

ВОЗБУЖДЕНИЕ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ ЩЕЛОЧНЫХ АТОМОВ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

А. К. Лигиньш и Р. К. Петеркоп

В приближении Борна вычислены сечения возбуждения первых двух s , p , d автоионизационных состояний из внешних заполненных s - и p -оболочек при энергиях налетающих электронов от порога до 600 эВ. Волновые функции атома определены полуэмпирическим методом. Для К, Rb и Cs преобладающим является сечение возбуждения d -уровней. Сравнение с другими работами показывает значительную зависимость результатов от выбора атомных волновых функций.

В последние годы значительное внимание привлекают процессы возбуждения электронным ударом электронов внешних заполненных оболочек щелочных атомов, в результате которых образуются автоионизационные состояния. Им посвящен ряд экспериментальных исследований [1-3]. Теоретические расчеты [4, 5] возбуждения n_0p электронов (n_0 — главное квантовое число внешней заполненной оболочки) проведены методом парциальных волн при сравнительно небольших энергиях налетающего электрона (до 4 пороговых единиц). Приближение Борна (без разложения по парциальным волнам), вычисленное в [6] для перехода $n_0p \rightarrow (n_0+1)s$ при энергиях до 70 эВ, значительно превышает соответствующие результаты [4, 5].

В настоящей работе в приближении Борна (без разложения по парциальным волнам) вычислены сечения возбуждения σ ($n_0l_0 \rightarrow nl$) первых двух s , p , d автоионизационных состояний как из оболочки n_0s , так из оболочки n_0p при энергиях от порога возбуждения до 600 эВ. Кроме того, проверен расчет [6] и установлено, что приближение Борна в нем завышено примерно в 24 раза. В настоящей работе используются полуэмпирические атомные волновые функции. Подобный расчет сечений возбуждения $5s$ -электронов атома цезия с использованием нескольких отличных волновых функций ранее проведен в [7]. Возможная роль процессов возбуждения n_0s -электронов обсуждается в [8].

Сечение возбуждения уровня nl из заполненной оболочки n_0l_0 в приближении Борна в атомных единицах, согласно [9], имеет вид

$$\sigma = \frac{4\pi}{E_0} \sum_x a_{l_0 l x} \int_{q_1}^{q_2} \left[\int_0^{\infty} P_{n_0 l_0}(r) (j_x(qr) - \delta_{x0}) P_{nl}(r) dr \right]^2 \frac{dq}{q^3}, \quad (1)$$

$$a_{l_0 l x} = 2(2l_0 + 1)(2l + 1)(2x + 1) \begin{pmatrix} l_0 & l & x \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2. \quad (2)$$

$\begin{pmatrix} a & b & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ — $3j$ -символ. E_0 — энергия налетающего электрона. Если $nl = (n_0+1)s$, то в правой части (2) отсутствует множитель 2, что связано с тем, что тогда в конечном состоянии уже находится один электрон. Пределы интегрирования по переданному импульсу в настоящей работе определялись по формулам

$$q_1 = k_0 - k_1, \quad q_2 = k_0 + k_1, \quad (3)$$

$$k_0^2 = 2E_0, \quad k_1^2 = 2(E_0 + \epsilon_{n_0 l_0} - \epsilon_{nl} + \Delta), \quad (4)$$

ε_{nl} — энергия уровня nl . В формуле (4) введен Δ , учитывающий сдвиг уровней, обусловленный тем, что при возбуждении внутреннего электрона уменьшается экранировка ядра.

В качестве ε_{nl} для возбужденных состояний мы использовали хорошо известные уровни энергии валентного электрона [10]. По энергиям связи электронов заполненных оболочек в литературе имеются различные данные. В настоящей работе ε_{1s} лития и ε_{n_0p} других щелочных атомов были определены сложением энергии ионизации валентного электрона атома с энергией возбуждения иона, для которых использовались данные [10]. Так как тонкая структура в нашем расчете не учитывается, то во всех случаях проводилось усреднение по полному моменту (с учетом статистического веса). Для энергии состояния $1s2s^1S$ иона лития был взят теоретический результат [11], который представляется более точным, чем приведенный в [10]. Энергии ε_{n_0s} для Na, K, Rb, Cs были взяты из [12], где проведен расчет энергий связи с учетом обменных и релятивистских эффектов. Величины ε_{n_0p} из [12] близки к найденным нами. Сдвиг уровня Δ выбирался таким, чтобы энергия перехода $n_0p \rightarrow (n_0+1)S$ (для лития $1s \rightarrow 2s$) была равна экспериментальному значению [10, 13, 14]. Используемые нами значения $\varepsilon_{n_0l_0}$ и Δ приведены в таблице.

