

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ЕЛЕКТРОННОЇ ФІЗИКИ**

На правах рукопису



Роман Вікторія Іванівна

УДК 539.184;539.186

**АВТОІОНІЗАЦІЙНІ ТА РЕЗОНАНСНІ ЯВИЩА
ПРИ ЕЛЕКТРОННОМУ ЗБУДЖЕННІ АТОМА РУБІДІЮ**

спеціальність 01.04.04 – фізична електроніка

Д и с е р т а ц і я на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Науковий керівник:

Боровик Олександр Олександрович

доктор фіз.-мат. наук,
старший науковий співробітник

Ужгород 2015

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ.....	4
ВСТУП.....	5
1. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА УСТАНОВКА ТА МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ ЕЛЕКТРОНІВ.....	17
1.1. Методичні аспекти дослідження явища автоіонізації та загальна характеристика установки.....	17
1.2. Електронний спектрометр.....	21
1.2.1. Монохроматор первинного електронного пучка.....	23
1.2.2. Джерело атомного пучка.....	27
1.2.3. Аналізатор енергій розсіяних та ежектованих електронів.....	29
1.2.4. Системи електроживлення та детектування корисного сигналу.....	30
1.3. Методика вимірів та обробка одержаних даних.....	32
Висновки до розділу 1.....	40
2. ЕНЕРГЕТИЧНІ СПЕКТРИ РОЗСІЯНИХ ТА ЕЖЕКТОВАНИХ ЕЛЕКТРОНІВ АТОМА РУБІДІЮ.....	42
2.1. Енергетична структура спектрів.....	42
2.2. Динаміка збудження ліній в енергетичних спектрах ежектованих електронів.....	47
2.3. Спектроскопічна ідентифікація ліній в енергетичних спектрах розсіяних та ежектованих електронів атома рубідію.....	51
Висновки до розділу 2.....	62
3. ЕФЕКТИВНІ ПЕРЕРІЗИ ЕЛЕКТРОННОГО ЗБУДЖЕННЯ АВТОІОНІЗАЦІЙНИХ СТАНІВ АТОМА РУБІДІЮ.....	63
3.1. Основні визначення та методи теоретичного аналізу.....	63
3.2. Функції електронного збудження автоіонізаційних станів	67
3.2.1. Загальна характеристика функцій збудження та роль каскадних процесів заселення рівнів.....	68

3.2.2. Резонанси в перерізах збудження автоіонізаційних станів...	69
3.3. Електронне збудження молекули Rb_2	79
Висновки до розділу 3.....	80
4. ЕФЕКТ ВЗАЄМОДІЇ ПІСЛЯ ЗІТКНЕННЯ ПРИ ЗБУДЖЕННІ $4p^6$ ОБОЛОНКИ АТОМА РУБІДІЮ.....	82
4.1. Основні визначення та методика досліджень.....	82
4.2. Ефект взаємодії після зіткнення в енергетичних спектрах ежектованих електронів.....	87
4.3. Загальні риси і відмінності перебігу ефекту взаємодії після зіткнення в атомі рубідію та в інших лужних металах.....	89
Висновки до розділу 4.....	93
5. АВТОІОНІЗАЦІЯ ТА ІОНІЗАЦІЯ АТОМА РУБІДІЮ.....	94
5.1. Методика досліджень перерізу автоіонізації.....	95
5.2. Переріз автоіонізації атома рубідію.....	96
5.3. Повний переріз однократної іонізації атома рубідію електронним ударом.....	99
5.3.1. Теоретичні методи розрахунку перерізів автоіонізації та іонізації атомів електронним ударом.....	100
5.3.2. Перерізи прямої іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок.....	104
5.3.3. Повний переріз прямої іонізації атома рубідію: експеримент і теорія.....	108
5.3.4. Експериментальний та теоретичний перерізи автоіонізації атома рубідію.....	111
Висновки до розділу 5.....	114
ВИСНОВКИ.....	116
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	118

