

ОСОБЛИВОСТІ $KL_{2,3}^2$ - ТА $KL_{2,3}^3$ - ІОНІЗАЦІЇ АТОМІВ КРЕМНІЮ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ

Боровий М.О., доктор фізико-математичних наук, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

Іщенко Р.М., кандидат фізико-математичних наук, Національний транспортний університет, Київ, Україна

Ісаєнко Г.Л., кандидат фізико-математичних наук, Національний транспортний університет, Київ, Україна

FEATURES OF $KL_{2,3}^2$ - AND $KL_{2,3}^3$ - IONIZATION OF SILICON ATOMS UNDER ELECTRON IMPACT

Borovoy M.O., Doctor of Sciences, Kyiv Taras Shevchenko National University, Kyiv, Ukraine

Ishchenko R.M., Ph. D., National Transport University, Kyiv, Ukraine

Isaienko G.L., Ph. D., National Transport University, Kyiv, Ukraine

ОСОБЕННОСТИ $KL_{2,3}^2$ - И $KL_{2,3}^3$ - ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ КРЕМНИЯ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

Боровой Н.А., доктор физико-математических наук, Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев, Украина

Ищенко Р.Н., кандидат физико-математических наук, Национальный транспортный университет, Киев, Украина

Исаенко Г.Л., кандидат физико-математических наук, Национальный транспортный университет, Киев, Украина

Постановка проблеми та аналіз літературних джерел.

Іонізація K - оболонки атома електроном чи фотоном може супроводжуватися автоіонізацією з утворенням однієї чи декількох додаткових вакансій у $L_{2,3}$ - підоболонках [1,2]. Природа автоіонізаційного процесу, головного при бомбардуванні легкими частинками, пов'язана зі «струшуванням» (“shake-off” (SO)- процес) $2p$ - електронів внаслідок швидкої зміни самоузгодженого поля при виникненні первинної вакансії в K - оболонці [2]. Важливо, що ймовірність утворення однієї додаткової L - вакансії за SO - механізмом з прийнятною точністю обчислюється в одноелектронному наближенні [1-4]. Однак, навіть для цього найпростішого випадку у роботах [5-7] було експериментально виявлено, що деякі особливості двократної $KL_{2,3}$ - іонізації не пояснюються лише SO - процесом. Зокрема, протилежна біляпорогова поведінка відношення перерізів збудження 3P - та 1P - термів $\sigma(^3P)/\sigma(^1P)$ атомів Cr [5] та Si [6,7] при фотопоглинанні та електронному ударі не знаходить пояснення без урахування багатоелектронних ефектів у системі «повільні вилітаючі $1s$ -, $2p$ - електрони – іонізований атомний залишок». Можливо припустити, що при утворенні двох та трьох додаткових $L_{2,3}$ - вакансій (конфігурації $KL_{2,3}^2$ та $KL_{2,3}^3$ відповідно) відносна роль багатоелектронних ефектів зростатиме відповідно до кратності додаткової $L_{2,3}$ - іонізації, оскільки міжелектронні кореляції повинні бути найбільш сильними для автоіонізаційних електронів, що належать до однієї підоболонки [8,9]. Отже, порівняльне експериментальне дослідження ймовірностей додаткової $L_{2,3}^2$ - та $L_{2,3}^3$ - іонізації (P_{2L} і P_{3L} відповідно) при різних енергіях іонізуючих частинок дозволяє кількісно оцінити величину кореляційної взаємодії автоіонізаційних $2p$ - електронів між собою та $KL_{2,3}^2$ - і $KL_{2,3}^3$ - іонізованим атомним залишком залежно не тільки від енергії іонізуючої частинки (швидкості збурення), а й кратності додаткової $KL_{2,3}^n$ - іонізації. Доцільність такого експерименту обумовлена і тим, що теоретичні обчислення ймовірності $KL_{2,3}^n$ - іонізації атомів з урахуванням взаємодії повільних електронів між собою та атомним залишком у літературі не знайдені. Інформація про значення ймовірностей P_{2L} та P_{3L} може бути отримана за відносними інтенсивностями груп рентгенівських емісійних $K\alpha_{3,4}$ -, $K\alpha_{5-8}$ - та $K\alpha_{9-12}$ - ліній, для яких $KL_{2,3}^2$ -, $KL_{2,3}^3$ -, $KL_{2,3}^3$ - конфігурації є початковими: групі $K\alpha_{3,4}$ відповідають радіаційні переходи $KL_{2,3}^2-L_{2,3}^2$, групі $K\alpha_{5-8}$ - переходи $KL_{2,3}^2-L_{2,3}^3$, а групі $K\alpha_{9-12}$ - переходи $KL_{2,3}^3-L_{2,3}^4$ [3,10,11].

Мета роботи.

Зважаючи на вище сказане, в представленій роботі ставилося завдання експериментально дослідити відносні інтенсивності рентгенівських емісійних $K\alpha_{3,4}$ -, $K\alpha_{5-8}$ - та $K\alpha_{9-12}$ - ліній атомів кремнію

у широкому діапазоні енергій бомбардуєчих електронів, за якими визначити ймовірність утворення двох та трьох додаткових $L_{2,3}$ - вакансій (P_{2L} і P_{3L}) при виникненні первинної K - вакансії.

Основна частина.

Використання в якості зразка кремнію зумовлено тим, що $K\alpha$ - спектр Si добре розділяється кварцовими кристалами-аналізаторами не тільки на окремі групи ліній, що відповідають різній кратності іонізації, але й на окремі компоненти у межах кожної такої групи. Крім того, досить слабкі лінії груп $K\alpha_{5-8}$ - та $K\alpha_{9-12}$ - у Si є ще доступними для достовірної експериментальної реєстрації при щокроковому скануванні з прийнятним часом накопичення у кожній точці.

