

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

Парціальні перерізи іонізації атома рубідію електронним ударом

(Представлено академіком НАН України О. Б. Шпенником)

Розраховано парціальні перерізи електронної іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$, $3d^{10}$ оболонок атома рубідію в релятивістському наближенні Кулона–Борна, бінарних зіткнень та спотворених хвиль для енергій зіткнень від порога до 600 еВ. Виконано порівняльний аналіз цих даних з експериментальним перерізом автоіонізації та повним перерізом однократної іонізації атома рубідію. Показано, що кожне з розглянутих наближень задовільно відображає реальну картину процесу прямої іонізації атома рубідію лише в окремих енергетичних областях, а саме: в припороговій області — це наближення спотворених хвиль, а при більших енергіях зіткнень — це наближення бінарних зіткнень.

Ключові слова: атом, автоіонізація, збудження, іонізація, переріз.

Автоіонізація є непрямим процесом іонізації і його істотний внесок в повний переріз однократної іонізації раніше був виявлений у важких лужних атомах калію, рубідію і цезію [1–3]. Проте визначити абсолютну величину цього внеску в даних експериментах було неможливо внаслідок інтегрального характеру вимірювань, а саме, реєстрації повного потоку іонів, що утворюються в області взаємодії нейтральних атомів з електронами. Встановити цей внесок теоретично не дозволяють великі розбіжності як в енергетичній поведінці, так і в абсолютних значеннях перерізів іонізації, одержаних в різних наближеннях (див. роботу [4] та посилання в ній). Ця ситуація пов'язана зі складністю адекватного опису процесу збудження–автоіонізації глибоких оболонок важких атомів та технічними труднощами виконання таких розрахунків.

Розробка та впровадження методики прецизійних досліджень динаміки збудження електронних спектрів [5] дали змогу зробити прямі виміри перерізу автоіонізації шляхом встановлення сумарної інтенсивності ліній в електронних спектрах, визначених для різних значень енергії зіткнень [6]. Для всіх лужних металів нами було проаналізовано природу резонансної поведінки перерізу автоіонізації в припороговій області енергій та роль окремих атомних конфігурацій у формуванні цього перерізу [6, 7]. Порівняння абсолютних значень перерізу автоіонізації та повного перерізу однократної іонізації дозволило визначити відносний внесок автоіонізації в прямий процес, зокрема, для атома рубідію цей внесок становить 32% [8]. В цих роботах нами також вперше показано, що наявність експериментальних даних з перерізу автоіонізації σ_{aut} та повного перерізу однократної іонізації σ_{tot} дає унікальну можливість одержати переріз прямої іонізації $\sigma_{\text{tot}} - \sigma_{\text{aut}}$, який неможливо визначити іншими методами. Порівняння цього перерізу з теоретично розрахованими дозволяє оцінити адекватність того або іншого наближення. Таке порівняння для атома рубідію [8] виявило великі розбіжності з усіма відомими теоретичними даними в області енергій за порогом збудження субвалентної $4p^6$ оболонки. Можливою причиною такої ситуації могло бути неврахування релятивістських та кореляційних поправок, які відіграють значну роль для важкого атома рубідію [9]. Мета даної роботи — з'ясування ролі цих поправок в рі-

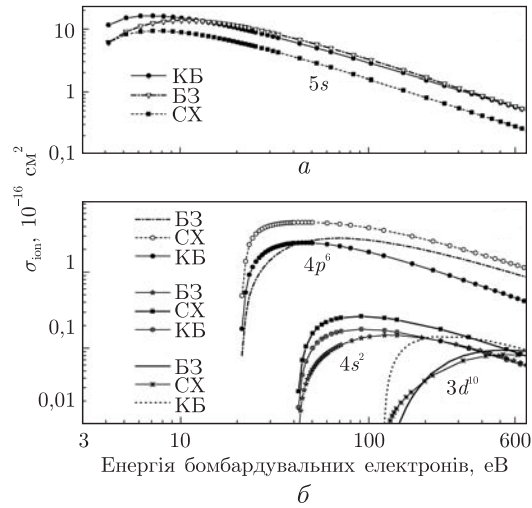


Рис. 1. Розраховані в різних наближеннях сумарні перерізи електронної іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок в атомі рубідію

зних теоретичних моделях при розрахунку абсолютних значень і енергетичної поведінки парціальних перерізів прямої іонізації глибоких оболонок атома рубідію.