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

AIC – автоіонізаційний стан;
BAH – вольт-амперна характеристика;
BEP – вторинний електронний помножувач;
BK – наближення взаємодії конфігурацій;
BПЗ – взаємодія після зіткнення;
BУФ – вакуумний ультрафіолетовий;
ДП – диференціальний переріз;
ЕОМ – електронно-обчислювальна машина;
ЕПЗ – ефективний переріз збудження;
ЕФ-Л – емпірична формула Лотца;
ІП – іонізаційний потенціал;
К-БЗ – наближення бінарних зіткнень (програмний пакет Кована);
К-СХ – наближення спотворених хвиль (програмний пакет Кована);
КТ-Г – класична теорія Грізінського;
ПШПВ – повна ширина на половині висоти;
ПХБ – плоскохвильове наближення Борна;
РБЗ – наближення бінарних зіткнень з включенням релятивістських поправок;
РБЗ-БК – наближення бінарних зіткнень з включенням релятивістських та кореляційних поправок;
РКБ – наближення Кулон-Борна з включенням релятивістських поправок;
РСХ – наближення спотворених хвиль з включенням релятивістських поправок;
РСХ-БК – наближення спотворених хвиль з включенням релятивістських та кореляційних поправок;
СЗ – наближення сильного зв'язку;
ФЗ – функція збудження;
FAC – програмний пакет Flexible Atomic Code;
LANL – програмний пакет (Los Alamos National Laboratory) Atomic Physics Code Package.

ВСТУП

Актуальність роботи. Стани атома, які утворюються у результаті збудження двох і більше електронів валентної оболонки або одного електрона субвалентної оболонки, як правило, енергетично розташовані вище його першого потенціалу іонізації. Залежно від електронної конфігурації такого “надзбудженого” стану, значень його повного моменту та мультиплетності, атомна система має два канали дезбудження (розпаду): електронний – з утворенням іона і вільного (ежектованого) електрона та радіаційний – з випромінюванням фотона:

$$A + e_n \rightarrow A^{**} + e_p \quad (1)$$

$$\left[\begin{array}{l} \rightarrow A^{*+} + e_{eж} \end{array} \right. \quad (2)$$

$$\left[\begin{array}{l} \rightarrow A^* + h\nu \end{array} \right. \quad (3)$$

Вперше електронний канал дезбудження (2) спостерігав П’єр Оже ще у 1923 році у дослідженнях іонізації рентгенівським випромінюванням [1]. Пізніше це явище він назвав *автоіонізацією* (“самоіонізацією”) [2]. Існування *автоіонізаційних* станів (AIC) атома експериментально було виявлено як відсутність певних ліній в оптичних спектрах нейтральних атомів при їх двоелектронному збудженні з основного стану [3]. Теоретичний аналіз [4] цих експериментальних результатів показав, що процес автоіонізації необхідно трактувати як взаємодію дискретних станів збудженого атома, що розташовані вище потенціалу іонізації, зі станами неперервного спектра. У термінах схеми *L-S* зв’язку [5] це означає, що електронний розпад цих AIC має місце лише при виконанні певного співвідношення між векторними моментами *S, L, J* початкового (збудженого) атомного стану та кінцевого стану системи “утворений іон – ежектований електрон”. Зокрема, для “кулонівської” автоіонізації, що відбувається внаслідок прямої електростатичної взаємодії в системі “збуджений електрон – атомний залишок”, має виконуватися співвідношення $\Delta J = \Delta L = \Delta S = 0$ [6]. Час життя відповідних AIC становить 10^{-15} - 10^{-13} с.

Наявність більш слабкої взаємодії (наприклад, спин-орбітальної та спин-спінової) приводить до збільшення часу життя АІС до 10^{-10} - 10^{-8} с і, відповідно, до збільшення ймовірності радіаційного каналу розпаду. Такі стани одержали назву *квазіметастабільних* [7] і їх характерною ознакою є наявність двох конкуруючих каналів розпаду (2) та (3), що дозволяє спостерігати їх як в енергетичних спектрах ежектованих електронів, так і в оптичних спектрах випромінювання. Зазначимо, що у радіаційному каналі розпаду (3) слід розрізняти два типи переходів – на низькоенергетичні АІС (т. зв. міжрівневі або каскадні переходи) та – у звичайні збуджені стани атома, які розташовані нижче його потенціалу іонізації. У першому випадку спектральний діапазон випромінювання лежить в інфрачервоній та видимій областях спектра, у другому випадку – у ВУФ та довгохвильовій рентгенівській областях.

У кожній автоіонізаційній конфігурації існують також енергетичні стани з максимальними значеннями повного моменту J та мультиплетності ξ , для яких як автоіонізаційний (2), так і радіаційний (3) канали розпаду є забороненими [8]. Час життя таких *метастабільних* станів становить більше 10^{-6} с.

