

Спектроскопия и теория рассеяния

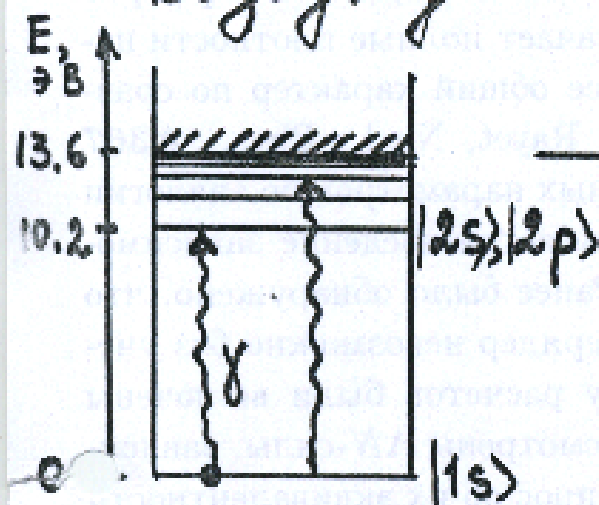
Спектроскопия и теория рассеяния

**Квазистационарные
состояния систем
(атомов, ядер, молекул)**

Взаимодействие излучения с атомами и молекулами.

Атомы:

Возбуждение:



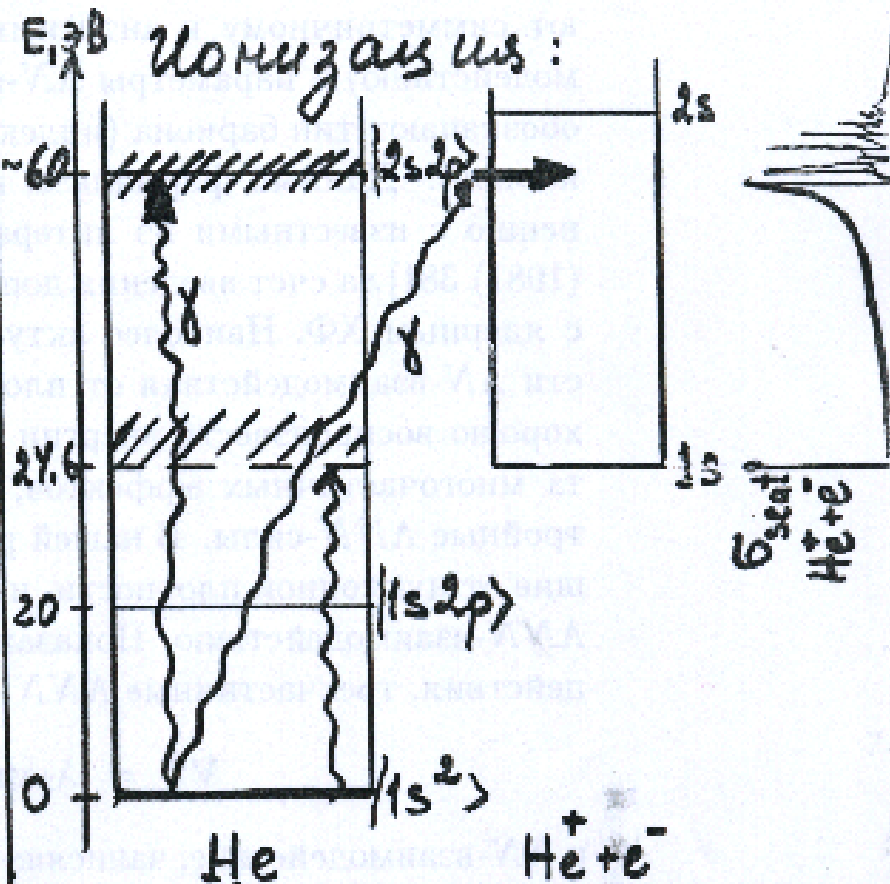
H

$$I = 1 Ry = 13.6 \text{ эВ}$$

$$1 a.e. = 2 Ry$$

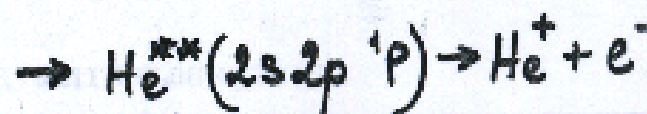
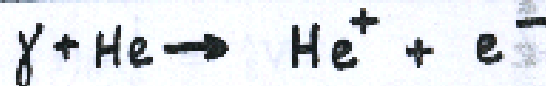
$p^+ + e^-$

Ионизация:

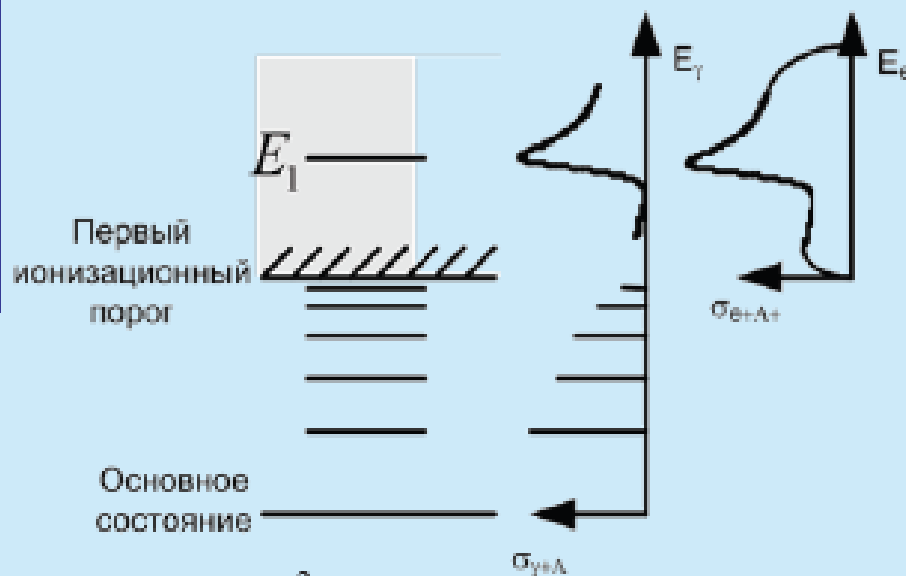
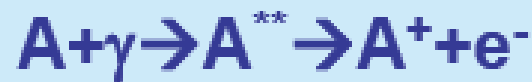


