

УДК 539.12.04

ФОРМУЛА ДЛЯ ПОПЕРЕЧНОГО СЕЧЕНИЯ ИОНИЗАЦИИ К-ОБОЛОЧКИ АТОМА Si РЕЛЯТИВИСТСКИМИ ЭЛЕКТРОНАМИ В ТОНКОМ СЛОЕ КРЕМНИЯ**А.В. Щагин, В.В. Сотников***Национальный Научный Центр "Харьковский физико-технический институт", 61108 Харьков, Украина**E-mail: shchagin@kipt.kharkov.ua*

Поступила в редакцию 30 апреля 2007 г.

В работе анализируются данные по сечению К-ионизации атомов Si релятивистскими электронами в тонком слое кремния. Приведены имеющиеся результаты измерений и результаты расчетов сечения по различным формулам из литературы. Обсуждается влияние эффекта плотности на поведение сечения при высоких энергиях налетающих электронов. Получена простая формула, аппроксимирующая имеющиеся экспериментальные данные для кремния. Эта формула для расчета сечения К-ионизации Si может быть использована при анализе экспериментальных данных по выходу характеристического рентгеновского излучения из тонкого слоя кремния в диапазоне энергий налетающих электронов от единиц до сотен МэВ. Обсуждается использование характеристического рентгеновского излучения в экспериментах на пучках частиц высоких энергий.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: сечение ионизации К-оболочки атомов электронами, характеристическое рентгеновское излучение, эффект плотности

Монокристалл кремния используется во многих экспериментах по излучению релятивистских частиц. В качестве примера упомянем работы по излучению при каналировании (см. список литературы в [1]), когерентного тормозного излучения (см. список литературы в [2]), дифракционного переходного излучения (см., например, [3]). Большинство таких экспериментов выполняется на тонких монокристаллах кремния, в которых релятивистские частицы, помимо основного исследуемого эффекта, производят рефлексывы параметрического рентгеновского излучения (ПРИ) [4-6] при взаимодействии с кристаллографическими плоскостями и ионизируют К-оболочки атомов кремния. В результате ионизации в К-оболочке атома образуется вакансия, которая затем заполняется внешним электроном и при этом испускается характеристическое рентгеновское излучение (ХРИ) кремния с энергией 1,74 кэВ. Отличительной особенностью ПРИ и ХРИ является то, что оба эти типа рентгеновского излучения испускаются под большими углами к направлению движения пучка частиц. ПРИ имеет резкие максимумы в угловом распределении (рефлексывы), направление распространения которых зависит от ориентации кристаллографических плоскостей. Возможности применения рефлексывов ПРИ для контроля ориентации и состояния кристалла, а также для мониторинга измерений отмечалась, например, в [7].

В настоящей работе мы обратимся к рассмотрению ионизации К-оболочки атомов кремния. ХРИ, возникающее в результате К-ионизации, испускается изотропно. Это излучение удобно использовать для независимого контроля и мониторинга измерений (см., например, [4,8]). Величина сечения ионизации К-оболочки Si при различных энергиях электронов представляет особый интерес для анализа экспериментальных результатов по излучению и движению частиц в монокристалле кремния. Однако имеющиеся в литературе формулы для расчета сечения дают значительно различающиеся результаты. Целью настоящей работы является поиск наиболее реалистичного способа расчета сечения в зависимости от энергии налетающих электронов. В работе рассмотрены имеющиеся в литературе данные по сечению и получена простая формула для его расчета в случае атома Si, аппроксимирующая имеющиеся экспериментальные данные.

ИЗМЕРЕНИЯ И ВЫЧИСЛЕНИЯ

В литературе опубликовано немало экспериментальных работ по измерению сечений ионизации К-оболочки различных атомов релятивистскими электронами при энергиях налетающих электронов от единиц МэВ до единиц ГэВ. Читатель может найти ссылки на некоторые из таких работ в статье [9]. Теоретические расчеты сечений К-ионизации атомов электронами описаны, например, в работах [10-12]. Универсальные формулы, аппроксимирующие экспериментальные данные по многим атомам, получены, например, в работах [13,14]. Кроме того, сечения приведены в базе данных [15]. Рассмотрим имеющиеся в литературе результаты применительно к атому Si.

