠČAJOČI FAZI. REŠITEV V ZUNANJEM PODROČJU JE LINEARNA KOMBINACIJA F_ℓ IN G_ℓ, ČE JE V NOTRANJEM PODROČJU PRISOTEN ŠE DODATEN POTENCIAL KRATKEGA DOSEGA. DRUGAČE, REŠITEV JE TEDAJ FAZNO PREMAKNJENA ZA $\boxed{\delta_\ell}$ REGULARNA REŠITEV (REŠITEV PROBLEMA BREZ DODATNEGA V_{ef} KRATKEGA DOSEGA)

$$\phi(r) \propto \sin\left(kr - \eta \ln(2kr) - \frac{\ell\pi}{2} + \sigma_\ell + \delta_\ell\right) \qquad (5)$$

FOTOIONIZACIJSKI SIPALNI PRESEK

$$\frac{d^2\sigma}{dE\, d\Omega}(\omega) = \frac{\Gamma}{I} = 4\pi^2 \alpha\, \omega \left| \langle f | \hat{\varepsilon} \cdot \sum_i \vec{r}_i | 0 \rangle \right|^2 \delta\left(E_f - (E_0 + \omega)\right)$$



$$E_f = E_F + E, \quad E = \frac{k^2}{2}$$

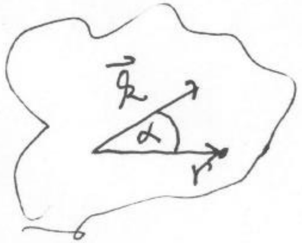
$$|f\rangle = |\gamma_F J_F \pi_F\rangle |\chi_{\vec{k}}\rangle \qquad |0\rangle = |\gamma_0 J_0 \pi_0\rangle$$

$$|\chi_{\vec k}\rangle = \sum_{lj} a^{\vec k}_{lj} \,|l \tfrac{1}{2} j\rangle \;,$$

$$|\chi_{\vec k}\rangle \approx e^{i\vec k\cdot\vec r}$$ .... PROSTI ELEKTRON

$$\overset{\parallel}{\sum_{l=0}^{\infty}} (2l+1)\, i^l j_l(kr)\, P_l(\hat k\cdot\hat r)$$

$$\overset{\parallel}{P_l(\cos\alpha)}$$



$$\lim_{kr\to\infty} j_l = \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$$

NORMALIZACIJA PROSTEGA VALA NA $\delta(\vec k - \vec k')$.

$$\int e^{i(\vec k - \vec k')\vec r}\, d\vec r = (2\pi)^3\, \delta(\vec k - \vec k')$$

$$|\chi_{\vec k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_l (2l+1)\, i^l e^{i\delta_l} R_{El}(r)\, P_l(\hat k\cdot\hat r)$$ ... PROSTI e^-, KI JE POTOVAL SKOZI POTENCIAL KRATKEGA DOSEGA

$R_{El} = P_{El}/r$

$$= \frac{k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_l (2l+1)\, i^l e^{i\delta_l} P_{El}(r)\, P(\hat k\cdot\hat r)$$

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V_{ef}(r)\right] P_{El} = \frac{k^2}{2} P_{El}$$

VZAMEMO TAKO REŠITEV, DA JE NJENA ASIMPTOTSKA AMPLITUDA 1 : $P_{El} \propto \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)$.

KER VELJA $\delta(k - k') = \frac{dE}{dk}\delta(E - E') = k\,\delta(E - E')$, MI PA V PRESEKU POTREBUJEMO PROSTI VAL, NORMALIZIRAN NA $\delta(E - E')$, JE KONČNO:

$$|\chi_{\vec k}\rangle = \sqrt{\frac{k}{(2\pi)^3}} \sum_l (2l+1)\, i^l e^{i\delta_l} P_{El}(r)\, P(\hat k\cdot\hat r) :$$

$$\frac{d\sigma^2(\omega)}{dE\,d\Omega} = 4\pi^2 \alpha\, \omega\, k\, \left|\langle f|\,\hat\varepsilon\cdot\sum_i \vec r_i\,|0\rangle\right|^2 \delta(E_f + E - E_0 - \omega)$$

$$\sigma^F(\omega) = \int dE \int d\Omega \, \frac{d\sigma^2(\omega)}{dE\, d\Omega}$$ ... FOTOIONIZACIJSKI PRESEK V $A^+(E_F)$ PRI DANI ENERGIJI FOTONOV ω

(7)

$$\sigma^F(\omega) = \frac{4}{3}\pi^2 \alpha k \omega \sum_{jl} |D^F_{Elj}(\omega)|^2$$

REDUCIRAN MATRIČNI ELEMENT ZA PRIMER $J_0 = 0$

$$D^F_{Elj} = \langle\langle (k\, l\, \tfrac{1}{2}\, j) J_F) 1 \,||\, C^1 \,||\, 0 \rangle$$

$$= 4\pi (-1)^{j+l-1/2}\, i^l e^{i\Delta_l} [j, l, J_F] \langle l\, 0\, 1\, 0 | L_F\, 0\rangle \begin{Bmatrix} j & 1 & J_F \\ L_f & 1/2 & l \end{Bmatrix} \int_0^\infty \underbrace{P_{El}(r)}_{\text{asimpt ampl. } 1}\, r\, \underbrace{P_{nL_F}}_{\text{ORBITALA IZ KATERE JE BIL IZBIT } e^-} dr$$

$$\Delta_l = \sigma_l(1) + \delta_l$$

$\sigma_l(1)$: $\mathrm{Arg}[\Gamma(l+1-\frac{i}{k})]$ COUL. FAZA

δ_l: FAZNA RAZLIKA ZARADI POTENCIALA KRATKEGA DOSEGA

KOTNA PORAZDELITEV FOTOELEKTRONOV

YANG (1948) PHYS. REV 74, 764.

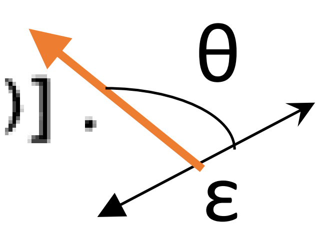
- VALOVNA DOLŽINA SVETLOBE DOSTI VEČJA OD TARČE (DIPOLNI PRIBLIŽEK) → ABSORBIRA SE VRT. KOL. 1
- TARČA JE NEPOLARIZIRANA (VERJETNOSTI ZA VSE PROJEKCIJE VRTILNIH KOLIČIN ATOMOV SO ENAKE)

$\Rightarrow$ KOTNA KORELACIJA MED FOTONOM IN IZBITIM DELCEM JE NEKA LINEARNA KOMBINACIJA 1 IN $\cos^2\theta$, KJER JE θ KOT POD KATERIM ODLETI IZBITI DELEC (e^-) GLEDE NA POLARIZACIJO VPADNEGA FOTONA.

$\cos\theta$ JE ODSOTEN, KER SE OHRANJA PARNOST π PRI FOTOABS.

KOTNA PORAZDELITEV FOTOELEKTRONOV

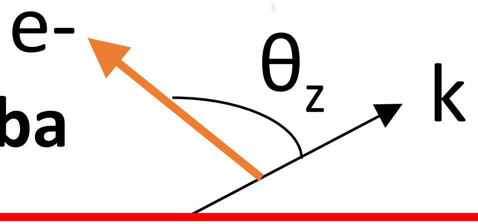
$$\left[\frac{d\sigma}{d\Omega}\right]_{\text{lin pol}} = \frac{\sigma}{4\pi}[1+\beta P_2(\cos\theta)]\ .$$



Kotna porazdelitev fotoelektronov pri absorpciji **linearno polarizirane svetlobe**.

$$\left[\frac{d\sigma}{d\Omega}\right]_{\text{unpol}} = \frac{\sigma}{4\pi}[1-\tfrac{1}{2}\beta P_2(\cos\theta_z)] = \frac{1}{2}\frac{\sigma}{4\pi}[1+\beta P_2(\cos\theta_x)] + \frac{1}{2}\frac{\sigma}{4\pi}[1+\beta P_2(\cos\theta_y)]\ .$$

Nepolarizirana svetloba



β parameter (parameter asimetrije):

$$\beta^{CZ} = \frac{l_0(l_0-1)R_{l_0-1}^2 + (l_0+1)(l_0+2)R_{l_0+1}^2 - 6l_0(l_0+1)R_{l_0-1}R_{l_0+1}\cos(\sigma_{l_0+1}+\delta_{l_0+1}-\sigma_{l_0-1}-\delta_{l_0-1})}{(2l_0+1)[l_0R_{l_0-1}^2 + (l_0+1)R_{l_0+1}^2]}$$

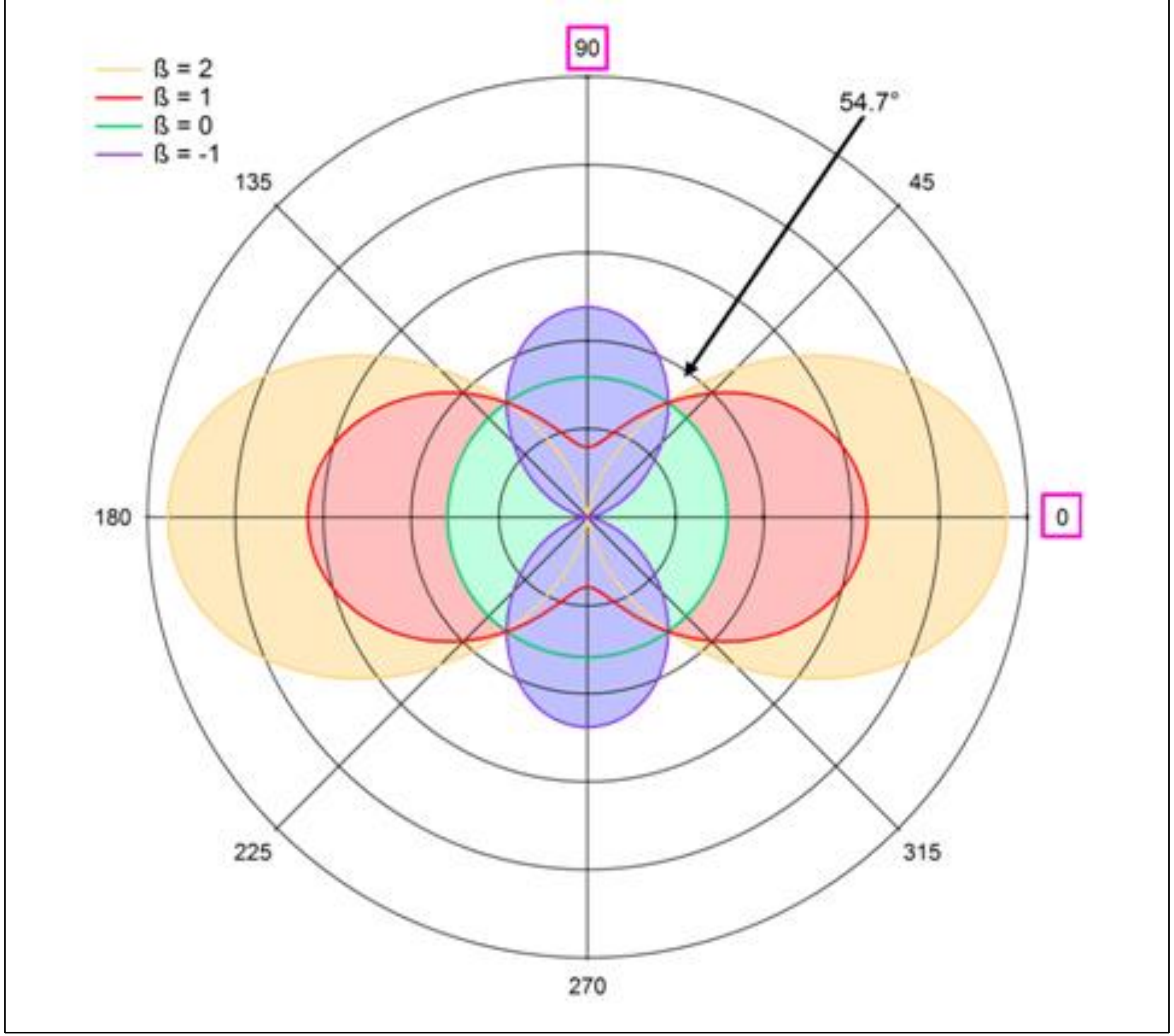
Radialni dipolni integral

$$R_{\varepsilon l}^{L_cS_cL} \equiv \int_0^\infty P_{nl_0}(r)\, r\, P_{\varepsilon l}^{L_cS_cL}(r)\, dr$$

σ_l :Coulombski fazni premik

δ_l :fazni premik potenciala kratkega dosega

S.T. Manson and A.F. Starace, Rev. Mod. Phys. 54, 389 (1982)



Omejen obseg za β, kotni presek mora biti pozitiven:

$-1 \leq \beta \leq 2$

Magični kot $\theta = 54{,}7^{o}$ $(P_2(\cos\theta_m) = 0)$

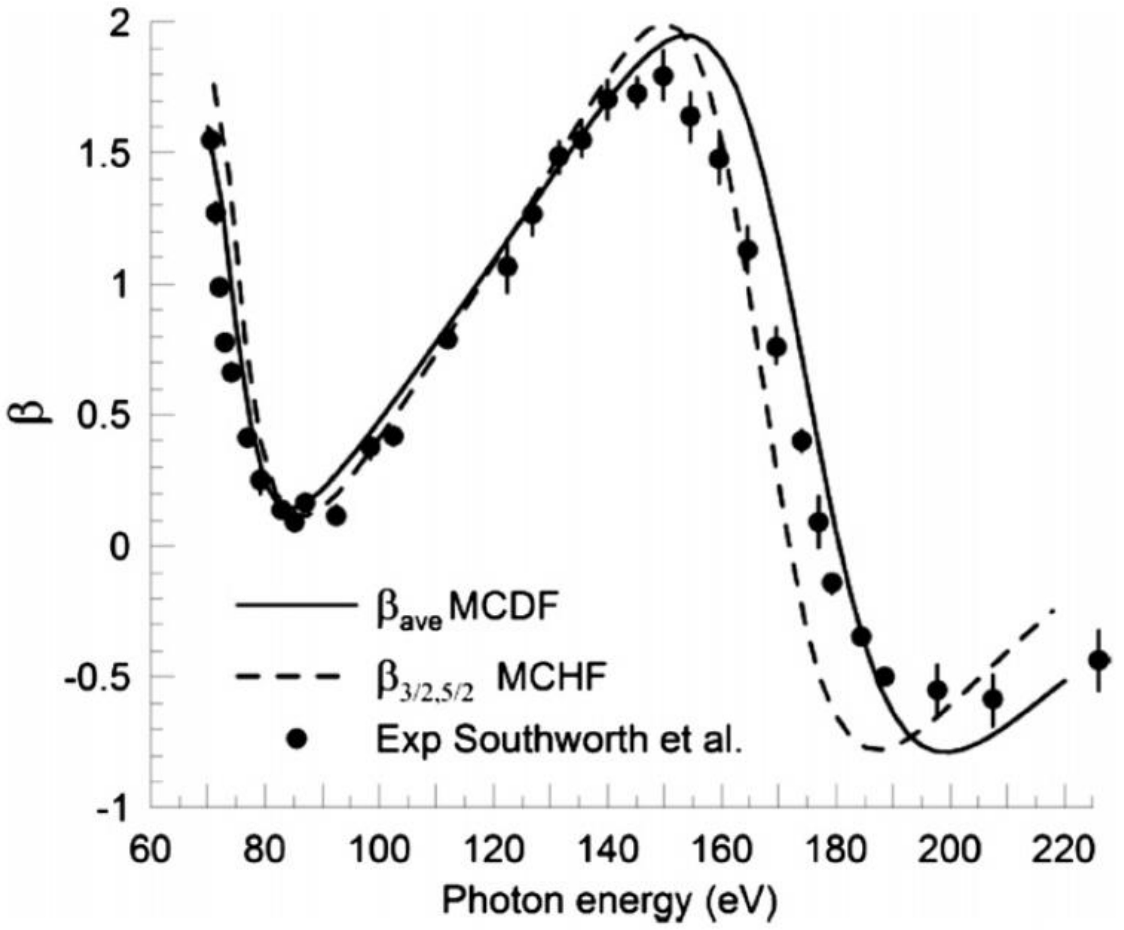
s-elektron:

$\beta = 2$,

$d\sigma/d\Omega \sim \cos^2\theta$

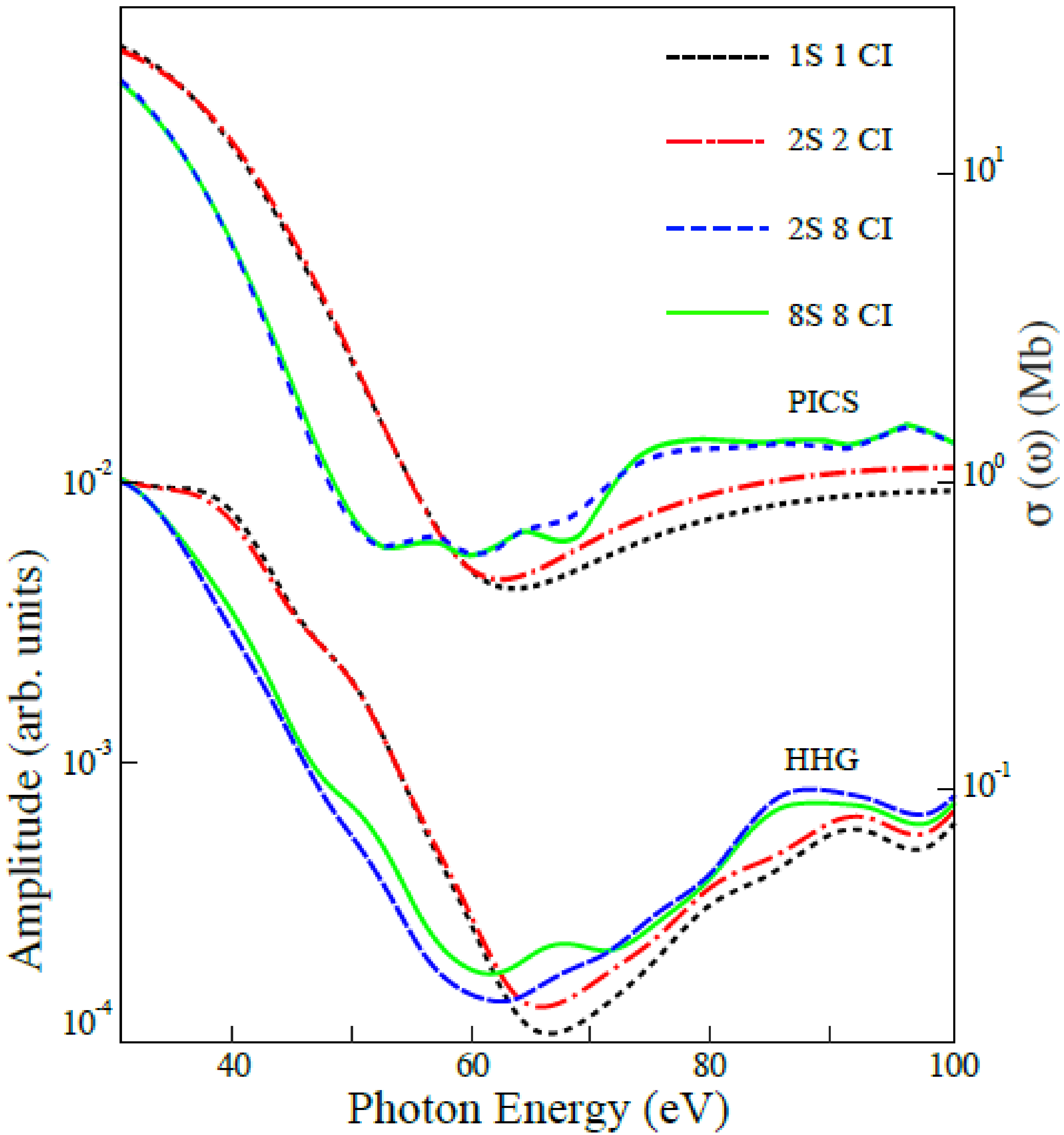
$$[1 + \beta P_2(\cos\theta)] \qquad P_2(\cos\theta) \equiv \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)$$

Primer:
Odvisnost β parametra za izbitje elektrona 4d v atomu Xe pri absorpciji fotona.
Zaradi interference med prispevkoma kontinumskih valov p in f je odvisnost kotne porazdelitve izbitega fotoelektrona od energije fotonov zelo izrazita.



Cooperjev minimum v odvisnosti totalnega preseka σ od energije fotonov za elektrone, ki so izbiti iz orbital, ki imajo radialne vozle: 2s, 3s, 3p, 4p, 4d….

Primer:
Fotoionizacija Ar 3p



LBNL/PUB-490 Rev. 3

Center for X-Ray Optics
and
Advanced Light Source

X-RAY DATA BOOKLET

Albert Thompson
David Attwood
Eric Gullikson
Malcolm Howells
Kwang-Je Kim
Janos Kirz
Jeffrey Kortright
Ingolf Lindau
Yanwei Liu
Piero Pianetta
Arthur Robinson
James Scofield
James Underwood
Gwyn Williams
Herman Winick

Table 1-1. Electron binding energies, in electron volts, for the elements in their natural forms.

Element	K 1s	L_1 2s	L_2 $2p_{1/2}$	L_3 $2p_{3/2}$	M_1 3s	M_2 $3p_{1/2}$	M_3 $3p_{3/2}$	M_4 $3d_{3/2}$	M_5 $3d_{5/2}$	N_1 4s	N_2 $4p_{1/2}$	N_3 $4p_{3/2}$
1 H	13.6											
2 He	24.6*											
3 Li	54.7*											
4 Be	111.5*											
5 B	188*											
6 C	284.2*											
7 N	409.9*	37.3*										
8 O	543.1*	41.6*										
9 F	696.7*											
10 Ne	870.2*	48.5*	21.7*	21.6*								
11 Na	1070.8†	63.5†	30.65	30.81								
12 Mg	1303.0†	88.7	49.78	49.50								
13 Al	1559.6	117.8	72.95	72.55								
14 Si	1839	149.7*b	99.82	99.42								
15 P	2145.5	189*	136*	135*								
16 S	2472	230.9	163.6*	162.5*								
17 Cl	2822.4	270*	202*	200*								
18 Ar	3205.9*	326.3*	250.6†	248.4*	29.3*	15.9*	15.7*					
19 K	3608.4*	378.6*	297.3*	294.6*	34.8*	18.3*	18.3*					
20 Ca	4038.5*	438.4†	349.7†	346.2†	44.3 †	25.4†	25.4†					
21 Sc	4492	498.0*	403.6*	398.7*	51.1*	28.3*	28.3*					
22 Ti	4966	560.9†	460.2†	453.8†	58.7†	32.6†	32.6†					

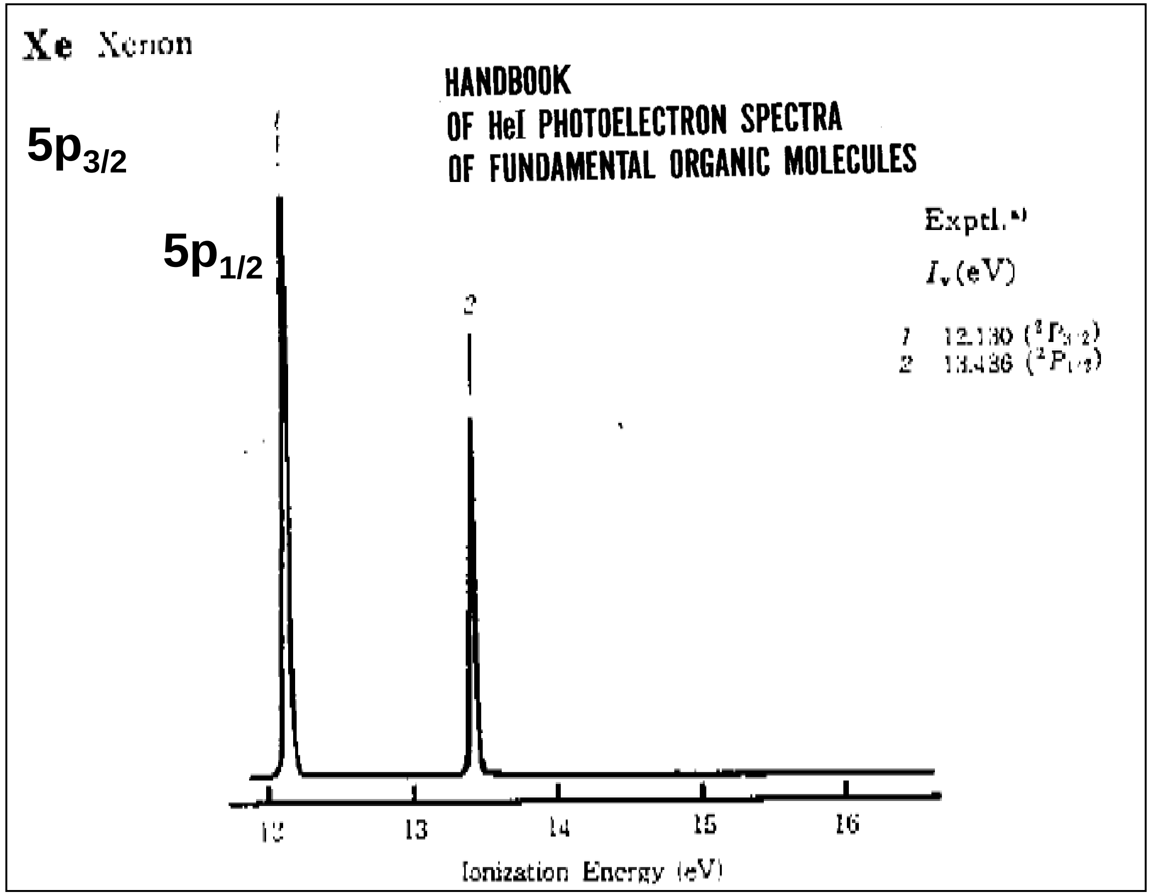
Signal valenčnih fotoelektronov je močno odvisen od kemijske okolice.