Рентгенівські емісійні $K\alpha$ - спектри кремнію при електронному збудженні у діапазоні прискорюючих напруг $U=(7\div 100)$ кВ було отримано на модернізованому приладі ЕММА-2 (електронний мікроскоп мікроаналізатор) за допомогою брегівського спектрометра з вигнутим за Іоганом монокристалом кварцу (10 $\bar{1}0$). Спектри реєструвалися у режимі щокрокового сканування ($\Delta E=0.1\div 0.4$ еВ) з часом накопичення у точці (1 $\div 50$)с, залежно від прискорюючої напруги та спектральної ділянки. Обернена лінійна дисперсія спектрометра – 3.5 еВ/мм. При обробці спектрів вводилися корекції, які враховували кутову залежність коефіцієнта відбивання кристала-аналізатора та дисперсію спектрометра при переході від шкали кутів до шкали енергій. Для характеристики іонізуючої дії електронного пучка, який гальмується у товстій мішені, було використано ефективну енергію електронів (ε) [12].

Типова $K\alpha$ - спектрограма Si представлена на рис. 1 ($U=50$ кВ). Інтенсивність (I) $K\alpha_{3,4}$ - сателітів на рис. 1 збільшено в 30 разів, інтенсивність $K\alpha_{5-8}$ - сателітів – в 750 разів, інтенсивність $K\alpha_{9-12}$ - сателітів – в 8400 разів. Для визначення ймовірності утворення двох та трьох додаткових $L_{2,3}$ - вакансій P_{2L} і P_{3L} при виникненні первинної K - вакансії вимірювалися відносні інтенсивності ліній $K\alpha$ - спектру кремнію ($\rho = I(K\alpha_{5-8})/I(K\alpha_{1,2})$, $\nu = I(K\alpha_{5-8})/I(K\alpha_{3,4})$ та $\chi = I(K\alpha_{9-12})/I(K\alpha_{5-8})$) як відношення площ під експериментальними контурами $K\alpha_{1,2}$ -, $K\alpha_{3,4}$ -, $K\alpha_{5-8}$ - та $K\alpha_{9-12}$ - ліній.

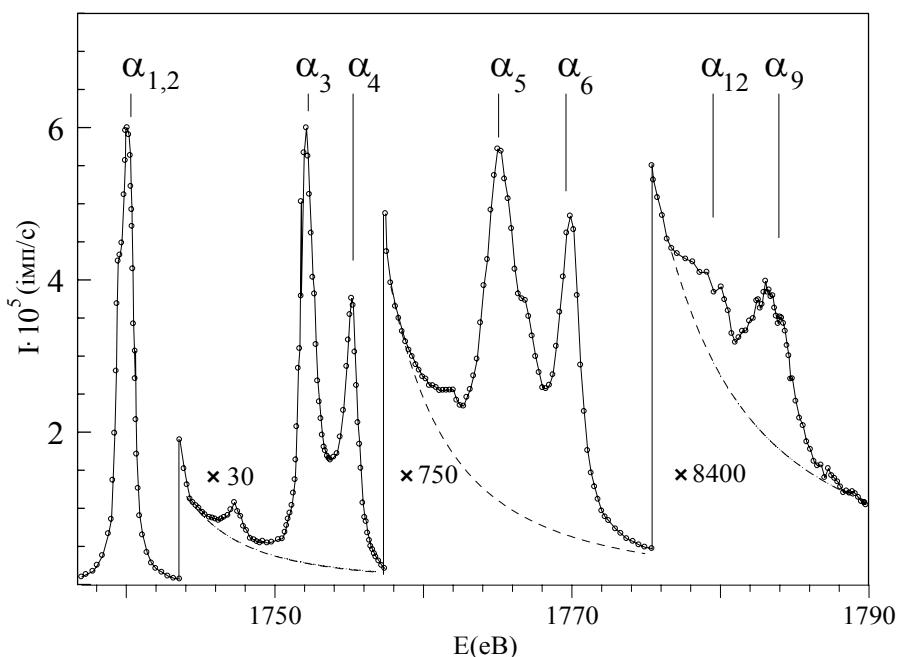


Рисунок 1 – Групи $K\alpha_{1,2}$ -, $K\alpha_{3,4}$ -, $K\alpha_{5-8}$ - та $K\alpha_{9-12}$ - ліній $K\alpha$ - спектру кремнію при електронному бомбардуванні ($U=50$ кВ)

При виділенні $K\alpha_{5-8}$ - сателітів із загального $K\alpha$ - контуру, $K\alpha_{1,2}$ - дублет апроксимувався двома функціями Фойгта, а $K\alpha_{3,4}$ - сателіти – трьома. Коли ж виділялися ще й $K\alpha_{9-12}$ - сателіти, то $K\alpha_{5-8}$ - лінії також апроксимувалися трьома функціями Фойгта. У процесі підгонки ширина гаусової складової функцій Фойгта зберігалася незмінною і дорівнювала величині розділення спектрографа, а всі інші параметри були такими, що варіюються. Результуючий синтезований $K\alpha$ - контур Si без сателітних ліній на різних ділянках спектру показано на рис. 1 штриховою лінією. Відносна похибка визначення величин ρ , ν та χ головним чином зумовлена варіюванням параметрів функцій Фойгта при виділенні сателітних ліній з загального $K\alpha$ - спектрального масиву і досягала 8%.

Тепер розглянемо яким чином пов'язані між собою відносні інтенсивності $K\alpha_{5-8}$ - сателітів (ρ і ν) та ймовірність утворення двох додаткових $L_{2,3}$ - вакансій P_{2L} при іонізації K - оболонки. За умови shake- механізму такого процесу його можна розглядати як двостадійний: перший етап – утворення K - вакансії, другий – вильот (shake-off, SO) чи збудження у дискретні вільні стани (shake-up, SU) двох електронів з $L_{2,3}$ - підоболонки. У такому наближенні:

$$P_{2L} = \sigma_{KL_{2,3}^2} / \sigma_K, \quad (1)$$

де σ_K - переріз іонізації K - оболонки електронним ударом.

