XPS YÖNTEMİ



Şekil 1. Fotoelektronların ortaya çıkması

X-Işınlarının çekirdeğe yakın elektron tabakalarından elektron koparıldığını daha önce belirtmiştik. Bu elektronlara fotoelektronlar adı verilir.Fotoelektronlar dedekte edilebilirlerse atom hakkında çok faydalı bilgiler verirler, çünkü elektronu koparmada x-ışını kullanılırsa fotoelektronun enerjisi gelişigüzel olmaz , eğer x-ışını fotonunun enerjisi E = hν ve bu elektronu çekirdeğe bağlayan kuvvet Eb ise bu fotoelektronun kinetik enerjisi,

Ek = hν - Eb olur.

Işık fotonunun enerjisi artarsa fotoelektronun kinetik enerjiside artar. Aynı eşitliği hızlandırılmış elektron için yazamayız çünkü hızlandırılmış elektronun enerjisinin ne kadarını fotoelektrona yükleyeceği bilinemez, bu sebepten XPS yönteminde uyarıcı kaynak olarak coolidge tüpleri kullanılır.

XPS Cihazlarında Analit X-ışını ile etkileştirildikten sonra çıkan elektronlar bir magnetik toplayıcı ile odaklanırlar ve bir elektrostatik ayırıcıda enerjilerine göre ayırt edilirler. Burada önemli olan kullanılan uyarıcı x-ışınının enerjisinin sabit olmasıdır. Bilinen atomlarda K,L ve M tabakalarının çekirdeğe bağlanma enerjileri 3000 eV tan küçük olduğu için fotoelektronların elde edilebilmesi amacıyla yüksek enerjili bir x-ışınına gereksinim yoktur. Bu yüzden kaynak olarak Mg anotlu bir x-ışını tüpü kaynak olarak yeterlidir. Madde üzerinde atomik halde veya moleküler halde bulunan çok sayıda atomdan uygun orbitallerden fotoelektronlar kopar ve bu elektronlar elektrostatik analizörde enerjilerine göre dedekte edilirler. Kaynaktan gelen ışığın enerjisi sabit olduğuna göre elektronu çekirdeğe bağlayan Eb hesaplanabilir. Bir atom için, özellikle atom numarası büyük elementlerde birkaç farklı enerjide fotoelektronlar ortaya çıkar, bunların bir kısmı K tabakasından koparken diğerleri L tabakasından kopmuşlardır. Bu durum hiçbir zaman karışıklık yaratmaz çünkü aynı atomdan çıkan iki farklı fotoelektronların enerjileri birbirinden çok farklıdır. Her atomdan çıkan fotoelektronların bir grubu diğerine göre yoğun ve o element için spesifiktir. Örneğin 1. Sıra geçiş elementleri için 2p orbitalinden kopan fotoelektronlar spesifiktir ,ancak N ve O için ise 2s orbitalinden çıkan fotoelektronlar spesifiktir. Bu fotoelektronların kinetik enerjileri yaklaşık sabittir, atomun kimyasal çevresine göre çok az değişebilir, çünkü atomun yüküne daha doğrusu etkin çekirdek yüküne göre Eb çok azda olsa değişir. Bu değişiklik hiçbir zaman 10 eV ‘u geçmez ancak geçmesede atomun kimyasal çevresi hakkında bilgi verir. En azından atomun yükseltgenme basamağına göre azda olsa bir fark yaratır. Bu noktada XPS yöntemi XRF yönteminden ayrılır. XRF sadece element analizi yapabildiği halde XPS hem element analizi hemde türleme yapabilir.

AUGER ELEKTRONLARI

Aşağıda şekil 2’de Auger elektronlarının ortaya çıkışı şematik olarak gösterilmiştir., 

Şekil 2. Auger elektronlarının ortaya çıkışı

Auger elektronları ancak küçük atom numaralı elementlerde ortaya çıkar. Çünkü gelen X-ışınının veya hızlı elektronun enerjisi fotoelektronu ortaya çıkarabilmek için gerekli olan Eb enerjisinden çok büyükse tüm enerji fotoelektrona aktarılamaz , enerjinin bir kısmı atomun üzerine yayılır, bu durumda fotoelektronun boşluğu doldurulurken fazla enerjnin atomdan boşaltılabilmesi için aynı elektron kabuğundan bir elektron daha fırlatılır. Budurumda ilk akla gelen fotoelektronlarla Auger elektronlarının ortamda karışık olarak dağılacağıdır. Gerçektende Auger elektronları ve fotoelektronlar ortama karmaşık dağılırlar. Ancak atom numarası 3-9 arasındaki elementlerde ortamda Auger elektronları hakimken atom numarası 20 den büyük elementlerde fotoelektronlar daha çoktur. Ancak fotoelektronlar ile Auger elektronlarını ayırt edebilmek için auger elektronlarının bir özelliğinden yararlanılır. Auger elektronlarının enerjisi dikkat edilirse,

Ek = Eb – 2 Eb’

Eşitliği ile hesaplanabilir ve kaynağın enerjisinden bağımsızdır, bunun yanında atomun kimyasal çevresindende bağımsızdır. Bu sebepten dolayı Auger elektron spektroskopi cihazları üretiminde uyarıcı kaynak olarak x-ışını tüpü değil bir elektron tabancası kullanılır. Auger spektroskopi yöntemi atom numarası 3-20 olan elementleri daha çok nitel analiz amacıyla kullanılır.