He

$He^+ + e^-$



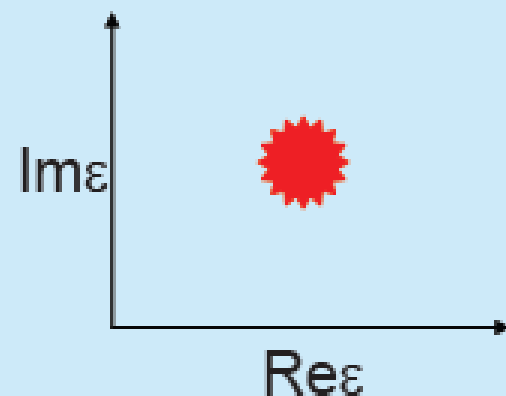
СПЕКТРОСКОПИЯ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ И ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ



Резонансу в сечении фотоионизации атома соответствует полюс S – матрицы в сечении процесса рассеяния электронов на остаточном ионе.

$$\sigma \sim \frac{\Gamma^2 / 2}{(E - E_{res})^2 + \Gamma^2 / 4}, \quad \varepsilon = E - E_{res} + i\Gamma / 2$$

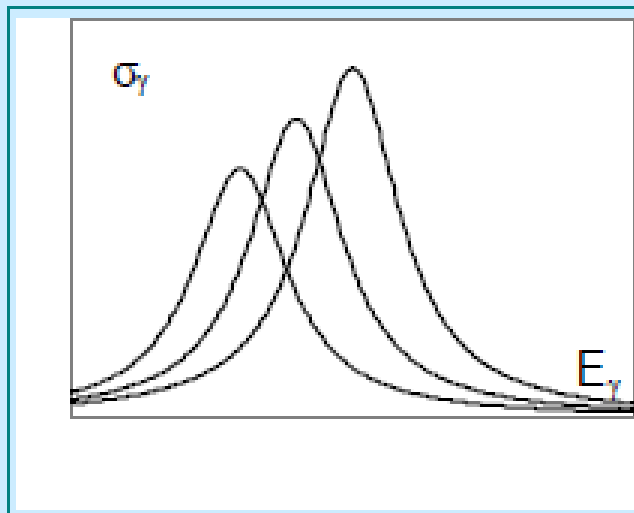
$$S \rightarrow \frac{-\Gamma / 2}{E - E_{res} + i\Gamma / 2}$$



ЕДИНАЯ ТЕОРИЯ ЯДЕРНЫХ И АТОМНЫХ РЕАКЦИЙ

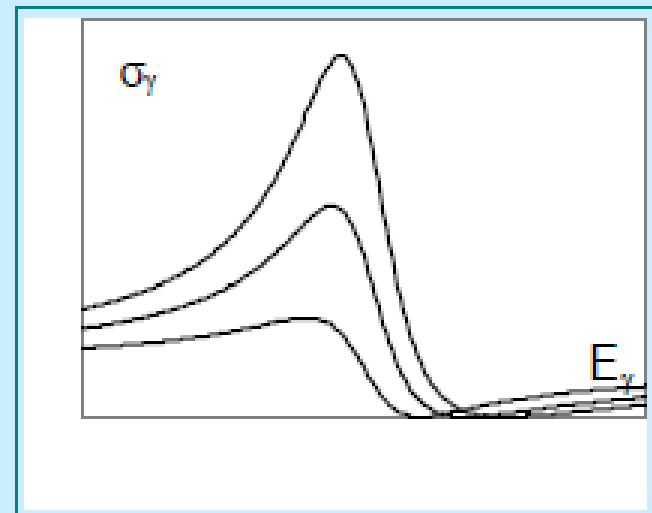
Ядерная физика

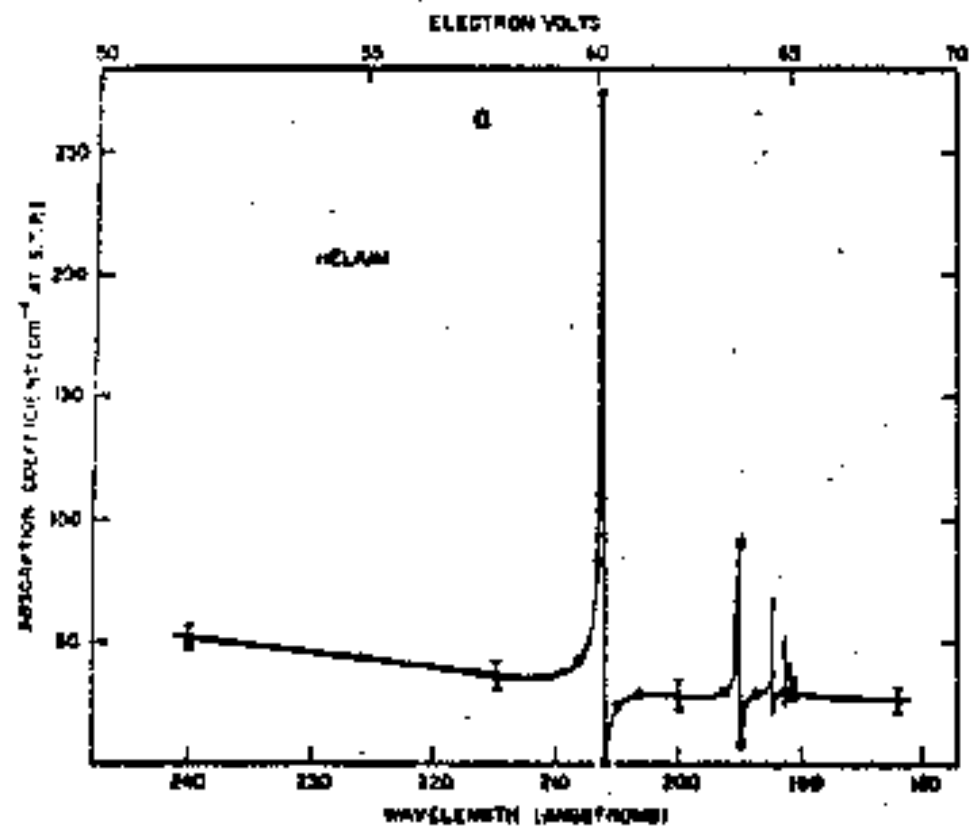
- H. Feshbach// Unified theory of nuclear reaction, Ann. Of Phys. **5** 357 (1958);
- H. Feshbach// Unified theory of nuclear reaction III: Overlapping resonances, Ann. Of Phys. **43** 410 (1967).



Атомная физика

- U.Fano// Phys.Rev. 124,1866-1879, 1961
- F. H. Mies// Configuration Interaction Theory. Effects of overlapping resonance, Phys. Rev. **175** 164 (1968).