Якщо в результаті взаємодії атома з налітаючою частинкою генеруються стани $KL_{2,3}^2$ - іонізації, причому $\sigma_{KL_{2,3}^2}$ – переріз генерації тривакансійного стану $KL_{2,3}^2$, а $\sigma_{KL_1L_{2,3}}$ – переріз генерації тривакансійного стану $KL_1L_{2,3}$, то в подальшому можливі наступні процеси:

а) радіаційний розпад K - вакансії за рахунок радіаційного переходу $K - L_{2,3}$ у присутності двох додаткових вакансій у $L_{2,3}$ - підоболонці. Швидкість такого переходу дорівнює $g_\alpha \Gamma_{K\alpha}^{(R)}$, де $g_\alpha = 4/6 = 2/3$;

б) Оже- розпад K - вакансії за рахунок переходів $K - L_iL_j$, $K - L_1M_k$, а також $K - L_{2,3}M_l$ (де $i, j = 1, 2, 3$; $k = 1, 2, 3$; $l = 4, 5$) у присутності двох додаткових $L_{2,3}$ - вакансій. Швидкість групи усіх можливих переходів такого роду дорівнює добутку $g^{(A)} \Gamma_K^{(A)}$, де коефіцієнт $g^{(A)}$ визначає зменшення швидкості Оже- переходів за рахунок наявності двох додаткових $L_{2,3}$ - вакансій;

в) розпад $L_{2,3}$ - вакансії у присутності K - вакансії. Цей процес переводить стани $KL_{2,3}^2$ - іонізації у стани $KL_{2,3}M$ - іонізації, фактично початкові для $K\alpha_{3,4}$ - сателітів. Такий ефект можна врахувати через коефіцієнт безрадіаційного розпаду ($R_{2\alpha}$) початкового $KL_{2,3}^2$ - стану, який визначає відносну кількість атомів, в яких розпад кожної з двох $L_{2,3}$ - вакансій відбувається незалежно у присутності K - вакансії:

$$R_{2\alpha} = \frac{2\Gamma_{L_{2,3}}}{2\Gamma_{L_{2,3}} + \Gamma_K},$$

де Γ_K - повна ширина K - рівня;

$\Gamma_{L_{2,3}} = (1/3)\Gamma_{L_2} + (2/3)\Gamma_{L_3}$; $\Gamma_{L_2}, \Gamma_{L_3}$ - ширини L_2 - та L_3 - рівнів.

Тоді переріз генерації групи $K\alpha_{5-8}$ - сателітів визначається у наступний спосіб:

$$\sigma_{K\alpha_{5-8}} = \left(\sigma_{KL_{2,3}^2} + \sigma_{KL_1L_{2,3}} \right) \frac{g_\alpha \Gamma_{K\alpha}^{(R)}}{g^{(A)} \Gamma_K^{(A)} + g_\alpha \Gamma_{K\alpha}^{(R)} + \Gamma_{K\beta}^{(R)}} (1 - R_{2\alpha}), \quad (2)$$

де $\Gamma_{K\alpha}^{(R)}$ - швидкість радіаційного переходу $K - L_{2,3}$;

$\Gamma_{K\beta}^{(R)}$ - швидкість радіаційного переходу $K - M_{2,3}$.

Використовуючи подібні міркування, можна записати вирази для перерізів генерації $K\alpha_{3,4}$ - сателітів та $K\alpha_{1,2}$ - ліній:

$$\sigma_{K\alpha_{3,4}} = (\sigma_{KL_{2,3}} + \sigma_{KL_1} f_{L_1-L_{2,3}X}) \frac{k_\alpha \Gamma_{K\alpha}^{(R)}}{k^{(A)} \Gamma_K^{(A)} + k_\alpha \Gamma_{K\alpha}^{(R)} + \Gamma_{K\beta}^{(R)}} (1 - R_\alpha), \quad (3)$$

$$\sigma_{K\alpha_{1,2}} = \sigma_K (1 - P_L) \frac{\Gamma_{K\alpha}^{(R)}}{\Gamma_K} + \sigma_{K\alpha_{3,4}} \frac{R_\alpha}{1 - R_\alpha}, \quad (4)$$

де $\sigma_{KL_{2,3}}$ – переріз генерації двоелектронної $KL_{2,3}$ - іонізації;

σ_{KL_1} – переріз генерації двоелектронної KL_1 - іонізації;

$f_{L_1-L_{2,3}X}$ - вихід процесів Костера-Кроніга $L_1 - L_{2,3}X$, $X=M, N$;

$k_\alpha = 5/6$; $k^{(A)}$ - коефіцієнт, який враховує зменшення швидкості Оже-переходів $K - L_i L_j$ при появі вакансії у $L_{2,3}$ - підоболонці;

R_α - коефіцієнт безрадіаційного розпаду початкового $KL_{2,3}$ - стану, який визначає відносну кількість атомів, в яких розпад $L_{2,3}$ - вакансії відбувається у присутності K - вакансії;

P_L - ймовірність утворення однієї додаткової $L_{2,3}$ - вакансії при іонізації K - оболонки.

Вираз (2) можна дещо спростити, якщо прийняти до уваги, що група $KL_1 L_{2,3}$ - сателітів практично накладається на $KL_{2,3}^2$ - сателіти, а $\sigma_{KL_1 L_{2,3}} \cong s \cdot \sigma_{KL_{2,3}^2}$, причому для Si з достатньою точністю $s \cong 0.1$ [13]. Крім того, для груп ліній $K\alpha_{1,2}$ -, $K\alpha_{3,4}$ - та $K\alpha_{5-8}$ - можна прийняти, що відношення інтенсивностей груп цих ліній співпадають з відношеннями їх перерізів генерації: $\rho = I(K\alpha_{5-8})/I(K\alpha_{1,2}) = \sigma_{K\alpha_{5-8}}/\sigma_{K\alpha_{1,2}}$, $\nu = I(K\alpha_{5-8})/I(K\alpha_{3,4}) = \sigma_{K\alpha_{5-8}}/\sigma_{K\alpha_{3,4}}$. Отже, обмежуючись врахуванням внеску до перерізу генерації $K\alpha_{1,2}$ - ліній частки від $K\alpha_{3,4}$ - сателітів (другий доданок у формулі (4)), із співвідношень (1) - (4) можна отримати:

$$P_{2L} = \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\nu} \cdot \frac{\Gamma_L}{\Gamma_K} \right)^{-1} \frac{(1 - P_L)(g^{(A)}\Gamma_K^{(A)} + g_\alpha\Gamma_{K\alpha}^{(R)} + \Gamma_{K\beta}^{(R)})(2\Gamma_L + \Gamma_K)}{(1 + s)g_\alpha\Gamma_K}, \quad (5)$$

де Γ_L - повна ширина L - рівня.