Розглянуті вище процеси (1)-(3) утворення та розпаду АІС супроводжуються низкою інших атомних процесів. У припороговій області енергій (1-2 еВ вище порогу збудження стану) це – утворення станів негативних іонів (резонансів) [9] та ефект взаємодії після зіткнення [10]. За більш високих енергій починає проявлятися каскадне заселення рівнів. Дослідження цих процесів для поглиблення уявлень про внутрішньоатомні процеси зумовлює *фундаментальне значення* таких досліджень.

Резонанси негативних іонів проявляються у вигляді вузьких (≈ 0.1 еВ) максимумів у перерізах збудження атомних АІС, для виявлення яких енергетична роздільна здатність вимірів має бути того ж порядку величини або кращою. Це вимагає використання суттєво монохроматизованого за енер-

гією електронного пучка для дослідження збудження атомів в області енергії зіткнень (те саме, що “енергія взаємодії”, “енергія електрона, що налітає”, “енергія первинних електронів”), близької до порогових.

Згідно з реакціями (1)-(2), внаслідок припорогового збудження і наступного розпаду АІС, виникають два електрони, один з яких – повільний розсіяний e_p , а другий – “швидкий” ежектований e_{ej} . Ефект обміну енергією внаслідок кулонівської взаємодії цих електронів у полі позитивного іона A^+ відомий як *ефект взаємодії після зіткнення (ВПЗ)* [10, 11].

Автоіонізація, за своєю суттю, є непрямим процесом іонізації, і, тому, може впливати на перебіг, енергетичний баланс та зарядовий розподіл компонент різних типів плазмових середовищ [12, 13]. Для кількісного опису параметрів цих середовищ необхідні дані з перерізів збудження та каналів розпаду АІС, що визначає важливе **прикладне значення** досліджень автоіонізації.

Атоми лужних елементів мають найпростішу структуру зовнішніх електронних оболонок, яка складається з одного валентного електрона та шести електронів субвалентної оболонки. Відносно низькі температури випаровування [14], висока адгезія (до 100%) парів практично до всіх металічних поверхонь [15], низьке значення енергії зв’язку зовнішніх електронних оболонок і, відповідно, високі ефективні перерізи електронного збудження [16] та іонізації [17] роблять їх достатньо “зручними” об’єктами для експериментальних досліджень. Зауважимо, що проста будова зовнішніх електронних оболонок робить атоми лужних металів привабливими об’єктами також і для теоретичного моделювання процесів збудження та іонізації [18-20].

На початок даної роботи для атомів лужних металів були проведені комплексні експериментально-теоретичні дослідження електронного збудження субвалентних оболонок, зокрема $1s^2$ в атомі літію [21, 22] та np^6 в атомах натрію ($n=2$) [23, 24, 25], калію ($n=3$) [26, 27, 28] та цезію ($n=5$) [25,

29]. У цих роботах були досліджені енергетичні спектри ежектованих електронів у широкому діапазоні енергій зіткнень, здійснено ідентифікацію спостережуваних ліній, одержано функції збудження (ФЗ) рівнів та абсолютні значення перерізів автоіонізації. Атом рубідію залишався єдиним лужним металом, для якого як експериментальні, так і теоретичні, дані з дослідження автоіонізації були нечисленними і мали оглядовий характер.

Хімічний елемент рубідій (Rb) відкрили німецькі вчені Роберт Бунзен та Густав Кірхгофф спектроскопічним методом у 1861 році, а свою назву він отримав за кольором характерних для його спектра червоних ліній (від лат. *Rubidus* – червоний, темно-червоний) [30]. Електронна конфігурація оболонок атома рубідію має вигляд $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^1$ з іонізаційним потенціалом (ІП) валентної оболонки 4.177 еВ [31].

Результатом збудження субвалентної $4p^6$ оболонки (поріг $E_{зб}$ становить 15.312 еВ [32]) є утворення дублетних і кватретних станів із загальною конфігурацією $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$, розпад яких відбувається згідно з реакціями (2) і (3). Наявність значного енергетичного проміжку ($\Delta E = 11.14$ еВ) між першим потенціалом іонізації і порогом збудження найнижчого АІС пов'язано з суттєвою різницею в енергіях зв'язку валентної та субвалентної оболонок. Якщо АІС розташовані вище від іонних рівнів $4p^5 nl$ (20.71 еВ [31]), для них відкривається додатковий канал електронного розпаду з утворенням збудженого іона A^{+*} . Аналіз результатів зі збудження резонансних ліній однозарядних іонів рубідію [33] показує, що каскадний внесок в переріз збудження іонних ліній має місце, але за величиною є значно меншим за ефективність прямого процесу. Таким чином, це дає підставу вважати, що електронний розпад атомних АІС, які енергетично розташовані нижче іонних рівнів $4p^5 nl$, буде основним процесом при формуванні енергетичних спектрів ежектованих електронів атома рубідію.