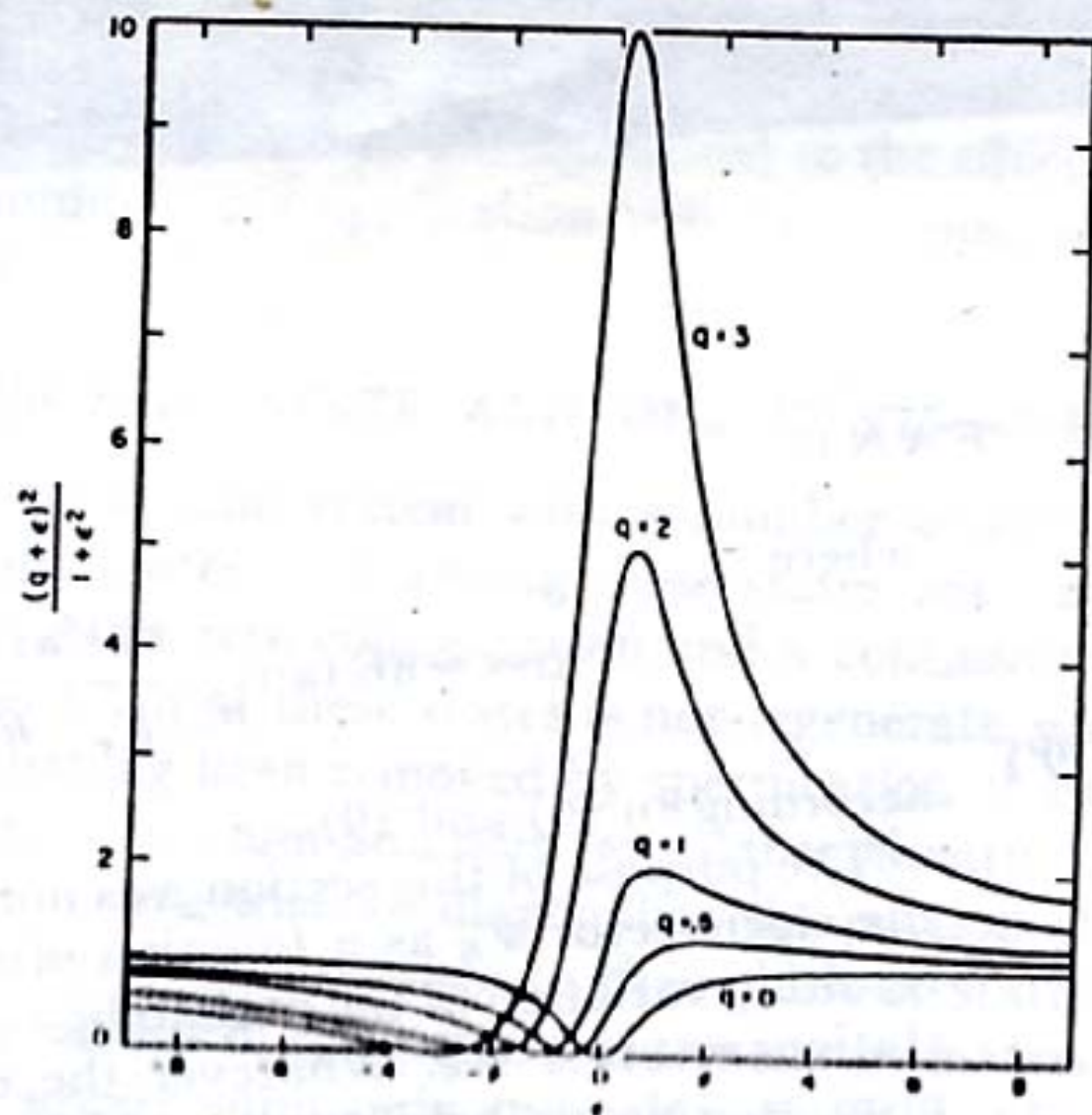


FIG. 1. Natural line shapes for different values of q . (Reverse the scale of abscissas for negative q .)

Fano Resonance in Crossed Carbon Nanotubes

Jinhee Kim,¹ Jae-Ryoung Kim,² Jeong-O Lee,² Jong Wan Park,¹ Hye Mi So,² Nam Kim,¹ Kicheon Kang,³
Kyung-Hwa Yoo,⁴ and Ju-Jin Kim²

¹*Electronic Device Group, Korea Research Institute of Standards and Science, Daejeon 305-600, Korea*

²*Department of Physics, Chonbuk National University, Jeonju 561-756, Korea*

³*Semiconductor and Basic Research Laboratory, Electronics and Telecommunications Research Institute, Daejeon 305-350, Korea*

⁴*Department of Physics, Yonsei University, Seoul 120-749, Korea*

(Received 9 December 2002; published 24 April 2003)

We report the observation of the resonant transport in multiwall carbon nanotubes in a crossed geometry. The resonant transport is manifested by an asymmetric peak in the differential conductance curve. The observed asymmetric conductance peak is well explained by the Fano resonance originating from the scattering at the contact region of the two nanotubes. The conductance peak depends sensitively on the external magnetic field and exhibits Aharonov-Bohm-type oscillation.

DOI: 10.1103/PhysRevLett.90.166403

PACS numbers: 71.10.Pm, 73.40.Gk, 73.61.-r

Резонансы в нейтронных реакциях

Общая формула электронного захвата



Атом при электронном захвате переходит в возбужденное состояние с внутренней оболочкой без электрона (или, как говорят, с «дыркой», вакансией на внутренней оболочке). Снятие возбуждения атомной оболочки происходит путём перехода на нижний уровень электрона с одной из верхних оболочек, причем образовавшуюся на более высокой оболочке вакансию может заполнить электрон с ещё более высокой оболочки и т. д. Энергия, выделяющаяся при этом, уносится одним или несколькими фотонами рентгеновского излучения и/или одним или несколькими Оже-электронами. Если электронный захват происходит в атоме, находящемся в вакууме или разреженном газе, распавшийся атом образует, как правило, многозарядный положительный ион вследствие потери оже-электронов; вероятность сохранения атомом нейтральности порядка процента и менее.

Внутренняя конверсия

— физическое явление, заключающееся в том, что переход атомного ядра из возбуждённого изомерного состояния в состояние с меньшей энергией (или основное состояние) осуществляется путём передачи высвобождаемой при переходе энергии непосредственно одному из электронов этого атома.