На рисунке показаны зависимости сечения ионизации К-оболочки атома Si от энергии налетающих электронов. Величины сечения, измеренные экспериментально, показаны точками с погрешностями измерений. Сечения при энергии 15,7 и 25,7 МэВ измерены в ХФТИ, Харьков, на ускорителе ЛУЭ-40 [9]. Измерения при энергии 50 МэВ выполнены в Германии [16], а при 150 МэВ – в Японии [14]. Величина сечения при 150 МэВ из [14] скорректирована так, чтобы все точки на рисунке привести к одинаковому значению флуоресцентного выхода, принятого в более поздних работах [9,16]. Для этого величина сечения из [14] была умножена на отношение флуоресцентных выходов для Si 0,043/0,047, которые использовались в этих работах.

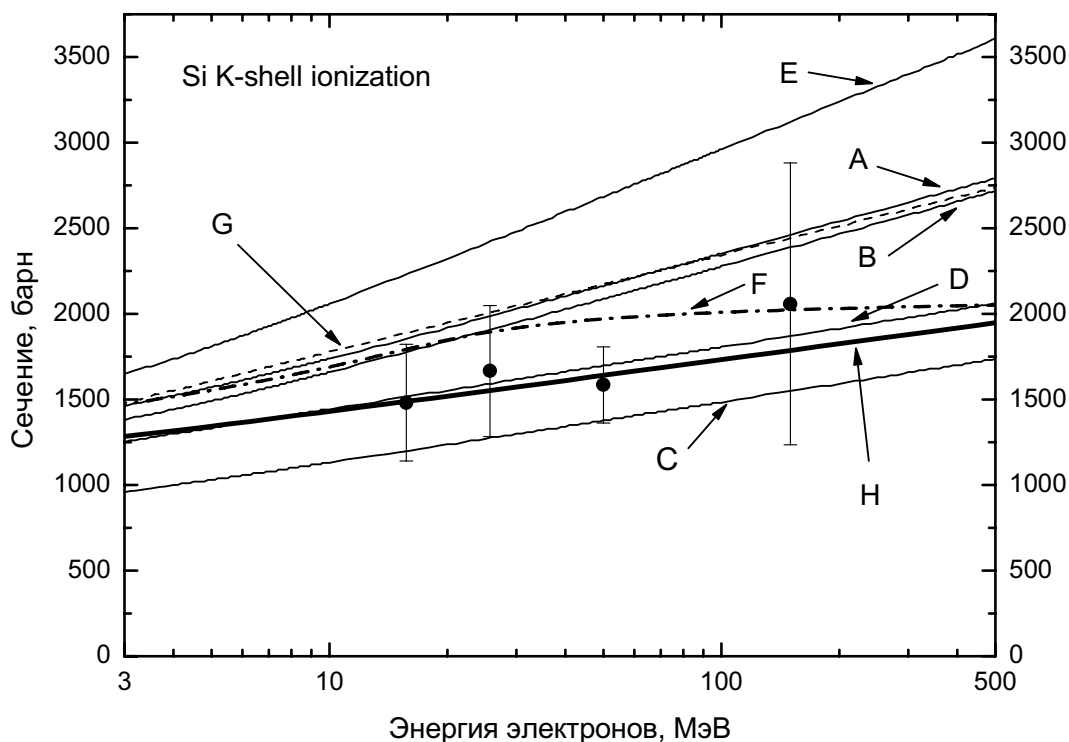


Рисунок. Поперечное сечение ионизации К-оболочки кремния в зависимости от энергии налетающих электронов.

