

电子能量损失谱

廖荣

中国科学技术大学 微尺度物质科学国家研究中心 物理学院, 合肥 230026
合肥国家实验室, 合肥 230088

1 实验目的

1. 认识原子分子的激发态能级结构;
2. 观察允许跃迁与禁戒跃迁, 理解选择定则;
3. 分析不同跃迁的强度, 了解跃迁的激发几率;
4. 了解高分辨快电子能量损失谱仪工作原理, 增加对大科研装置的认识, 增强科研兴趣。

分子的动量平方为:

$$K^2 = p_0^2 + p_a^2 - 2p_0p_a\cos\theta \quad (2)$$

发生非弹性散射时的入射电子的能量损失值 E 近似为原子分子激发能:

$$E = E_0 - E_a \approx E_j \quad (3)$$

2 实验原理

当电子和原子分子碰撞时, 非弹性散射过程中入射电子传递其部分动能给原子分子, 由能量守恒可知, 这部分动能就等于原子分子的激发能。所以通过测量非弹性散射过程中的电子能量损失值, 就可获得原子分子的激发态能级结构。

对于高能带电粒子与原子分子的碰撞, 可以用广义振子强度 (GOS) 来描述电子碰撞实验的跃迁几率:

$$f_{oj}(K) = \frac{2E_j}{K^2} |\varepsilon_j(K)|^2 \quad (4)$$

式中 E_j 代表末态为激发态 j 的能量 (相对于初态), K 指电子的动量转移, $|\varepsilon_j(K)|^2$ 称为跃迁矩阵元:

$$|\varepsilon_j(K)|^2 = |\langle \Psi_j | \sum_{i=1}^N e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}_i} | \Psi_0 \rangle|^2 \quad (5)$$

将上式中 $e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}_i}$ 项 Taylor 展开, 在动量转移很小的情况下, 有:

$$\lim_{K \rightarrow 0} f_{oj}(K) = 2E_j |K \langle \Psi_j | \sum_{i=1}^N \vec{r}_i | \Psi_0 \rangle|^2 \quad (6)$$

上式中 K 是动量转移的矢量方向, 最右边 $|K \langle \Psi_j | \sum_{i=1}^N \vec{r}_i | \Psi_0 \rangle|^2$ 是电偶极跃迁矩阵元。

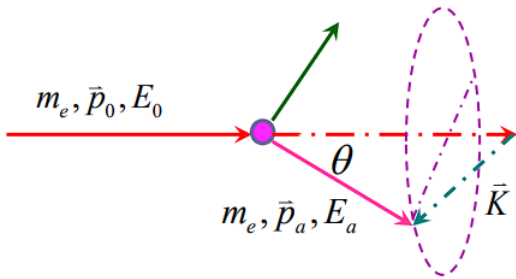


图 1: 电子碰撞运动学

设入射电子的能量为 E_0 , 电子和原子的质量分别为 m 和 M , 散射角为 θ , 如图 1 所示。则由能量和动量守恒定律可得, 当发生非弹性散射时, 散射电子的能量 E_a 为:

$$\begin{aligned} E_a = & [1/(m+M)^2] \{ (M^2 - m^2)E_0 \\ & - (m+M)ME_j + 2m^2\cos^2\theta E_0 \\ & + 2m\cos\theta E_0 [m^2\cos^2\theta + (M^2 - m^2)] \\ & - (m+M)ME_j/E_0 \}^{1/2} \end{aligned} \quad (1)$$

这里 E_j 为原子分子的激发能。而电子传递给原子

3 实验装置

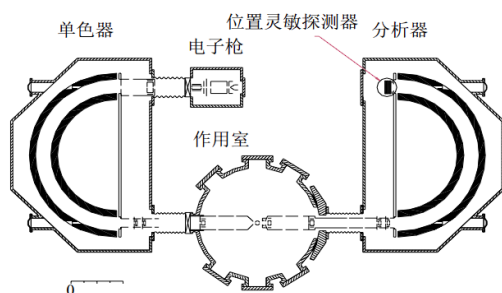


图 2: 电子能量损失谱仪

电子能量损失谱仪由电子枪 (产生一定能量的电子束)、单色器 (减少电子束的能量分散, 提高能量分辨率)、作用室 (通入待测原子分子气体或蒸汽与电子发生作用) 和分析器 (测量散射电子能量) 以及一系列高低压供电系统、位置灵敏探测器、计算机在线数据获取和控制电子学系统、磁屏蔽系统及真空系统组成。

