



УДК 539.186.188

О. О. Боровик, В. І. Роман, А. В. Купляускієне

Переріз автоіонізації атомів рубідію при збудженні електронним ударом

(Представлено академіком НАН України О. Б. Шпенником)

Досліджено спектри ежектованих електронів при збудженні $4p^6$ оболонки атомів рубідію в діапазоні енергій зіткнень від порогу збудження до 600 еВ. Шляхом визначення сумарної інтенсивності ліній у спектрах та нормування на теоретичні дані вперше отримано абсолютний переріз автоіонізації атомів рубідію з максимальним значенням $(2,9 \pm 0,6) \cdot 10^{-16}$ см² при енергії 22 еВ. Енергетична залежність перерізу виявляє наявність трьох максимумів при енергіях зіткнень 16, 22 і 113 еВ, які відображають динаміку внеску дублетних та квартетних автоіонізаційних станів. Порівняльний аналіз одержаного перерізу автоіонізації з відомими даними щодо повного перерізу однократної іонізації атомів рубідію дозволив також вперше визначити абсолютне значення перерізу прямої іонізації $5s + 4p^6$ оболонок з максимальним значенням $(7,2 \pm 2,2) \cdot 10^{-16}$ см² при енергії 39 еВ. Встановлено, що автоіонізаційний внесок від збудження $4p^6$ оболонки в повний переріз однократної іонізації атомів рубідію сягає максимального значення $32 \pm 5\%$.

Найбільш низьколежачі автоіонізаційні стани в атомах лужних металів утворюються в результаті збудження їх субвалентних оболонок. Електронний розпад цих станів істотно впливає на характер поведінки енергетичної залежності повного перерізу однократної іонізації і веде до істотного збільшення його абсолютного значення [1]. Однак визначити експериментально кількісний внесок такого непрямого процесу іонізації в повний переріз однократної іонізації атомів лужних металів, а тим більше парціальних перерізів прямої іонізації окремих електронних оболонок, в традиційних дослідженнях іонізації практично неможливо. Проблема полягає в тому, що результатом обох процесів є утворення іонізаційного електрона та однозарядного іона, енергетичні параметри яких не залежать від типу вихідного процесу. В попередніх публікаціях (див. роботи [1–6] і посилання в них) даються різні оцінки величини автоіонізаційної добавки — від 20% у калію до 30% у рубідію і цезію.

© О. О. Боровик, В. І. Роман, А. В. Купляускієне, 2013

Нез'ясованим залишалося також походження резонансного характеру перерізу іонізації атомів лужних металів у припороговій області енергій збудження субвалентних оболонок. Для вирішення цього питання в теоретичній роботі [4] автори припустили, що ефективність електронного збудження автоіонізаційних станів є значною лише у припорогових областях. Проведені в останній період роботи з експериментального і теоретичного дослідження динаміки припорогового збудження автоіонізаційних станів $np^5n_1l_1n_2l_2$ в атомах натрію ($n = 2$), калію ($n = 3$) і цезію ($n = 5$) показали, що така ситуація дійсно має місце (див. [7, 8] і посилення в них).

У роботах [9–11] вперше безпосередньо було виміряно переріз автоіонізації і проаналізовано роль окремих атомних конфігурацій в процесі автоіонізації атомів літію, калію і цезію відповідно. Ці дослідження показали, що динаміка поведінки перерізу автоіонізації цих атомів визначається в основному тими атомними автоіонізаційними станами, які енергетично розташовані нижче перших збуджених іонних рівнів. Нещодавно ми одержали результати щодо перерізу автоіонізації атомів рубідію в діапазоні енергій зіткнень від порогу збудження $4p^6$ оболонки до 50 еВ [12]. У роботі проаналізовано роль окремих конфігурацій в процесі автоіонізації атомів, а також розглянуто причину резонансної поведінки перерізу автоіонізації в припороговій області енергій. Відкритим залишилося питання поведінки перерізу автоіонізації атомів рубідію при високих енергіях первинних електронів.

Для одержання повної картини енергетичної поведінки перерізу автоіонізації атомів рубідію нижче наведено результати дослідження автоіонізаційних спектрів у широкому діапазоні енергій зіткнень 15–600 еВ.