Наші розрахунки проводилися з використанням програмного пакета Flexible Atomic Code (FAC) [10], який враховує релятивістський характер збудження складних атомів шляхом використання гамільтоніана Дірака–Кулона та чисельного розв’язання базису релятивістських радіальних орбіталей Дірака–Фока–Слетера. Парціальні перерізи іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок одержані в трьох наближеннях — Кулона-Борна (КБ), спотворених хвиль (СХ) і бінарних зіткнень (БЗ). Спільним для всіх трьох наближень є застосування методу факторизації, тобто відокремлення кутових та радіальних орбіталей, що дозволяє набагато спростити та пришвидшити розв’язок радіальних інтегралів. Розрахунки в наближенні СХ є найбільш трудомісткими, оскільки для оцінки радіальних інтегралів необхідне знання радіальних орбіталей для активного атомного електрона і трьох електронів неперервного спектра, тоді як в наближеннях КБ і БЗ — тільки для одного електрона неперервного спектра. Далі за складністю йде наближення КБ, в якому відбувається параметризоване зменшення перерізу у всьому енергетичному діапазоні. Найпростішим методом з технічної точки зору є наближення БЗ. Тут для одержання напівемпіричної формули радіальних орбіталей підсумовуються перерізи бінарних зіткнень та перерізи Мотта з урахуванням обмеження Бете для високих енергій [11].

На рис. 1 наведено розраховані нами парціальні перерізи іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок атома рубідію в наближеннях КБ, БЗ та СХ. Перерізи іонізації більш глибоких $3p^6$, $3s^2$ оболонок становлять менше 1% від повного перерізу прямої іонізації, тому в даній роботі вони не розглядаються.

Як видно, всі одержані перерізи, крім $3d^{10}$, мають схожі енергетичні залежності і відрізняються лише поведінкою в області припорогових енергій зіткнень. Зокрема, в перерізі іонізації $5s$ оболонки в наближенні БЗ спостерігається зсув положення максимуму на 3 еВ в бік високих енергій, а переріз іонізації $4p^6$ оболонки зростає в порозі значно швидше в наближеннях КБ та СХ, ніж в наближенні БЗ. Привертає увагу переріз іонізації $3d^{10}$ оболонки, де наближення КБ дає значно іншу енергетичну залежність перерізу, ніж два інші наближе-

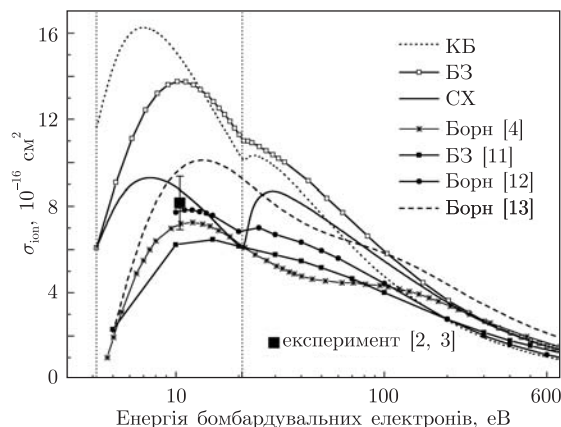


Рис. 2. Розраховані в різних наближеннях сумарні перерізи прямої іонізації атома рубідію. Вертикальні пунктирні лінії позначають пороги іонізації $5s$ і $4p^6$ оболонок при 4,18 і 20,71 еВ [14], відповідно

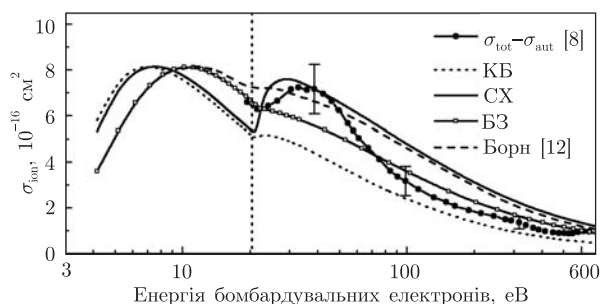


Рис. 3. Експериментальні [8] та розраховані в різних наближеннях сумарні перерізи прямої іонізації атома рубідію. Вертикальна пунктирна лінія позначає поріг іонізації $4p^6$ оболонки при 20,71 еВ [14]

ння у всьому дослідженому діапазоні енергій. Стосовно абсолютних значень розрахованих перерізів необхідно зазначити: якщо в наближеннях КБ і БЗ переріз $5s$ є вищим на 42 та 32% відповідно, ніж в СХ, то переріз $4p^6$ навпаки, є найбільшим в наближенні СХ. Що стосується перерізів іонізації $4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок, то залежно від наближення, вони відрізняються на 40–50%. Зрозуміло, що такі відмінності не можуть не вплинути на енергетичну поведінку та абсолютне значення повного перерізу прямої іонізації, який є сумою вказаних парціальних перерізів.