Точки с погрешностями – результаты измерений из работ [9,14,16], линия А – расчет по формулам (1-3), линия В – расчет по формулам (4-7), линия С – расчет по формуле (8), штриховая линия G – расчет по формуле (9), линия D – расчет по формуле (10), линия Е – расчет по формулам из работы [12], штрих-пунктирная линия F – аппроксимирующая кривая для сечений из базы данных EEDL [15], толстая сплошная линия H – расчет по формуле (12).

Для сравнения с экспериментальными данными линиями на рисунке показаны результаты расчетов, а также сечения из базы данных EEDL [15]. Опишем расчеты более подробно и приведем соответствующие формулы из литературы в виде, удобном для настоящей работы. Сплошной линией А показана зависимость сечения К-ионизации кремния от энергии налетающих электронов, вычисленная по формулам (14), (15) из работы [10]

$$\sigma_K = \sigma_1 + \sigma_2, \quad (1)$$

где

$$\sigma_1 = \frac{4\pi r_0^2 0.282}{\beta^2 I_0 t^4} \left\{ \left[1 - \frac{16}{13}(1-t) \right] \left[\ln \left(\frac{2p^2}{tI_0} \right) - \beta^2 \right] - \frac{55}{78} + \frac{32}{39}(1-t) \right\}, \quad (2)$$

$$\sigma_2 = \frac{4\pi r_0^2}{\beta^2 I_0} \left\{ \frac{1}{t} - \frac{I_0}{E} \left[1 - \frac{E^2}{2(E+1)^2} + \frac{2E+1}{(E+1)^2} \ln \frac{E}{tI_0} \right] \right\}, \quad (3)$$

r_0 – классический радиус электрона, β – скорость налетающих электронов в единицах скорости света,

$I_0 = \frac{1}{2} \left[\alpha \left(Z - \frac{5}{16} \right) \right]^2$ – идеальная энергия ионизации К-оболочки атома с атомным номером Z в единицах

mc^2 , $\alpha = \frac{1}{137}$ – постоянная тонкой структуры, $t = I/I_0$ – фактор экранирования, I – наблюдаемая энергия

ионизации атома в единицах mc^2 , E – кинетическая энергия налетающих электронов в единицах mc^2 ,

$p = \frac{\beta}{(1-\beta^2)^{\frac{1}{2}}}$ – импульс налетающих электронов в единицах mc .

Сплошной линией В на рисунке показано сечение, вычисленное по формуле (11) из работы [10]

$$\sigma_K = \frac{4\pi r_0^2}{\beta^2 I_0} \left\{ A \left[\ln \left(\frac{P^2}{2I_0} \right) - \beta^2 \right] + B \right\}, \quad (4)$$

где

$$A = 0,2834 + 0,7815\delta + 1,4327\delta^2 + 2,1939\delta^3 + 3,0369\delta^4 + 3,9426\delta^5 + 4,9006\delta^6, \quad (5)$$

$$B = 1,2565 + 1,1560\delta + 0,7942\delta^2 + 0,1252\delta^3 + 0,9218\delta^4 - 5,4117\delta^5, \quad (6)$$

$$\delta = 1 - t. \quad (7)$$

Сплошной линией С на рисунке показано поперечное сечение, вычисленное по формуле для неканалирующих частиц из работы [11]

$$\sigma_K = \frac{8\pi r_0^2}{3} \left\{ \frac{1,5}{I} + \frac{0,423}{I} \left[\ln \left(\frac{1,274\gamma^2}{I} \right) - 1 \right] \right\}, \quad (8)$$

где γ - релятивистский фактор налетающих электронов.

В работе [14] большое количество экспериментальных данных в диапазоне энергий электронов от 70 до 270 МэВ по сечению К-ионизации различных атомов с атомными номерами Z от 11 до 92 были аппроксимированы с помощью закона подобия формулой

$$\sigma_K^{\text{ex}} = \frac{1 - \frac{16}{13}(1-t)}{I_{ob} t^3} \left[129 \ln \left(\frac{E_e^2}{t I_{ob}} \right) + 1017 \right] + \frac{4\pi r_0^2 m c^2}{I_{ob}}, \quad (9)$$

где E_e - энергия налетающих электронов в МэВ, I_{ob} - экспериментально наблюдаемая энергия ионизации К-оболочки в кэВ. Расчет сечения К-ионизации атомов кремния по этой формуле показан на рисунке штриховой линией G.

