

РЕЗОНАНСНАЯ ИОНИЗАЦИЯ АТОМА ГЕЛИЯ
БЫСТРЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИВ. В. Балашов, С. С. Липовецкий, А. В. Павличенков,
А. Н. Полудов и В. С. Сенашенко

Дано единое описание основных характеристик процесса резонансной ионизации гелия электронным ударом — обобщенных сил осцилляторов, углового распределения рассеянных электронов, полных сечений возбуждения автоионизационных состояний, профиля резонансных линий в спектрах рассеянных и эжектируемых электронов, угловой анизотропии Оже-электронов. Результаты расчетов приводятся для трех низших автоионизационных $1P^{(-)}$ -состояний.

Введение

Неупругое рассеяние моноэнергетических пучков быстрых электронов представляет в настоящее время наиболее перспективным методом атомной спектроскопии [1]. Особенно интересно использование этого метода для изучения переходов, в которых меняется состояние двух электронов атома. В первом приближении теории возмущений такой «двойной переход» есть чисто корреляционный эффект. Неупругое рассеяние электронов дает возможность исследовать его в широком диапазоне передаваемого импульса, что может служить жестким критерием соответствующих теоретических моделей.

Простейшая система, на которой можно изучать физику двойных переходов — это атом гелия. Ярким проявлением двойного перехода в гелии является возбуждение его автоионизационных состояний, лежащих между первым и вторым порогами ионизации — в интервале 60.12—65.40 эв. $1P^{(-)}$ -состояния такой природы, отвечающие оптически разрешенным переходам, изучались методом фотопоглощения [2]; им посвящено большое число теоретических работ [3]. Экспериментальное исследование автоионизационных состояний с помощью быстрых электронов только начато.

В ряде работ [4, 5] изучались спектры неупругих потерь при рассеянии вперед электронов с энергией до 500 эв. При этом удалось выделить отдельные резонансные линии, соответствующие возбуждению автоионизационных состояний гелия, а для наиболее сильных, оптически разрешенных переходов определить параметры профиля этих линий. К настоящему времени еще не получено данных об угловом распределении неупруго рассеянных электронов при возбуждении автоионизационных состояний. Можно думать, что такие данные появятся в ближайшее время, поскольку при возбуждении одноэлектронных переходов в гелии измерения углового распределения уже выполнены [6]. Это делает особенно актуальным разработку теории возбуждения автоионизационных состояний гелия электронным ударом и проведение предварительных количественных расчетов.

Другого рода сведения о возбуждении автоионизационных состояний получены путем изучения спектров эжектируемых электронов при бомбардировке гелия быстрыми электронами вплоть до энергии 4 кэВ [7, 8]. При достаточном разрешении уверенно выделяются линии, отвечающие

Оже-переходам из автоионизационных состояний. Характеристики этих линий несут в себе определенную интегральную информацию о вероятности возбуждения автоионизационных состояний, соответствующую всей области допустимых значений передаваемого импульса.

Цель настоящей работы — единое рассмотрение основных вопросов, относящихся к процессу резонансной ионизации гелия электронным ударом, к его первой стадии — возбуждению, и второй — распаду.

Для этого необходимо учесть интерференцию между собой амплитуд прямой и резонансной (через автоионизационное состояние) ионизации. Общая теория такой интерференции дана Фано [9]. Реализуя общий подход Фано применительно к задаче ионизации электронным ударом, мы используем простое диагонализационное приближение для расчета свойств автоионизационных состояний. Как было показано ранее [10], при рассмотрении процессов фотоионизации, в случае гелия оно дает примерно такую же точность приближения к эксперименту, что и метод сильной связи или строгий метод Фано (метод связанных интегральных уравнений).

Основные формулы и приближения

В данной работе все расчеты выполнены в приближении плоских волн для падающего и рассеянного электронов. При энергиях электронов, много больших, чем энергия возбуждения атома, это приближение представляется вполне оправданным. Мы не учитываем также вклады многократных переходов через промежуточные уровни и обменные эффекты, что могло бы оказаться существенным при малых энергиях падающего пучка или при расчете оптически запрещенных переходов.