Энергии связи заполненных оболочек и сдвиги уровней, эВ

	Li	Na	K	Rb	Cs
$-\varepsilon_{n_0p}$	—	38.14	24.66	21.16	17.86
$-\varepsilon_{n_0s}$	64.88	71.85	45.56	40.68	34.05
Δ	3.18	2.18	1.52	1.39	1.25

Радиальные волновые функции находились как собственные функции уравнения

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2V(r) + 2\varepsilon_{nl} \right] P_{nl}(r) = 0. \quad (5)$$

Для потенциала использовалось аналитическое выражение [15]

$$V(r) = -\frac{1}{r} \left\{ \frac{Z-1}{H[\exp(r/d)-1]+1} + 1 \right\}, \quad (6)$$

где Z — атомный номер. В [15] приведены значения параметра d для $2 \leq Z \leq 103$, которые обеспечивают аппроксимацию хартри-фоковского потенциала, если параметр H определяется по формуле

$$H = d(Z-1)^{0.4}. \quad (7)$$

В настоящей работе параметр d для каждого уровня nl выбирался таким, чтобы собственное значение совпало с используемой нами энергией ε_{nl} (в расчетах волновых функций сдвиг уровней не учитывался). В то же время для параметра H сохранялись те значения, которые по формуле (7) соответствуют приведенным в [15] значениям параметра d . Такое изменение потенциала отвечает введению масштабного параметра [9] и обеспечивает правильную энергию при сравнительно небольшом отличии от данных [15].

Расчет волновых функций и сечений возбуждения проводился численным интегрированием на ЭВМ по методике, изложенной в [7].

Вычисленные сечения приведены на рисунках. Энергия налетающего электрона дана в логарифмическом масштабе. Наибольшие сечения приведены уменьшенными в 10 раз. Для тяжелых щелочных атомов наибольшим является сечение возбуждения уровня n_0d , которое даже на порядок превышает остальные сечения. Большая величина этих сечений объясняется свойствами волновых функций d -состояний, которые заметно пере-

крываются с волновыми функциями состояний n_0s и n_0p . Для лития и натрия, где отсутствует уровень n_0d , сечения возбуждения d -уровней меньше, чем $0.001 \pi a_0^2$. Сечения растут с уменьшением энергий связи. Наибольшие сечения имеют цезий и рубидий. Следует подчеркнуть, что энергетическая зависимость сечений не имеет резонансного характера.

Сечения возбуждения из оболочки n_0s на порядок меньше сечений возбуждения из оболочки n_0p . Это связано с большей энергией связи уровня n_0s , а также с тем, что s -электронов в три раза меньше, чем p -электронов.

Сечения возбуждения внутренних электронов существенно меньше сечений возбуждения валентного электрона. Для сравнения отметим, что σ ($6s \rightarrow 6p$) цезия в приближении Борна в максимуме достигает $250 \pi a_0^2$.

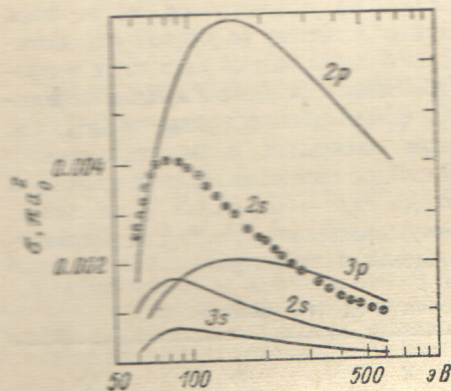


Рис. 1. Сечения возбуждения автоионизационных состояний Li (1s).

В скобках после названия элемента указано начальное состояние возбуждаемого электрона, а у кривых — конечное состояние. Сечения уровней, отмеченных звездочкой, уменьшены в 10 раз. Пунктиром обозначены сечения, вычисленные использованием безузловых атомных волновых функций.

Пунктиром на рисунках показаны сечения, вычисленные с использованием безузловых атомных волновых функций [16, 17]. Для $s-s$ -переходов сечение при этом увеличивается в 2—4 раза, для $p-s$ -переходов различие меньше. Безузловые функции были использованы также в работе [6]. В нашем расчете используются несколько другие энергии перехода, так как в [6] было взято наименьшее значение, а у нас — ус-

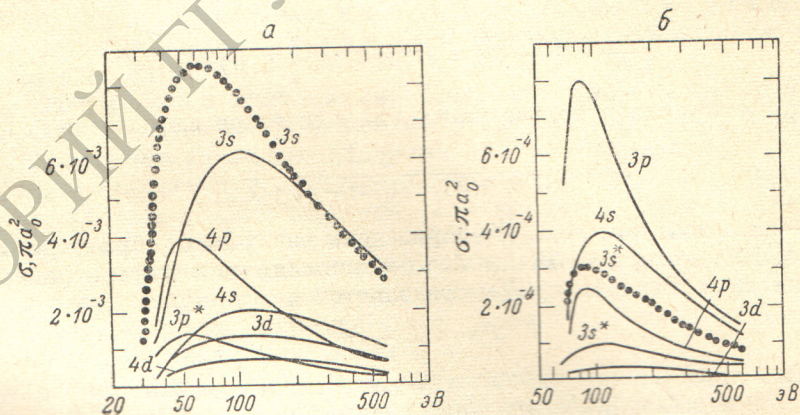


Рис. 2. То же для Na (2p) (a) и Na (2s) (б).