Міркуючи подібним чином, можна визначити ймовірність утворення трьох додаткових $L_{2,3}$ - вакансій P_{3L} при іонізації K - оболонки:

$$P_{3L} = P_{2L}\chi \frac{m^{(A)}\Gamma_K^{(A)} + m_\alpha\Gamma_{K\alpha}^{(R)} + \Gamma_{K\beta}^{(R)}}{g^{(A)}\Gamma_K^{(A)} + g_\alpha\Gamma_{K\alpha}^{(R)} + \Gamma_{K\beta}^{(R)}} \cdot \frac{g_\alpha}{m_\alpha} \cdot \frac{3\Gamma_{L_{2,3}} + \Gamma_K}{2\Gamma_{L_{2,3}} + \Gamma_K}, \quad (6)$$

де $\chi = I(K\alpha_{9-12})/I(K\alpha_{5-8}) = \sigma_{K\alpha_{9-12}}/\sigma_{K\alpha_{5-8}}$;

$m_\alpha = 1/2$; $m^{(A)}$ - коефіцієнт, що визначає зменшення швидкості Оже- переходів за рахунок наявності трьох додаткових $L_{2,3}$ - вакансій.

Таким чином, виходячи з експериментально визначених відносних інтенсивностей ρ , ν та χ , за формулами (5), (6) для Si було розраховано значення ймовірностей P_{2L} та P_{3L} (див. табл. 1) при різних енергіях бомбардуючих електронів. Залежність величини P_L від енергії налітаючих електронів для Si було досліджено раніше [6,12]. Інші фізичні величини, що входять до розрахункових формул (5), (6) було взято з робіт [14-19]. Відносна похибка розрахованих величин P_{2L} та P_{3L} у вище описаний спосіб зумовлена, головним чином, відносною похибкою експериментально визначених відносних інтенсивностей ліній $K\alpha$ - спектру кремнію (ρ , ν та χ) та відносною похибкою величини P_L і складала 12% і 17% відповідно.

Як видно з таблиці 1, при зростанні енергії бомбардуючих електронів у діапазоні $\varepsilon > 13$ кеВ значення P_{2L} і P_{3L} монотонно зменшуються. Спадаючий характер залежностей величин P_{2L} та P_{3L} від енергії налітаючих електронів, як і у випадку $KL_{2,3}$ - іонізації [5,6], може бути зумовлений зменшенням середньої енергії, що передається атому в акті співудару. Таке зменшення призводить до того, що вибитий $1s$ - електрон залишає атом повільно (з кінетичною енергією $\varepsilon_{1s} \cong 10 - 100$ еВ). У силу цього монотонно зменшується швидкість зміни самоузгодженого поля атома, що призводить до зменшення ймовірності SO - процесу, при якому атом залишають один ($KL_{2,3}$ - іонізація), два ($KL_{2,3}^2$ - іонізація) та три ($KL_{2,3}^3$ - іонізація) електрони з $L_{2,3}$ - підоболонки.

Іншими характеристиками процесу $KL_{2,3}^n$ - іонізації є відношення $P_{21}=P_{2L}/P_L$ та $P_{31}=P_{3L}/P_L$, які визначають відносні частки атомів з однією, двома та трьома додатковими $L_{2,3}$ - вакансіями. У таблиці 1 наведено відповідні значення цих величин. Важливо, що в усьому діапазоні прискорюючих напруг значення P_{21} та P_{31} у межах експериментальної похибки (16% і 20% відповідно) залишаються сталими. Отже, відносні ймовірності додаткової кратної іонізації $L_{2,3}$ - підоболонки (P_{21} та P_{31}) фактично є деякими характерними внутрішньоатомними параметрами, що не залежать від швидкості збурення.

Нарешті, для з'ясування ролі електронних кореляцій у процесах $KL_{2,3}^2$ - та $KL_{2,3}^3$ - іонізації необхідно порівняти експериментально визначені величини P_{2L} та P_{3L} з розрахованими у наближенні незалежного ежектування двох та трьох $2p$ - електронів (P_2 та P_3 відповідно). Кількісна оцінка цих ве-

личин може бути виконана з використанням ймовірності утворення однієї додаткової $L_{2,3}$ - вакансії P_L [14,15]. Зокрема, ймовірність одночасного незалежного вильоту двох будь-яких $2p$ - електронів при виникненні K - вакансії є $P_2=(5/12)\cdot(P_L)^2$ (враховано, що ймовірність вильоту певного $2p$ - електрона є $(P_L/6)$, певної пари $2p$ - електронів - $(1/36)\cdot(P_L)^2$, кількість можливих пар - $6!/(2!4!)=15$). З аналогічних міркувань у випадку одночасного вильоту трьох $2p$ - електронів $P_3=(5/54)\cdot(P_L)^3$.