Основные обозначения

\mathbf{K}_0 и \mathbf{K} , E_0 и E — импульсы и энергии падающего и рассеянного электронов; $\mathbf{Q} = \mathbf{K}_0 - \mathbf{K}$, $\Delta E = E_0 - E$ — передаваемый импульс и передаваемая энергия; $\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — волновая функция основного состояния атома; $\Psi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — волновая функция n -го автоионизационного состояния атома; E_{0n} — его энергия возбуждения;

$$f_{0n}(Q) = \frac{2E_{0n}}{Q^2} \left| \langle \Psi_n | \sum_{i=1}^2 e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} | \Psi_0 \rangle \right|^2 \quad (1)$$

обобщенная сила осциллятора для возбуждения n -го состояния атома; в пределе $Q \rightarrow 0$ функция $f_{0n}(Q)$ переходит в оптическую силу осциллятора

$$(f_{0n})_{\text{opt}} = \lim_{Q \rightarrow 0} f_{0n}(Q); \quad (2)$$

\mathbf{K}' и E' — импульс и энергия эжектируемого электрона; E' связана с E через ионизационный потенциал I : $E_0 = E + E' + I$; $\varphi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})$ — волновая функция эжектируемого электрона; $\varphi_{\mathbf{K}'}^{(1)}(\mathbf{r})$ — парциальная волна с $l=1$ функции $\varphi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})$, интерферирующая с ${}^1P^{(-)}$ -автоионизационными состояниями; $\tilde{\varphi}_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) - \varphi_{\mathbf{K}'}^{(1)}(\mathbf{r})$ — оставшаяся часть функции, не интерферирующая с ${}^1P^{(-)}$ -автоионизационными состояниями;

$$\Phi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{1s}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}_2) + \varphi_{1s}(\mathbf{r}_2) \varphi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}_1)] \quad (3)$$

волновая функция системы $(\text{He}^+ + e^-)$ в непрерывном спектре; $\tilde{\Phi}_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и $\Phi_{\mathbf{K}'}^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ получаются из (3) заменой $\varphi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})$ на $\tilde{\varphi}_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})$ и $\varphi_{\mathbf{K}'}^{(1)}(\mathbf{r})$ соответственно;

$$\left[\frac{d^2 f}{d\Omega_{\mathbf{K}'} dE} \right]_{\text{фон}} = \int d\Omega_{\mathbf{K}'} \frac{2\Delta E}{Q^2} \left| \langle \tilde{\Phi}_{\mathbf{K}'} | \sum_{i=1}^2 e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} | \Psi_0 \rangle \right|^2 \quad (4)$$

«фоновая» составляющая обобщенной дифференциальной силы осциллятора, соответствующая прямой ионизации атома ($l \neq 1$);

$$\left[\frac{d^2 f}{d\Omega_k dE} \right]_{l=1} = \int d\Omega_{K'} \frac{2\Delta E}{Q^2} \left| \langle \Phi_{K'}^{(1)} | \sum_{i=1}^2 e^{iQr_i} | \Psi_0 \rangle \right|^2 \quad (5)$$

составляющая с $l=1$ обобщенной дифференциальной силы осциллятора для прямой ионизации;

$$\frac{d^2 f}{d\Omega_k dE} = \left[\frac{d^2 f}{d\Omega_k dE} \right]_{\text{фон}} + \left[\frac{d^2 f}{d\Omega_k dE} \right]_{l=1} \frac{[\varepsilon + q]^2}{1 + \varepsilon^2} \quad (6)$$

полная обобщенная дифференциальная сила осциллятора вблизи изолированного автоионизационного состояния — формула Фано [9].

В формуле (6) $\varepsilon = \frac{\Delta E - E_{0n}}{\Gamma_n/2}$ — относительное отклонение от резонанса, Γ_n — ширина резонанса; $q(Q)$ — профильный индекс, рассчитываемый обычным образом для оператора $\sum_{i=1}^2 e^{iQr_i}$; в пределе $Q \rightarrow 0$, $q(Q)$ переходит в оптический профильный индекс

$$(q)_{\text{опт.}} = \lim_{Q \rightarrow 0} q(Q); \quad (7)$$

$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega_k dE} = \frac{2a_0^2}{E_{0n}} \frac{d^2 f}{d\Omega_k dE} \frac{\left[1 - \frac{E_{0n}}{E_0} \right]^{1/2}}{Q^2} \quad (8)$$

дифференциальное сечение неупругого рассеяния электрона, проинтегрированное по всем направлениям вылета эжектируемого электрона.

$$\sigma_n(E_0) = \frac{4\pi a_0^2}{E_0 E_{0n}} \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} f_{0n}(Q) \frac{dQ}{Q} \quad (9)$$

полное сечение возбуждения n -го автоионизационного состояния (проинтегрированное по всем углам вылета рассеянного электрона); Q_{\min} и Q_{\max} находятся из кинематики.