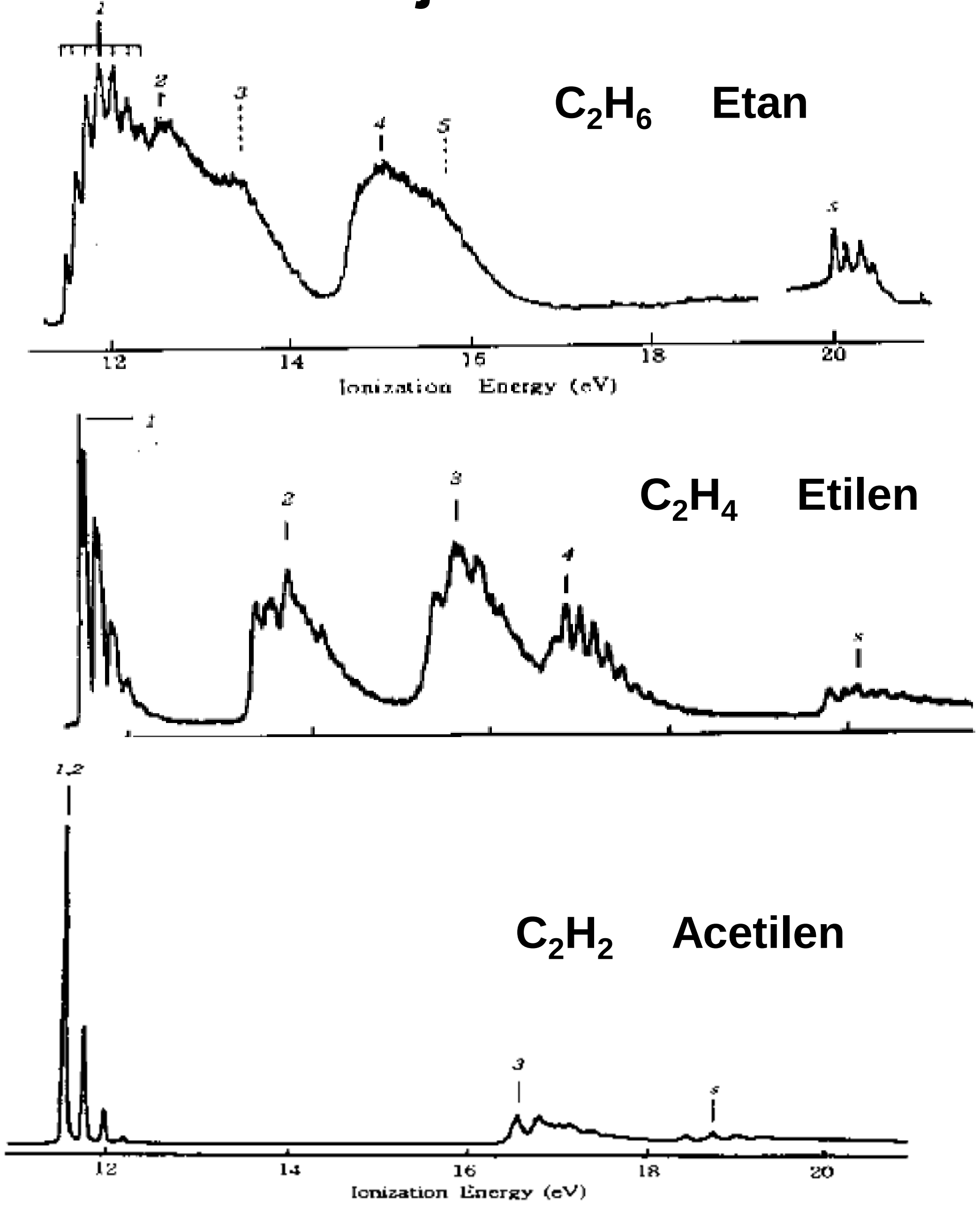
To je osnova za tehniko

ESCA – Electron Spectroscopy

for Chemical Analysis

K. Kimura et al.



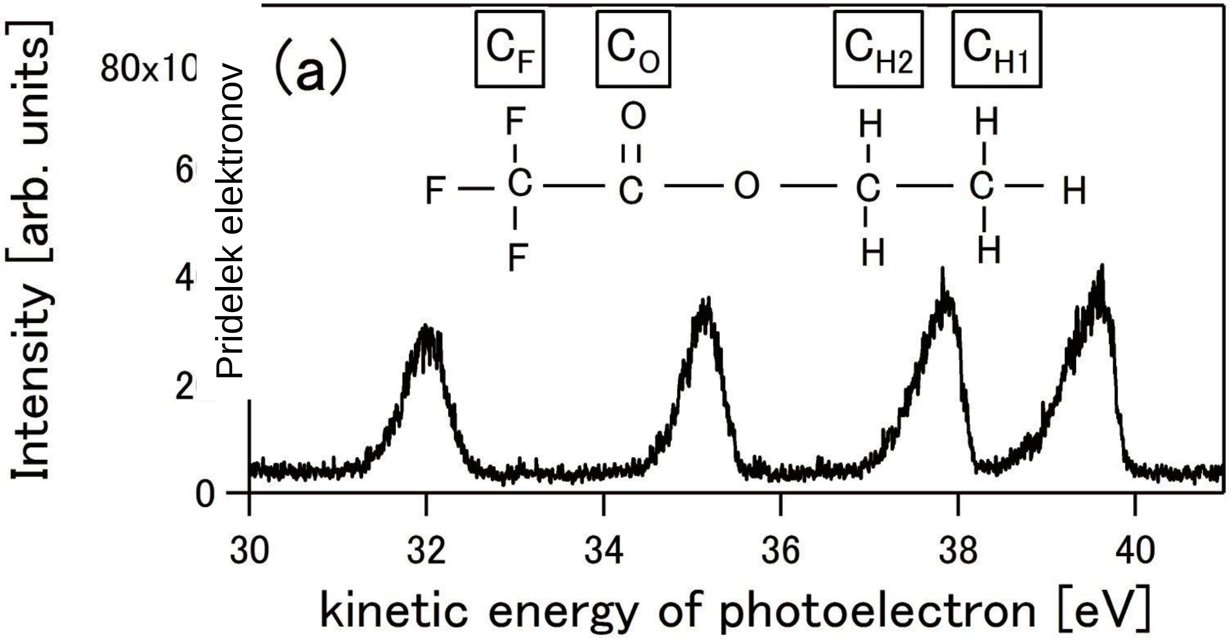


Fotoelektron K: od kemijske okolice atoma je odvisna vezavna energija elektrona EB. Energijski premik črte glede na črto v atomu je značilen za posamezno vrsto molekule – Kemijski premik.

Ethyl trifluoroacetate ($C_4H_5F_3O_2$), **''Siegbahnova''** molekula*

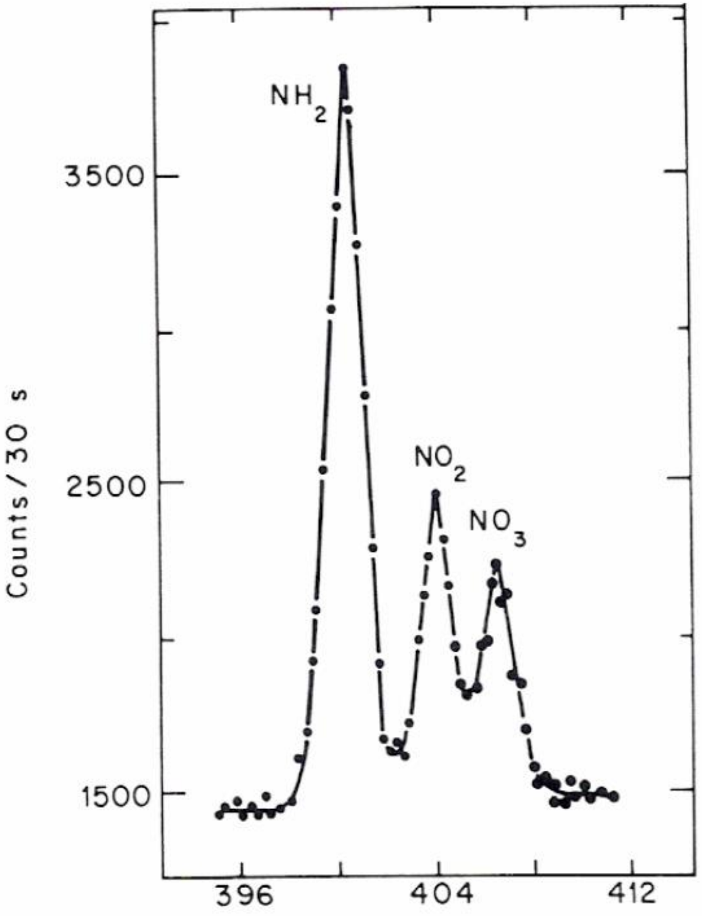
hv=330 eV

H. Iwayama et al.

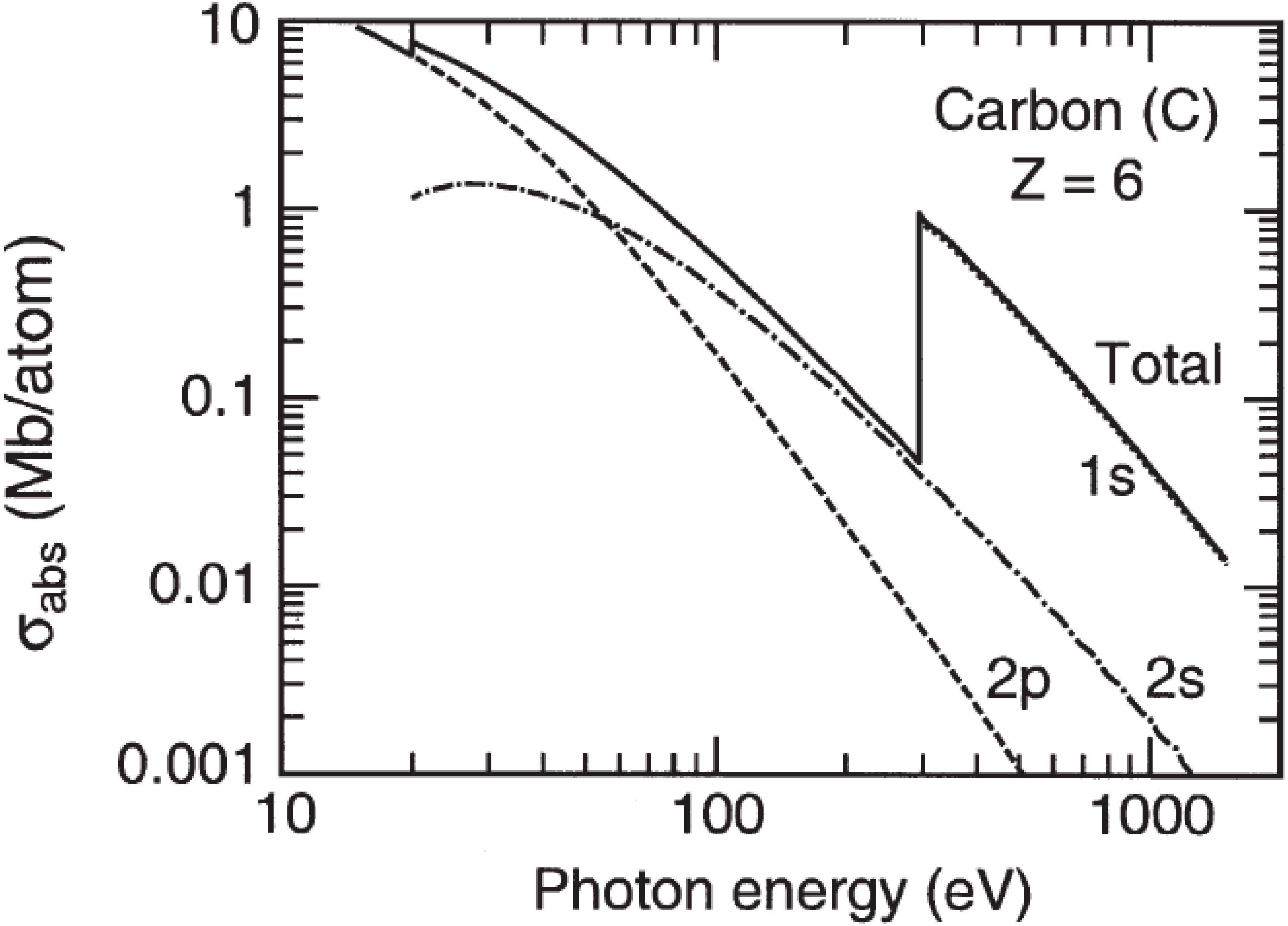


*Kai Siegbahn (1918-2007) z Univerze v Uppsali (Švedska) je dobil Nobelovo nagrado iz fizike 1981 za razvoj metode ESCA, ki ji danes rečemo tudi rentgenska fotoelektronska spektroskopija (XPS : X-ray photoelectron spectroscopy).

$[Co(NH_2CH_2CH_2NH_2)_2(NO_2)_2]NO_3$



Vezavna energija N-K (eV)



Carbon (C)
Z = 6
Total
1s
2p
2s
10
1
0.1
0.01
0.001
10
100
1000
σabs (Mb/atom)
Photon energy (eV)

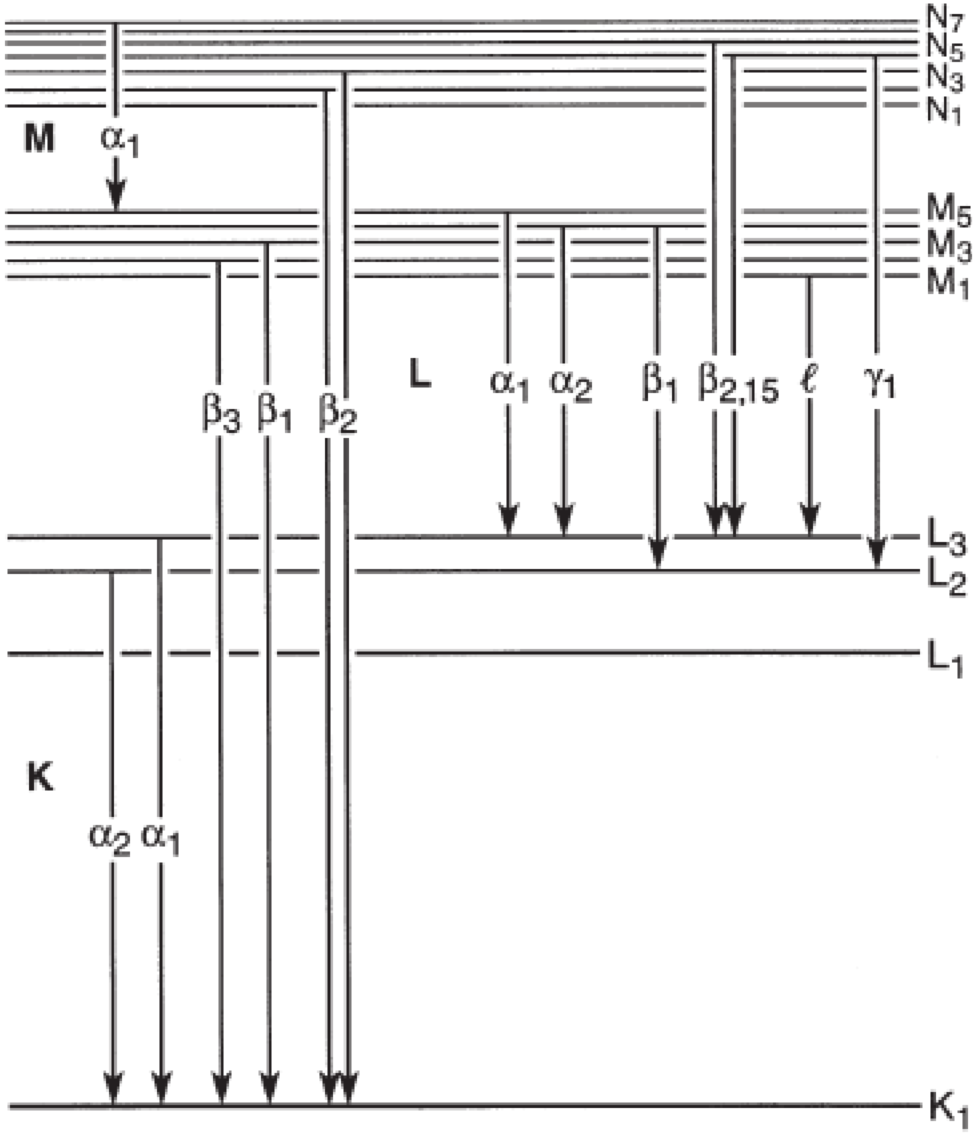
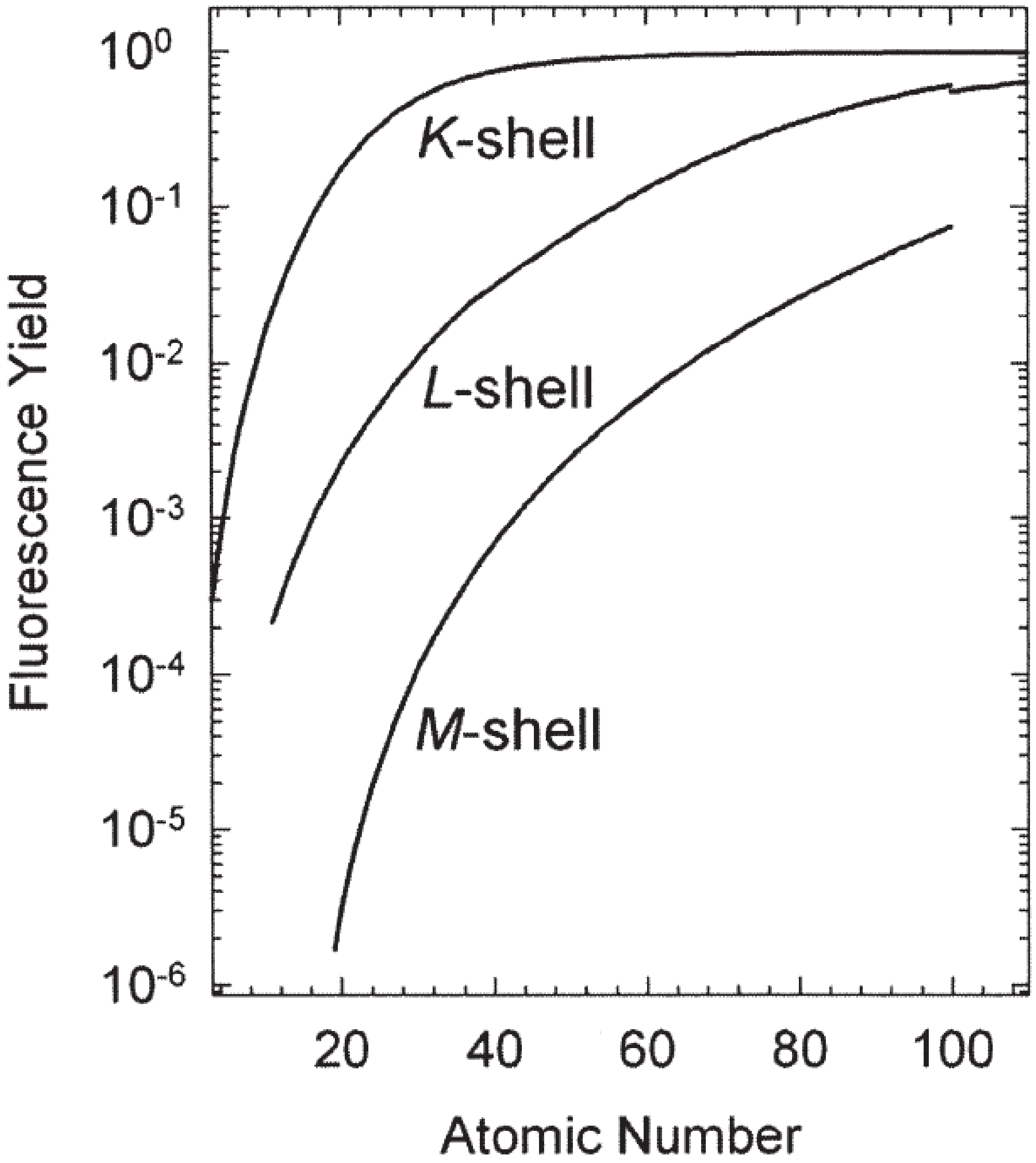