Таблиця 1 – Відносні інтенсивності $K\alpha_{3,4}$ -, $K\alpha_{5,8}$ - та $K\alpha_{9,12}$ - сателітів Si при електронному ударі

U , кВ	ε , кеВ	ρ , 10^{-3}	ν , 10^{-2}	χ , 10^{-2}	P_{L_2} , 10^{-2}	P_{2L_2} , 10^{-3}	P_{3L_2} , 10^{-5}	P_{21_2} , 10^{-2}	P_{31_2} , 10^{-3}
7	5.58	5.03	6.71	3.69	5.99	2.32	6.52	3.87	1.08
11	8.54	4.75	6.52	3.81	5.83	2.20	6.39	3.77	1.10
17	13.01	4.72	6.64	3.88	5.91	2.18	6.44	3.69	0.93
25	19.19	4.29	6.46	3.84	5.33	1.99	5.82	3.73	1.09
50	41.89	3.66	6.70	3.62	4.92	1.71	4.72	3.48	0.96
75	68.23	3.54	6.74	3.74	4.27	1.67	4.77	3.91	1.11
100	94.52	3.32	6.83	3.80	3.86	1.56	4.56	4.04	1.18

Порівнюючи розраховані у вище зазначений спосіб величини P_2 і P_3 з даними експерименту P_{2L} і P_{3L} , для усього діапазону енергій налітаючих електронів маємо $P_{2L}/P_2=1.5\div 2.5$, $P_{3L}/P_3=3.5\div 8.3$. Отже, експериментальні значення ймовірностей P_{2L} і P_{3L} істотно перевищують передбачувані у наближенні незалежного ежектування $2p$ - електронів значення P_2 і P_3 , причому зростання кратності додаткової $L_{2,3}$ - іонізації супроводжується збільшенням відповідної розбіжності. Це дозволяє говорити про суттєво багатоелектронний характер $KL_{2,3}^2$ - і $KL_{2,3}^3$ - іонізації та необхідність урахування кореляційних ефектів при побудові відповідної теоретичної моделі процесу.

Висновки.

Таким чином, у роботі експериментально досліджено ймовірності утворення двох та трьох додаткових вакансій у $L_{2,3}$ - підоболонках при K - іонізації атомів кремнію залежно від енергії бомбардуючих електронів та виявлено суттєву роль багатоелектронних кореляційних ефектів у процесах $KL_{2,3}^2$ - та, особливо, $KL_{2,3}^3$ - іонізації. У цьому розумінні параметри $P_{21}=P_{2L}/P_L$ та $P_{31}=P_{3L}/P_L$ можуть розглядатися як деякі експериментально визначені кількісні характеристики $2p$ - $2p$ - кореляцій, які можуть використовуватися при побудові багатоелектронної моделі процесу взаємодії електронної підсистеми атому з іонізуючим випромінюванням.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Carlson, T.A., Nestor, C.W., Thomas, Jr. (1968). Calculation of electron shake-off for elements from $Z=2$ to 92 with the use of self-consistent field wave functions. *Physical Review*, 169 (1), 27-36.
2. Mauron, O., Dousse, J.Cl., Hozzowska, J. (2000). L - shell shake processes resulting from $1s$ photoionization in elements $11 < Z < 17$. *Physical Review A*, 62 (6), 2508-2520.
3. Mauron, O., Dousse, J.Cl. (2002). Double KL ionization in Al , Ca and Co targets bombarded by low-energy electrons. *Physical Review A*, 66 (4), 2713-2727.
4. Mukoyama, T., Ito, Y., Taniguchi, K. (1999). Atomic excitation and ionization as the result of inner-shell vacancy creation. *X-Ray Spectrometry*, 28 (6), 491-496.
5. Боровой Н.А. Особенности рентгеновской $KL_{2,3}$ - эмиссии атомов хрома при околопороговом возбуждении электронным ударом / Н.А.Боровой, В.В. Иванов, В.И. Шияновский // *Оптика и спектроскопия*. – 1999. – Т. 86, № 1. – С. 16-19.
6. Боровий М.О. Вплив типу та енергії іонізуючої частинки на інтенсивність рентгенівської $KL_{2,3}$ - емісії атомів кремнію / М.О. Боровий, В.В. Иванов, В.Ф. Суржко, В.І. Шияновський // *Український фізичний журнал*. – 2001. – Т. 46, № 1. – С. 70-73.
7. Yokoi, K., Oohashi, H., Ito, J. (2006). $K\alpha_{3,4}$ satellites in Mg - Cl elements. *Radiation Physics and Chemistry*, 75 (11), 1461-1464.
8. Shigeoka, N., Oohashi, H., Ito, J. (2004). Threshold excitation in Fe $K\alpha_{3,4}$ satellites. *Journal of Physics B*, 37 (11), 2303-2309.
9. Kawatsura, K., Morikawa, T., Takahiro, K. (2003). Evolution of the $K\alpha$ X-ray satellites for Fe , Ni and Zn : from threshold to saturation. *Journal of Physics B*, 36 (20), 4065-4072.

10. Shigeoka, N., Oohashi, H., Tochio, T. (2004). Experimental investigation of the origin of the $Ti K\alpha'$ satellites. *Physical Review A*, 69 (5), 2505-2509.
11. Diamant, R., Sharon, R., Caliebe, W.A. (2006). Structure of the Co and $Fe K\alpha_{3,4}$ satellite spectra. *Journal of Physics B*, 39 (3), 651-667.
12. Шияновский В.И. Встряска и прямые соударения в атомах при фотоионизации, β - распаде и ионизации электронным ударом / В.И. Шияновский // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1989. – Т. 95, № 2. – С. 467-474.
13. Mikkola, E., Keski-Rahkonen, O., Lahtinen, J. (1983). Determination of the $KL^2 \rightarrow L_3$ X-ray multiplet structure in Na , Mg and Al . *Physica Scripta*, 28 (2), 188-192.
14. Kochur, A.G., Dudenko, A.I., Petrini, D. (2002). Shake process probabilities for outer-shell electrons in atoms with $Z \leq 71$. *Journal of Physics B*, 35 (2), 395-399.
15. Kochur, A.G., Popov, V.A. (2006). Probabilities of multiple shake processes in sudden approximation. *Journal of Physics B*, 39 (16), 3335-3344.
16. Scofield, J.H. (1974). Relativistic hartree-slater values for K and L X-ray emission rates. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 14 (2), 121-137.
17. Krause, M.O. (1979). Atomic radiative and radiationless yields for K and L shells. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 8 (2), 307-327.
18. Krause, M.O., Oliver, J.H. (1979). Natural widths of atomic K and L levels, $K\alpha$ X-ray lines and several KLL Auger lines. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 8 (2), 328-338.
19. Chen, M.H., Crasemann, B., Mark, H. (1979). Relativistic radiationless transition probabilities for atomic K - and L - shells. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 24 (1), 13-37.