Волновые функции автоионизационных состояний $\Psi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ взяты из работы [10], где были получены диагонализацией матрицы 10×10 на базисе двухэлектронных водородоподобных функций в поле с зарядом $Z=2$. Из этой же работы взяты параметры резонансов — их положение и ширины. При вычислении переходов в автоионизационные состояния в качестве волновой функции основного состояния гелия взята шестипараметрическая функция Стюарта и Вебба [11]. При вычислении прямых переходов в непрерывный спектр использовалась более простая волновая функция основного состояния [12], которая с успехом применялась в аналогичных расчетах ранее [13]. В качестве волновой функции выбиваемого электрона взята точная кулоновская функция непрерывного спектра в поле с зарядом $Z=1$.

Более детальное исследование чувствительности обобщенных сил осцилляторов и ряда других характеристик автоионизационных $1P^{(-)}$ -состояний к виду используемых волновых функций дано в работе [14]. Там же приведены и обсуждаются дифференциальные сечения возбуждения этих состояний.

Результаты расчетов и их обсуждение

Мы приводим и обсуждаем результаты расчетов для трех низших автоионизационных $1P^{(-)}$ -состояний гелия. В общепринятой классификации это состояния $2s2p$, (23) — и (23) +, располагающиеся, согласно расчету [10], при энергиях 60.35, 62.79 и 63.71 эв (экспериментальные

значения 60.12, 62.76 и 63.65 эв [2]). В дальнейшем мы будем нумеровать их в порядке возрастания энергий номерами 1, 2, 3. Состояние (23) — очень слабо возбуждается при фотопоглощении и, как будет видно ниже, слабо возбуждается электронами. Однако при рассмотрении относящихся к нему результатов расчетов обнаружили некоторые аномалии. Поэтому с теоретической точки зрения слабые переходы на уровни типа (23) — могут оказаться не менее интересными, чем сильные переходы.

Обобщенные силы осцилляторов

На рис. 1 для трех низших $1P^{(-)}$ -автоионизационных состояний приведены значения $f_{on}(Q)$, $\left[\frac{d^2f}{d\Omega_k dE}\right]_{фон}$ и $\left[\frac{d^2f}{d\Omega_k dE}\right]_{l=1}$. Во всех трех случаях существует довольно широкая область значений передаваемого импульса ($Q^2 \leq 1$), в которой $f_{on}(Q)$ остаются практически постоянными [электронный формфактор (1) пропорционален Q^2]. Ширина этой области определяется, грубо говоря, размерами атома. Как видно из рис. 1, при больших значениях Q^2 для (+)-состояний наступает монотонный спад $f_{on}(Q)$,

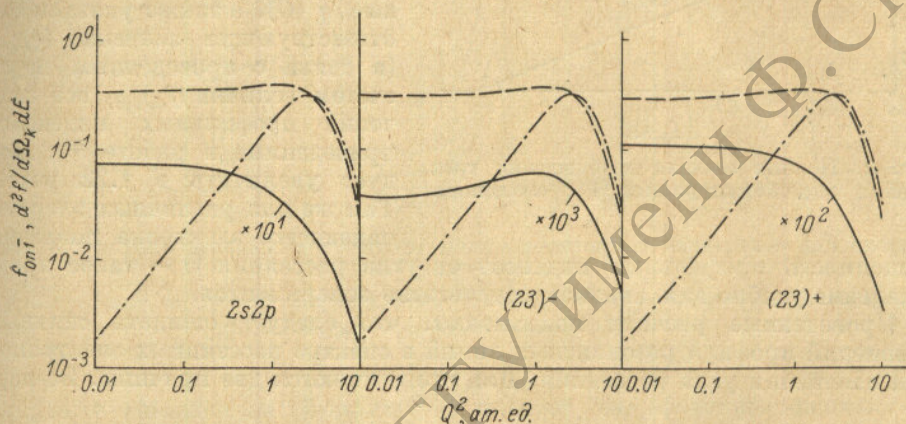


Рис. 1. Обобщенные силы осцилляторов трех низших $1P^{(-)}$ -автоионизационных состояний гелия (сплошные линии), увеличенные в 10^1 , 10^3 , 10^2 раз соответственно; дифференциальные обобщенные силы осцилляторов (в ат. ед.): $\left[\frac{d^2f}{d\Omega_k dE}\right]_{l=1}$ — штриховые линии, $\left[\frac{d^2f}{d\Omega_k dE}\right]_{фон}$ — штрих-пунктирные линии.