Fig. 1-1. *Transitions that give rise to the emission lines in Table 1-3.*

Table 1-2. *Photon energies, in electron volts, of principal K-, L-, and M-shell emission lines.*

Element	$K\alpha_1$	$K\alpha_2$	$K\beta_1$	$L\alpha_1$	$L\alpha_2$	$L\beta_1$	$L\beta_2$	$L\gamma_1$	$M\alpha_1$
3 Li	54.3								
4 Be	108.5								
5 B	183.3								
6 C	277								
7 N	392.4								
8 O	524.9								
9 F	676.8								
10 Ne	848.6	848.6							
11 Na	1,040.98	1,040.98	1,071.1						
12 Mg	1,253.60	1,253.60	1,302.2						
13 Al	1,486.70	1,486.27	1,557.45						
14 Si	1,739.98	1,739.38	1,835.94						
15 P	2,013.7	2,012.7	2,139.1						
16 S	2,307.84	2,306.64	2,464.04						
17 Cl	2,622.39	2,620.78	2,815.6						
18 Ar	2,957.70	2,955.63	3,190.5						
19 K	3,313.8	3,311.1	3,589.6						
20 Ca	3,691.68	3,688.09	4,012.7	341.3	341.3	344.9			
21 Sc	4,090.6	4,086.1	4,460.5	395.4	395.4	399.6			



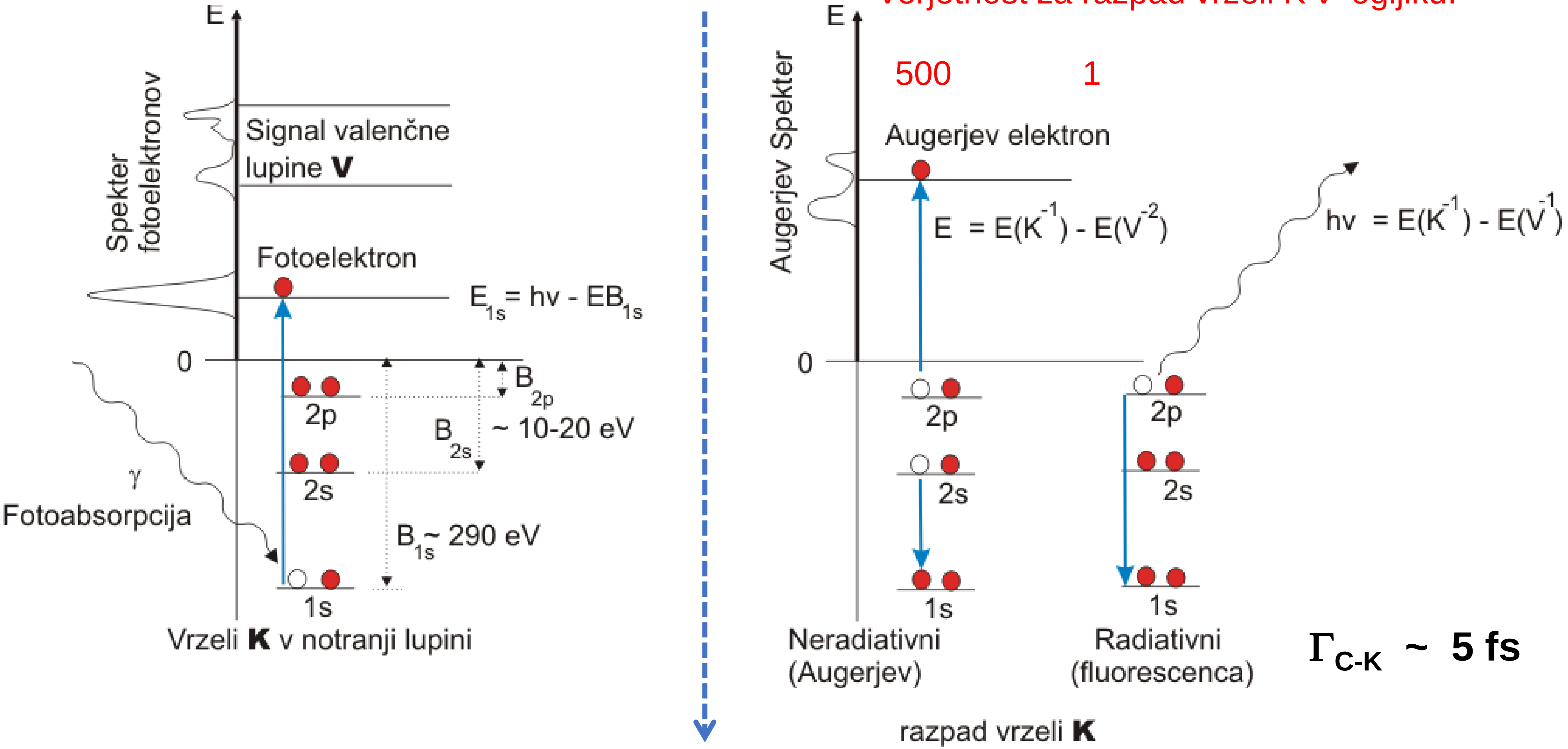
Fluorescenčni pridelek je razmerje med verjetnostjo za sevalni (fluorescenčni) in verjetnostjo za nesevalni (Augerjev) razpad vrzeli:

$$\eta = \Gamma_F / \Gamma_A$$

Tvorba in razpad razpad notranje vrzeli pri fotoabsorbciji, primer C

Verjetnost za razpad vrzeli K v ogljiku:

500 1



$\Gamma_{C\text{-}K} \sim$ **5 fs**

VERJETNOST ZA AUGERJEV RAZPAD

8

$$A^{+}|\varkappa_i J_i \pi_i\rangle \to A^{++}|\varkappa_F J_F \pi_F\rangle + e^-$$ AUGERJEV ELEKTRON

STANJE Z VRZELJO V NOTRANJI LUPINI — STANJE Z 2 VRZELIMA V VIŠJIH LUPINAH

N.M. Kabachnik et al Physics Reports 451, 155 (2007)

PRIMER: ω 250-248 eV

$$Ar^{+}(2p^{-1}) \to Ar^{2+}(3p^{-2}) + e^-_{L_{23}-M_{23}^2} \quad (E \approx 200-207\,\mathrm{eV})$$

$$\to Ar^{2+}(3s^{-1}3p^{-1}) + e^-_{L_{23}-M_1M_{23}} \quad (E \approx 190-195\,\mathrm{eV})$$

$$\to Ar^{2+}(3s^{-2}) + e^-_{L_{23}-M_1^2} \quad (E \approx 174\,\mathrm{eV})$$

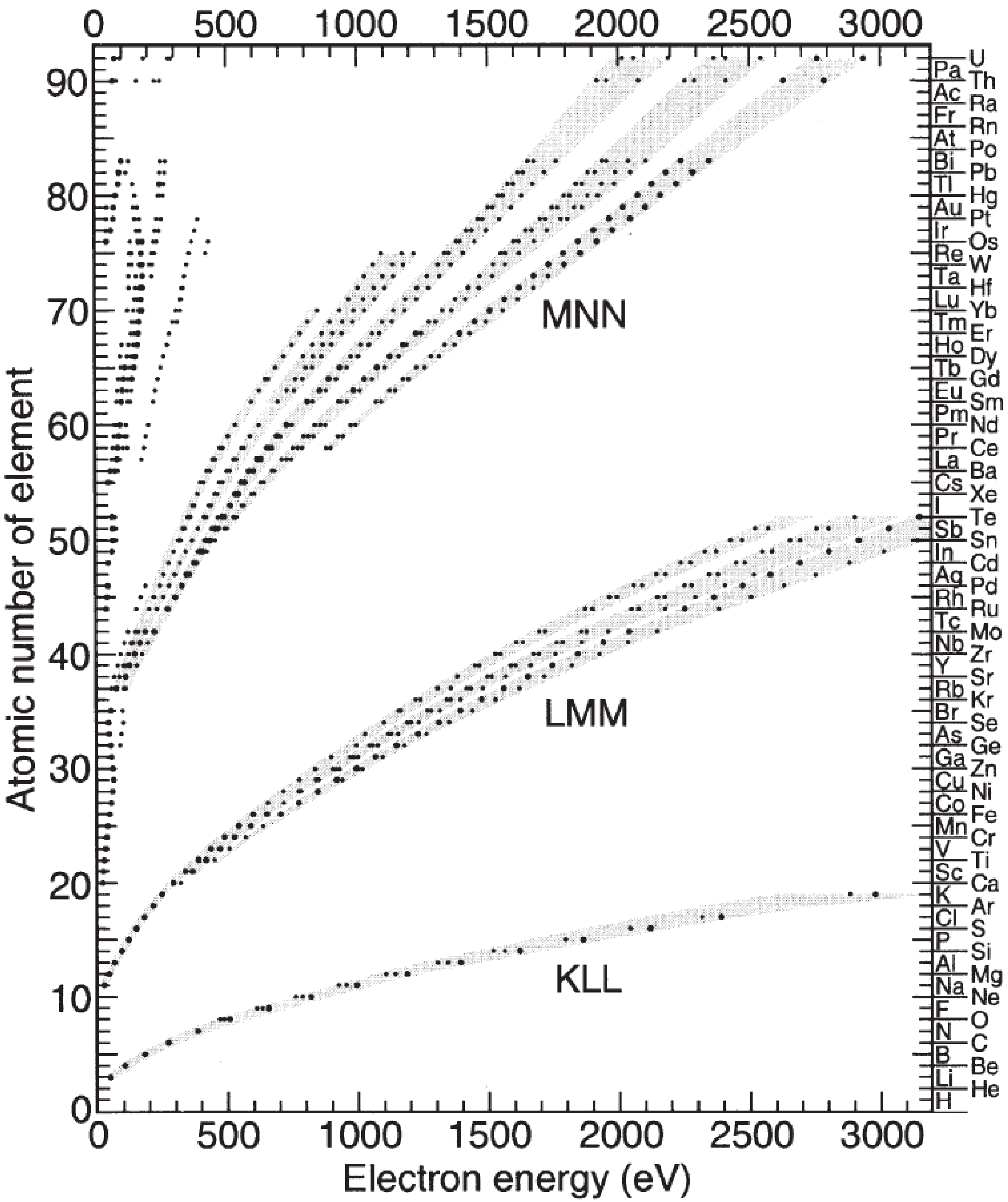
$$\Gamma = 2\pi \left|\langle \varkappa_F J_F \pi_F | \langle \chi_{\vec{k}} | \sum_{i>j} \frac{1}{r_{ij}} | \varkappa_i J_i \pi_i \rangle\right|^2 \delta(E_F + E - E_i)$$