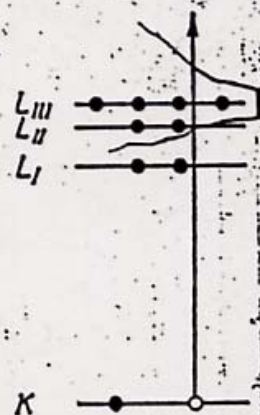
Таким образом, в результате этого явления испускается *не гамма-квант*, а так называемый *конверсионный электрон*, энергия которого определяется разностью между энергией ядерного изомерного перехода и энергией связи определенной оболочки, с которой электрон был испущен (в зависимости от этого различают К-, L-, М- и др. электроны). Кроме того, небольшая доля энергии (сотые или тысячные доли процента) передаётся самому атому в результате эффекта отдачи.

Эффект Оже

Эффект Оже

1.

Возбуждение атома



2.

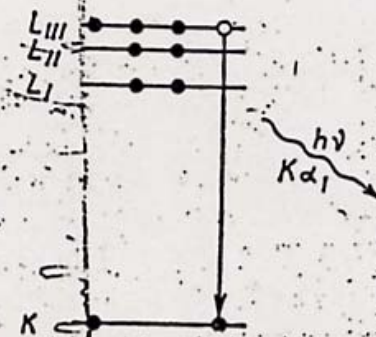
Переход в нормальное состояние

Оже - переход

Радиационный переход



e^-
 $K L_I L_{III}$



$$\tau \sim 10^{-15} \text{ c}$$

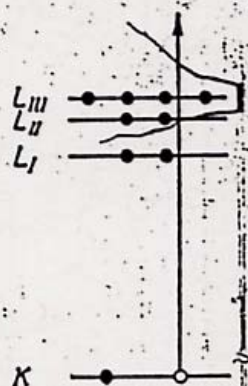
Энергии связи электронов разных оболочек в атомах в эВ

Атомы	C	S	F	Co	I
Оболочки	$1s^2 2s^2 2p^2$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	$1s^2 2s^2 2p^5$	$\dots 3d^7 4s^2$	$\dots 5s^2 5p^5$
1s	288	2 476	690	7 713	33 174
2s	19.5	233	40	930	5 192
2p	10.7	168	13	798	4 856
3s		20		105	1 076
3p		12		64	...

Эффект Оже

1.

Возбуждение атома

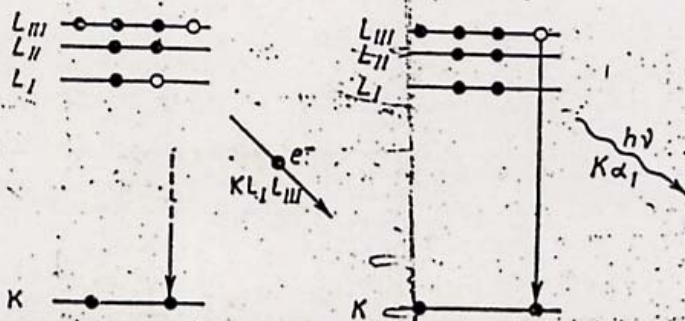


2.

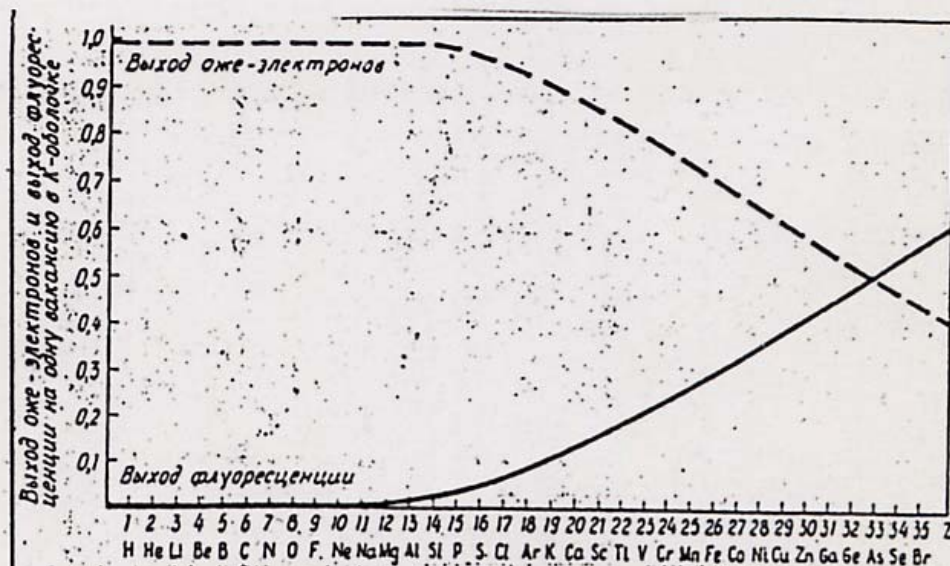
Переход в нормальное состояние

Оже - переход

Радиационный переход



$$\tau \sim 10^{-15} \text{ c}$$

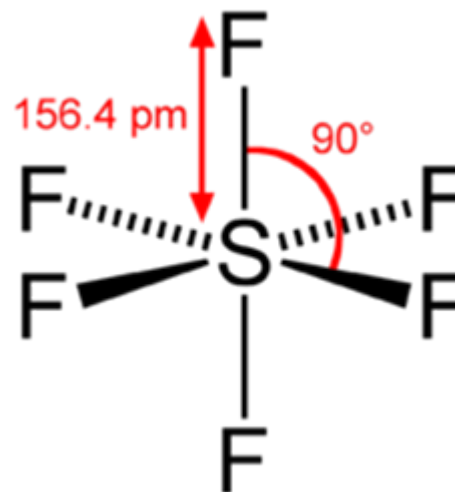
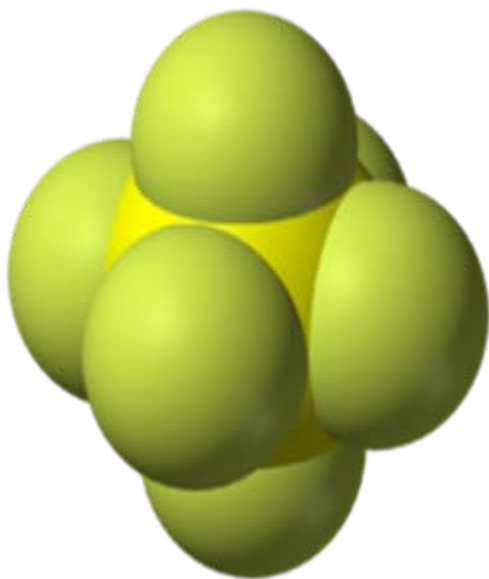


Зависимость выхода флуоресценции и выхода оже-электронов K-оболочки от атомного номера Z для легких элементов.