а для (—)-уровня в области $1 \leq Q^2 \leq 3$ наблюдается небольшой подъем и затем спад.

Для непосредственного сравнения полученных значений $f_{on}(Q)$ с экспериментом можно было бы обратиться, например, к измерениям Лассетра и Сильвермана [4]. Однако рассеяние электронов с энергией 500 эв на нулевой угол соответствует очень малым значениям передаваемого импульса ($Q < 0.1$); фактически здесь реализуется оптический предел и мы не получаем новой информации о свойствах рассматриваемых состояний.

Показанные на рис. 1 кривые $\left[\frac{d^2f}{d\Omega_k dE}\right]_{l=1}$ и $\left[\frac{d^2f}{d\Omega_k dE}\right]_{фон}$ соответствуют энергиям E' Оже-электронов для рассматриваемых $1P^{(-)}$ -автоионизационных состояний. В пределе малых Q^2 величина $\left[\frac{d^2f}{d\Omega_k dE}\right]_{l=1}$ определяет вероятность прямого фотоэффекта. При вычислении $\left[\frac{d^2f}{d\Omega_k dE}\right]$ проводилась ортогонализация функций начального и конечного состояний [13]; практически к таким же результатам приводит замена в (4) оператора $\sum_{i=1}^2 e^{iQr_i}$ на оператор вида $\sum_{i=1}^2 [e^{iQr_i} - 1]$.

Полные сечения возбуждения автоионизационных состояний

Результаты расчетов для трех низших $1P^{(-)}$ -состояний с функцией основного состояния [11] приведены на рис. 2. Недавно расчет полного сечения возбуждения для низшего $1P^{(-)}$ -состояния провел Вебс [15]. Наши результаты близки к результатам Вебса.

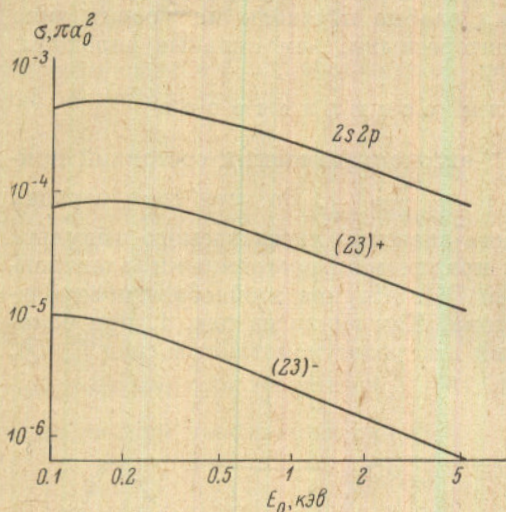


Рис. 2. Полные сечения возбуждения трех низших автоионизационных $1P^{(-)}$ -состояний.

О профиле резонансных линий в энергетическом спектре рассеянных электронов

На рис. 3 приведены рассчитанные в данной работе кривые $q(Q)$, а также указаны соответствующие значения $(q)_{opt.}$ (в связи с проведенным пересчетом величины $(f_{on})_{opt.}$ все значения профильных индексов, приведенные в работе [10], следует увеличить в 1.22 раза). Там же для различных энергий падающего электрона показана

зависимость профильных индексов от угла рассеяния Θ — такое представление удобно для анализа результатов экспериментов.

Проведенные расчеты показывают, что следует ожидать сильных изменений профиля резонансных линий в спектре рассеянных электронов при изменении угла рассеяния. Для этого имеются две причины. Во-пер-

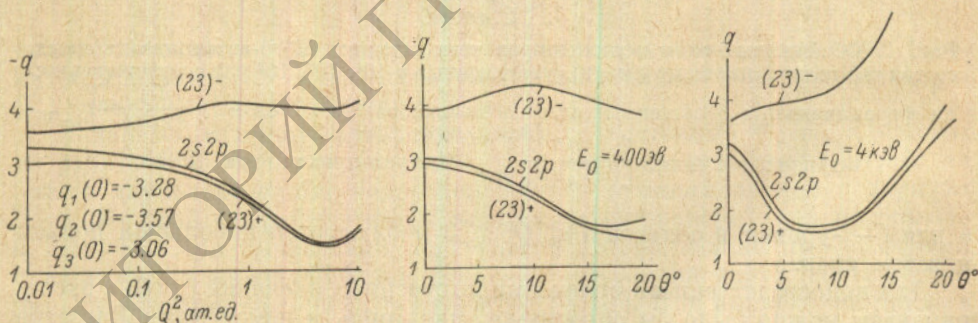


Рис. 3. Профильные индексы $q(Q)$ и $q(\Theta)$ при фиксированных значениях E_0 .