Збудження $4p^6$ оболонки атома рубідію вперше спостерігалось у спектрах фотопоглинання [32], де було виявлено 39 ліній, а пізніше, із удосконаленням техніки експерименту [34], – вже 180 ліній. Ці дані були використані при аналізі результатів досліджень [35, 36], що були єдиними даними до початку нашої роботи, де наведено енергетичні спектри саме при електронному збудженні субвалентної $4p^6$ оболонки атома рубідію. У цих роботах дослідження спектрів ежектованих електронів було здійснено тільки для трьох значень енергій зіткнень – 27, 400 і 500 еВ, де в енергетичному діапазоні енергій збудження 15.31 - 20.67 еВ виявлено 66 ліній. При спробі провести ідентифікацію спостережуваних ліній як у спектрах фотопоглинання, так і у спектрах ежектованих електронів виникла суттєва проблема – відсутність надійних теоретичних розрахунків параметрів збудження та розпаду $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$ АІС. Роботи з ідентифікації АІС в атомі рубідію [37-40] виявили існування суттєвих розбіжностей навіть для найбільш низькоенергетичних станів. Тому із 66 ліній, що спостерігалися в спектрах ежектованих електронів [35, 36], і 180, які спостерігались при фотопоглинанні в роботі [34], остаточна ідентифікація була здійснена тільки для 10 АІС атома рубідію [31].

Попередні експериментально-теоретичні дослідження припорогового збудження найбільш низькоенергетичних АІС $np^5(n+1)s^2$ в атомах натрію ($n=2$) [24] та калію ($n=3$) [27] виявили домінуючу роль резонансів негативних іонів у прямому та каскадному збудженні цих рівнів електронним ударом. Для рубідію, який є більш складною атомною системою, резонансні процеси повинні проявлятися ще більш інтенсивно внаслідок значно більшого впливу кореляційних та релятивістських ефектів [41]. Експериментальні дослідження ФЗ метастабільних [8] та квазіметастабільних АІС [17], а також розраховані ФЗ найнижчих дублетних АІС [20] атома рубідію, також підтверджують дане припущення.

Експериментальне дослідження електронної однократної іонізації атомів лужних металів [42-48], а також теоретичний аналіз [49-54] показали, що електронний розпад АІС суттєво впливає на характер поведінки енергетичної залежності повного перерізу однократної іонізації і веде до істотного збільшення його абсолютного значення у важких атомах калію, рубідію та цезію [42-45]. Однак визначити абсолютний внесок такого непрямого процесу (переріз автоіонізації) у повний переріз однократної іонізації атомів у традиційних дослідженнях іонізації [42-48] практично неможливо, оскільки результатом обох процесів є утворення вільного електрона та однозарядного іона, які в цих експериментах неможливо розрізнити.

Щодо теоретичних досліджень процесу іонізації [49-54] та електронного збудження [51, 52] атома рубідію, то всі ці дані суттєво відрізняються між собою як за формою, так і за абсолютною величиною перерізів. Удосконалення теоретичного опису цих процесів може бути стимульоване в першу чергу наявністю експериментальних даних з перерізу автоіонізації та прямої іонізації, які до цього часу для атома рубідію були відсутні. У роботах [55-57] вперше вдалося експериментально визначити переріз автоіонізації і проаналізувати роль окремих атомних конфігурацій у його формуванні для атомів літію, калію та цезію, відповідно. Результати цих досліджень показали, що відносний внесок у повний переріз однократної іонізації для цих атомів становить 2, 26 та 39%, відповідно. Тому слід очікувати, що в атомі рубідію, як у атомі важкого лужного металу, цей внесок також має бути суттєвим.

