



УДК 539.186;188

В. І. Роман, А. В. Купліаускіене, О. О. Боровик, О. І. Зацарінний

Динаміка збудження автоіонізаційних станів атома рубідію і молекули Rb_2 при електрон-атомних зіткненнях

(Представлено академіком НАН України О. Б. Шпеником)

Досліджено електронні автоіонізаційні спектри атома рубідію в діапазоні енергій зіткнень від порога збудження субвалентної $4p^6$ оболонки до 660 еВ. Одержано енергетичні залежності абсолютних перерізів збудження для десяти атомних та молекулярного автоіонізаційних станів. На основі теоретичних розрахунків енергій, перерізів збудження, ймовірностей розпаду станів $4p^5n_1l_1n_2l_2$ здійснено спектроскопічну ідентифікацію спостережуваних ліній.

Енергетичні залежності перерізів збудження (функцій збудження (ФЗ)) атомних станів, якщо вони одержані з прийнятним енергетичним розділенням, містять багату інформацію про процеси утворення і розпаду цих станів. Такі дані, доповнені теоретичним аналізом енергій, перерізів збудження та ймовірностей розпаду, лежать в основі надійної класифікації різного типу спектрів.

Збудження субвалентної $4p^6$ оболонки в атомі рубідію (енергетичний поріг 15,312 еВ [1]) призводить до утворення дублетних та кватретних станів із загальною конфігурацією $4p^5n_1l_1n_2l_2$. Оскільки такі стани розташовані за енергією вище першого потенціалу іонізації атома рубідію $E_{\text{іон}} = 4,177$ еВ [2], їх розпад може відбуватись як в електронному каналі з утворенням іона Rb^+ та автоіонізаційного електрона з енергією $E_{\text{авт}} = E_{\text{зб}} - E_{\text{іон}}$, так і в оптичному каналі на збуджені атомні рівні $4p^6nl$.

Спектроскопічна класифікація станів $4p^5n_1l_1n_2l_2$ має довгу історію — від перших даних з фотопоглинання для найнижчого дублету $(4p^55s^2)^2P_{3/2}$ [1] до вибіркової класифікації найнижчих метастабільних та квазіметастабільних станів з конфігураціями $4p^54d5s$ та $4p^55s5p$ (див. [3, 4] і посилання в них). Спроби здійснити більш широку класифікацію станів $4p^5n_1l_1n_2l_2$ [5–8] наражалися на надзвичайно складну структуру як спектрів фотопоглинання [9], так і електронних ежекційних спектрів [6]. Ці результати показали, зокрема, що для надійної класифікації високоенергетичних станів необхідною умовою є знання їх

© В. І. Роман, А. В. Купліаускіене, О. О. Боровик, О. І. Зацарінний, 2014

динаміки збудження в широкому діапазоні енергій взаємодії. Вже перші дослідження [10] ФЗ для станів $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2,1/2}$, $(4p^5 4d 5s)^4 P_{1/2,3/2,5/2}$ підтвердили сказане. Тому метою даної роботи є детальне дослідження збудження високоенергетичних автоіонізаційних станів (АІС) $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$ в атомі рубідію з подальшою їх спектроскопічною класифікацією.

Експериментальна техніка і методика проведення вимірювань детально описані в наших попередніх роботах [6, 10]. Якщо стисло, електронний спектрометр містив монохроматор первинного електронного пучка і аналізатор енергій електронів, зібрані на базі 127° електростатичних дефлекторів, та джерело пучка нейтральних атомів ефузійного типу. Для зменшення впливу анізотропії кутового розподілу електронів на вимірювані ФЗ електронні спектри вимірювалися під «магічним» кутом спостереження $54,7^\circ$ [11]. Виміри проводилися при енергетичному розділенні аналізатора 0,04 еВ і моноенергетичності первинного електронного пучка $\leq 0,2$ еВ. ФЗ були одержані у вигляді нормованих на струм первинного електронного пучка інтенсивностей ліній в спектрах, виміряних при значеннях енергії зіткнень від порогів збудження до 660 еВ. Отримані відносні значення перерізів збудження АІС були приведені до абсолютної шкали шляхом нормування інтенсивності лінії $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}$ на теоретичне значення перерізу збудження при енергії 16,04 еВ [10]. У випадку молекулярної лінії, крім співвідношення інтенсивностей ліній, враховувалося також співвідношення концентрацій атомів і молекул у пучку [12]. При визначенні перерізу збудження молекулярного стану похибка становила близько 45% для даних, отриманих в припороговій області, і не перевищувала 35% для всіх інших даних. Похибка одержання перерізу збудження атомних АІС становила не більше 35% у всьому дослідженому діапазоні енергій.