редненное, но это влияет несущественно. Точное повторение расчетов [6] показало, что они завышены примерно в 24 раза.

Результаты настоящей работы заметно меньше результатов [4, 5]. Например, сечения возбуждения уровней $6s$, $6p$ и $5d$ цезия из уровня $5p$ в [4, 5] достигают 0.35 , 1.5 и $10 \pi a_0^2$ соответственно, а в настоящей работе — 0.17 , 0.2 и $3.5 \pi a_0^2$. Причиной различия результатов может быть то, что в [4, 5] использованы другие атомные волновые функции, вычисленные для внешних оболочек в приближении Хартри, а для внутренних — в приближениях Хартри—Фока или Германа—Скиллмана. Настоящие результаты для σ ($5s \rightarrow nl$) цезия меньше также сечений, полученных в [7], что связано с тем, что в [7] использована меньшая энергия связи

($\epsilon_{5s} = -28.14$ эВ), а волновые функции определены другим полуэмпирическим методом.

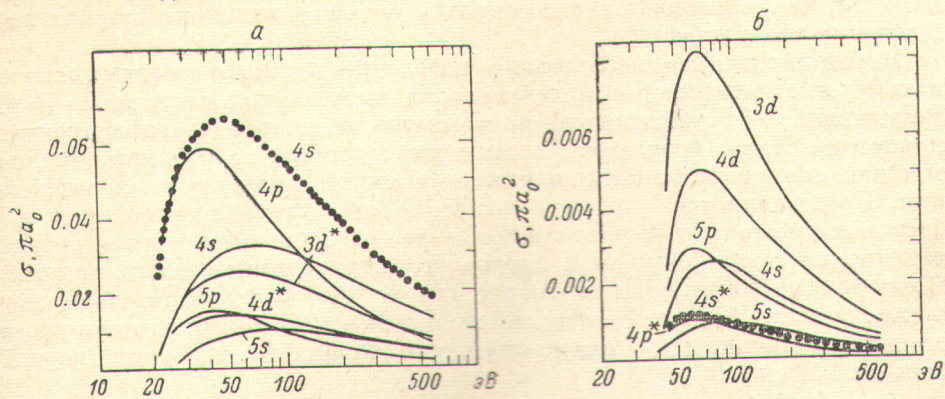


Рис. 3. То же для К (3p) (а) и К (3s) (б).

Чувствительность результатов к выбору атомных волновых функций обуславливается тем, что волновые функции заполненной оболочки

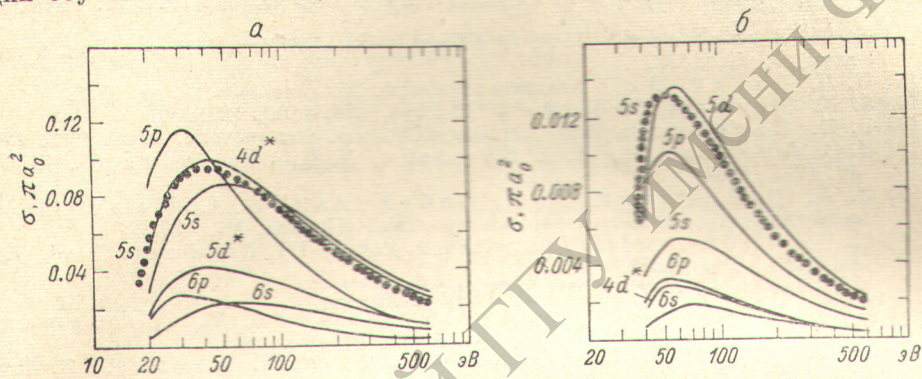


Рис. 4. То же для Rb (4p) (а) и Rb (4s) (б).