Дослідження проводилися методом електронної спектроскопії з використанням техніки пучків, що пересікаються. Детальний опис експериментальної установки і методики вимірювань можна знайти в [7]. В нашій роботі коротко зупинимося лише на основних деталях проведених досліджень. Електронний спектрометр включав у себе 127° електростатичний монохроматор з енергетичною роздільною здатністю не гірше 0,2 еВ (повна ширина енергетичного розподілу електронів у пучку на половині його висоти), аналізатор енергій електронів з енергетичним розділенням 0,15 еВ і джерело пучка нейтральних атомів. Електронні спектри автоіонізаційних станів атомів рубідію були одержані в діапазоні енергій первинного електронного пучка від порогу збудження $4p^6$ оболонки при 15,31 еВ до 600 еВ. Похибки шкал енергій первинних і автоіонізаційних електронів становили $\pm 0,06$ еВ і $\pm 0,04$ еВ відповідно. Для зменшення впливу анізотропії кутового розподілу ежекттованих електронів автоіонізаційні спектри атомів вимірювалися під “магічним” кутом спостереження $54,7^\circ$ [13]. Переріз автоіонізації атомів рубідію отримано шляхом визначення сумарної інтенсивності ліній в електронних спектрах, виміряних для різних значень енергії зіткнень у діапазоні 15–600 еВ за методикою, детально описаною раніше [7, 12]. Одержаний відносний переріз автоіонізації був приведений до абсолютного значення шляхом нормування перерізу збудження стану $(4p^55s^2)^2P_{3/2}$ на розраховане значення $6,94 \cdot 10^{-18}$ см² при енергії 17,66 еВ [14]. Наведені в роботі дані отримані шляхом порівняння і усереднення результатів п'ятьох незалежних вимірювань. Відносна похибка у визначенні перерізу автоіонізації становила не більше 20%, за винятком перших точок у припороговій області енергій, де вона збільшувалася до 30% за рахунок слабкої інтенсивності ліній у спектрах.

Рис. 1 демонструє приклади автоіонізаційних спектрів атомів рубідію для різних значень енергії зіткнень. Ідентифікація ліній у спектрах здійснена нами раніше у роботі [12] з використанням розрахунків енергій і перерізів збудження, а також автоіонізаційних ширин рівнів $4p^5n_1l_1n_2l_2$. З рис. 1, а випливає, що у спектрі при енергії 28,24 еВ за ефективніс-

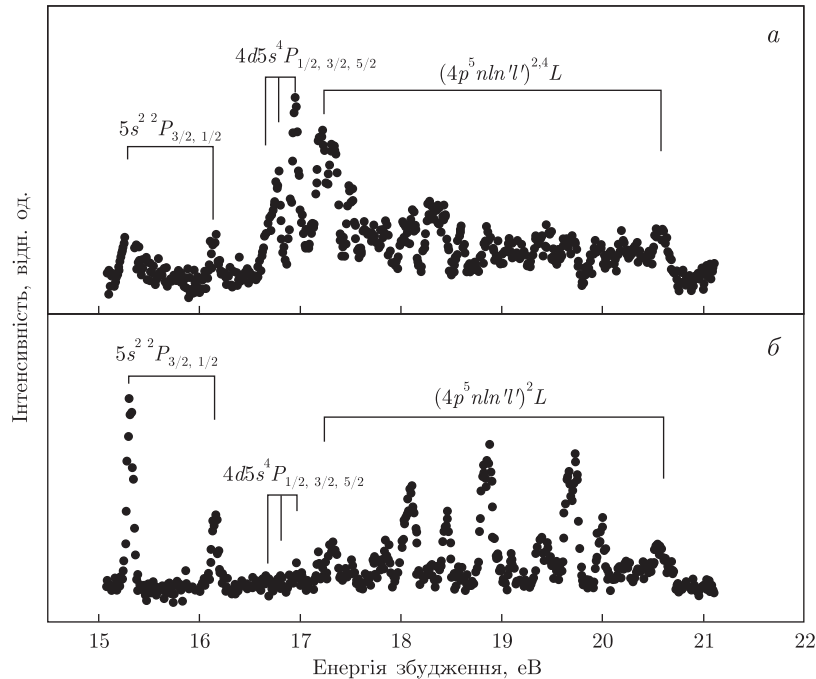


Рис. 1. Автоіонізаційні спектри атомів рубідію для значень енергій зіткнень 28,24 еВ (а) і 100,4 еВ (б). У наведених спектрах від експериментальних даних віднято неперервний фон, апроксимований поліноміальною функцією

тюд збудження домінують лінії, які відповідають розпаду кватетних рівнів. Із збільшенням енергії первинного електронного пучка (рис. 1, б) більш інтенсивними стають лінії дублетних рівнів. Очевидно, що така динаміка збудження ліній в електронних спектрах визначатиме і енергетичну залежність поведінки перерізу автоіонізації атомів рубідію.