REFERENCES

1. Carlson, T.A., Nestor, C.W., Thomas, Jr. (1968). Calculation of electron shake-off for elements from $Z=2$ to 92 with the use of self-consistent field wave functions. *Physical Review*, 169 (1), 27-36.
2. Mauron, O., Dousse, J.Cl., Hoszowska, J. (2000). L - shell shake processes resulting from $1s$ photoionization in elements $11 < Z < 17$. *Physical Review A*, 62 (6), 2508-2520.
3. Mauron, O., Dousse, J.Cl. (2002). Double KL ionization in Al , Ca and Co targets bombarded by low-energy electrons. *Physical Review A*, 66 (4), 2713-2727.
4. Mukoyama, T., Ito, Y., Taniguchi, K. (1999). Atomic excitation and ionization as the result of inner-shell vacancy creation. *X-Ray Spectrometry*, 28 (6), 491-496.
5. Borovoy M.O., Ivanov V.V., Shiyonovskiy V.I. Features of X-ray $KL_{2,3}$ - emission of chromium atoms at near-threshold electron impact excitation. *Optics and Spectroscopy*. 1999. V. 86, № 1. P. 16-19. (Rus)
6. Borovoy M.O., Ivanov V.V., Surzhko V.F., Shiyonovskiy V.I. Influence of the type and energy of ionizing particle on the intensity of X-ray $KL_{2,3}$ - emission of silicon atoms. *Ukrainian Journal of Physics*. 2001. V. 46, № 1. - P. 70-73. (Ukr)
7. Yokoi, K., Oohashi, H., Ito, J. (2006). $K\alpha_{3,4}$ satellites in $Mg-Cl$ elements. *Radiation Physics and Chemistry*, 75 (11), 1461-1464.
8. Shigeoka, N., Oohashi, H., Ito, J. (2004). Threshold excitation in $Fe K\alpha_{3,4}$ satellites. *Journal of Physics B*, 37 (11), 2303-2309.
9. Kawatsura, K., Morikawa, T., Takahiro, K. (2003). Evolution of the $K\alpha$ X-ray satellites for Fe , Ni and Zn : from threshold to saturation. *Journal of Physics B*, 36 (20), 4065-4072.
10. Shigeoka, N., Oohashi, H., Tochio, T. (2004). Experimental investigation of the origin of the $Ti K\alpha'$ satellites. *Physical Review A*, 69 (5), 2505-2509.
11. Diamant, R., Sharon, R., Caliebe, W.A. (2006). Structure of the Co and $Fe K\alpha_{3,4}$ satellite spectra. *Journal of Physics B*, 39 (3), 651-667.
12. Shiyonovskiy V.I. Shake and direct collisions in atoms by photoionization, β - decay and electron impact ionization. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 1989. V. 95, № 2. P. 467-474. (Rus)
13. Mikkola, E., Keski-Rahkonen, O., Lahtinen, J. (1983). Determination of the $KL^2 \rightarrow L_3$ X-ray multiplet structure in Na , Mg and Al . *Physica Scripta*, 28 (2), 188-192.
14. Kochur, A.G., Dudenko, A.I., Petrini, D. (2002). Shake process probabilities for outer-shell electrons in atoms with $Z \leq 71$. *Journal of Physics B*, 35 (2), 395-399.
15. Kochur, A.G., Popov, V.A. (2006). Probabilities of multiple shake processes in sudden approximation. *Journal of Physics B*, 39 (16), 3335-3344.
16. Scofield, J.H. (1974). Relativistic hartree-slater values for K and L X-ray emission rates. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 14 (2), 121-137.

17. Krause, M.O. (1979). Atomic radiative and radiationless yields for K and L shells. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 8 (2), 307-327.
18. Krause, M.O., Oliver, J.H. (1979). Natural widths of atomic K and L levels, $K\alpha$ X-ray lines and several KLL Auger lines. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 8 (2), 328-338.
19. Chen, M.H., Crasemann, B., Mark, H. (1979). Relativistic radiationless transition probabilities for atomic K - and L - shells. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 24 (1), 13-37.

РЕФЕРАТ

Боровий М.О. Особливості $KL_{2,3}^2$ - та $KL_{2,3}^3$ - іонізації атомів кремнію електронним ударом / М.О. Боровий, Р.М. Іщенко, Г.Л. Ісаєнко // Вісник Національного транспортного університету. — К. : НТУ, 2013. — Вип. 28.

В статті запропоновано метод розрахунку ймовірності утворення двох та трьох $L_{2,3}$ - вакансій при виникненні первинної K - вакансії за експериментально визначеними відносними інтенсивностями рентгенівських емісійних $K\alpha_{3,4}$ -, $K\alpha_{5,8}$ - та $K\alpha_{9,12}$ - ліній атомів кремнію, отриманими при електронному ударі.

Об'єкт дослідження – процеси кратної іонізації внутрішніх електронних оболонок атомів кремнію при електронному ударі.

Мета роботи - експериментально дослідити відносні інтенсивності рентгенівських емісійних $K\alpha_{3,4}$ -, $K\alpha_{5,8}$ - та $K\alpha_{9,12}$ - ліній атомів кремнію у широкому діапазоні енергій бомбардуючих електронів, за якими визначити ймовірність утворення двох та трьох додаткових $L_{2,3}$ - вакансій при виникненні первинної K - вакансії.

Метод дослідження - рентгенівська емісійна $K\alpha$ - спектроскопія при використанні модернізованого приладу ЕММА-2.