Підсумовуючи усе наведене, можна зробити висновок, що на початок даних досліджень для атома рубідію були відсутні систематичні дані зі спектроскопічної ідентифікації АІС, абсолютних перерізів їх збудження, а також перерізу автоіонізації. Повністю були відсутні дослідження у припороговій області енергій зіткнень, де найбільш ефективно проявляються процеси резонансного збудження та ефект ВПЗ. Викладені обставини зумовлюють **актуальність** теми дослідження і обґрунтування її вибору.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Робота виконувалася у відділі електронних процесів Інституту електронної фізики НАН України. Дані дослідження були пов'язані з основними науковими напрямками діяльності інституту і виконувалися у рамках трьох науково-дослідницьких тем, затверджених розпорядженням Бюро відділення фізики і астрономії НАН України:

1. “Експериментальне та теоретичне дослідження складних атомів та молекул при збудженні електронним ударом” – 2009-2010 рр., № Держреєстрації 0109U005602;
2. “Процеси взаємодії моноенергетичних електронів з багатоелектронними атомними системами” – 2009-2013 рр., № Держреєстрації 0109U001499;
3. “Фізичні процеси та явища при взаємодії електронів і фотонів з речовиною в газовому та конденсованому станах” – 2012-2016 рр., № Держреєстрації 0112U002079.

Мета і завдання дослідження. Мета роботи полягала в отриманні даних про процеси, що мають місце при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію електронами з енергією 15-600 еВ.

Для досягнення поставленої мети у роботі необхідно було вирішити такі ***техніко-конструкторські та наукові завдання:***

1. Здійснити модернізацію вакуумної системи експериментальної установки для поліпшення стабільності параметрів вимірів. Розробити та впровадити методику роботи з хімічно активним металом рубідієм. Розробити конструкцію та виготовити вихідну електронно-оптичну систему монохроматора первинного електронного пучка для роботи у широкому діапазоні енергій 15-600 еВ.

2. Провести виміри енергетичних спектрів розсіяних та ежектованих електронів при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію та дослідити динаміку збудження спектрів ежектованих електронів в енергетичному діапазоні енергій

зіткнень 15-600 еВ. Здійснити спектроскопічну ідентифікацію спостережуваних ліній у спектрах розсіяних та ежектованих електронів.

3. Одержати енергетичні залежності ефективних перерізів електронного збудження АІС у діапазоні енергій зіткнень від порогу збудження до 600 еВ та проаналізувати вплив станів негативних іонів і каскадних процесів на ефективність збудження автоіонізаційних станів.

4. Дослідити ефект взаємодії після зіткнення у спектрах ежектованих електронів атома рубідію.

5. Одержати енергетичну залежність перерізу автоіонізації атома рубідію, визначити його абсолютне значення та відносний внесок у повний переріз однократної іонізації електронним ударом.

6. Провести розрахунки парціальних перерізів іонізації та автоіонізації атома рубідію, а також здійснити аналіз дієвості найбільш поширених теоретичних наближень для опису цих процесів.

Об'єкт дослідження: процеси утворення і розпаду автоіонізаційних станів атома рубідію, а також явища резонансного збудження і взаємодії після зіткнення, що супроводжують ці процеси.

Предмет дослідження: ефективні перерізи, канали утворення і розпаду автоіонізаційних станів та станів негативних іонів, а також спектроскопічна ідентифікація цих станів при електронному збудженні $4p^6$ оболонки в атомі рубідію.

Методи дослідження. Енергетичні спектри розсіяних та ежектованих електронів атома рубідію були одержані з використанням методу електронної спектроскопії у поєднанні з технікою електронного та атомного пучків, що перетинаються.

Наукова новизна одержаних результатів. У результаті виконання даної роботи *вперше*:

1. Досліджено динаміку збудження спектрів ежектованих електронів у діапазоні енергій зіткнень від порогу збудження $4p^6$ оболонки до 600 еВ, що дозволило провести повну спектроскопічну ідентифікацію ліній, спо-

стережуваних в енергетичних спектрах електронів атома рубідію.

2. Визначено абсолютні значення ефективних перерізів електронного збудження автоіонізаційних станів, які становлять $\sim 10^{-17} \text{ см}^2$, та встановлено домінуючу роль станів негативного іона Rb^- при електронному приповерховому збудженні автоіонізаційних станів. Визначено енергії, перерізи збудження, канали розпаду станів негативних іонів Rb^- та здійснено їх спектроскопічну ідентифікацію.

3. Виявлено та досліджено електронне збудження молекули Rb_2 та одержано абсолютний переріз збудження молекулярного автоіонізаційного стану. Показано, що величина цього перерізу становить у максимумі $(1.1 \pm 0.3) \times 10^{-14} \text{ см}^2$, що є на три порядки більшою за величину перерізів збудження атомних автоіонізаційних станів.