Переріз автоіонізації σ_{aut} атомів рубідію в діапазоні енергій первинних електронів від порогу збудження $4p^6$ оболонки до 600 еВ наведено на рис. 2, а. Як видно, поведінка перерізу характеризується наявністю трьох максимумів *A*, *B* і *C* при енергіях зіткнень 16, 22 і 113 еВ відповідно. Для аналізу природи утворення цих максимумів ми одержали енергетичні залежності відносних перерізів збудження σ_{exc} дублетних $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}$, $(4p^5 5s^2)^2 P_{1/2}$ і кватетних $(4p^5 4d5s)^4 P_{5/2}$, $(4p^5 4d5s)^4 P_{3/2}$, $(4p^5 4d5s)^4 P_{1/2}$ автоіонізаційних станів при енергіях зіткнень від порогу збудження ліній до 600 еВ (див. рис. 2, б) (детальну методику досліджень функцій збудження див. у роботах [7, 12]).

Дані [12], а також рис. 2 підтверджують, що максимум *A* є виключно результатом резонансного збудження дублетних станів $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}$ і $(4p^5 5s^2)^2 P_{1/2}$. Формування основного максимуму *B* перерізу σ_{aut} із максимальним значенням $(2,9 \pm 0,6) \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$ напряду пов'язано з ефективністю резонансного збудження в цій області кватетних рівнів $(4p^5 4d5s)^4 P_j$ (див. рис. 2), а також, хоча і меншою мірою, високолежачих дублетів конфігурацій $4d5s$, $5p$ і $5s5p$, $5d$, $6p$ із порогам збудження вище 17,2 еВ. Оскільки даний переріз автоіонізації σ_{aut} формується від сумарного внеску $(4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2)^{2,4} L$ автоіонізаційних станів, то його повільне зниження в області енергій 22–50 еВ викликано суперпозицією спадаючих перерізів кватетних рівнів та зростаючих перерізів дублетних рівнів, які домінують у спектрах при високих енергіях зіткнень (рис. 1, б).