Эффект Силарда — Чалмерса —

явление, состоящее в том, что при облучении химического соединения нейтронами или γ - квантами в результате того, что образующиеся радиоактивные ядра приобретают значительную энергию, происходит разрушение химической связи, что позволяет выделить радиоактивные атомы.

Эффект обнаружен в 1934 году Лео Силардом и Т.А.Чалмерсом в Великобритании при выделении радиоактивного изотопа иода ^{128}I из облученного нейтронами соединения $\text{C}_2\text{H}_5\text{I}$, CH_3I . Этот эффект лежит в основе методов выделения радиоактивных нуклидов, образующихся при ядерной реакции (n, γ).



Традиционные
названия

Гексафторид серы, шестифтористая сера,
элегаз

Химическая
формула

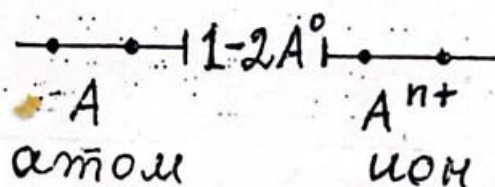
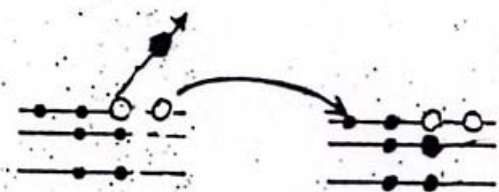
SF₆

Состояние (ст.усл.)

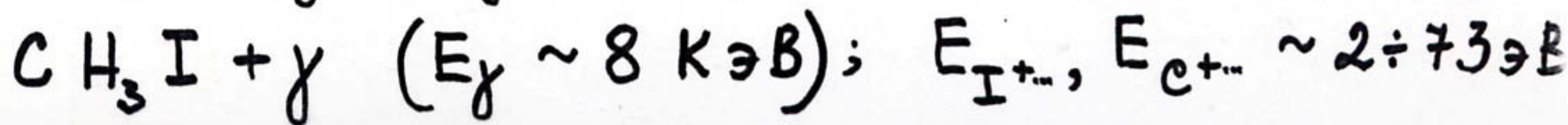
газ

Перезарядка

$$\tau \sim 10^{-15} \text{ c}$$



Кулоновский взрыв молекул:



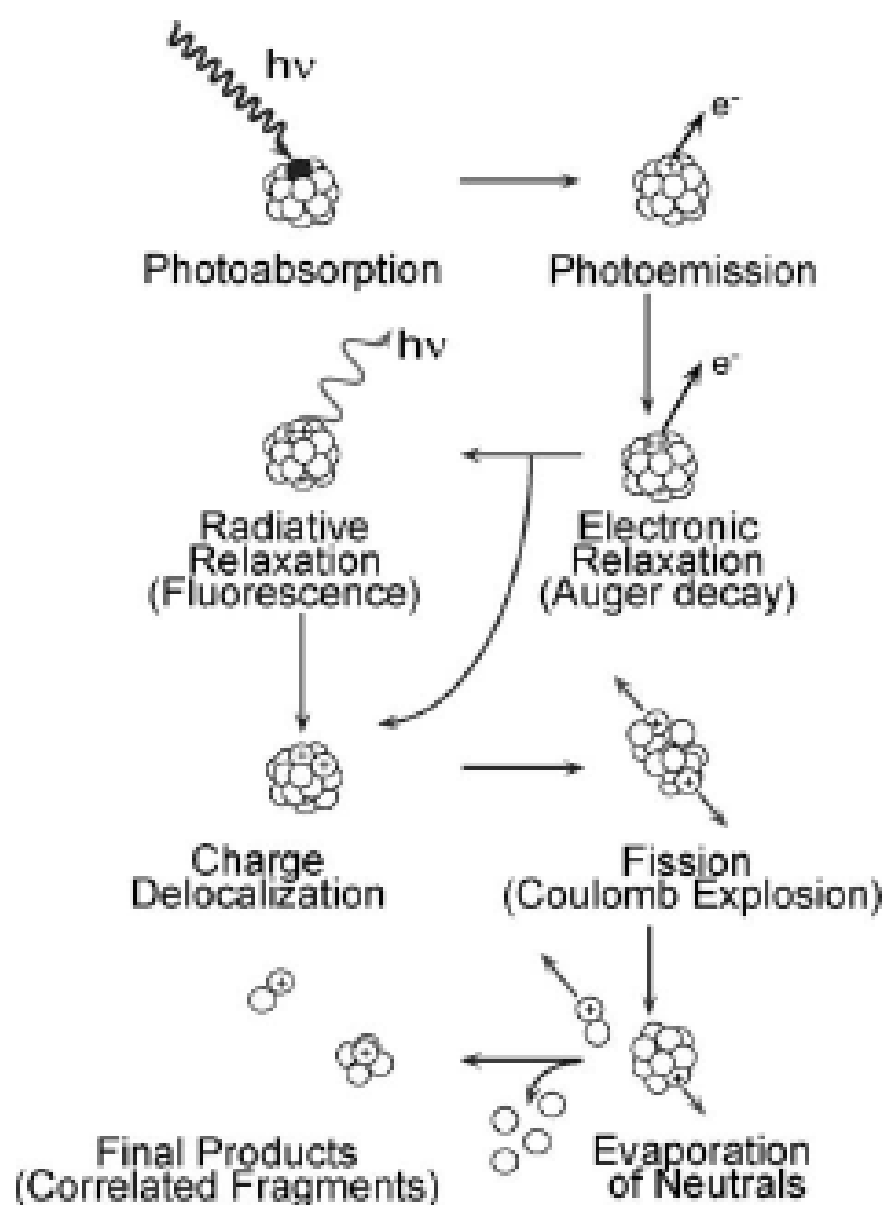


Fig. 29. Schematic diagram of the processes occurring after core level excitation in free atomic van der Waals clusters. Note that the fragmentation processes become more complicated in the case of molecular clusters, since various chemical fragmentation route may occur.

Многokратная ионизация кластера вызывает его нестабильность, что приводит к его очень быстрой высокоэнергетической диссоциации или к взрыву.

Скорость разлета фрагментов кластера в этом процессе очень высока.

Такое явление называется кулоновским взрывом.

Многokратная ионизация кластера вызывает быстрое перераспределение зарядов на его атомах, делающее каждый атом более положительно заряженным.

Если энергия электростатического отталкивания между атомами становится больше энергии связи, атомы быстро разлетаются друг от друга с большими скоростями.

Китайские ученые придумали простой способ разделять углеродные нанотрубки, который основан на кулоновском взрыве.

Суть в том, что при превышении определенного заряда кластер становится нестабильным и происходит взрыв.