вых, резкое изменение фона в области $Q^2 \leq 1$ (рис. 1). Во-вторых, некоторое изменение соотношения между амплитудой прямой ионизации с $l=1$ и амплитудой возбуждения автоионизационного состояния, которые интерферируют между собой. Этот второй эффект проявляется в зависимости резонансных профильных индексов от передаваемого импульса. Как видно из рис. 3, кривые $q(Q)$ и $q(\Theta)$ для $(-)$ -уровня изменяются в области $Q^2 \leq 10$ немонотонно.

Рис. 4 иллюстрирует предполагаемое изменение профиля основной резонансной линии (соответствующей состоянию $2s2p$) в зависимости от передаваемого импульса, а также от угла рассеяния электрона при различных значениях энергии падающего пучка.

О профиле резонансных линий в спектре эжектируемых электронов

Анализируя с помощью общей формулы Фано резонансные линии, соответствующие Оже-переходам с автоионизационных состояний гелия, Мельхори [7] нашел профильный индекс для низшего $1P^{(-)}$ -состояния: $q = (-1.6) \div (-1.9)$. Полученное значение q практически совпадает с результатом Лассетра и Сильвермана [4] ($q = -1.87$) и близко к тому, что

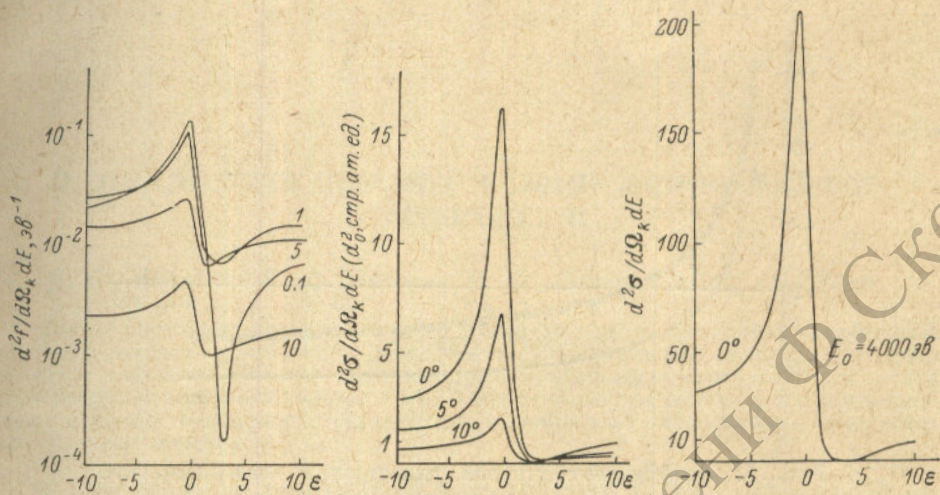


Рис. 4. Профили резонансов в спектре потерь рассеянных электронов для низшего $1P^{(-)}$ -состояния.

Значения Q^2 (в ат. ед.), угла Θ рассеяния и энергии E_0 падающего электронов указаны на кривых. По оси абсцисс отложена величина $E = \frac{\Delta E - E_{01}}{\Gamma_{1/2}}$.

получили Мадден и Кодлинг в опытах по фотопоглощению [2] ($q = -2.8 \pm 0.25$). Приводимые выше результаты нашего расчета объясняют эту близость значений. Эксперимент Мельхорна выполнен с электронами высокой энергии: $E_0 = 4$ кэв. Определяющий вклад в полное сечение возбуждения автоионизационного состояния дает очень узкий конус рассеянных электронов: Q^2 меняется от величины порядка 0.14 до нескольких единиц. Как видно из рис. 3, в основной части этой области профильный индекс $q(Q)$ меняется слабо и мало отличается от своего оптического предела [заметим, что именно благодаря такому приблизительно постоянству $q(Q)$ оказывается возможной обычной расшифровка Оже-линий с помощью формулы Фано].