Авторы работы [13] аппроксимировали множество экспериментальных данных по сечению ионизации К, L, M оболочек атомов с атомными номерами Z от 12 до 92 в диапазоне энергий налетающих электронов от 20 до 60 МэВ [16] с помощью закона подобия. Они получили формулу (2) [13]

$$\sigma_{K,L,M} = \frac{N_i}{I_{ob}} \left[333 \log \left(\frac{E_0}{I_{ob}} \right) + 83 \right], \quad (10)$$

где N_i - число электронов на К, L или M оболочке атома, E_0 / I_{ob} - безразмерная величина, E_0 - энергия электронов. Расчет по этой формуле показан на рисунке сплошной линией D. Сечение, рассчитанное по полуэмпирической формуле из работы [12], показано кривой E.

В базе данных EEDL [15] приведены только отдельные оцененные значения сечений при энергии электронов от 10 эВ до 100 ГэВ. На рисунке эти сечения показаны штрих-пунктирной кривой F. Кривая F получена путем соединения точек из EEDL с помощью сплайнов.

Отметим, что во всех приведенных расчетах не учитывается влияние эффекта плотности. Эффект плотности должен приводить к насыщению роста сечения при энергии электронов E_e , превышающей критическую энергию $E_e > E_{crit}$ [17,5], где

$$E_{crit} = m c^2 \frac{E_K}{\hbar \omega_p}, \quad (11)$$

где ω_p - плазменная частота в мишени, E_K - энергия К-края поглощения. В кристалле кремния $\hbar \omega_p = 31,1$ эВ,

$E_K = 1,84$ кэВ, $E_{crit} = 30,2$ МэВ. Однако в экспериментальных работах на различных атомах (см., например,

[18]) эффект плотности при энергии электронов $E_e > E_{crit}$ не обнаруживался. Сечение К-ионизации продолжало монотонно возрастать с увеличением энергии электронов, что представлялось неожиданным. Это явление было объяснено в работе [19]. Оказалось, что при энергии электронов больше критической включается еще один канал К-ионизации. Этот канал обусловлен фотоионизацией атомов мишени переходным излучением, которое возникает при пересечении электроном поверхности мишени. Спектр переходного излучения

простирается от низких энергий до граничной величины $\hbar \omega_b = \hbar \omega_p \frac{E_e}{m c^2}$ [17]. При энергии электронов,

превышающей E_{crit} , граничная энергия переходного излучения превышает энергию К-края ионизации и происходит фотоионизация К-оболочки атомов под действием переходного излучения. Суммарный эффект от ионизации электроном с учетом эффекта плотности и от фотоионизации его переходным излучением оказывается таким, как будто эффект плотности не работает [19]. Именно поэтому эффект плотности не

проявлялся при $E_e > E_{crit}$ в экспериментах с тонкими мишенями [18], которые прозрачны для переходного излучения с энергией, превышающей энергию К-края поглощения.

Очевидно, что фотоионизация переходным излучением не должна наблюдаться в глубине мишени в экспериментах с толстыми мишенями. В этом случае переходное излучение с энергией, превышающей энергию К-края, поглощается в приповерхностном слое мишени и не может обеспечивать фотоионизацию на большей глубине. Таким образом, фотоионизация переходным излучением маскирует проявление эффекта плотности в тонкой мишени и в приповерхностном слое толстой мишени.