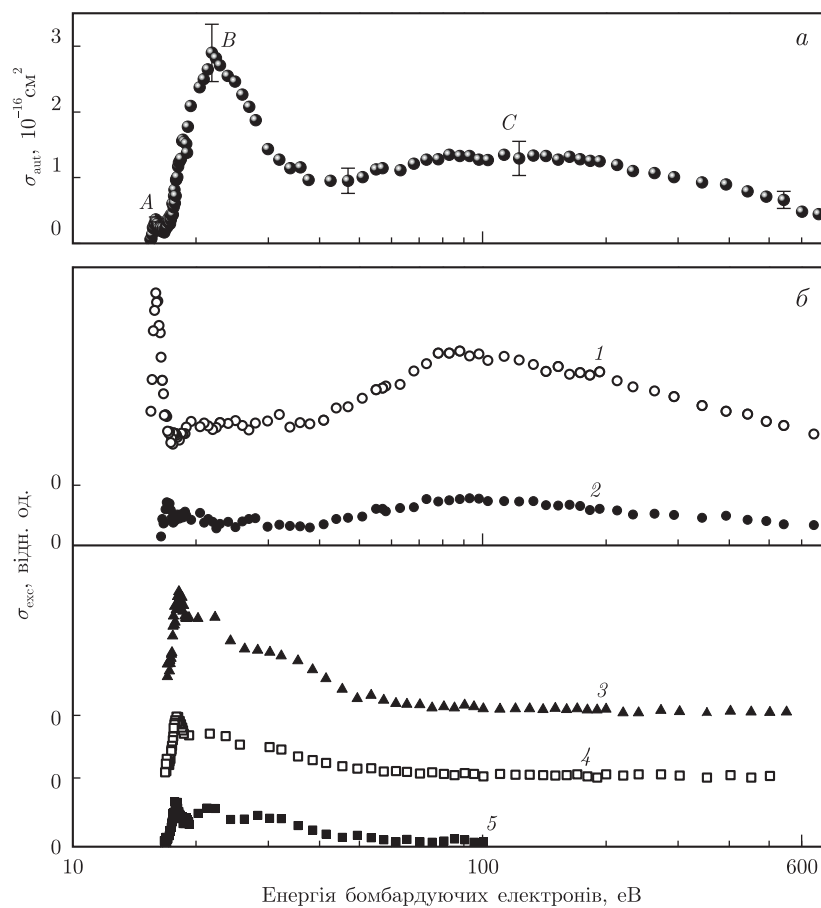


Рис. 2. Енергетична залежність повного перерізу автоіонізації σ_{aut} атомів рубідію (а); відносних перерізів збудження σ_{exc} дублетних $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}$ (1), $(4p^5 5s^2)^2 P_{1/2}$ (2) та кватетних автоіонізаційних станів $(4p^5 4d 5s)^4 P_{5/2}$ (3), $(4p^5 4d 5s)^4 P_{3/2}$ (4), $(4p^5 4d 5s)^4 P_{1/2}$ (5) (б)

З аналізу динаміки поведінки функцій збудження $(4p^5 4d 5s)^4 P_j$ станів (рис. 2, б) випливає, що в області енергій 22–50 еВ на їх перерізах збудження спостерігається явна затягнутість, що може бути результатом додаткового внеску за рахунок радіаційних каналів розпаду із високолежачих автоіонізаційних станів $(4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2)^{2,4} L$. При цьому у відповідній області енергій збудження 22–50 еВ спостерігається плавне спадання перерізу σ_{aut} , що якраз і може бути пов'язано з цим процесом. Третій широкий максимум *C*, в основному, може бути пов'язаний з внеском розпаду дублетних автоіонізаційних станів, оскільки при енергіях зіткнень 50–600 еВ саме вони формують автоіонізаційні спектри атомів рубідію (див. рис. 1, б і 2, б).

Щоб визначити відносну величину внеску автоіонізації в повний переріз іонізації σ_{tot} , на рис. 3 наведено порівняння виміряного нами перерізу $4p^6$ -автоіонізації σ_{aut} з експериментальними даними [1, 2] повного перерізу однократної іонізації σ_{tot} атомів рубідію електронним ударом. Внаслідок того, що дані [1] наведені в роботі у відносних одиницях, вони були нормовані нами на абсолютне значення $(1,6 \pm 0,2 \text{ eV}) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ роботи [2] при енергії 500 еВ. Відносно теоретичних робіт щодо перерізу іонізації атомів рубідію, то нами було проведено аналіз всіх відомих на даний момент даних (див. [4–6] та посилання в них). Ці результа-

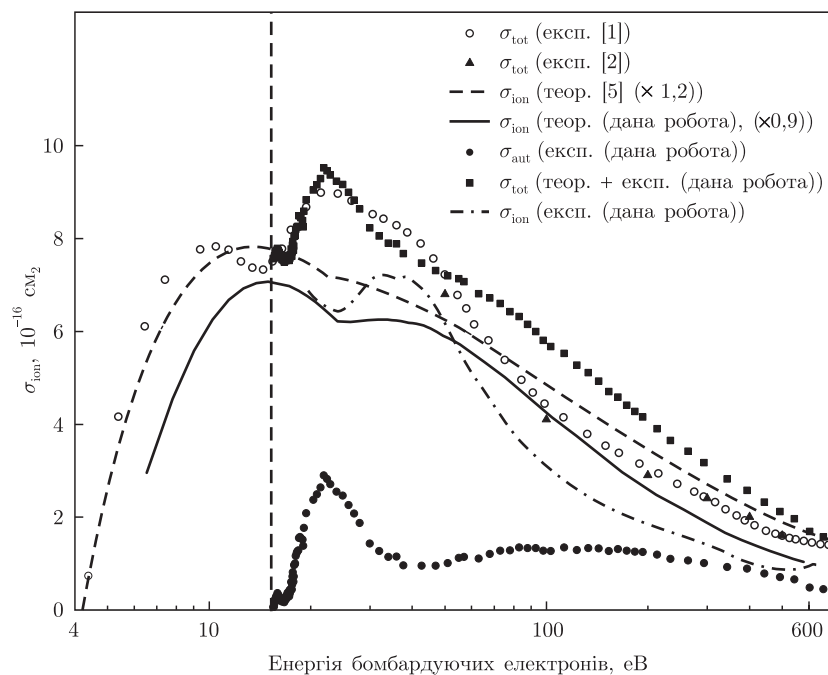


Рис. 3. Порівняння експериментальних та теоретичних даних щодо повного перерізу однократної іонізації σ_{tot} , перерізу автоіонізації σ_{aut} та перерізу прямої іонізації $5s+4p^6$ оболонок σ_{ion} атомів рубідію (див. текст). Вертикальна штрихова лінія позначає поріг збудження $4p^6$ оболонки

ти істотно відрізняються, як в порівнянні з експериментальними даними, так і між собою. У зв'язку з цим нами проведено розрахунки перерізу прямої іонізації $5s+4p^6$ оболонок σ_{ion} атомів рубідію з використанням сучасного програмного пакету FAC (The Flexible Atomic Code) [15], який дозволяє у випадку важких атомів враховувати релятивістські ефекти.