IZBIRNA PRAVILA: $\Delta J = 0$, $\Delta L = 0$, $\Delta S = 0$, $\Delta\pi = 0$

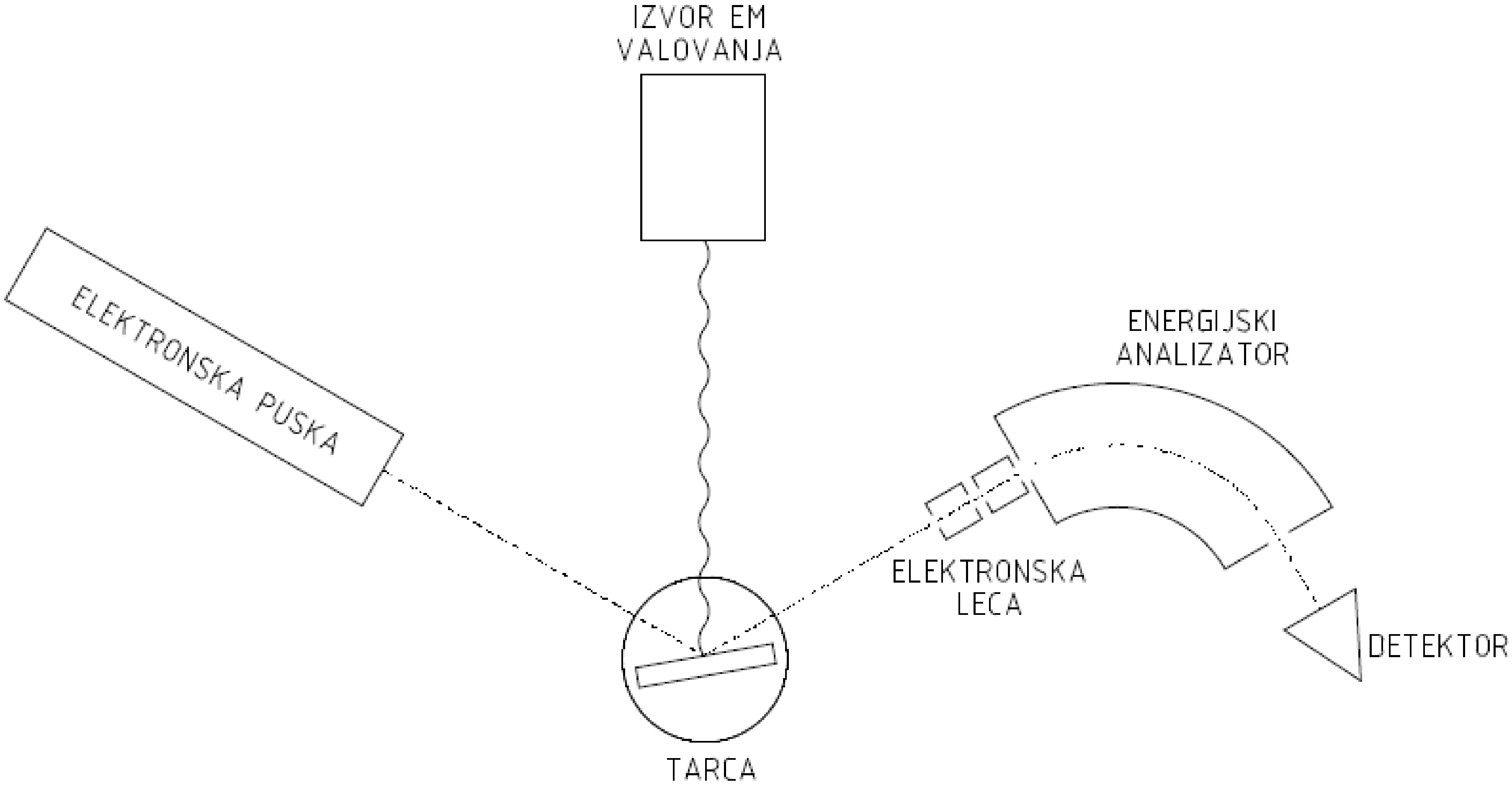
$$\Gamma = 2\pi[J_F] \sum_{\ell j} [j] \left| \sqrt{[L_i, S_i]} \begin{Bmatrix} L_F & \ell & L_i \\ S_F & 1/2 & S_i \\ J_F & j & J_i \end{Bmatrix} \langle (\varkappa_F L_F S_F)(k\,\ell\,\tfrac{1}{2}) L_i S_i \| \sum_{i>j} \frac{1}{r_{ij}} \| \varkappa_i L_i S_i \rangle \right|^2$$

TO JE KOTNO INTEGRIRANA VERJETNOST ZA PREHOD NA ČASOVNO ENOTO, ZA PRIMER, KO JE ZAČETNO A^+ IN KONČNO A^{2+} STANJE PODANO Z ENO LSJ KONFIG.

PRI AUGERJEVEM RAZPADU IZ VRZELI $J_i = 1/2$ (s) JE EMISIJA IZOTROPNA. ČE VRZEL NASTANE PRI ABSORPCIJI FOTONA JE PORAZDELITEV $\propto (1 + \beta P_2(\cos\theta))$!!



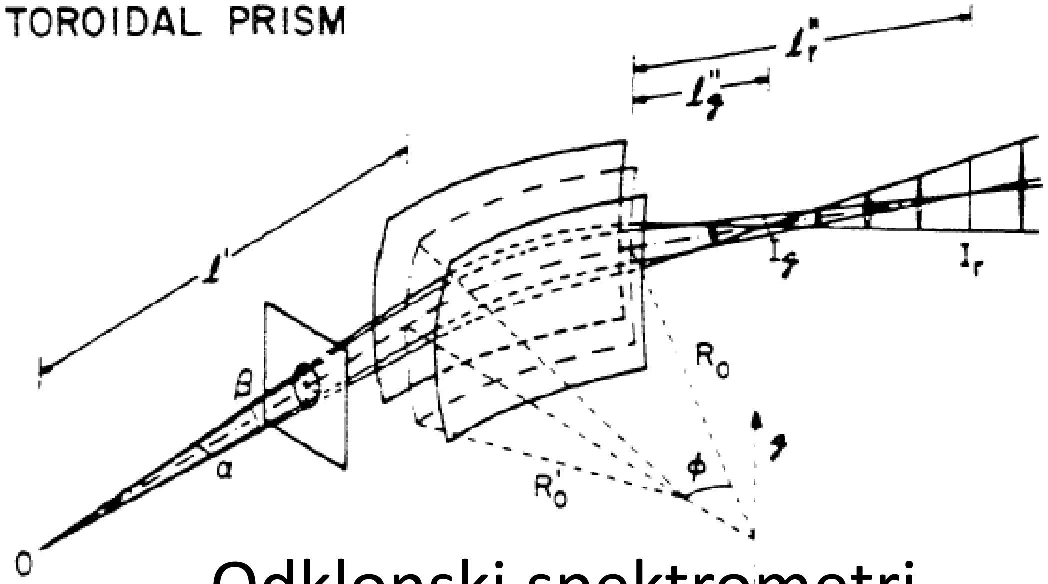
Atomic number of element
Electron energy (eV)
MNN
LMM
KLL
0
500
1000
1500
2000
2500
3000
0
10
20
30
40
50
60
70
80
90
H
He
Li
Be
B
C
N
O
F
Ne
Na
Mg
Al
Si
P
S
Cl
Ar
K
Ca
Sc
Ti
V
Cr
Mn
Fe
Co
Ni
Cu
Zn
Ga
Ge
As
Se
Br
Kr
Rb
Sr
Y
Zr
Nb
Mo
Tc
Ru
Rh
Pd
Ag
Cd
In
Sn
Sb
Te
I
Xe
Cs
Ba
La
Ce
Pr
Nd
Pm
Sm
Eu
Gd
Tb
Dy
Ho
Er
Tm
Yb
Lu
Hf
Ta
W
Re
Os
Ir
Pt
Au
Hg
Tl
Pb
Bi
Po
At
Rn
Fr
Ra
Ac
Th
Pa
U



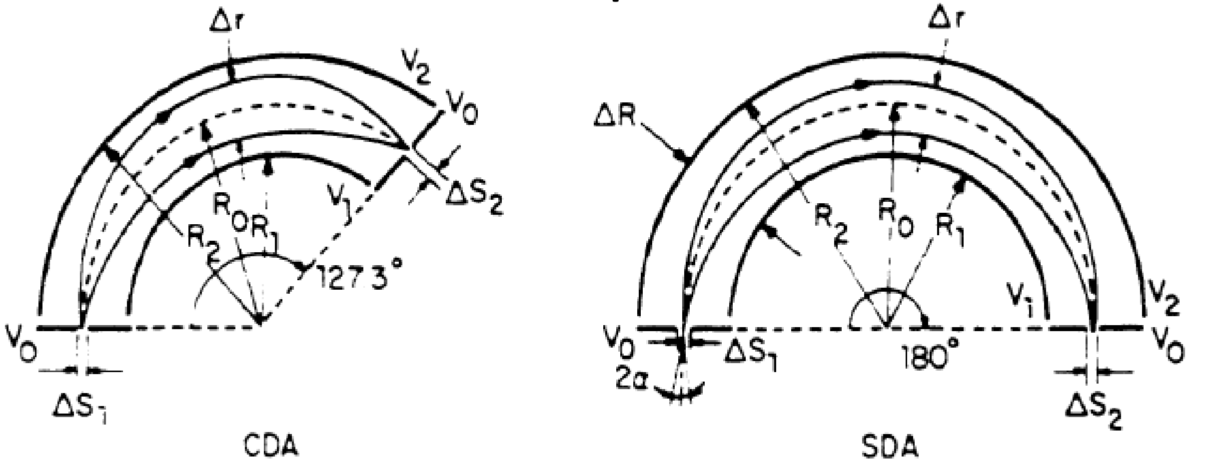
Slika 1: Shema eksperimenta z elektronskim spektrometrom

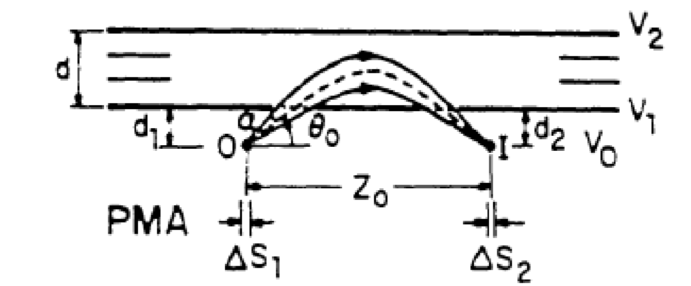
Pregled elektrostatskih elektronskih spektrometrov

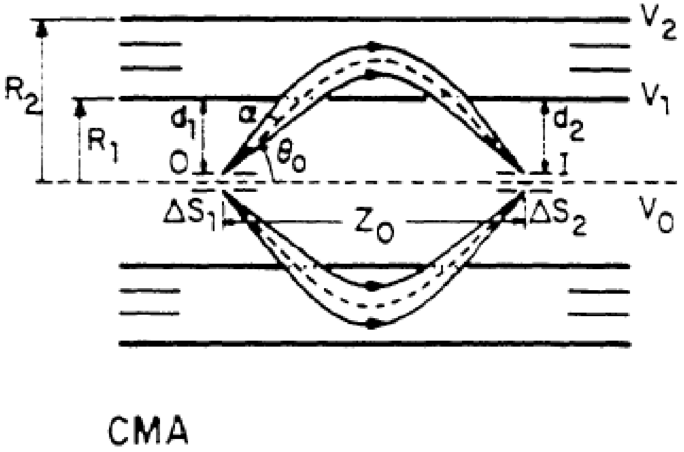
Rep. Prog. Phys. 53 (1990) 1621-1674.
Design of electron spectrometers
D Roy and D Tremblay!