С помощью этого метода можно разделять пучки нанотрубок на более тонкие части с одинаковым диаметром, а также получать отдельные нанотрубки.

Вероятность поглощения мю-мезонов водородом, химически связанным с атомом А с зарядом ядра Z, аппроксимируется формулой $W=aZ^{-3}$.

Оказывается, что коэффициент пропорциональности «а» в этой формуле чувствителен к типу связей, образуемых атомом А.

Таким образом, мезон как частица, "чувствующая" внутриатомное поле в молекулах, становится источником информации в вопросах, касающихся структуры соединений.

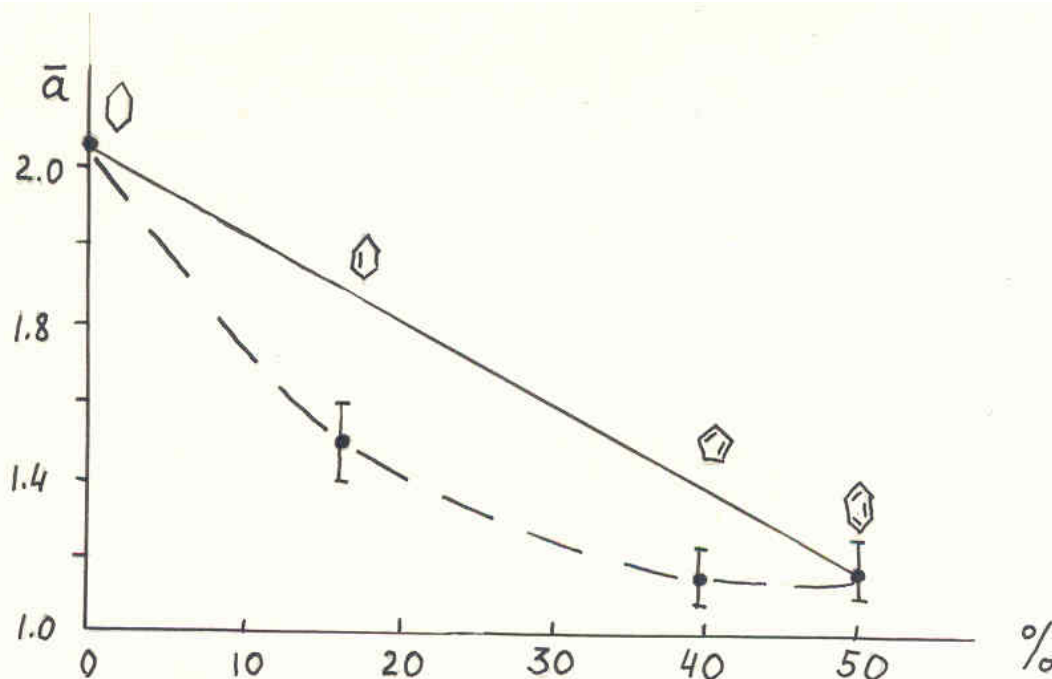
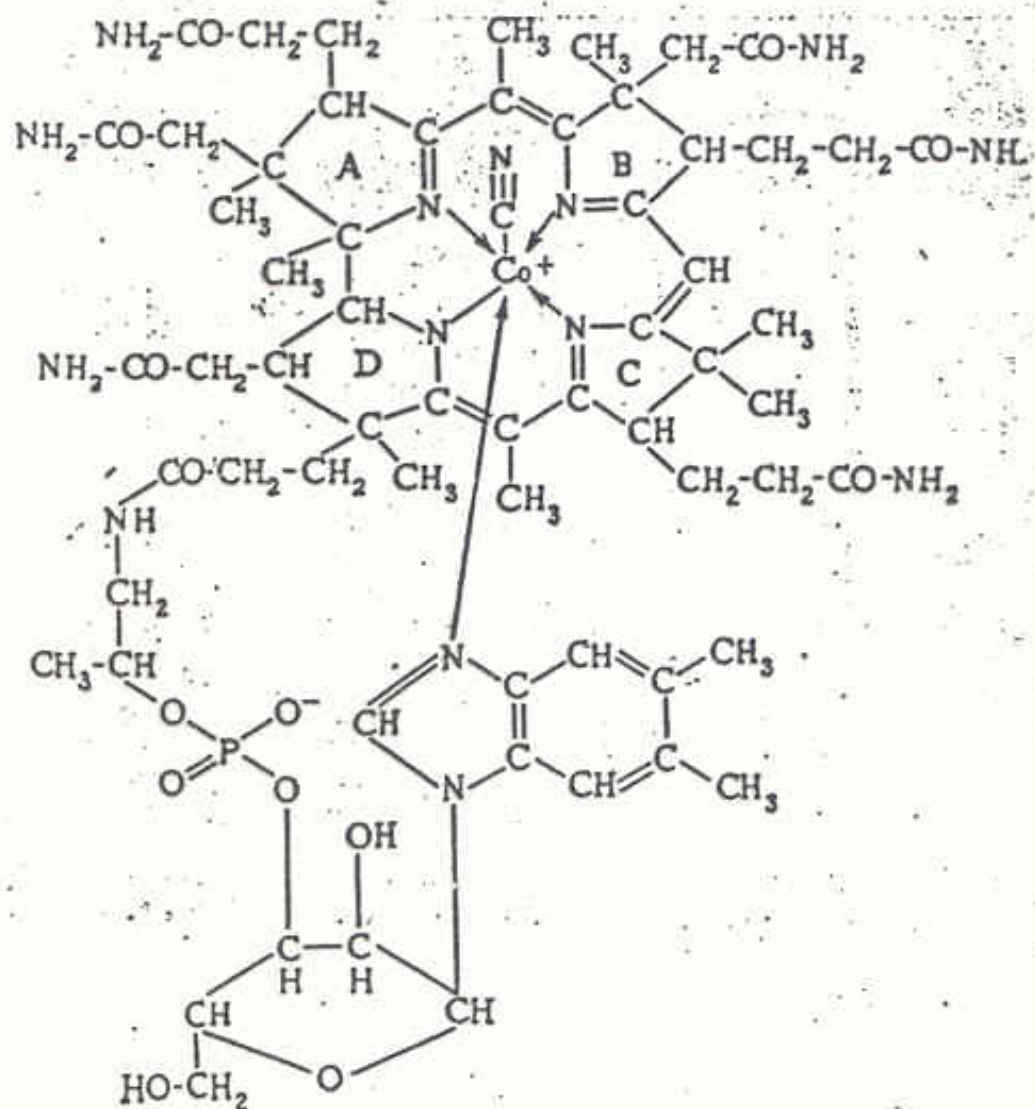


Рис.4. Зависимость коэффициента "а" от степени насыщенности углеводородных циклов ($W_{\text{погл.}} = a z^{-3}$) при поглощении μ -мезонов химически связанным водородом.