Для порівняння перерізу автоіонізації σ_{aut} та повного перерізу однократної іонізації σ_{tot} [1, 2] перший був доданий до розрахованого нами перерізу прямої іонізації $5s+4p^6$ оболонок σ_{ion} . Як видно з рис. 3, результуючий переріз σ_{tot} як за формою, так і за абсолютним значенням добре збігається із даними [1] в області енергій зіткнень до 50 еВ. Це, в свою чергу, означає, що $4p^6$ -автоіонізація є основним непрямим процесом іонізації, внесок якого у повний переріз однократної іонізації становить $32 \pm 5\%$.

При енергіях зіткнень вище 50 еВ одержаний нами переріз σ_{tot} лежить значно вище даних [1, 2]. Це свідчить про те, що при високих енергіях первинного електронного пучка в дані теоретичні розрахунки необхідно включити в розгляд й іонізацію більш глибоких оболонок ($4s^2$ і інші). Аналогічний висновок можна зробити відносно інших теоретичних моделей [4–6], які дають ще більш завищені результати перерізу прямої іонізації $5s+4p^6$ оболонок σ_{ion} при високих енергіях зіткнень (див., наприклад дані [5] на рис. 3).

У даній роботі ми маємо унікальну можливість вперше визначити абсолютний переріз прямого процесу іонізації $5s+4p^6$ оболонок σ_{ion} шляхом віднімання від даних [1] одержаного нами експериментального перерізу автоіонізації σ_{aut} . Отримана в результаті енергетична залежність відповідає прямому процесу іонізації $5s+4p^6$ в діапазоні енергій зіткнень 20,7–600 еВ із максимальним значенням перерізу $(7,2 \pm 2,2) \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$. Як видно з рис. 3, визначений переріз σ_{ion} при енергіях зіткнень більше 50 еВ є значно меншим за розраховані дані і показує при цьому наскільки теорія дає завищені результати.

Одержані в даній роботі результати показали, що прямі дослідження автоіонізаційних спектрів у широкому діапазоні енергій зіткнень дозволили визначити роль різних електронних станів у формуванні автоіонізаційного перерізу атомів рубідію. Зокрема, в області енергій зіткнень до 50 еВ основний внесок в переріз автоіонізації вносить електронний розпад дублетних і кватретних автоіонізаційних станів $5s^2$, $4d5s$, $5p$ і $5s5p$, $5d$, $6p$ конфігурацій. При великих енергіях зіткнень поведінка перерізу повністю визначається динамікою збудження дублетних рівнів $(4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2)^2 L$. Вперше визначений абсолютний переріз прямої іонізації $5s + 4p^6$ оболонки, а також внесок процесу $4p^6$ -автоіонізації в повний переріз однократної іонізації атомів рубідію електронним ударом.