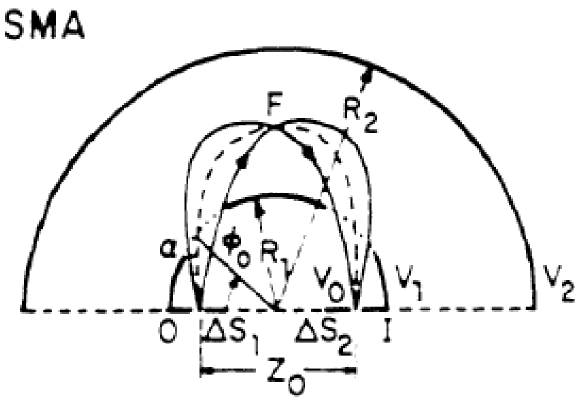
Odklonski spektrometri



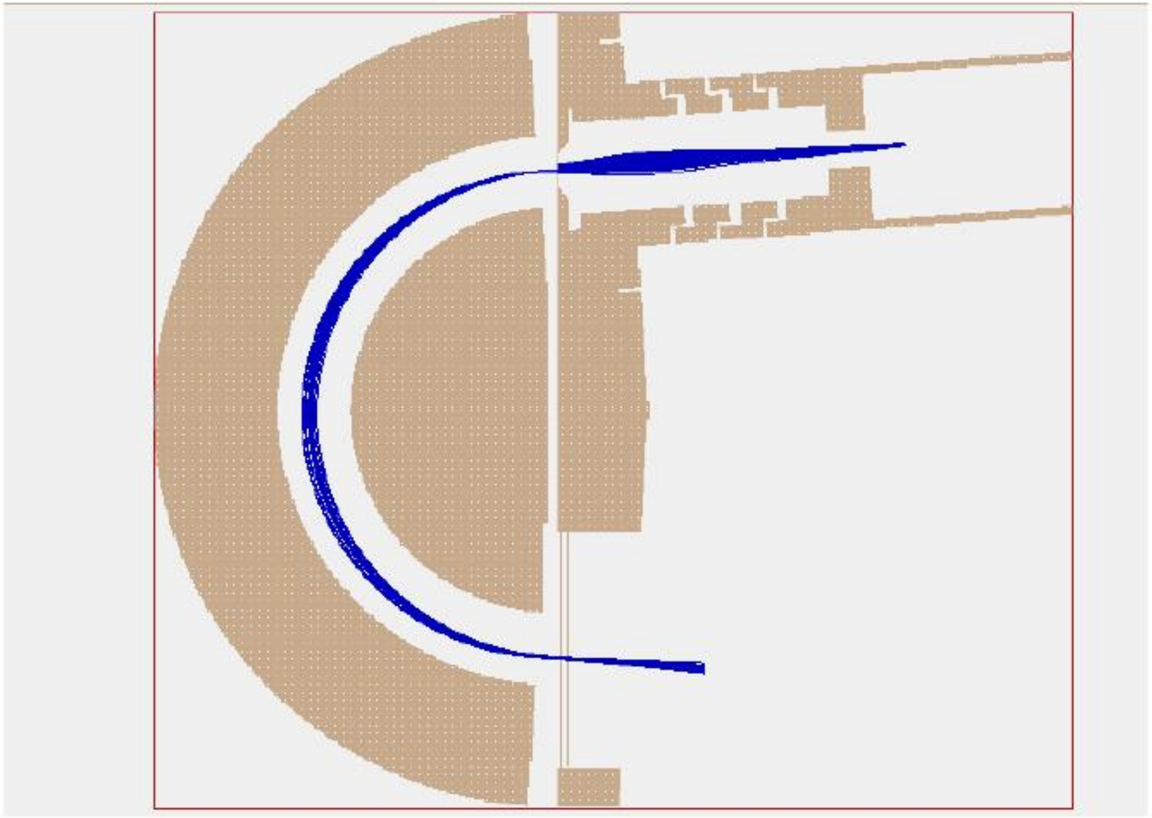


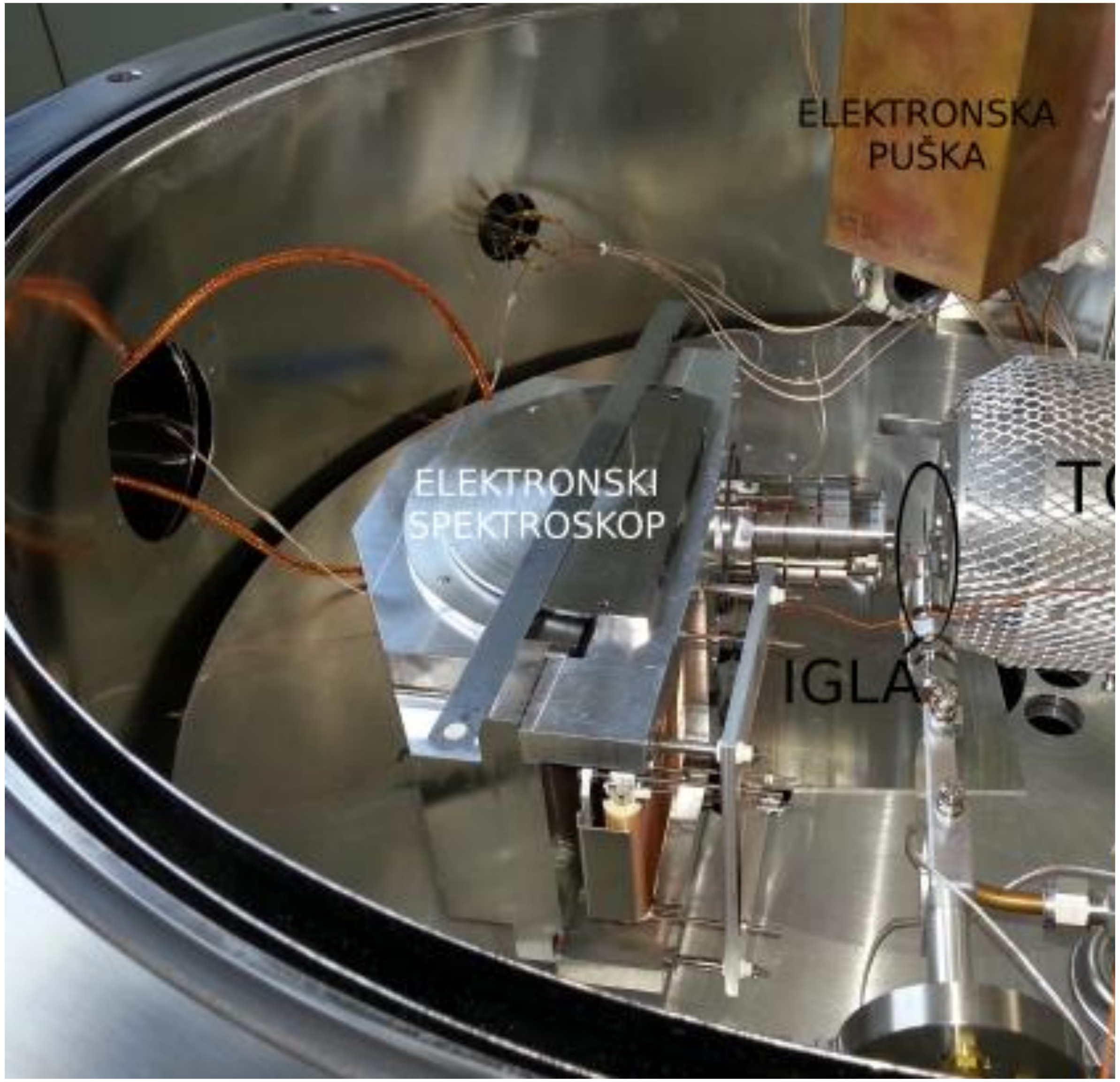


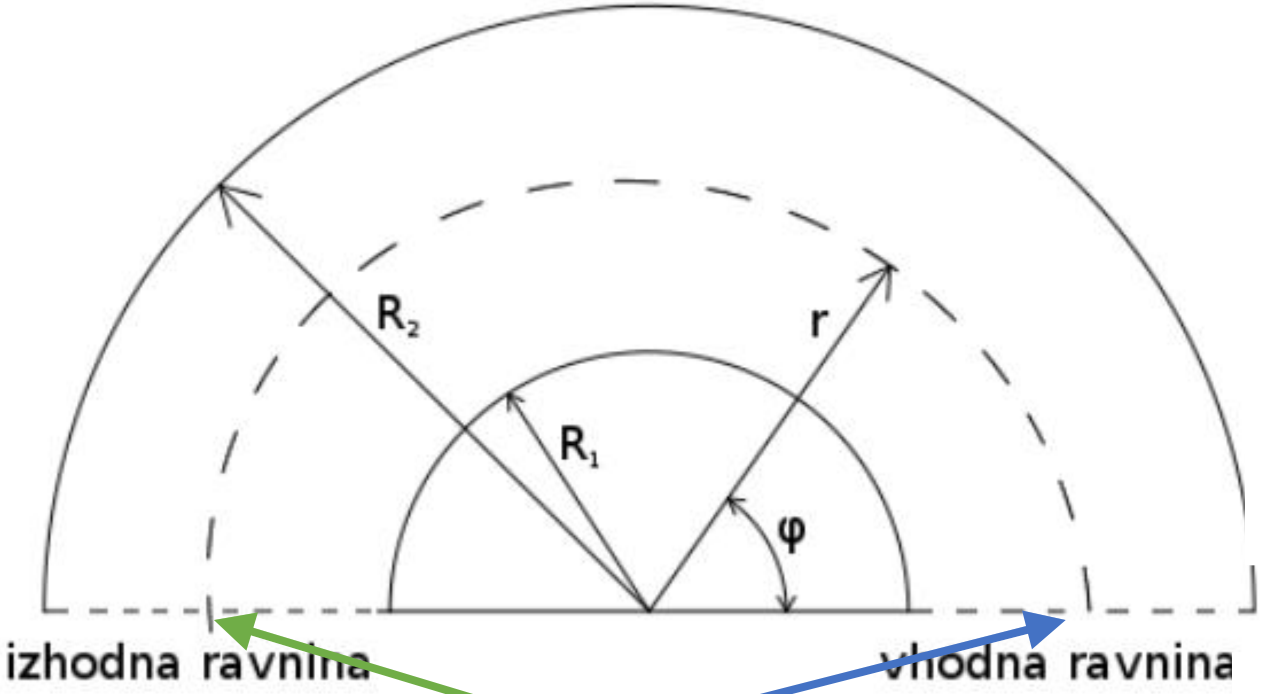
Zrcalni spektrometri



Krogelni odklonski analizator (SDA) s 4-elementno cilindrično lečo







Helmholtz-Lagranžev zakon:

$$|M_L| \cdot |M_\alpha| = \sqrt{R}.$$

$$|M_L| = \frac{\Delta r_0}{d_s}$$

Linearna povečava leče,
Δr_0 širina vhodne reže an,
d_s širina tarče

$$|M_\alpha| = \frac{\alpha_0}{\alpha_s}$$

Kotna povečava leče
α_0 vpadni kot v analizator
α_s vpadni kot v lečo

$$R = \frac{W}{t}$$

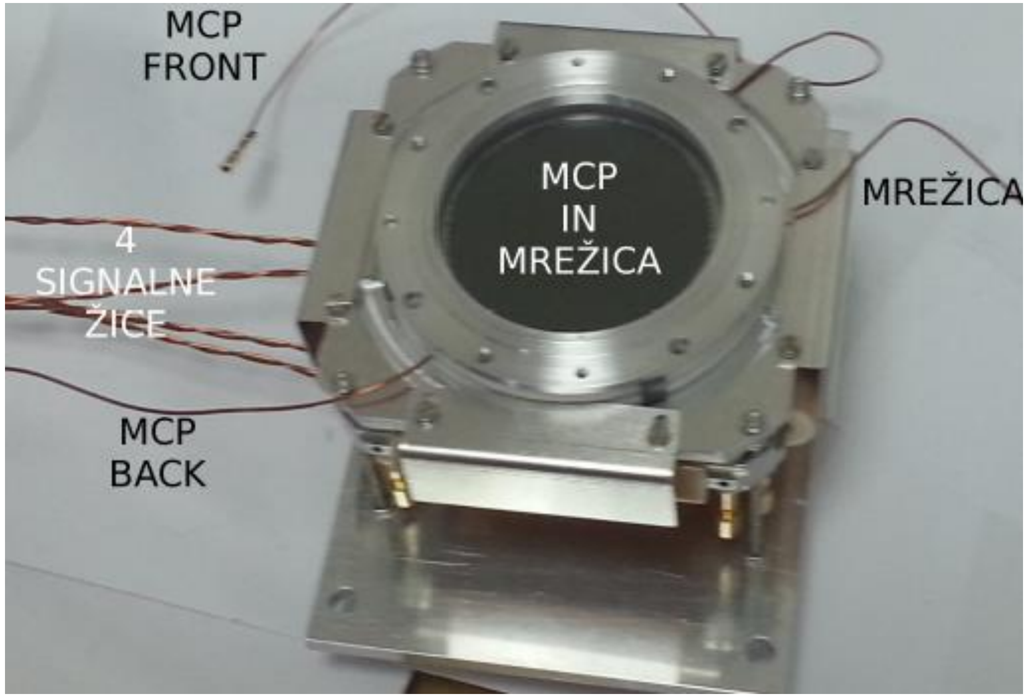
R Zaviralno razmerje leče,
W začetna energija elektrona,
T kinetična energija ob vstopu v analizator analizator

$$\frac{\Delta t_B}{t} = \frac{\Delta r_0 + \Delta r_\pi}{2r_0} + \alpha_0^2$$

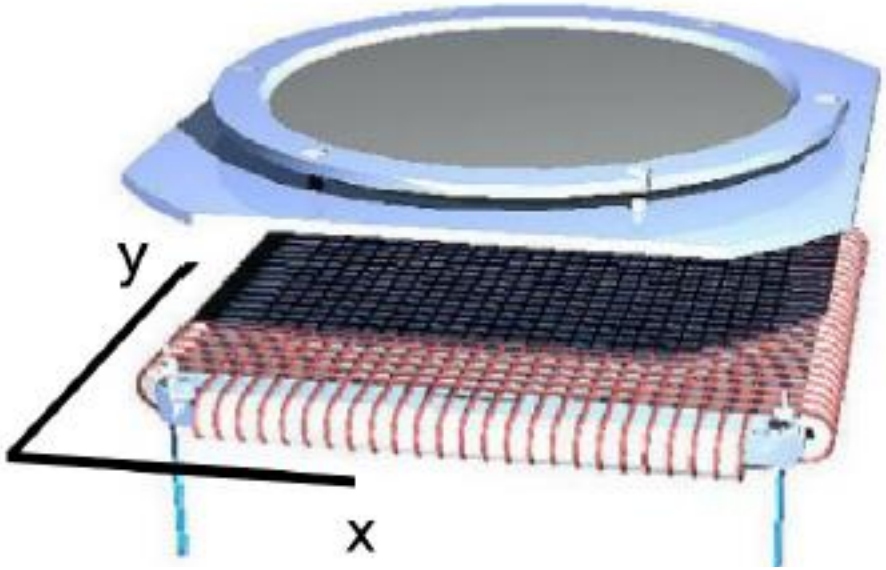
Spektralna ločljivost analizatorja

Napetosti na zunanji in notranji polkrogli:

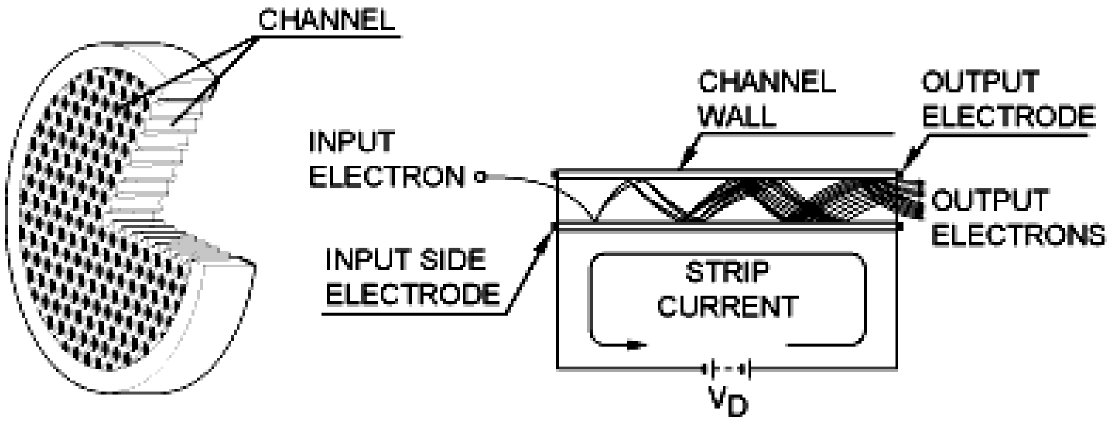
$$qV_1 = W - t\left(\frac{2r_0}{R_1} - 1\right) \qquad qV_2 = W - t\left(\frac{2r_0}{R_2} - 1\right)$$