Отметим, что в измерениях сечения К-ионизации Si при энергии электронов 15,7 и 25,7 МэВ эффект плотности не должен проявляться, потому что электроны имеют энергию меньше критической величины $E_e < E_{crit} = 30,2$ МэВ. Измерения при энергии электронов 50 и 150 МэВ, превышающей критическую $E_e > E_{crit} = 30,2$ МэВ, были выполнены на тонких мишенях, и в этом случае влияние эффекта плотности маскируется фотоионизацией переходным излучением в тонкой мишени.

Из рисунка видно, что расчеты по универсальным формулам с разной степенью точности описывают экспериментальные данные по Si. Результаты некоторых вычислений различаются в два и более раз. Наличие четырех экспериментальных точек позволяет аппроксимировать результаты измерений.

ФОРМУЛА ДЛЯ РАСЧЕТА СЕЧЕНИЯ К-ИОНИЗАЦИИ КРЕМНИЯ

Для получения простой формулы, наиболее адекватно описывающей поведение сечения ионизации К-оболочки кремния, мы аппроксимировали экспериментальные данные по Si методом наименьших квадратов с помощью логарифмической функции. Аппроксимирующая формула для сечения К-ионизации Si имеет вид

$$\sigma_K^{Si} = 134 \ln \gamma + 1025, \quad (12)$$

где σ_K^{Si} - сечение К-ионизации атома Si в барнах, $\gamma = \frac{E_e}{mc^2} + 1$ - релятивистский фактор налетающих частиц.

Расчет по формуле (12) показан на рисунке толстой линией Н. Эта формула тоже не содержит влияния эффекта плотности, т.к. в экспериментальных данных при $E_e < E_{crit} = 30,2$ МэВ влияние эффекта плотности не должно проявляться, а при $E_e > E_{crit} = 30,2$ МэВ влияние эффекта плотности маскируется благодаря фотоионизации переходным излучением в тонкой мишени [19].

ВЫВОДЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Мы получили формулу (12) для расчета сечения К-ионизации Si, которая аппроксимирует имеющиеся экспериментальные данные для атома Si. Ее можно использовать в диапазоне энергий налетающих электронов от единиц до сотен МэВ. Формула (12) справедлива для мишеней любой толщины при энергии электронов $E_e < E_{crit} = 30,2$ МэВ. При энергии электронов $E_e > E_{crit} = 30,2$ МэВ она справедлива для тонких мишеней, прозрачных для переходного излучения с энергией, превышающей энергию К-края поглощения в кремнии, а также при наблюдении характеристического излучения с той стороны толстой мишени, на которую падают электроны. Из остальных описанных выше расчетов по универсальным для многих атомов формулам отметим формулу (10), расчеты по которой (линия D) оказались весьма близки к аппроксимации результатов измерений по Si (линия Н).

При анализе экспериментальных данных следует также учитывать поглощение характеристического излучения в мишени и ориентационные эффекты К-ионизации в кристаллах, обусловленные каналированием частиц в случае их движения вдоль одной из кристаллографических осей или плоскостей кристалла. Влияние таких эффектов рассматривались в [11]. В толстой мишени следует также учитывать возможность еще одного канала ионизации, возникающего благодаря фотоионизации атомов тормозным излучением электрона в мишени. Коэффициенты в формуле (12) можно уточнять при появлении новых экспериментальных данных по К-ионизации Si.

Использование ХРИ, а также ПРИ для мониторинга и диагностики представляется перспективным в исследованиях по прохождению, повороту, излучению заряженных частиц высоких энергий в изогнутых кристаллах и кристаллическом ондуляторе. Уникальной особенностью ХРИ и ПРИ является возможность регистрации спектральных пиков ХРИ и ПРИ на низком спектральном фоне под большими углами наблюдения потому что другие виды прямого излучения в таких направлениях обычно отсутствуют. Особенно удобно использовать ХРИ в ситуациях, когда трудно определить другими методами долю частиц пучка, проходящих через мишень или ее участок – например в случае прохождения части пучка вдоль изогнутой кристаллической пластины (см. подробнее в [8]) или кристаллического ондулятора (см. в [7,20]), а также в случае использования внутренней мишени в синхротроне или накопительном кольце.