4 实验内容

电子能量损失谱的实验内容可包括测氦原子的电子能量损失谱、数据处理和结果分析等几部分。测谱过程分为以下几个步骤:

1. 正确设置电子学主放大器放大倍数, CFD 阈值, 以及采集延迟时间;
2. 在 2 度设置测量能谱区域。起始电压为 19V (对应电子能量损失值 19eV), 能谱宽度设置为 6eV, 扫一张 He 的能损谱;
3. 同样的电压参数下, 在 6 度扫 He 的能损谱;
4. 用专有的数据处理软件处理原始数据, 获得电子能量损失谱;
5. 把所测谱中的最高峰标定为氦原子的 $1s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 1snp \ ^1P_1$ 跃迁。

5 思考题

5.1 由图 3 所示能级图中 $1s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 1snp \ ^1P_1, n = 2 \rightarrow 4$ 跃迁的能级位置标定所观测能谱, 并标识谱中所有峰;

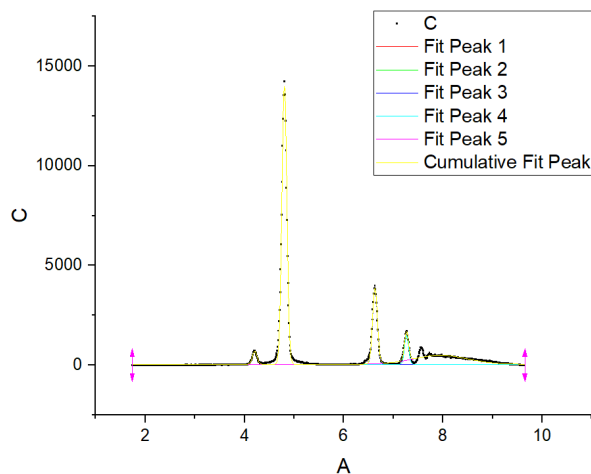


图 3: 2 度时能量损失谱

Model	Gaussian				
Equation	$y = y_0 + A/(w \cdot \sqrt{\pi/4 \cdot \ln(2)}) \cdot \exp(-4 \cdot \ln(2) \cdot (x-xc)^2/w^2)$				
Plot	Peak1(C)	Peak2(C)	Peak3(C)	Peak4(C)	Peak5(C)
y0	48.93528 ± 4	48.93528 ± 4.5	48.93528 ± 4.5	48.93528 ± 4	48.93528 ± 4.5
xc	4.20622 ± 0	4.80333 ± 1.62	6.62854 ± 5.86	7.26568 ± 0.0	7.9516 ± 0.018
A	74.551 ± 4.8	1743.48319 ±	459.50645 ± 5	146.38034 ± 5	608.07317 ± 2
w	0.10672 ± 0	0.11737 ± 3.85	0.11357 ± 0.00	0.09498 ± 0.0	1.27316 ± 0.04
Reduced C	9113.80976				
R-Square (0.99603				
Adj. R-Squa	0.99595				

图 4: 2 度时能量损失谱峰位拟合信息

用 $1s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 1snp \ ^1P_1, n = 2 \rightarrow 4$ 跃迁来标定第 2 到第 4 个峰, 得到:

Peak	4.8033	6.6285	7.2657
E(eV)	21.28	23.15	23.91

进行线性拟合得到

$$E = 1.0584 \times channel + 16.183, R^2 = 0.999$$

第 1 个峰 (4.2062) 对应的能量为 20.635eV。较为接近 $1s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 1s2p^3 \ P_{2,1,0}$ ($E = 21.02eV$)。

第 5 个峰 (7.9516) 对应的能量为 24.599eV。较为接近 $1s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 1s5p^1 \ P_1$ ($E = 24.11eV$)。