На рис. 1 наведено енергетичні залежності перерізів збудження деяких АІС $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$ в атомі рубідію. Перші шість ФЗ мають типовий для кватетів вигляд — максимум поблизу порога збудження і швидке падіння перерізу зі збільшенням енергії зіткнень. Винятком є ФЗ лінії 25, динаміка збудження якої в області енергій зіткнень 50–200 еВ характеризується наявністю деякого збільшення ефективності збудження, що є притаманним для дублетних рівнів. Такий характер поведінки функції відображає можливу присутність ефекту змішування конфігурацій, роль якого у важкому атомі рубідію є дуже значною [7]. Як видно також з рис. 1, припорогове резонансне збудження є домінуючим процесом для розглянутих рівнів і характеризується наявністю максимумів перерізу збудження при енергії близько 20 еВ. Порівняння з раніше одержаними ФЗ нижніх рівнів [10] показало, що ці максимуми відображають ефективне утворення і наступний електронний розпад (резонансів) станів негативних іонів Rb^- . Крім того, наявність структурних особливостей на ФЗ дозволяє вважати, що спостережувані максимуми є суперпозицією кількох близько розташованих резонансів. Подальша поведінка перерізів збудження даних ліній, а саме повільне зменшення перерізу в діапазоні енергій збудження 20–40 еВ, може вказувати на наявність каскадних процесів через радіаційний розпад більш високоенергетичних кватетних рівнів, які, в свою чергу, також мають ефективний резонансний канал збудження [10].

Порівняння наведених на рис. 1 кривих показує, що ФЗ ліній 47, 49, 63 і 64 є схожі за формою. Максимум перерізу досягається при енергіях 100–200 еВ, що відображає дублетний характер відповідних рівнів.

У спектрах електронів [13] поблизу лінії атомного стану $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}$ була виявлена широка лінія при енергії $E = 11,2$ еВ і порогом збудження $15,4 \pm 0,1$ еВ. Аналіз поведінки інтенсивності цієї лінії, а також порівняння з автоіонізаційними спектрами атомів літію [14] показав, що дана лінія може відповідати розпаду неідентифікованого на даний

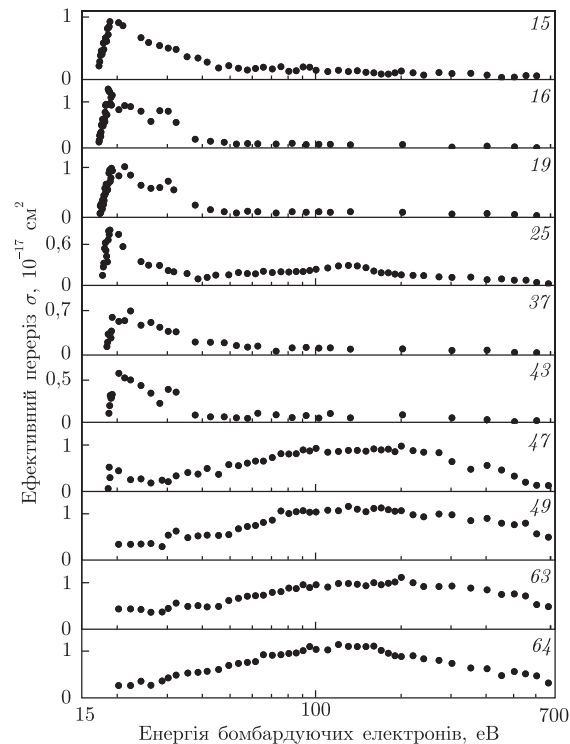


Рис. 1. Енергетичні залежності абсолютних перерізів збудження σ автоіонізаційних $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$ станів атома рубідію (ідентифікація відповідних станів наведена в табл. 1)