Зависимость коэффициента «а» от типа образуемых углеродом связей - степени насыщенности углеводородных циклов - в ряду циклогексан –циклогексен – циклопентадиен - бензол при поглощении мю-мезонов атомами связанного водорода в указанных соединениях.

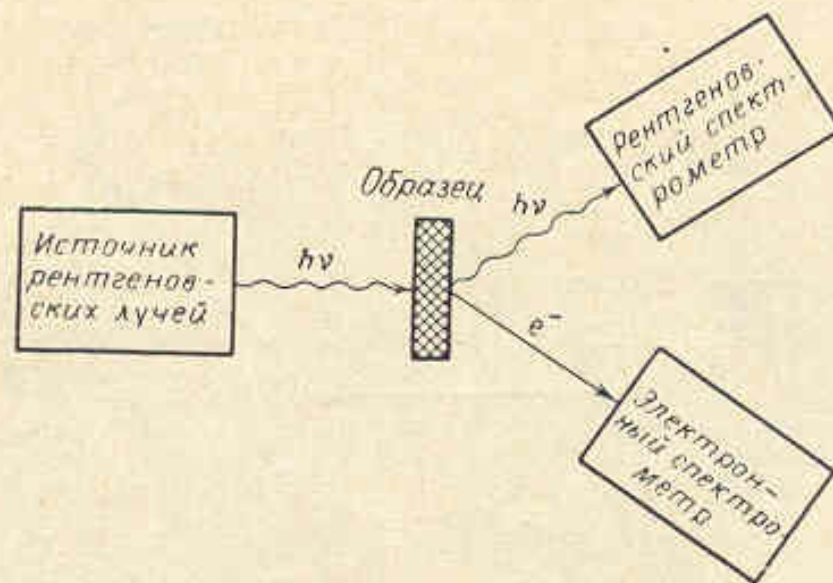
ЭСХА

**Метод электронной
спектроскопии для
химического анализа**

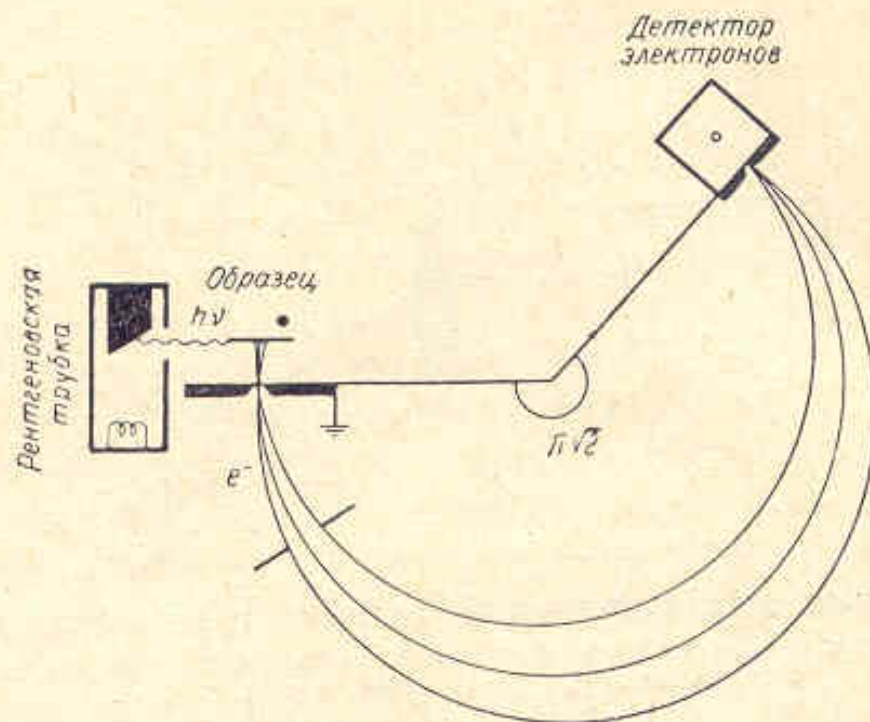


Молекула витамина В₁₂

Один атом кобальта приходится на 180 атомов других элементов.



Ф и г. 1. Два различных метода получения атомных и молекулярных спектров. Верхняя часть — рентгеновская флуоресцентная или абсорбционная спектроскопия; нижняя часть — электронная спектроскопия (метод ЭСХА).



Ф и г. 2. Схема метода ЭСХА, используемого для изучения спектра электронов, выбиваемых из атомов рентгеновскими лучами.

Метод ЭСХА с генерацией электронов излучением, лежащим в рентгеновской области, начал успешно развиваться с 1954 года в Уппсальском физическом институте (Швеция) Каем Зигбаном - сыном выдающегося шведского ученого Карла Манне Зигбана.

Последний широко известен своими классическими работами в области рентгеновской и атомной спектроскопии.

Метод ЭСХА зародился в Швеции на базе рентгеновской спектроскопии и спектроскопии ядерных излучений, развивавшихся здесь с 1920 и 1936 г. соответственно.

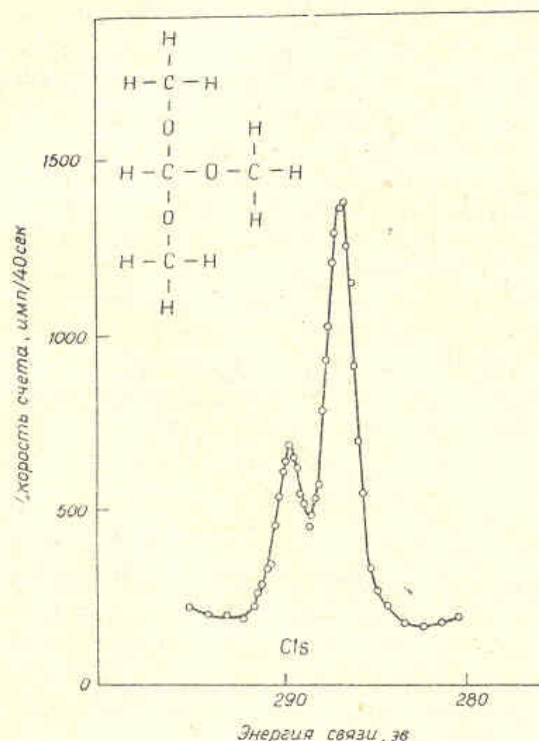
Таблица 4

Молекула	Полная энергия, <i>ат. ед.</i>	Рассчитанный сдвиг C1s-орбиты 1), <i>эв</i>	Эксперименталь- ный сдвиг 2), <i>эв</i>	Полный атомный за- ряд на С	Молекуляр- ный потенциал, <i>эв</i>
CH ₄	-40,1890	0	0	-0,71	9,40
CH ₃ F	-139,0438	2,89	2,8	-0,13	2,73
CH ₂ F ₂	-237,9102	5,93		0,36	-2,90
CHF ₃	-336,8447	8,81	8,1	0,67	-6,86
CF ₄	-435,6495	12,11	11,1	1,01	-10,99
H ₂ CO	-113,8418	3,90	3,3	0,14	-1,19
CO	-112,7027	5,01	5,2	0,32	-4,13
CO ₂	-187,5703	7,86	6,8	0,66	-8,14

1) Относительно орбитальной энергии C1s в метане (-305,07 эв). Положительный сдвиг означает большую энергию связи, т. е. более отрицательную орбитальную энергию.