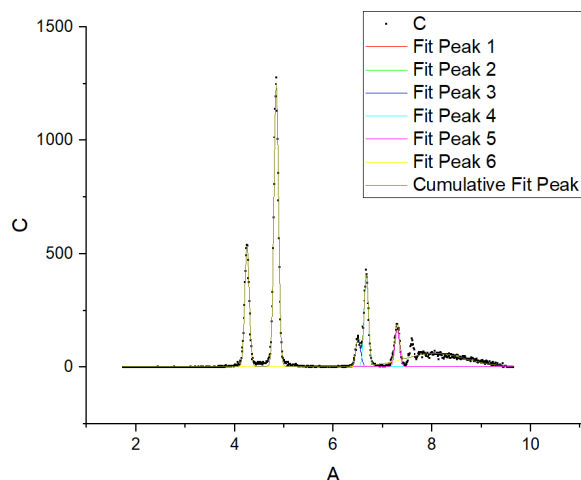


图 5: 2 度时能量损失谱

Gaussian	
Model	$y = y_0 + A/(w*\sqrt{\pi(4*\ln(2))}) * \exp(-4*\ln(2)*(x-xc)^2/w^2)$
Equation	
Plot	Peak1(C) Peak2(C) Peak3(C) Peak4(C) Peak5(C) Peak6(C)
y0	4.18922 ± 0.52 4.18922 ± 0.52 4.18922 ± 0.5 4.18922 ± 0.52 4.18922 ± 0. 4.18922 ± 0.
xc	4.24895 ± 4.67 4.84165 ± 2.00 6.50398 ± 0.0 6.66689 ± 6.95 7.29367 ± 0. 8.06019 ± 0.
A	60.05465 ± 0.5 144.29575 ± 0. 14.47156 ± 0. 43.8906 ± 0.64 18.37555 ± 85.364 ± 2.7
w	0.10707 ± 0.00 0.10932 ± 4.77 0.11272 ± 0.0 0.10294 ± 0.00 0.10617 ± 0. 1.40273 ± 0.
Reduced C	118.28539
R-Square (0.99405
Adj. R-Squa	0.99391

图 6: 2 度时能量损失谱峰位拟合信息

用 $1s^2\ ^1S_0 \rightarrow 1snp\ ^1P_1, n = 2 \rightarrow 4$ 跃迁来标定第 2、第 4、第 5 个峰, 得到:

Peak	4.8417	6.6669	7.2837
E(eV)	21.28	23.15	23.91

进行线性拟合得到

$$E = 1.0650 \times channel + 16.109, R^2 = 0.999$$

第 1 个峰 (4.2500) 对应的能量为 20.635eV。较为接近 $1s^2\ ^1S_0 \rightarrow 1s2p^3P_{2,1,0}(E = 21.02eV)$ 。

第 3 个峰 (6.5040) 对应的能量为 23.036eV。较为接近 $1s^2\ ^1S_0 \rightarrow 1s3p^3P_{2,1,0}(E = 23.06eV)$ 。

第 6 个峰 (7.5960) 对应的能量为 24.199eV。较为接近 $1s^2\ ^1S_0 \rightarrow 1s5p^1P_1(E = 24.11eV)$ 。

5.2 根据实验结果估算 $1s^2\ ^1S_0 \rightarrow 1s2p\ ^1P_1$ 跃迁在零度角和 6 度角的截面比

根据 $\lim_{K \rightarrow 0} f_{oj}(K) = 2E_j |K \langle \Psi_j | \sum_{i=1}^N \vec{r}_i | \Psi_0 \rangle|^2$, 0 度时的散射截面与 6 度时的比值应为 $(\cos \frac{6}{180} \pi)^2 = 98.8\%$

5.3 简述半球型能量分析器的原理 (用文字或者公式描述皆可)

其基本原理是采用两个半球, 外球加负电压, 内球加正电压, 这样由小孔限制的相当于从一个点垂直入射的电子束就在内外球之间发生偏转。显然, 入射电子束中能量较大的电子不容易偏转, 在半球出口处落在靠近外球的一侧。相反地, 入射电子束中能量较小的电子偏转容易, 在半球出口处落在靠近内球的一侧。由简单的电磁学知识推导可以得出, 电子在出口处距球心的距离与其进入半球的能量是线性关系。如果我们在半球的出口处放置一个小孔, 这样就相当于从入射电子束中挑出了能量分散很小的一部分电子束。

5.4 试想有哪些方法可以进一步提高谱仪的分辨率, 以及相应的代价是什么?

1. 可以将半球出口的小孔设置得更小, 从而提高分辨率, 但是随着小孔减小, 能量会急剧下降, 降低仪器的灵敏度。

2. 可以使用更高的加速电压, 但这样会导致样品的辐射损伤, 另外, 更高的加速电压还会导致更多的背景噪声。