и возбужденного состояния имеют малую область перекрывания, которая может относительно сильно изменяться при сравнительно малом изме-

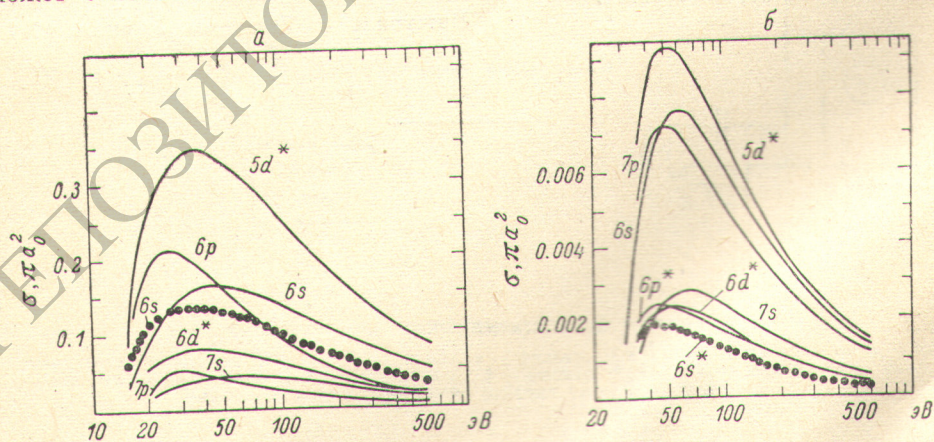


Рис. 5. То же для Cs (5p) (а) и Cs (5s) (б).

нению волновых функций. Для иллюстрации приведем расположения главных максимумов полуэмпирических волновых функций атома цезия. Для состояний 5s, 5p, 6s, 6p, 5d соответственно $r_{\max} = 1.5, 1.7, 4.7, 6.5,$

3.8. Для начальных и конечных состояний они значительно отличаются. Наиболее близким к начальным значениям является максимум состояния $5d$, чем объясняется относительно большая величина сечения возбуждения этого уровня.

Экспериментально исследовано поведение полного сечения ионизации [1] и относительные интенсивности вылетающих электронов [2, 3]. Результаты [2, 3] убедительно показывают наличие автоионизационных процессов. Наши результаты с ними непосредственно сравнить трудно, так как для многих экспериментальных линий отсутствует классификация. Представляется, что, согласно [2, 3], относительно интенсивно возбуждается не только $5d$ -уровень цезия (что согласуется с нашими результатами), но также $3d$ -уровень натрия (что отличается от наших данных). Вычисленные нами сечения возрастают и убывают сравнительно медленно. Поэтому основной вклад они вносят не в средний максимум полного сечения ионизации [1], а в максимум, расположенный в области энергий, больших 20 эВ.

Литература

- [1] K. J. Nygaard. *Phys. Rev.*, **A11**, 1475, 1975.
- [2] K. J. Ross, W. R. Newell, T. W. Ottley, S. H. Al-Shamma. *J. Phys.*, **B8**, L 113, 1975.
- [3] K. J. Ross, T. W. Ottley, V. Рејсеv, D. Rassi. *J. Phys.*, **B9**, 3237, 1976.
- [4] А. К. Лиепиньш, Л. Л. Рабик. Изв. АН ЛатвССР, сер. физ. и техн. наук, **6**, 42, 1972.
- [5] Л. Л. Рабик. В сб.: Атомные процессы, 25. «Зинатне», Рига, 1975.
- [6] S. N. Tiwary, D. K. Rai. *J. Phys.*, **B8**, 1109, 1975.
- [7] Р. К. Петеркоп. Изв. АН ЛатвССР, сер. физ. и техн. наук, **1**, 3, 1976.
- [8] И. С. Алексахин, В. С. Вукстич, И. П. Запесочный. ЖЭТФ **66**, 1973, 1974.
- [9] Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков. Сечения возбуждения атомов и ионов электронами. «Наука», М., 1973.
- [10] Ch. E. Moore. *Atomic Energy Levels*, vol. I—III. Nat. Bureau Stand., Washington, 1949—1958.
- [11] C. L. Pekeris. *Phys. Rev.*, **126**, 143, 1962.
- [12] K. N. Huang, M. Aoyagi, M. H. Chen, B. Crasemann, H. Mark. *At. Data Nucl. Data Tables*, **18**, 243, 1976.
- [13] H. W. Wolff, K. Radler, B. Sonntag, R. Haensel. *Z. Phys.*, **257**, 353, 1972.
- [14] D. J. Pegg, H. H. Haselton, R. S. Thoe, P. M. Griffin, M. D. Brown, I. A. Sellin. *Phys. Rev.*, **A12**, 1330, 1975.
- [15] A. E. S. Green, D. L. Sellin, A. S. Zachor. *Phys. Rev.*, **184**, 1, 1969.
- [16] E. Clementi, D. L. Raimondi. *J. Chem. Phys.*, **38**, 2686, 1963.
- [17] E. Clementi, D. L. Raimondi, W. P. Reinhardt. *J. Chem. Phys.*, **47**, 1300, 1967.

Поступило в Редакцию 5 июля 1977 г.