Приведем в качестве примера использование ХРИ в недавнем исследовании свойств ПРИ из текстурированного поликристалла Mo, которое выполнялось на внутренней мишени накопительного кольца электронов с энергией 150 МэВ REFER [21,22]. Спектры рентгеновского излучения, возбуждаемого частью пучка электронов на краю мишени, измерялись под большими углами к оси пучка. В спектрах на низком спектральном фоне одновременно наблюдались спектральные пики К-линий ХРИ атомов Mo и ПРИ от

кристалічних зерен текстурованого полікристалла. Використання величини сечення К-іонізації атома Мо дозволило в'ясувати число електронів пучка, проходящих через мішень і визначити абсолютний вихід ПРИ з текстурованого полікристалла [21,22].

В заключення відзначимо роботу [23], в якій приведені отримані експериментально величини сечення іонізації К-оболочки, виміряні на атомах з атомними номерами Z від 1 до 92 електронами з різними енергіями від еВ до Гев, а також є посилання на оригінальні роботи, опубліковані до 2000г.

Робота виконана частково за підтримки грантів STCU1030 і STCU1911.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. B.L. Berman Channeling radiation: a historical perspective. In: "Electron-Photon Interaction in Dense Media" ed. by H. Wiedemann, NATO Science Series, II. Mathematics, Physics and Chemistry – V.49. - Kluwer Academic Publishers, Dordrecht / Boston / London. – 2002. - P.7-24.
2. А.П. Потылицын Поляризованные фотонные пучки высоких энергий. - Энергоатомиздат: Москва, 1987.
3. K. Chouffani, M.Yu. Andreyashkin, I. Endo, J. Masuda, T. Takahashi, Y. Takashima Parametric X-radiation and diffracted transition radiation at REFER electron ring // Nucl. Instr. and Meth. – 2001. – V.B173. – P. 241-252.
4. A.V. Shchagin, V.I. Pristupa, N.A. Khizhnyak A fine structure of parametric X-ray radiation from relativistic electrons in a crystal // Phys. Lett. – 1990.- V.A148 – P.485-488.
5. A.V. Shchagin, N.A. Khizhnyak Differential properties of parametric X-ray radiation from a thin crystal // Nucl. Instr. and Meth. – 1996. – V.B119 – P.115-122.
6. A.V. Shchagin, X.K. Maruyama Parametric X-rays. In: "Accelerator-Based Atomic Physics Techniques and Applications", eds. S.M. Shafroth and J.C. Austin, AIP Press, New York. – 1997. – P.279-307.
7. A.V. Shchagin Diffraction, extraction and focusing of parametric X-ray radiation, channeling radiation and crystal undulator radiation // Вісник ХНУ. Серія фізична: Ядра, частинки, поля. – 2006 - № 732. - Випуск 2/30/. - С.35-46.
8. А.В. Щагин Фокусировка параметрического рентгеновского излучения // Письма в ЖЭТФ. – 2004. – Т.80 – С.535-540.
9. A.V. Shchagin, V.I. Pristupa, N.A. Khizhnyak K-shell ionization cross section of Si atoms by relativistic electrons // Nucl. Instr. and Meth. – 1994. – V. B 84 – P.9-13.
10. H. Kolbenstvedt Asymptotic expression for K-shell ionization cross section with electrons // J. Appl. Phys. – 1975. – V.46 – P.2771-2773.
11. С.М. Дарбинян, К.А. Испирян. К-ионизация каналированными релятивистскими частицами / Препринт ЕФИ-461(3)-81, Ереванский физический институт, Ереван, 1981. S.M. Darbinian, K.A. Ispirian // Rad. Eff. – 1982. – V.62. – P.207.
12. C. Jakoby, H. Genz, A. Richter A semi-empirical formula for the total K-shell ionization cross section by electron impact // J. Phys. Colloq. – 1987. – V.C9 48. – P.487.
13. D.H.H. Hoffmann, C. Brendel, H. Genz, W. Low, A. Richter Application of relativistic electrons for the quantitative analysis of trace elements // Nucl. Instr. and Meth. – 1984. – V.B3. – P.279-282.