4. Виявлено ефект взаємодії після зіткнення в енергетичних спектрах ежектованих електронів атома рубідію та встановлено прямий зв'язок цього ефекту з резонансним збудженням автоіонізаційних станів.

5. Визначено абсолютне значення перерізу автоіонізації атома рубідію у діапазоні енергій зіткнення від порогу збудження $4p^6$ оболонки до 600 еВ, яке у максимумі складає $(2.9 \pm 0.6) \times 10^{-16} \text{ см}^2$, та встановлено, що найбільший внесок у переріз автоіонізації атома рубідію дають автоіонізаційні стани $5s5p$, $4d5s$ конфігурацій. Показано, що відносний внесок перерізу автоіонізації у повний переріз однократної іонізації атома рубідію електронним ударом становить $32 \pm 5\%$.

6. На базі проведених теоретичних розрахунків парціальних перерізів іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$, $3d^{10}$ оболонок та перерізів збудження $4p^6$, $4s^2$ оболонок визначено роль кожної з них у формуванні повного перерізу однократної іонізації атома рубідію.

Достовірність одержаних результатів була забезпечена сучасним рівнем техніки експерименту, правильним вибором розробленої методики досліджень, контрольними вимірюваннями, ретельністю та багатократністю вимірів, відтворюваністю результатів і їх підтвердженням теоретичними розрахунками.

Наукове значення одержаних результатів. Одержані у даній роботі результати дозволяють глибше зрозуміти природу електрон-атомних взаємодій, енергетичну структуру автоіонізаційних атомних рівнів, а також переходів між ними; виявляють домінуючу роль станів негативних іонів у припороговому збудженні автоіонізаційних станів, дозволяють зрозуміти закономірності утворення та розпаду цих станів. Одержані експериментальні результати стимулювали розробку нових теоретичних наближень для опису процесу електронного збудження $4p^6$ оболонки у припороговій області енергій зіткнень. Також вони дозволили перевірити дієвість існуючих теоретичних наближень для розрахунку параметрів збудження та каналів розпаду автоіонізаційних станів, перерізів іонізації та автоіонізації атома рубідію.

Практичне значення одержаних результатів полягає у тому, що встановлені закономірності та дані, які представлені у роботі, можуть бути використані:

- при аналізі емісійних спектрів плазових джерел випромінювання;
- для пошуку активних середовищ та розробки лазерів на парах металу в ультрафіолетовій області спектра;
- при одержанні пучків негативних іонів металів для інжекційного нагріву плазми;
- для розробки нових теоретичних моделей взаємодії електронів зі складними атомними системами.

Особистий внесок здобувача у виконання досліджень, які склали основу дисертаційної роботи, полягає у наступному:

- здійснено модернізацію вакуумної системи установки, що дозволило суттєво стабілізувати експериментальні умови вимірів і тим самим підвищити надійність одержуваних даних;
- розраховано та виготовлено вихідну електронно-оптичну систему монохроматора електронного пучка для роботи в широкому діапазоні енергій зіткнень;

- автору належить провідна роль у підготовці та проведенні експериментальних досліджень, обробці експериментальних даних, аналізі та інтерпретації отриманих результатів;
- автором самостійно проведено теоретичні розрахунки перерізів електронного збудження та іонізації атома рубідію;
- здобувачу належить провідна роль у представленні результатів на конференціях та підготовці публікацій.

Спільно проведено: експериментальне дослідження спектрів ежектованих електронів атома рубідію з д.ф.-м.н. О.О. Боровиком (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород), енергетичних спектрів розсіяних електронів – з аспірантом В.В. Грицько та д.ф.-м.н. О.О. Боровиком (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород); дослідження ефекту взаємодії після зіткнення – з д.ф.-м.н. О.О. Боровиком та д.ф.-м.н. Г.М. Огурцовим (Фізико-технічний інститут ім. Йоффе, Санкт-Петербург, Росія); спектроскопічну ідентифікацію автоіонізаційних станів – з д.ф.-м.н. О.О. Боровиком та к.ф.-м.н. А.В. Купліаускіене (Вільнюський університет, Вільнюс, Литва); спектроскопічну ідентифікацію станів негативних іонів – з д.ф.-м.н. О.О. Боровиком та к.ф.-м.н. О.І. Зацаринним та проф. К. Бартчатом (Університет Дрейка, Дес-Мойнс, США).