1. *Tate J., Smith P.* Ionization potentials and probabilities for the formation of multiply charged ions in the alkali vapors and in krypton and xenon // *Phys. Rev.* – 1934. – **46**. – P. 773–776.
2. *Mcfarland R., Kinney J.* Absolute cross sections of lithium and other alkali metal atoms for ionization by electrons // *Ibid.* – 1965. – **137**. – P. 1058–1061.
3. *Nygaard K.* Electron impact autoionization in heavy alkali metals // *Phys. Rev. A.* – 1975. – **11**. – P. 1475–1478.
4. *Roy B., Rai D.* Electron-impact ionization in alkali metals // *Ibid.* – 1973. – **8**. – P. 849–855.
5. *Kim Y., Migdalek J., Siegel W., Bieron J.* Electron-impact ionization cross section of rubidium // *Ibid.* – 1962. – **57**. – P. 246–254.
6. *Lukomski M., Sutton S., Kedzierski W. et al.* Electron-impact ionization cross sections out of the ground and 6^2P excited states in cesium // *Ibid.* – 2006. – **74**. – 032708, 6 p.
7. *Borovik A., Grum-Grzhimailo A., Bartschat K., Zatsarinny O.* Electron impact excitation of the $(3p^5 4s^2)^2 P_{3/2,1/2}$ autoionizing states in potassium // *J. Phys. B.* – 2005. – **38**. – P. 1081–1092.
8. *Borovik A., Zatsarinny O., Bartschat K.* Resonance effects in electron and photon impact excitation of the p^6 subvalence subshell in alkali atoms // *Ibid.* – 2009. – **42**. – 044010 (11 p.).
9. *Боровик А.* Сечение автоионизации атомов лития при возбуждении электронным ударом // *Оптика и спектроскопия.* – 2010. – **109**, № 3. – С. 355–360.
10. *Evrjij M., Borovik A. (Jr.), Shimon L. et al.* Resonance excitation of the $3p^6$ -subshell in potassium: Contribution to the single ionization // *Nucl. Instrum. Methods B.* – 2005. – **233**. – P. 280–283.
11. *Borovik A., Kupliauskiene A.* The $5p^6$ autoionization cross section of cesium atoms: contribution to single ionization by electron impact // *J. Phys. B.* – 2009. – **42**. – 165202, 5 p.
12. *Borovik A., Roman V., Kupliauskiene A.* The $4p^6$ autoionization cross section of Rb atoms excited by low-energy electron impact // *Ibid.* – 2012. – **45**. – 045204, 11 p.
13. *Berezhko E., Kabachnik N.* Theoretical study of inner-shell alignment of atoms in electron impact ionization: angular distribution and polarisation of x-rays and Auger electrons // *Ibid.* – 1977. – **10**. – P. 2467–2477.
14. *Borovik A., Ilyashevych V., Zatsarinny O., Bartschat K.* Resonance excitation of the $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2,1/2}$ autoionizing states in Rb atoms by electron impact // *Abstracts of Contributed Papers. XXVII ICPEAC.* Belfast, Ireland. – 2011. – We009.
15. *Gu. F.* // *The Flexible Atomic Code.* – 2009. – <http://kipac-tree-standford.edu/fac>.

А. А. Боровик, В. И. Роман, А. В. Купляускиене

Сечение автоионизации атомов рубидия при возбуждении электронным ударом

Исследованы спектры эжектированных электронов при возбуждении $4p^6$ оболочки атомов рубидия в диапазоне энергий столкновений от порога возбуждения до 600 эВ. Путем определения суммарной интенсивности линий в спектрах и нормирования на теоретические данные получено абсолютное сечение автоионизации атомов рубидия при возбуждении электронным ударом с максимальным значением $(2,9 \pm 0,6) \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$ при 22 эВ. Энергетическая зависимость сечения обнаруживает наличие трех максимумов при энергиях столкновений 16, 22 и 113 эВ, которые отражают динамику вклада дублетных и кватрнетных автоионизационных состояний. Проведен сравнительный анализ полученного сечения автоионизации с известными данными по полному сечению однократной ионизации атомов рубидия и впервые определено абсолютное сечение прямой ионизации $5s+4p^6$ оболочек с максимальным значением $(7,2 \pm 2,2) \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$ при энергии 39 эВ. Установлено, что автоионизационный вклад от возбуждения $4p^6$ оболочки в полное сечение однократной ионизации атомов рубидия достигает максимального значения $32 \pm 5\%$.

A. A. Borovik, V. I. Roman, A. V. Kupliauskiene

The autoionization cross section of rubidium atoms excited by electron impact

The ejected-electron spectra arising from the excitation of the $4p^6$ subshell in rubidium atoms are studied in an electron impact energy range from the lowest excitation threshold up to 600 eV. By determining the total intensities of spectra and by their normalizing to the theoretical data, the absolute autoionization cross section of rubidium atoms is determined with the maximum value of $(2.9 \pm 0.6) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ at 22 eV. The energy dependence of the cross section possesses three maxima at the impact energy values of 16, 22, and 113 eV which reflect the dynamics of the contribution from doublet and quartet autoionizing states. A comparative analysis of the obtained autoionization cross section with the known data on the total single ionization cross section of rubidium atoms by electron impact is performed, and the $5s + 4p^6$ ionization cross section with the maximum value of $(7.2 \pm 0.2) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ at 39 eV is determined for the first time. The relative contribution from the $4p^6$ excitation-autoionization to the total single ionization cross sections of rubidium atoms reaches the maximum value of $32 \pm 5\%$.