14. K. Ishii, M. Kamiya, K. Sera, S. Morita, H. Tawara, M. Oyamada, T.C. Chu Inner-shell ionization by ultrarelativistic electrons // Phys. Rev. – 1977. – V.A 15 – P.906-913.
15. D.E. Cullen, S.T. Perkins and S.M. Seltzer Tables and Graphs of Electron Interaction Cross 10 eV to 100 GeV Derived from the LLNL Evaluated Electron Data Library (EEDL), $Z = 1 - 100$. Lawrence Livermore National Laboratory, UCRL-50400, Vol. 31, November 1991. Available: <http://www-nds.iaea.org/epdl97/>.
16. D.H.H. Hoffmann, C. Brendel, H. Genz, W. Low, S. Miller, A. Richter Inner-shell ionization by relativistic electron impact // Z. Physik. – 1979. – V.A293. – P.187-201.
17. М.Л. Тер-Микаелян Влияние среды на электромагнитные процессы. - Ереван: Издательство Академии наук Армянской ССР, 1969. – 457с.
18. D.H.H. Hoffmann, C. Brendel, P. Eschwey, U. Kuhn, W. Low, A. Richter, P. Seserko Search for the density effect in inner-shell ionization by ultra relativistic electron impact // Z. Physik. – 1982. – V.A305. – P.9-19.
19. A.H. Sorensen Atomic K-shell excitation at ultrarelativistic impact energies // Phys. Rev. – 1987. – V.A36. – P.3125-3137.
20. A.V. Shchagin Diffraction, extraction and focusing of parametric X-ray radiation, channeling radiation and crystal undulator radiation from a bent crystal. In: "Advanced radiation sources and applications" ed. by H. Wiedemann, NATO Science Series, II. Mathematics, Physics and Chemistry – V.199. – Springer. – 2006. - P.27-45.
21. Y. Takabayashi, I. Endo, K. Weda, C. Moriyoshi, A.V. Shchagin Observation of intense PXR from textured polycrystal // Nucl. Instr. and Meth. – 2006. – V.B243. – P.453-456.
22. S. Nawang, I. Endo, M. Iinuma, T. Takahashi, A. Kohara, K. Ueda, S. Stokov, H. Kuroiwa, T. Ohnishi, Y. Takabayashi, C. Moriyoshi, A. Shchagin Parametric X-ray Study from Textured Molybdenum Polycrystal // Journal of the Physical Society of Japan. – 2006. - V.75. – P.124705-1 - 124705-10.
23. M. Liu, Z. An, C. Tang, Z. Luo, X. Peng, X. Long Experimental electron-impact K-shell ionization cross sections // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 2000. – V.76. – P.213-234.

A FORMULA FOR K-SHELL IONIZATION CROSS SECTION OF SI ATOMS BY RELATIVISTIC ELECTRONS IN A THIN SILICON LAYER

A.V. Shchagin, V.V. Sotnikov

National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology", 61108 Kharkov, Ukraine

E-mail: schchagin@kipt.kharkov.ua

The data on the cross section for K-shell relativistic-electron ionization of Si atoms in a thin silicon layer are analyzed in the paper. The available measured data and the calculations of cross sections by different formulas taken from the literature are presented. The influence of the density effect on the cross-section behavior at high energies of incident electrons is discussed. A simple formula is derived to approximate the available experimental data on silicon. The formula for calculating the cross section for K-shell ionization of Si may be used in the analysis of the experimental data on the yield of characteristic X-ray radiation from a thin silicon layer at incident electron energies from unities to hundreds of MeV. Application of characteristic X-ray radiation in experiments with high energy particles are discussed.

KEY WORDS: K-shell ionization cross section of atoms by electron impact, characteristic X-ray radiation, density effect