Експериментально досліджено відносні інтенсивності ліній $K\alpha$ - спектру кремнію при іонізації електронним ударом у діапазоні прискорюючих напруг $U=(7\div 100)$ кВ. Встановлено, що ймовірності утворення станів $KL_{2,3}^2$ - конфігурації (P_{2L}) та $KL_{2,3}^3$ - конфігурації (P_{3L}) монотонно зменшуються при зростанні енергії бомбардуючих електронів в області $\varepsilon > 13$ кеВ. Такий результат пов'язується зі зменшенням середньої енергії, яка передається атому при співударі з налітаючим електроном, починаючи з $\varepsilon > 13$ кеВ. Разом з тим, відношення $P_{21}=P_{2L}/P_L$ та $P_{31}=P_{3L}/P_L$, що визначають відносні частки атомів з однією, двома та трьома додатковими $L_{2,3}$ - вакансіями, в усьому діапазоні прискорюючих напруг залишаються сталими. Виконано порівняння експериментальних значень P_{2L} та P_{3L} з розрахованими у наближенні незалежного ежектування $2p$ - електронів (P_2 та P_3). Виявилось, що $P_{2L}/P_2=1.5\div 2.5$, $P_{3L}/P_3=3.5\div 8.3$. Це дозволяє говорити про суттєво багатоелектронний характер $KL_{2,3}^2$ - і $KL_{2,3}^3$ - іонізації та необхідність урахування кореляційних ефектів при побудові відповідної теоретичної моделі процесу.

Результати статті можуть бути використані при розв'язку задач кількісного рентгеноспектрального аналізу твердих тіл та при розробці багатоелектронної моделі процесу взаємодії електронної підсистеми атому з іонізуючим випромінюванням.

Прогнозні припущення щодо розвитку об'єкта дослідження – врахування електронних кореляцій при $KL_{2,3}^2$ - і $KL_{2,3}^3$ - іонізації.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: КРЕМНІЙ, $K\alpha$ - СПЕКТР, ЕЛЕКТРОННИЙ УДАР, $KL_{2,3}^2$ - ТА $KL_{2,3}^3$ - ІОНІЗАЦІЯ, КОРЕЛЯЦІЙНІ ЕФЕКТИ.

ABSTRACT

Borovoy M.O., Ishchenko R.M., Isaienko G.L. Features of $KL_{2,3}^2$ - and $KL_{2,3}^3$ - ionization of silicon atoms under electron impact. *Visnyk National Transport University*. – Kyiv. National Transport University. 2013. – Vol. 28.

This paper proposes a method for calculating the probability of creating two and three $L_{2,3}$ - vacancies in by the appearance of the primary K - vacancy. The method is based on the experimentally determined relative intensities of X-ray emission $K\alpha_{3,4}$ -, $K\alpha_{5,8}$ - and $K\alpha_{9,12}$ - lines of silicon atoms obtained under electron impact.

Object of the study – multiple ionization processes of the electronic inner-shells of silicon atoms under electron impact.

Purpose of the study – to experimentally investigate the relative intensities of X-ray emission $K\alpha_{3,4}$ -, $K\alpha_{5,8}$ - and $K\alpha_{9,12}$ - lines of silicon atoms in a wide range of energies bombarding electrons, which determine

the probability of creating two and three additional $L_{2,3}$ - vacancies in by the appearance of the primary K -vacancy.

Method of the study – X-ray emission $K\alpha$ - spectroscopy using the upgraded device EMMA-2.

The relative intensities of lines of silicon $K\alpha$ - spectrum have been experimentally investigated under the excitation by electron impact within the range of accelerating voltage $U=(7\div 100)$ кВ. It was found, that the probabilities of creation $KL_{2,3}^2$ - configuration (P_{2L}) and $KL_{2,3}^3$ - configuration (P_{3L}) states monotony decreased with energy of the bombarding electrons increased in the range of $\varepsilon > 13$ keV. This result can be explained by decreasing of the average energy having transferred to the atom during collision with the bombarding electron, starting with $\varepsilon > 13$ keV. However, relations $P_{21}=P_{2L}/P_L$ and $P_{31}=P_{3L}/P_L$ which determine the relative share of atoms with one, two and three additional $L_{2,3}$ - vacancies in the whole range of accelerating voltages remain constant. Comparison of experimental values P_{2L} and P_{3L} with the calculated one in the approximation of the independent ejection of $2p$ - electrons (P_2 and P_3) was performed. It was revealed that $P_{2L}/P_2=1.5\div 2.5$ and $P_{3L}/P_3=3.5\div 8.3$. This suggests a significantly multielectrons nature of $KL_{2,3}^2$ - and $KL_{2,3}^3$ - ionization and the necessity of taking into account correlation effects while the appropriate theoretical model of this process has been creating.

The results of paper can be useful for doing quantitative X-ray analysis of solids as well as for developing multielectrons model of interaction process of the atom electron subsystem with ionizing radiation.

Forecast assumptions about the object of study – the inclusion of electron correlations in $KL_{2,3}^2$ - and $KL_{2,3}^3$ - ionization.

KEY WORDS: SILICON, $K\alpha$ - SPECTRUM, ELECTRON IMPACT, $KL_{2,3}^2$ - AND $KL_{2,3}^3$ - IONIZATION, CORRELATION EFFECTS.

РЕФЕРАТ

Боровой Н.А. Особенности $KL_{2,3}^2$ - и $KL_{2,3}^3$ - ионизации атомов кремния электронным ударом / Н.А. Боровой, Р.Н. Ищенко, Г.Л. Исаенко // Вестник Национального транспортного университета. — К. : НТУ, 2013. — Вып. 28.

В статье предложен метод расчета вероятности образования двух и трех $L_{2,3}$ - вакансий при возникновении первичной K - вакансии с использованием экспериментально определенных относительных интенсивностей рентгеновских эмиссионных $K\alpha_{3,4}$ -, $K\alpha_{5,8}$ - и $K\alpha_{9,12}$ - линий атомов кремния, полученных при электронном ударе.