Автором самостійно написана наукова стаття [58]; їй належить основний внесок у написанні статей [59-62]; написано спільно з О.О. Боровиком та А.В. Купліаускіене статті [63, 64]; з О.О. Боровиком, О.І. Зацаринним та К. Бартчатом статтю [65]; з О.О. Боровиком та Г.Н. Огурцовим статтю [66].

Апробація результатів роботи. Результати досліджень, що представлені в даній роботі, доповідалися та обговорювалися на:

- міжнародних конференціях молодих вчених та аспірантів “ІЕФ-2011” (м. Ужгород, 2011 р.); “ІЕФ-2013” (м. Ужгород, 2013 р.); “ІЕФ-2015” (м. Ужгород, 2015 р.);

- міжнародних конференціях з фізики електронних, фотонних і атомних зіткнень “ICPEAC XXVII” (м. Белфаст, Північна Ірландія, Великобританія).

танія, 2011 р.); “ISPEAS XXVIII” (м. Ланьчжоу, Китай, 2013 р.); “ISPEAS XXIX” (м. Толедо, Іспанія, 2015 р.);

- міжнародній конференції з атомної спектроскопії “EGAS 44” (м. Гетеборг, Швеція, 2012 р.);

- восьмій міжнародній конференції по атомних та молекулярних даних “ISAMDATA-8” (м. Меріленд, США, 2012 р.);

- науковій конференції “Новітні напрями в атомній фізиці та спектроскопії” (м. Ужгород, 2012 р.);

- науковій конференції професорсько-викладацького складу УжНУ (м. Ужгород, 2012 р.);

- міжнародній школі з фундаментальної атомної спектроскопії “ФАС XX” (м. Воронеж, Росія, 2013 р.);

- міжнародній науково-технічній конференції з фізики, електроніки та електротехніки “ФЕЕ-2014” (м. Суми, Україна, 2014 р.).

Публікації. Результати експериментальних досліджень, що представлені у даній роботі, опубліковані у 27 наукових працях, з них 9 статей у фахових журналах та 18 тез доповідей на міжнародних конференціях.

Структура і обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, п’яти розділів, висновків та списку використаних джерел із 122 найменувань. Загальний обсяг роботи становить 132 сторінки, з яких 116 складають основний текст дисертації. Робота містить 41 рисунок і 4 таблиці.

РОЗДІЛ 1

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА УСТАНОВКА ТА МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ ЕЛЕКТРОНІВ

1.1. Методичні аспекти дослідження явища автоіонізації та загальна характеристика установки

Дослідження явища автоіонізації як в каналі збудження (1), так і в каналах розпаду (2), (3) можуть проводитись різноманітними експериментальними методами. Зокрема, в каналі збудження – це атом-атомні, іон-атомні, електрон-іонні, фотон-атомні та електрон-атомні зіткнення. Атом-атомні та іон-атомні зіткнення характеризуються складністю аналізу результатів реакції [67]. Використання методу електрон-іонних зіткнень пов'язане з труднощами одержання стабільних іонних пучків, особливо при низьких енергіях зіткнень [68].

Фотон-атомні зіткнення (метод фотопоглинання, фотоіонізація) [32, 34] за чутливістю, енергетичною роздільною здатністю і точністю визначення енергетичних порогів збуджених станів виділяються серед усіх інших методів, що робить відповідні дані еталоном для аналізу результатів, одержаних іншими методами. Однак, внаслідок самої природи фотон-атомних зіткнень, цей метод обмежений можливістю дослідження лише каналу збудження і лише тих станів, що утворюються внаслідок дипольних переходів з основного стану атома.

Можливості досліджень значно розширюються при використанні для збудження атомів електронних пучків регульованої енергії. В експериментах, де ця техніка поєднується з різними спектроскопічними методами, з'являється можливість дослідити всі типи збуджених станів – автоіонізаційні (*електронна спектроскопія*) [35], квазіметастабільні (*оптична спектроскопія*) [33] та метастабільні (*спектроскопія метастабільних станів*) [8].

Домінування електронного каналу розпаду АІС [35, 36, 55-57] робить саме *електронну спектроскопію* найбільш прийнятним методом їх дослідження у плані повноти і різнобічності одержуваних даних. Річ у тім, що у поєднанні з технікою електронного та атомного пучків, що перетинаються, виникає унікальна можливість досліджувати як канал збудження АІС (1) (спектри енергетичних втрат первинних електронів), так і канал їх розпаду (2) (спектри ежектованих електронів).