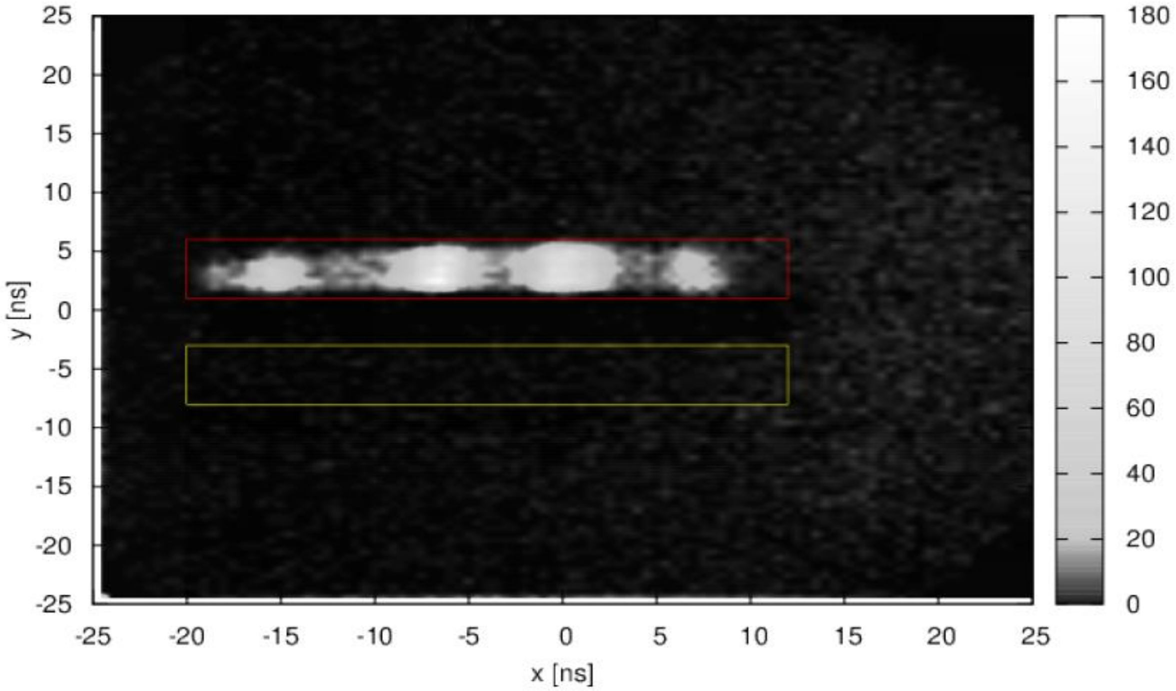


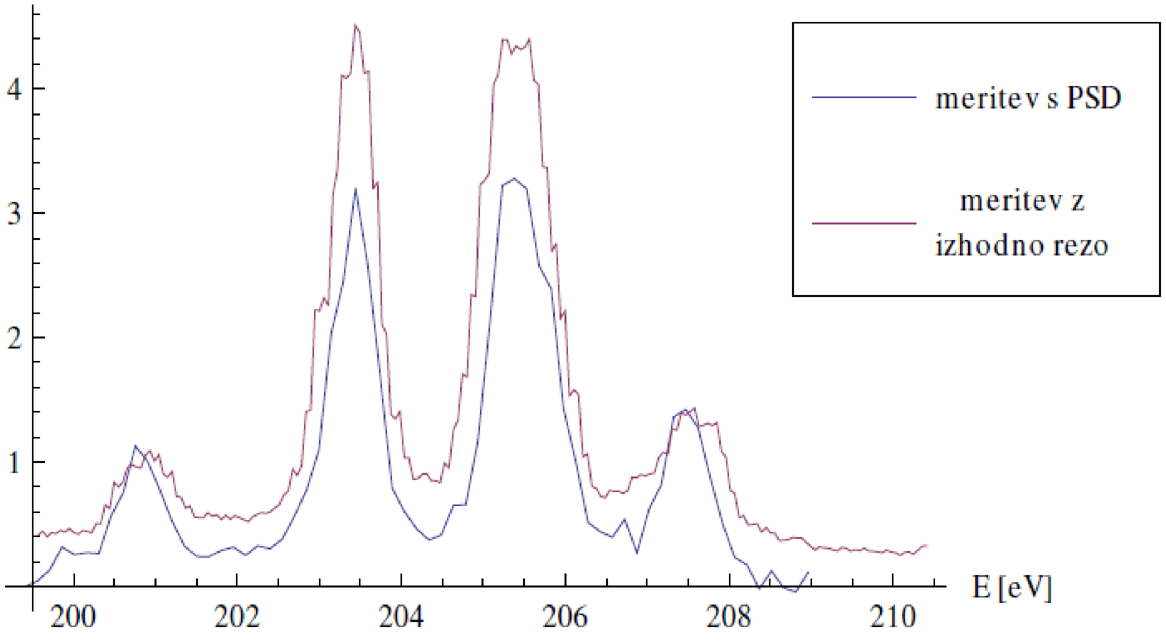
Pozicijsko občutljivi detektor: MCP + zakasnilni liniji

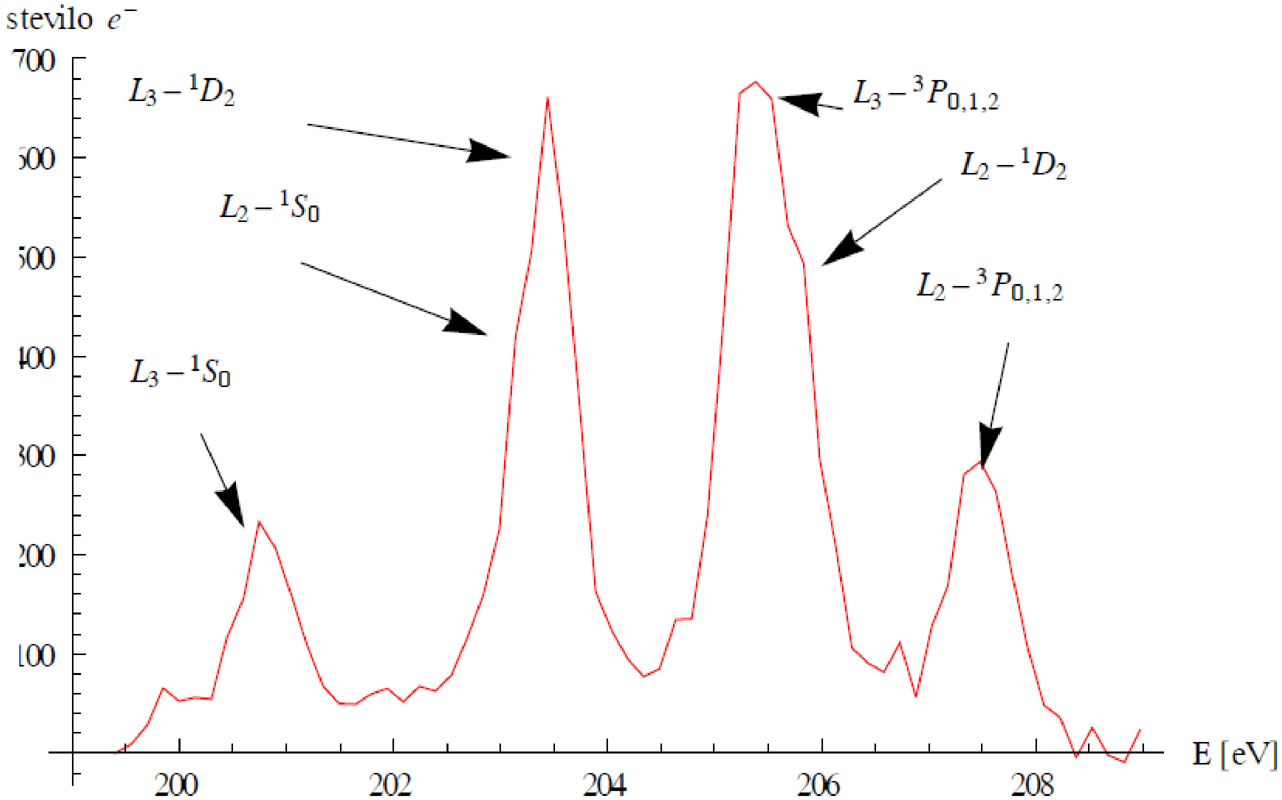


Mikrokanalna ploščica (MCP)









A. Založnik, Sklopitev časovno in pozicijsko občutljivega detektorja s polkrožnim odklonskim spektrometrom za elektrone, Diplomsko delo FMF UL, 2012

HANDBOOK OF AUGER ELECTRON SPECTROSCOPY

A Reference Book of Standard Data for Identification and Interpretation of Auger Electron Spectroscopy Data

SECOND EDITION

By

Lawrence E. Davis

Noel C. MacDonald

Paul W. Palmberg

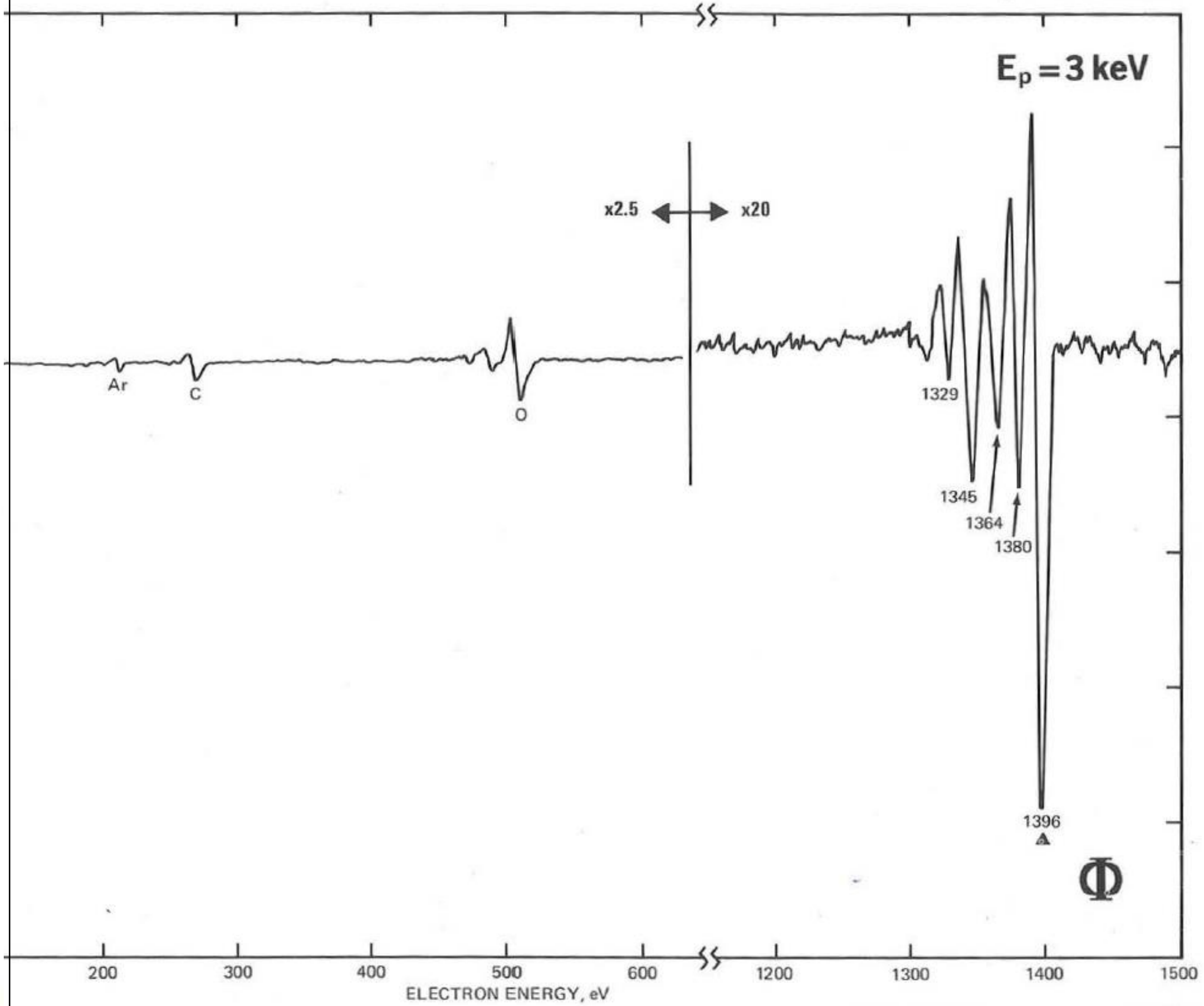
Gerald E. Riach

Roland E. Weber

Published by

Physical Electronics Division
Perkin-Elmer Corporation
6509 Flying Cloud Drive
Eden Prairie, Minnesota 55343

Aluminum, Al Atomic Number 13



Physica Scripta. Vol. 8, 149–158, 1973

The $L_{2,3}MM$ Auger Spectrum of Argon

L. O. Werme, T. Bergmark and K. Siegbahn

Institute of Physics, Uppsala, Sweden

Received April 6, 1973

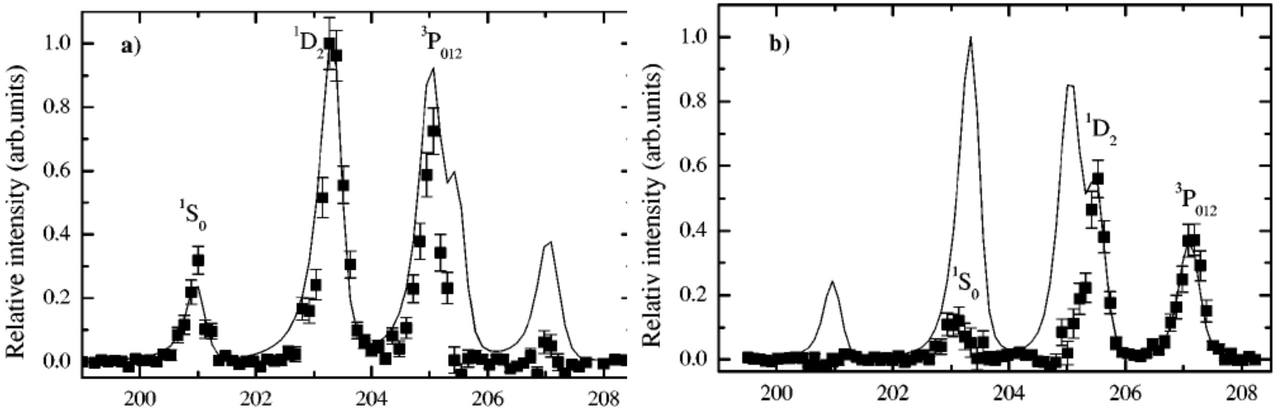
Spekter z visoko spektralno ločljivostjo

Spektri, ločeni glede na začetno vrzel

PHYSICAL REVIEW A, VOLUME 65, 042707

High-resolution photoelectron–Auger-electron coincidence study for the L_{23}-$M_{23}M_{23}$ transitions of argon