Объект исследования - процессы кратной ионизации внутренних электронных оболочек атомов кремния при электронном ударе.

Цель работы – экспериментально исследовать относительные интенсивности рентгеновских эмиссионных $K\alpha_{3,4}$ -, $K\alpha_{5,8}$ - и $K\alpha_{9,12}$ - линий атомов кремния в широком диапазоне энергий бомбардирующих электронов, используя которые определить вероятность образования двух и трех дополнительных $L_{2,3}$ - вакансий при возникновении первичной K - вакансии.

Метод исследования - рентгеновская эмиссионная $K\alpha$ - спектроскопия с использованием модернизированного прибора ЭММА-2.

Экспериментально исследованы относительные интенсивности линий $K\alpha$ - спектра кремния при ионизации электронным ударом в диапазоне ускоряющих напряжений $U=(7\div 100)$ кВ. Установлено, что вероятности образования состояний $KL_{2,3}^2$ - конфигурации (P_{2L}) и $KL_{2,3}^3$ - конфигурации (P_{3L}) монотонно уменьшаются с ростом энергии бомбардирующих электронов в области $\varepsilon > 13$ кэВ. Такой результат объясняется уменьшением средней энергии, которая передается атому при соударении с налетающим электроном, начиная с $\varepsilon > 13$ кэВ. Вместе с тем, отношения $P_{21}=P_{2L}/P_L$ и $P_{31}=P_{3L}/P_L$, что определяют относительные доли атомов с одной, двумя и тремя дополнительными $L_{2,3}$ - вакансиями, во всем диапазоне ускоряющих напряжений остаются постоянными. Выполнено сравнение экспериментальных значений P_{2L} и P_{3L} с рассчитанными в приближении независимого эжектирования $2p$ - электронов (P_2 и P_3). Оказалось, что $P_{2L}/P_2=1.5\div 2.5$, $P_{3L}/P_3=3.5\div 8.3$. Это позволяет говорить о существенно многоэлектронном характере $KL_{2,3}^2$ - и $KL_{2,3}^3$ - ионизации и необходимости учета корреляционных эффектов при построении соответствующей теоретической модели процесса.

Результаты статьи могут быть использованы при решении задач количественного рентгеноспектрального анализа твердых тел и при разработке многоэлектронной модели процесса взаимодействия электронной подсистемы атома с ионизирующим излучением.

Прогнозные предположения о развитии объекта исследования – учет электронных корреляций при $KL_{2,3}^2$ - и $KL_{2,3}^3$ - ионизации.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: КРЕМНИЙ, $K\alpha$ - СПЕКТР, ЭЛЕКТРОННЫЙ УДАР, $KL_{2,3}^2$ - И $KL_{2,3}^3$ - ИОНИЗАЦИЯ, КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ.

АВТОРИ

Боровий Микола Олександрович, доктор фізико-математичних наук, доцент, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, завідувач кафедри загальної фізики, e-mail: borovoy@univ.kiev.ua, тел. +380445262288, Україна, 03680, м. Київ, просп. Акад. Глушкова 2, корпус №1, к. 225.

Ищенко Руслан Миколайович, кандидат фізико-математичних наук, доцент, Національний транспортний університет, доцент кафедри фізики, e-mail: rm_ischenko@ukr.net, тел. +380442846709, +380663599038, Україна, 01103, м. Київ, вул. Кіквідзе, 42, к. 410.

Исаенко Галина Леонідівна, кандидат фізико-математичних наук, Національний транспортний університет, доцент кафедри фізики, e-mail: gl_isayenko@ukr.net, тел. +380442846709, +380973387759, Україна, 01103, м. Київ, вул. Кіквідзе, 42, к. 410.

AUTHORS

Borovoy Mikola O., doctor of sciences, associate professor, Kyiv Taras Shevchenko National University, head department of general physics, e-mail: borovoy@univ.kiev.ua, tel. +380445262288, Ukraine, 03680, Kyiv, Acad. Glushkova Prosp.2, build. 1, of. 225.

Ishchenko Ruslan M., Ph. D., associate professor, National Transport University, associate professor department of physics, e-mail: rm_ischenko@ukr.net, tel. +380442846709, +380663599038, Ukraine, 01103, Kyiv, Kikvidze str. 42, of. 410.

Isaienko Galina L., Ph. D., National Transport University, associate professor department of physics, e-mail: gl_isayenko@ukr.net, tel. +380442846709, +380973387759, Ukraine, 01103, Kyiv, Kikvidze str. 42, of. 410.

АВТОРЫ

Боровой Николай Александрович, доктор физико-математических наук, доцент, Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, заведующий кафедры общей физики, e-mail: borovoy@univ.kiev.ua, тел. +380445262288, Украина, 03680, г. Киев, просп. Акад. Глушкова 2, корпус №1, к. 225.

Ищенко Руслан Николаевич, кандидат физико-математических наук, доцент, Национальный транспортный университет, доцент кафедры физики, e-mail: rm_ischenko@ukr.net, тел. +380442846709, +380663599038, Украина, 01103, г. Киев, ул. Киквидзе, 42, к. 410.

Исаенко Галина Леонидовна, кандидат физико-математических наук, Национальный транспортный университет, доцент кафедры физики, e-mail: gl_isayenko@ukr.net, тел. +380442846709, +380973387759, Украина, 01103, г. Киев, ул. Киквидзе, 42, к. 410.

РЕЦЕНЗЕНТИ:

Данчук В.Д., доктор фізико-математичних наук, професор, Національний транспортний університет, декан факультету транспортних та інформаційних технологій, Київ, Україна.

Семенько М.П., доктор фізико-математичних наук, доцент, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, доцент кафедри фізики металів, Київ, Україна.

REVIEWER:

Danchuk V.D., doctor of sciences, professor, dean of the faculty of transport and information technologies, Kyiv, Ukraine.

Semenko M.P., doctor of sciences, associate professor, Kyiv Taras Shevchenko National University, associate professor department of metal physics, Kyiv, Ukraine.