Угловое распределение Оже-электронов

Вопросы анизотропии углового распределения Оже-электронов (относительно направления падающего пучка), на наш взгляд, еще не получили в физике электронных столкновений должного внимания. Вместе с тем они могут иметь значение в различных плазменных и астрофизических приложениях и интересны с чисто спектроскопической точки зрения. В связи со сказанным мы провели расчет углового распределения Оже-электронов, соответствующих $1P^{(-)}$ -автоионизационным состояниям гелия, для различных энергий падающих электронов. Расчет складывается из двух этапов. На первом этапе проводится тривиальное вычисление углового распределения Оже-электронов относительно направления вектора передаваемого импульса Q . Затем это распределение усредняется по всем направлениям вылета неупруго рассеянного электрона; здесь уже сказывается выбор волновых функций основного и возбужденного состояний.

В нашем случае угловое распределение Оже-электронов относительно направления падающего пучка описывается общей формулой вида

$$W(\widehat{K}_0, K') = 1 + \beta \cos^2(\widehat{K}_0, K'). \quad (10)$$

На рис. 5 приведены значения коэффициента анизотропии $\beta(E_0)$ для нескольких $1P^{(-)}$ -автоионизационных состояний. Как видно из рис. 5, анизотропия может быть довольно большой.

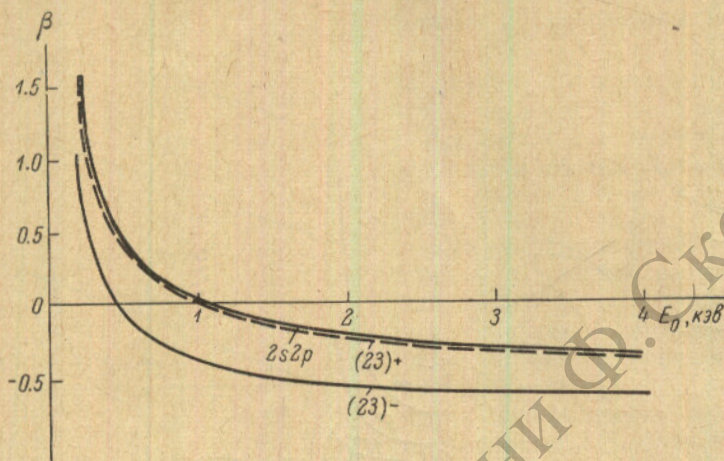


Рис. 5. Коэффициент угловой анизотропии Оже-электронов.

Вошедшие в настоящую работу расчеты были выполнены на ЭВМ Московского университета и ОИЯИ (г. Дубна). Авторы благодарны О. Н. Кутепову, М. Г. Мещерякову и В. Г. Соловьеву за содействие в проведении этих расчетов.

Литература

- [1] L. Kerwin, P. Marmet, J. D. Carrette. High resolution electron beams and their application. Сб. «Case studies in atomic collision physics», Ed. E. W. McDaniel, M. R. C. McDowell, Amsterdam—London, 1969, p. 527.
- [2] R. P. Madden, K. Codling. Phys. Rev. Lett., 10, 516, 1963.
- [3] В. В. Балашов. Сб. лекций I Всес. школы по электронным и атомным столкновениям. ХФТИ 69—8; том I, стр. 111, Харьков, 1969.
- [4] F. N. Lassetre, S. Silverman. J. Chem. Phys., 40, 1265, 1964.
- [5] J. A. Simpson, G. E. Chamberlain, S. R. Mielczarek. Phys. Rev., 139A, 1039, 1965.
- [6] H. Erhardt, K. Wipman. Zs. Physik, 203, 1, 1967.
- [7] W. Mehlhorn. Phys. Lett., 21, 155, 1966.
- [8] H. Suzuki, A. Konishi, M. Yamamoto, K. Wakiya. J. Phys. Soc. Japan, 28, 534, 1970, N. Oda, F. Nishimura, S. Tahira. Phys. Rev. Lett., 24, 42, 1970.
- [9] U. Fano. Phys. Rev., 124, 1868, 1961.
- [10] В. В. Балашов, С. И. Гришанова, И. М. Круглова, В. С. Сенашенко. Опт. и спектр., 28, 859, 1970; Phys. Lett., 27A, 101, 1968.
- [11] A. L. Stewart, J. G. Webb. Proc. Phys. Soc., 82, 532, 1963.
- [12] L. G. Green, M. M. Mulder, M. N. Lewis, J. W. Woll. Phys. Rev., 93, 757, 1964.
- [13] W. J. B. Oldham. Phys. Rev., 186, 52, 1969.
- [14] С. С. Липовецкий, А. В. Павличенков, А. Н. Полюдов, В. С. Сенашенко. Вестн. МГУ, сер. физ., 4, 452, 1971.
- [15] G. Wiebes. Physica, 48, 407, 1970.

Поступило в Редакцию 28 декабря 1970 г.