Дійсно, на рис. 2 наведено у порівнянні розраховані в різних наближеннях сумарні перерізи $5s + 4p^6 + 4s^2 + 3d^{10}$ прямої іонізації в наближеннях КБ, БЗ, СХ, а також розрахунки [4, 11–13]. Як видно, в області енергій зіткнень до 20 еВ, де внесок в переріз іонізації дає лише $5s$ оболонка, всі перерізи істотно відрізняються як за формою, так і за абсолютним значенням. Останнє змінюється в межах від +100% (КБ) до –21% (Борн [12]) відносно середнього максимального значення експериментального перерізу [2, 3]. Щодо поведінки перерізів за порогом іонізації $4p^6$ оболонки (20,7 еВ [14]), то наш розрахунок і дані [4, 13] в наближенні Борна, а також дані [11] в наближенні БЗ недооцінюють ефективність іонізації $4p^6$ оболонки, а також чітко не визначають положення порога її іонізації.

Як було згадано вище, наявність експериментального перерізу прямої іонізації $\sigma_{\text{tot}} - \sigma_{\text{aut}}$ дає можливість перевірити правильність теоретичних наближень опису цього процесу. На рис. 3 наведено порівняння перерізу $\sigma_{\text{tot}} - \sigma_{\text{aut}}$ [8] з результатами в наближеннях КБ, БЗ, СХ,

а також даними [12] в наближенні Борна. Для виключення впливу великих розбіжностей у значеннях розрахованого перерізу $5s$ іонізації всі ці дані були нормовані на переріз [1] при енергії зіткнень 10 еВ. Як видно, в припороговій області дані в наближенні СХ найкраще збігаються з експериментом, але при більших енергіях зіткнень вони разом із даними [12] значно його перевищують. Протилежна тенденція спостерігається для наближень КБ і БЗ.

Одержані дані та їх аналіз дозволяють зробити такі висновки. По-перше, включення релятивістських поправок в усі наближення (КБ, СХ, БЗ) дозволило краще описати експериментальні дані з іонізації глибоких оболонок. По-друге, кожне з розглянутих наближень задовільно відображає реальну картину процесу прямої іонізації атома рубідію лише в окремих енергетичних областях, а саме: в припороговій області це наближення СХ, а при більших енергіях зіткнень це наближення БЗ.

Цитована література

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. *Zapesochny I. P., Aleksakhin I. S.* Ionization of alkali metal atoms by slow electrons // *Sov. Phys. JETP.* – 1969. – **28**. – P. 41–45.
3. *Nygaard K. J.* Electron impact autoionization in heavy alkali metals // *Phys. Rev. A.* – 1975. – **11**. – P. 1475–1478.
4. *Lukomski M., Sutton S., Kedzierski W., Reddish T. J., Bartshat K., Bartlett P. L., Bray I., Stelbovics A. T., McConkey J.* Electron-impact ionization cross sections out of the ground and 6^2P excited states in cesium // *Phys. Rev. A.* – 2006. – **74**. – P. 032708–032713.
5. *Borovik A., Grum-Grzhimailo A., Bartshat K., Zatsarinny O.* Electron impact excitation of the $(3p^5 4s^2)^2P_{3/2,1/2}$ autoionizing states in potassium // *J. Phys. B.* – 2005. – **38**. – P. 1081–1092.
6. *Borovik A., Kupliauskiene A., Zatsarinny O.* Excitation-autoionization cross section of alkali atoms by electron impact // *J. Phys. B.* – 2013. – **45**. – P. 215201–215206.
7. *Borovik A., Roman V., Kupliauskiene A.* The $4p^6$ autoionization cross section of Rb atoms excited by low-energy electron impact // *J. Phys. B.* – 2012. – **45**. – P. 045204–045213.
8. *Боровик О. О., Роман В. І., Купляускієне А. В.* Переріз автоіонізації атомів рубідію при збудженні електронним ударом // *Доп. НАН України.* – 2013. – № 3. – С. 58–64.
9. *Kupliauskiene A., Kerevicius G.* Theoretical study of the $4p^5 nln'l'$ autoionizing states of Rb excited by electron impact // *Phys. Scr.* – 2013. – **88**. – P. 065312–065319.
10. *Gu. M. F.* The flexible atomic code // *Can. J. Phys.* – 2008. – **86**. – P. 675–689.
11. *Kim Y., Migdalek J., Siegel W., Bieron J.* Electron-impact ionization cross section of rubidium // *Phys. Rev. A.* – 1962. – **57**. – P. 246–254.
12. *McGuire E.* Systematics of ns subshell electron ionization cross sections // *J. Phys. B.* – 1997. – **30**. – P. 1563–1587.
13. *Bartlett P., Stelbovics A.* Electron-impact ionization cross sections for elements $Z=1$ to $Z=54$ // *At. Data and Nucl. Data Tabl.* – 2004. – **86** – P. 235–265.
14. *Sansonetti J. E., Martin W. C.* Handbook of Basic Atomic Spectroscopic Data // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* – 2005. – **34**, No 4. – P. 1559 – 2259.