S. Ricz,[1] Á. Kövér,[1] M. Jurvansuu,[2] D. Varga,[1] J. Molnár,[1] and S. Aksela[2]



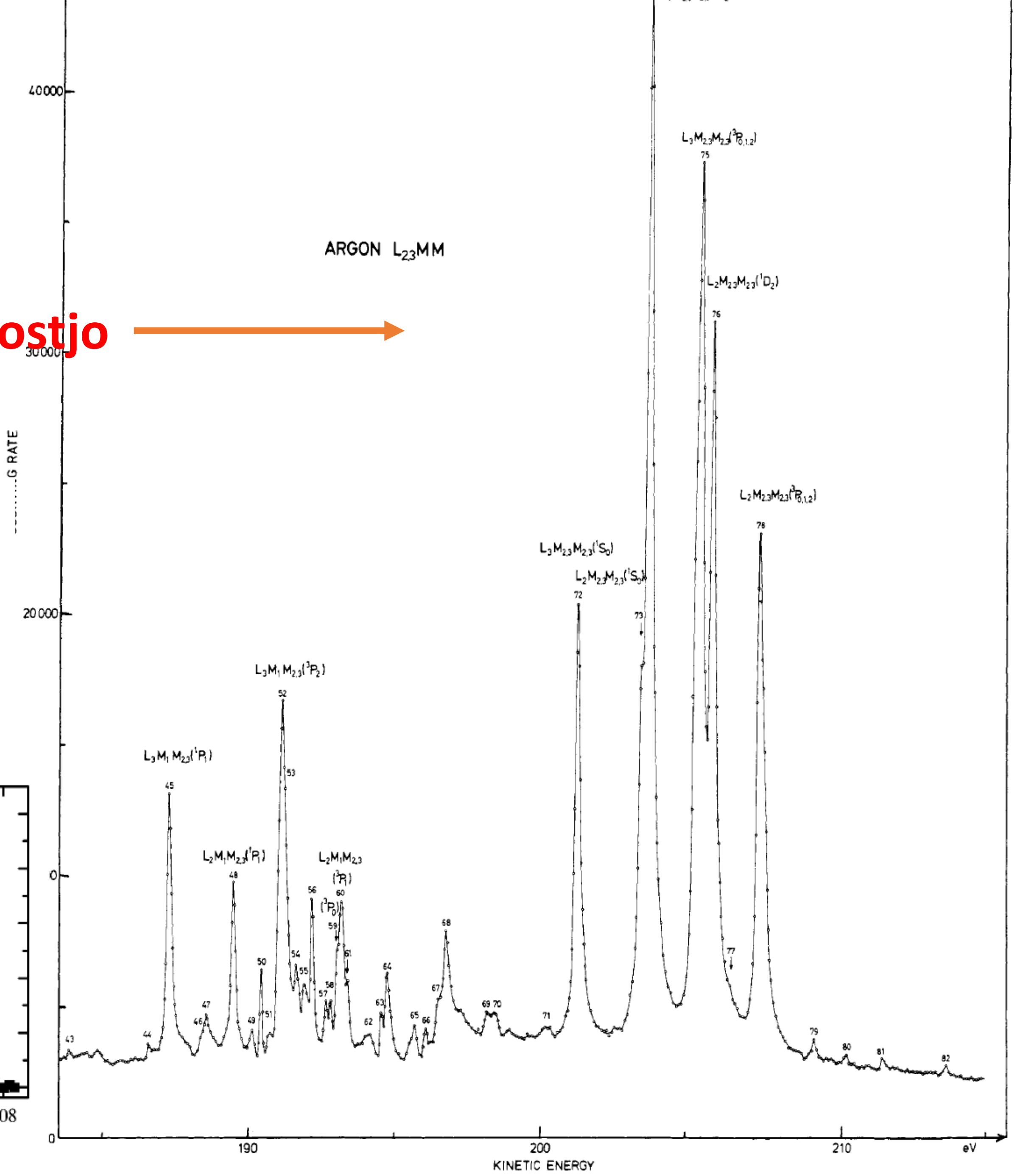
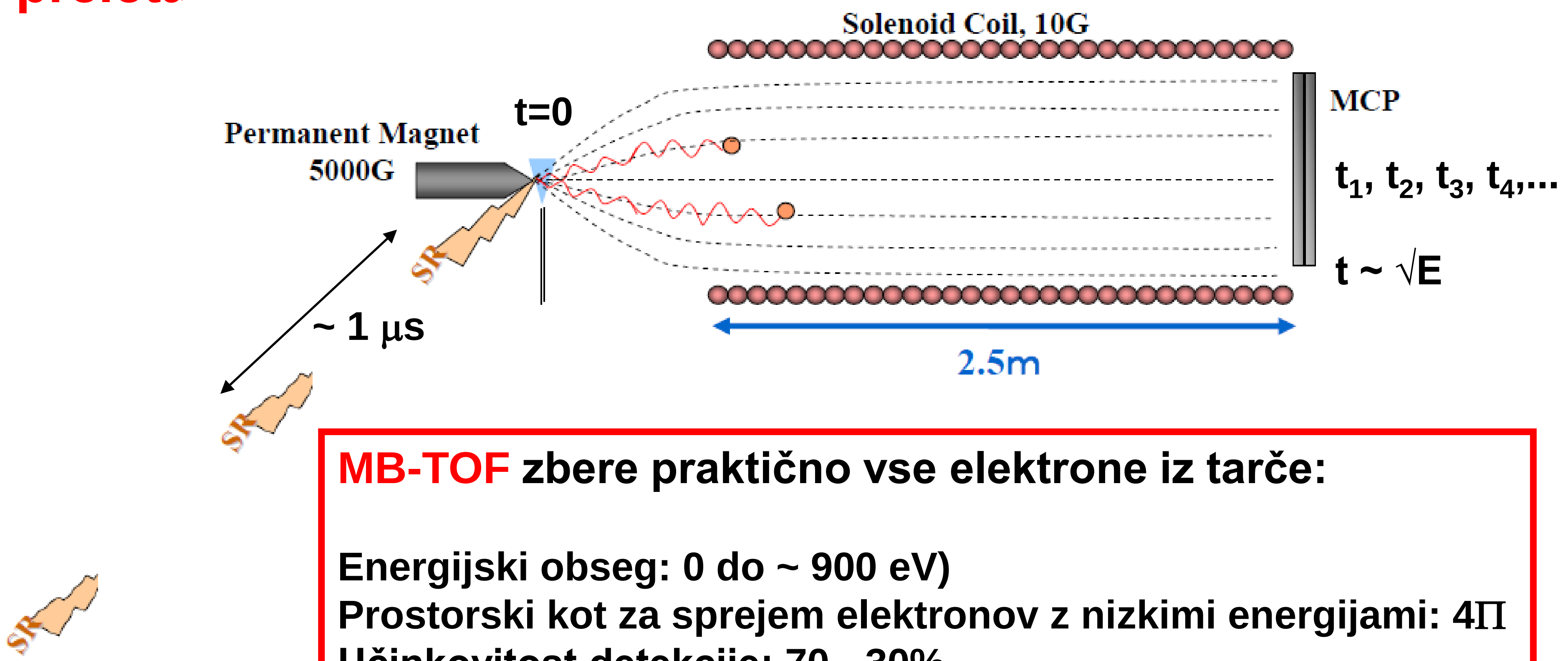


Fig. 1a, b. The $L_{2,3}MM$ Auger spectrum of argon. The spectrum in the figure and the numbers refer to lines resolved or partly resolved under higher resolution. The unnumbered structures in the figure did not reveal any individual lines under higher resolution.

Učinkovit spektrometer za elektrone za uporabo koincidenčnega filtriranja dogodkov:

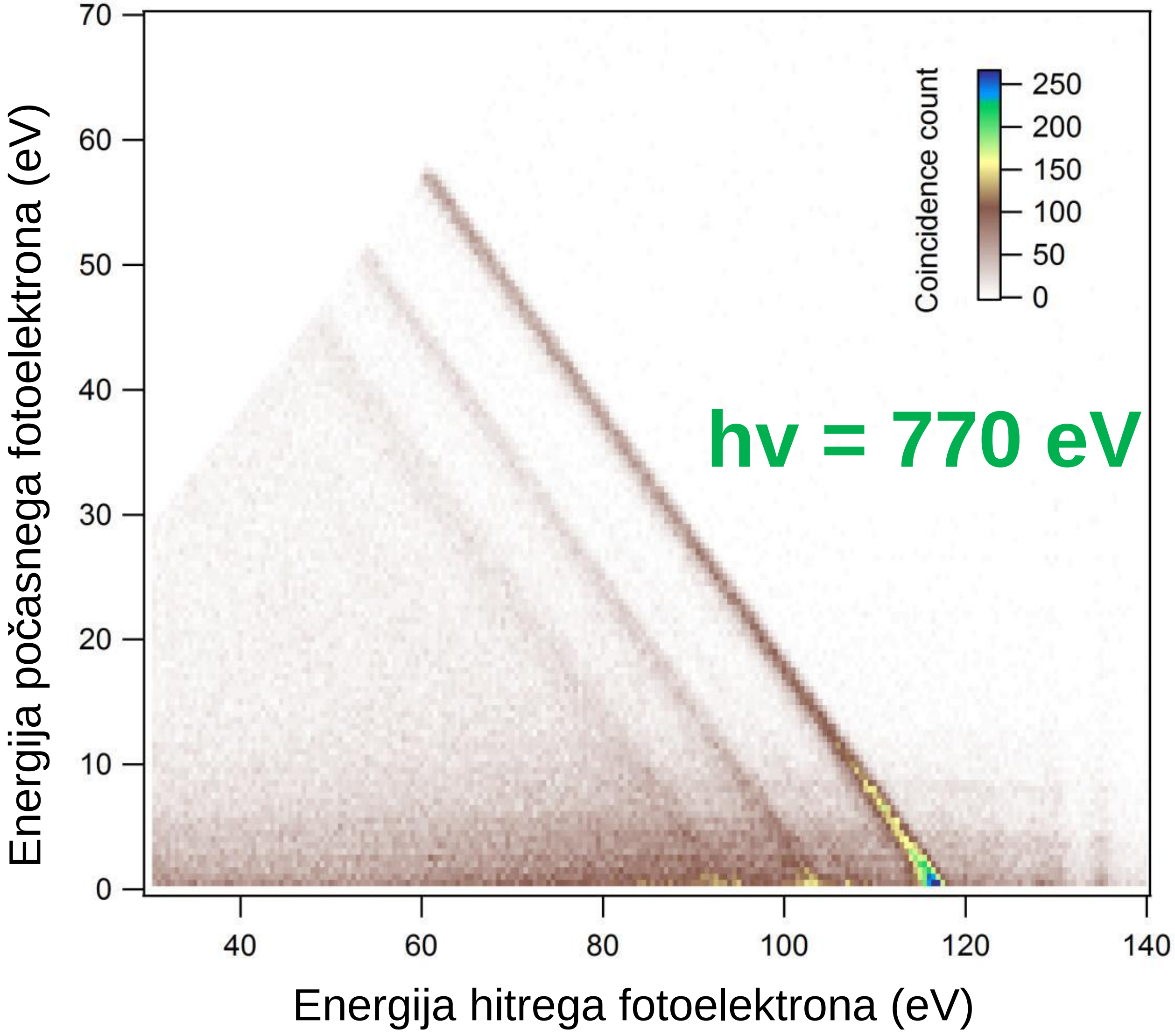
Magnetna steklenica s spektrometrom za elektrone na čas preleta

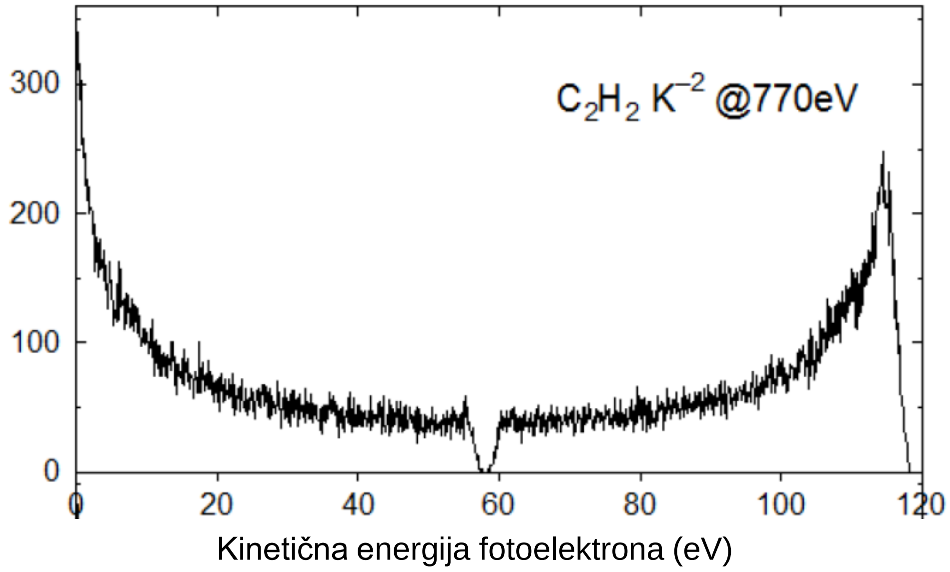


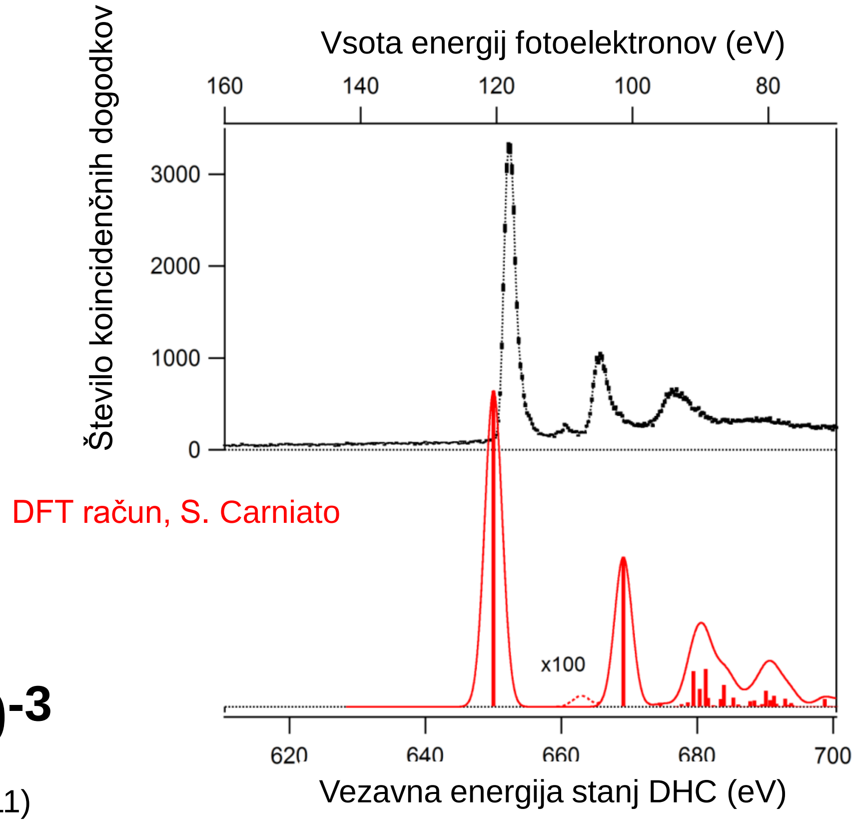
MB-TOF zbere praktično vse elektrone iz tarče:

Energijski obseg: 0 do ~ 900 eV)
Prostorski kot za sprejem elektronov z nizkimi energijami: 4Π
Učinkovitost detekcije: 70 - 30%
Solidna energijska ločljivost: 1~2%

Magnetic Field Spectrometer: Kruit & Read J. Phys. E 16 (1983) 313 ,He lamp Oxford: Eland *et al. Phys Rev Lett 90 (2003) 053003,Synchrotron SACO: Penent et al. Phys Rev Lett 95 (2005) 083002.*







$$hv = BE_n(K^{-2}) + E_k\,(Ph1) + E_k\,(Ph2)$$

$$K^{-2}/K^{-1} = 1.4 \times 10^{-3}$$

Lablanquie et al. PRL 107, 193004 (2011)