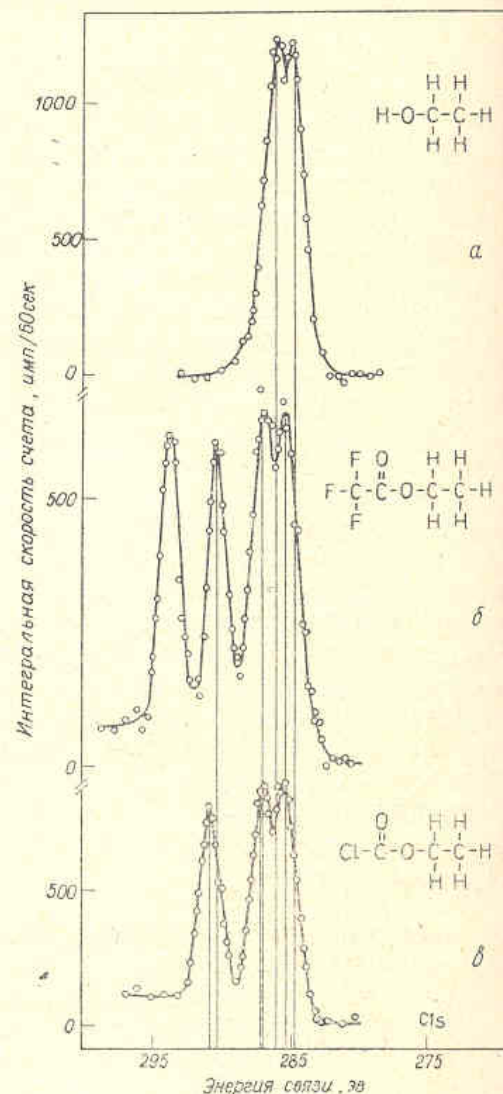
2) Экспериментальные значения взяты из работы [2], кроме значения для CH₃F, которое взято из работы [10].

графическим разложением линии, равно 1,4 эв. Если атом водорода в группе ОН замещается группой $\text{CF}_3\text{C}(\text{O})$, то более высокая электроотрицательность получающейся группы $\text{CF}_3\text{C}(\text{O})\text{O}$ оказывает влияние на атомы углерода как в метиле, так и в метиле, что проявляется в спектре в виде сдвига их энергий связи (фиг. 2, б). Влияние на углерод в метиле больше, чем на углерод в метиле, что приводит к увеличению расстояния между максимумами. Еще более электроотрицательный заместитель $\text{ClC}(\text{O})$ увеличивает энергию связи углерода метилена, но этот эффект недостаточно велик, чтобы быть заметным в случае углерода в метиле (фиг. 2, в).



Ф и г. 1. Спектр 1s-электрона углерода в триметилортоформате.

Интенсивности максимумов отражают относительные количества неэквивалентных атомов углерода.



Ф и г. 2. Спектры 1s-электрона углерода в этаноле (а), этилтрифторацетате (б) и этилхлорформате (в).

Вертикальные линии указывают положение максимумов; расстояния между линиями дают сдвиги вследствие индукционного эффекта различных групп, присоединенных к атому углерода.

Лазерная спектроскопия

**Летохов Владилен
Степанович**

ИСАН, Троицк

Уровень развития квантовой электроники налагает жесткие требования на чистоту соответствующих материалов: 1 атом примесей на 10^{10} - 10^{12} атомов материала.

Целый ряд технологических процессов требует обеспечения контроля за присутствием алюминия, бора и других элементов 3-го столбца периодической системы в полупроводниковых материалах на уровне 10^{-8} - 10^{-10} %.

В проблемах токсикологии, геохимии, геологии, защиты от агрессивных сред, создания сверхчистых материалов и поверхностей, разделения изотопов, смесей, растворов, биологически-активных молекул необходимо обеспечить контроль за количеством вещества порядка 10^{-8} - 10^{-10} %.

ЛАЗЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ
(В.С.Летохов, Институт спектроскопии РАН, г.Троицк, 1980-е годы)

Создание сверхчистых поверхностей, удаление "малых примесей",
разделение изотопов, смесей, растворов и др.

Примеры допустимых норм примесей в некоторых производствах:

<i>Al</i>	$2 \times 10^{-7} \%$
<i>Na в кристаллах CdS</i>	$2 \times 10^{-9} \%$
<i>Квантовая электроника</i>	$10^{-10} - 10^{-12} \%$

Нужно удалить один тип атомов (молекул)

Сечения фотоионизации атомов порядка $10^{-17} - 10^{-19} \text{ см}^2$

Сечения возбуждения атомов порядка $10^{-12} - 10^{-15} \text{ см}^2$

Скорость фотоионизации = «сечение» на «интенсивность фотонов»

Для увеличения скорости ионизации используют явление автоионизации высоковозбужденного атома во внешнем электромагнитном поле. Напряженность поля подбирают так, чтобы скорость автоионизации превысила скорость радиационного распада.

Один тип атомов возбуждают лазером в очень высокое подпороговое ридберговское связанное состояние (нужно точно знать спектр уровней, спектр изучают заранее).

Д А Л Е Е

либо	либо
накладывают постоянное электрическое поле, тем самым понижают порог ионизации, состояние оказывается в континууме, то есть разваливается на ион+электрон с вероятностью порядка единицы (автоматическая ионизация - автоионизация)	лазером возбуждают в квазистационарное состояние (спектр изучают заранее), которое за время порядка 10^{-15} с вероятностью порядка единицы распадается на ион+электрон

Ионы оттягивают электрическим полем
Выигрыш в эффективности (сечении) ионизации атома
(по сравнению с процессом прямой одноступенчатой ионизации атома
в континуум) составляет 4-5 порядков