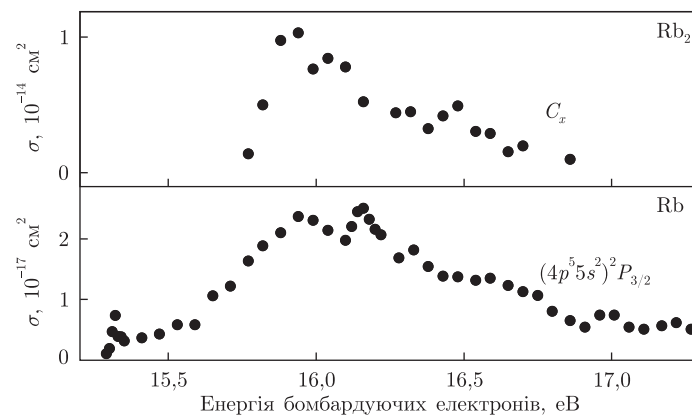


Рис. 2. Енергетичні залежності абсолютних перерізів збудження σ атомного $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}$ і молекулярного C_x автоіонізаційних станів

момент автоіонізаційного стану молекули Rb_2 [13]. Рис. 2 демонструє динаміку збудження цього стану і атомного АІС $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}$. Як видно, динаміка поведінки перерізу збудження молекулярного стану характеризується різким зростанням ефективності збудження у порозі ($\sigma_{\max} = 1,0 \pm 0,3 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2$), зумовленим процесом утворення і розпаду стану негативно-го іона Rb_2^- , і подальшим плавним спадом із збільшенням енергії зіткнень. Порівняння функцій атомного $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}$ та молекулярного станів показує їх подібну поведінку, за винятком енергетичного положення та ширини максимумів.

Аналіз експериментальних функцій збудження атомних АІС, проведений у даній роботі, та аналіз усіх відомих на даний час робіт з ідентифікації $4p^5n_1l_1n_2l_2$ станів разом з результатами теоретичних розрахунків енергій, перерізів збудження та ймовірностей розпаду [7], дозволили вперше здійснити найбільш повну на даний час спектроскопічну класифікацію АІС, розпад яких спостерігався в спектрах ежектованих електронів. Результати проведеної роботи наведені в табл. 1. Згідно з даною ідентифікацією, з 81 спостережуваної лінії

Таблиця 1. Енергії збудження $E_{зб}$ (еВ) та спектроскопічна класифікація ліній, що спостерігаються в спектрах ежектованих електронів атома рубідію. Похибка у визначенні $E_{зб}$ становила $\pm 0,04$ еВ для атомних станів і $\pm 0,1$ еВ — для молекулярного стану C_x