References

1. *Tate J., Smith P.* *Phys. Rev.*, 1934, **46**: 773–776.
2. *Zapesochny I. P., Aleksakhin I. S.* *Sov. Phys. JETP*, 1969, **28**: 41–45.
3. *Nygaard K. J.* *Phys. Rev. A*, 1975, **11**: 1475–1478.
4. *Lukomski M., Sutton S., Kedzierski W., Reddish T. J., Bartshat K., Bartlett P. L., Bray I., Stelbovics A. T., McConkey J.* *Phys. Rev. A*, 2006, **74**: 032708–032713.
5. *Borovik A., Grum-Grzhimailo A., Bartshat K., Zatsarinny O.* *J. Phys. B*, 2005, **38**: 1081–1092.

6. Borovik A., Kupliauskiene A., Zatsarinny O. J. Phys. B, 2013, **45**: 215201–215206.
7. Borovik A., Roman V., Kupliauskiene A. J. Phys. B, 2012, **45**: 045204–045213.
8. Borovik A., Roman V., Kupliauskiene A. Dop. NAN Ukrainy, 2013, No 3: 58–64 (in Ukrainian).
9. Kupliauskiene A., Kerevicius G. Phys. Scr, 2013, **88**: 065312–065319,
10. Gu. M. F. Can. J. Phys., 2008, **86**: 675–689,
11. Kim Y., Migdalek J., Siegel W., Bieron J. Phys. Rev. A, 1962, **57**: 246–254.
12. McGuire E. J. Phys. B, 1997, **30**: 1563–1587.
13. Bartlett P., Stelbovics A. At. Data and Nucl. Data Tabl., 2004, **86**: 235–265.
14. Sansonetti J. E., Martin W. C. J. Phys. Chem. Ref. Data, 2005, **34**, No 4: 1559–2259.

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

Надійшло до редакції 08.04.2015

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

Парциальные сечения ионизации атома рубидия электронным ударом

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

Рассчитаны парциальные сечения электронной ионизации $5s$, $4p^6$, $4s^2$, $3d^{10}$ оболочек атома рубидия в релятивистском приближении Кулона–Борна, искаженных волн и бинарных соударений при энергиях столкновений от порога до 600 эВ. Проведен сравнительный анализ этих данных с экспериментальным сечением автоионизации и полным сечением однократной ионизации атома рубидия. Показано, что каждое из рассмотренных приближений удовлетворительно отражает реальную картину процесса прямой ионизации атома рубидия лишь в отдельных энергетических областях, а именно: в припороговой области — это приближение искаженных волн, а при больших энергиях столкновений — это приближение бинарных соударений.

Ключевые слова: атом, автоионизация, возбуждение, ионизация, сечение.

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

Partial ionization cross-sections of rubidium atom by electron impact

Institute of Electron Physics of the NAS of Ukraine, Uzhgorod

The partial ionization cross-sections of the $5s$, $4p^6$, $4s^2$, $3d^{10}$ shells of a rubidium atom are calculated by using the relativistic distorted-wave, Coulomb-Born and binary-encounter-dipole approximations for the incident electron energies from the threshold up to 600 eV. The comparative analysis of the data with the experimental autoionization cross-section and the total single ionization cross-section of a rubidium atom is performed. Each of the considered approximations reflects satisfactorily the direct ionization of rubidium atom only in the certain energy regions, namely, the distorted-wave approximation at low impact energies, and the binary-encounter-dipole approximation at high impact energies.

Keywords: atom, autoionization, excitation, ionization, cross-section.