Лінія	$E_{зб}$	Класифікація	Робота	Лінія	$E_{зб}$	Класифікація	Робота
1	15,31	$5s^{22}P_{3/2}$	[1, 5, 10]	41	18,45	$4d(^3D)5s^2D_{3/2}$	[3, 7]
C_x	15,40	$Rb_2^* \rightarrow Rb_2^{+1}\Sigma_g^+$	—	42	18,55	$5s(^3P)6s^2P_{1/2}$	[7]
2	16,16	$5s^{22}P_{1/2}$	[1, 5, 10]	43	18,62	$4d(^3D)5s^2D_{5/2}$	[7]
3	16,64	$5s(^3P)5p^4S_{3/2}$	[4]	44	18,67	$5s(^3P)6s^4P_{5/2}$	[3]
4	16,69	$4d(^3P)5s^4P_{1/2}$	[5, 6, 10]	45	18,73	$5s(^3P)6p^2D_{5/2}$	[7]
5	16,72	$5s(^3P)5p^4D_{7/2}$	[15]	46	18,76	$5s(^3P)6s^4P_{3/2}$	[3]
6	16,78	$4d(^3P)5s^4P_{3/2}$	[5, 6, 10]	47	18,80	$4d(^1P)5s^2P_{1/2}$	[5, 6]
7	16,82	$5s(^3P)5p^4D_{5/2}$	[15]	48	18,87	$5s(^1P)6s^2P_{1/2}$	[3]
8	16,90	$5s(^3P)5p^4P_{5/2}$	[7]	49	18,90	$4d(^1P)5s^2P_{3/2}$	[5, 6]
9	16,93	$5s(^3P)5p^4P_{3/2}$	[7]	50	18,97	$5s(^3P)5d^4P_{3/2}$	[7]
10	16,97	$4d(^3P)5s^4P_{5/2}$	[4, 6]	51	19,02	$5p^{24}D_{5/2}$	[3]
11	17,04	$5s(^1P)5p^2S_{1/2}$	[7]	52	19,07	$5s(^3P)5d^4F_{9/2}$	[15]
12	17,10	—	—	53	19,11	$5s(^3P)5d^2D_{3/2}$	[6]
13	17,13	$4d(^3F)5s^4F_{9/2}$	[5, 15]	54	19,19	$5s(^3P)6s^4P_{1/2}$	[7]
14	17,16	$5s(^3P)5p^4P_{1/2}$	[7]	55	19,22	$5s(^1P)6s^2P_{3/2}$	[5]
15	17,19	$4d(^3F)5s^4F_{7/2}$	[5, 7]	56	19,31	$4d^2(^3P)^2D_{5/2}$	[7]
16	17,22	$4d(^3P)5s^2P_{1/2}$	[5, 6]	57	19,35	$4d^2(^3F)^4D_{3/2}$	[7]
17	17,28	$5s(^3P)5p^2P_{3/2}$	[7]	58	19,39	$5s(^3P)6p^2S_{1/2}$	[6]
18	17,31	$4d(^3F)5s^4F_{5/2}$	[5, 6]	59	19,44	$5s(^3P)5f^2D_{3/2}$	[7]
19	17,36	$4d(^3P)5s^2P_{3/2}$	[5, 6]	60	19,47	$4d(^3F)5p^4D_{1/2}$	[7]
20	17,40	$5s(^3P)5p^2D_{5/2}$	[7]	61	19,56	—	—
21	17,47	$5s(^1P)5p^2D_{3/2}$	[7]	62	19,63	$5s(^3P_1)5d$	[8]
22	17,51	$4d(^3F)5s^4F_{3/2}$	[5, 6]	63	19,66	$5s(^3P)5d^2P_{1/2}$	[6]
23	17,62	$5s(^1P)5p^2P_{1/2}$	[7]	64	19,74	$5s(^1P)6s^2P_{3/2}$	[6]
24	17,66	$4d(^3F)5s^2F_{7/2}$	[5, 6, 7]	65	19,81	$5s(^3P_1)7s$	[8]
25	17,73	$4d(^3F)5s^2F_{5/2}$	[5, 6, 7]	66	19,89	—	—
26	17,79	$5s(^1P)5p^2D_{5/2}$	[5]	67	19,96	$5s(^1P)6d^2P_{3/2}$	[6]
27	17,82	$4d(^1F)5s^2F_{5/2}$	[7]	68	20,01	$4d(^3P_1)6s$	[8]
28	17,87	$5s(^3P)5p^2P_{1/2}$	[7]	69	20,05	$4d(^3P_2)6s$	[8]
29	17,92	$4d(^3D)5s^4D_{7/2}$	[7]	70	20,12	$5s(^3P_2)8s$	[8]
30	17,96	—	—	71	20,17	$5s(^3P_0)5d$	[8]
31	18,02	$4d(^3D)5s^4D_{1/2}$	[5, 7]	72	20,21	$5s(^1P)6p^2S_{1/2}$	[6]
32	18,05	$4d(^3D)5s^4D_{3/2}$	[5, 7]	73	20,25	$5s(^3P_2)7d$	[8]
33	18,10	$4d(^3D)5s^4D_{5/2}$	[5, 7]	74	20,32	$5s(^3P_2)9s$	[8]
34	18,13	—	—	75	20,37	$5s(^3P_2)8d$	[8]
35	18,19	$4d(^3P)5p^4D_{1/2}$	[7]	76	20,44	$5s(^1P_1)5d$	[8]
36	18,24	$4d(^3P)5p^4D_{3/2}$	[7]	77	20,48	$5s(^3P_1)9s$	[8]
37	18,29	$4d(^1F)5s^2F_{7/2}$	[7]	78	20,53	$5s(^3P_1)8d$	[8]
38	18,33	$5s(^3P)6s^2P_{3/2}$	[5]	79	20,58	$4d(^1D)5p^2P_{1/2}$	[6]
39	18,36	$4d(^1D)5s^2D_{3/2}$	[7]	80	20,61	$5s(^1P_1)7s$	[8]
40	18,42	$5s(^3P)5p^2S_{1/2}$	[7]	81	20,67	$4d(^3P_0)5d$	[8]

ідентифіковано з кватетними і дублетними АІС приблизно однакову кількість. Крім найбільш низькоенергетичних станів $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2,1/2}$, всі АІС з енергією збудження до 17,19 еВ є кватетами. Більш високоенергетичні лінії 14–56 за своєю природою відповідають розпаду як кватетних, так і дублетних станів. Переважна кількість вищих рівнів (енергія збудження більше 19,35 еВ) є дублетами. Слід також відзначити, що основна частина станів належить конфігураціям, що зумовлені одноелектронними переходами з основного стану атома. Дана спектроскопічна ідентифікація підтверджує висновки роботи [6], зокрема, що переріз автоіонізації атома рубідію формується переважно за рахунок внеску від розпаду кватетних рівнів у припороговій області і дублетних рівнів при більш високих енергіях зіткнень.

1. Beutler H. Uber Absorptionsspektren aus der Anregung innerer Elektronen // Zs. f. Phys. – 1934. – **91**. – P. 131–142.
2. Sansonetti J. E., Martin W. C. Handbook of basic atomic spectroscopic data // J. Phys. Chem. Ref. Data. – 2005. – **34**, No 4. – P. 1559–2259.
3. Spong J., Kmetec J., Wallace S. et al. Laser spectroscopy of core-excited levels of neutral rubidium // Phys. Rev. Lett. – 1987. – **58**. – P. 2631–2634.
4. Mendelsohn A., Barty C., Sher M. et al. Emission spectra of quasimetastable levels of alkali-metal atoms // Phys. Rev. A. – 1987. – **35**. – P. 2095. – 2101.
5. Mansfield M. W. D. A new interpretation of the Rb I 4p subshell excitation spectrum between 15 and 19 eV // Astrophys. J. – 1978. – **364**. – P. 135–144.
6. 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**, No 4. – P. 045204–045214.
7. Kupliauskiene A., Kerevicius G. Theoretical study of the $4p^5 n l n' l'$ autoionizing states of Rb excited by electron impact // Phys. Scr. – 2013. – **88**. – P. 065312–065319.
8. Baig M., Mahmood M., Akram M., Hormes J. Inner-shell and double-excitation spectrum of rubidium involving 4p and 5s subshells // J. Phys. B. – 1995. – **28**. – P. 1777–1792.
9. Connerade J. The absorption spectrum of Rb I in the vacuum ultraviolet // Astrophys. J. – 1970. – **159**. – P. 695–702.
10. Borovik A., Roman V., Zatsarinny O., Bartschat K. Electron impact excitation of the lowest doublet and quartet core-excited autoionizing states in Rb atoms // J. Phys. B. – 2013. – **46**, No 1. – P. 015203–015209.
11. Berezhko E., Kabachnik N. Theoretical study of inner-shell alignment of atoms in electron impact ionisation: angular distribution and polarisation of x-rays and Auger electrons // J. Phys. B. – 1977. – **10**. – P. 2467–2477.
12. Несмеянов А. Давление пара химических элементов. – Москва: Изд-во АН СССР, 1961. – 396 с.
13. Borovik A., Roman V., Kupliauskiene A. The $4p^6$ core excitation of Rb₂ by low energy electron impact // Abstracts of Contributed Papers. – 2013. – ICPEAC XXVIII. – Lanzhou. China. – Th P41.
14. Borovik A. The core excitation of Li₂ by low energy electron impact // J. Phys. B. – 2008. – **41**. – P. 165205–165207.
15. Роман В. І., Грицько В. В., Боровик О. О. Енергетичні спектри розсіяних електронів на атомах рубідію // Наук. вісник УжНУ. – 2013. – № 34. – С. 139–142.

В. И. Роман, А. В. Куплияускиене, А. А. Боровик, О. И. Зацаринный

**Динамика возбуждения автоионизационных состояний атома
рубидия и молекулы Rb_2 при электрон-атомных столкновениях**

Исследованы электронные автоионизационные спектры атома рубидия в диапазоне энергий столкновений от порога возбуждения субвалентной $4p^6$ оболочки до 660 эВ. Получены энергетические зависимости абсолютных сечений возбуждения для десяти атомных и молекулярного автоионизационных состояний. На основе теоретических расчетов энергий, сечений возбуждения, вероятностей распада состояний $4p^5n_1l_1n_2l_2$ осуществлена спектроскопическая идентификация наблюдаемых линий.

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

**Excitation dynamics of autoionizing states in rubidium atom and
molecule Rb_2 in electron-atom collisions**

The autoionizing electron spectra in rubidium atoms are investigated in an impact energy range from the excitation threshold of the inner $4p^6$ subshell up to 660 eV. The energy dependences of the absolute excitation cross sections for ten atomic and one molecular autoionizing states are measured. Basing on theoretical calculations of the energies, cross-sections, and decay probabilities for the $4p^5n_1l_1n_2l_2$ states, the spectroscopic identification of the observed lines is performed.