Спектри розсіяних електронів (спектри енергетичних втрат первинних електронів) не мають аналогів в інших методах досліджень і являють собою джерело унікальної інформації про перебіг процесу збудження автоіонізаційних, квазіметастабільних та метастабільних станів в широкому діапазоні енергій зіткнень та кутів розсіювання.

Спектри ежектованих електронів, по суті, є аналогом оптичних спектрів випромінювання і містять інформацію про ефективність збудження та розпаду АІС, а при вимірюванні в широкому діапазоні енергій зіткнень дають змогу одержати енергетичні залежності ефективних перерізів збудження (ЕПЗ) цих АІС.

Визначальним фактором успішної реалізації усіх можливостей методу електронної спектроскопії у поєднанні з технікою атомного і електронного пучків, що перетинаються, є виконання певних вимог щодо конструкції апаратури та методики досліджень. Зокрема, необхідні строга геометрична визначеність електронного та атомного пучків і їх стабілізація у часі. Мінімізація температурного впливу джерела атомного пучка та хімічного складу атомних парів на роботу вузлів, що оточують область зіткнень, є додатковим фактором підвищення надійності і коректності одержуваних результатів в умовах довготривалих вимірів.

Для встановлення енергетичної схеми, здійснення спектроскопічної ідентифікації та визначення каналів розпаду АІС вкрай важливим є знання динаміки процесу їх збудження у широкому діапазоні енергій зіткнень – від порогу до кількох сотень електрон-вольт. Але інформативність таких

даних безпосередньо залежить від двох факторів: ступеня монохроматизації первинного електронного пучка, що використовується для збудження атомів, та кута спостереження θ , під яким вимірюються енергетичні спектри. Ступінь монохроматизації електронного пучка є особливо важливим фактором при дослідженнях у припороговій області енергій зіткнень [69], де проявляються резонансні явища та ефект ВПЗ. Ці фактори зумовили в якості джерела первинних електронів для дослідження збудження АІС атома рубідію використати електростатичний монохроматор.

Щодо значення кута спостереження енергетичних спектрів ежектованих та розсіяних електронів, тут слід враховувати анізотропність кутового розподілу електронів, ежектованих при розпаді АІС. Ступінь анізотропності залежить від типу збуджуваного АІС, кінцевого стану іона, що утворюється при розпаді АІС, та від енергії зіткнень. Зв'язок ефективного перерізу електронного збудження АІС з кутовим розподілом ежектованих електронів [70, 71] має вигляд:

$$\frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)}{d\theta} = \frac{\sigma_e}{4\pi} (1 + \sum_k \beta_k P_k(\cos \theta)), \quad (1.1)$$

де: $\alpha_0 J_0$, $\alpha_1 J_1$, $\alpha_2 J_2$ – квантові числа, які описують початковий і збуджений стан атома, а також кінцевий стан іона, відповідно; σ_e – повний ефективний переріз збудження атома та наступного електронного розпаду; $P_k(\cos \theta)$ – поліном Лежандра ступеня k , де $k=2, 4, \dots \leq 2J$; θ – кут спостереження; β_k – параметр анізотропії кутового розподілу ежектованих електронів.

Як було показано в [71], в атомі рубідію для АІС з різними значеннями повного кутового моменту J від $\frac{1}{2}$ до $\frac{7}{2}$ в конфігураціях $5s^2$, $4d5s$, $5s5p$ ізотропний кутовий розподіл ежектованих електронів ($\beta_k=0$) має місце лише при розпаді станів із $J = \frac{1}{2}$. Для станів $J > \frac{1}{2}$ параметр β_k може збільшуватися до 30%. При “магічному” куті спостереження $\theta = 54.7^\circ$

[70] поліном Лежандра $P_k(\cos\theta)$ дорівнює нулю для всіх АІС з $J \leq \frac{3}{2}$.

Виходячи з цього, у даних дослідженнях аналізатор енергій електронів та розсіяних електронів був розташований саме під кутом спостереження $\theta = 54.7^\circ$.

Із врахуванням усього вищенаведеного, у даній роботі була вибрана найбільш оптимальна методика дослідження явища автоіонізації атома рубідію, а саме – електронна спектроскопія у поєднанні з технікою електрон-атомних пучків, що перетинаються. Відповідна експериментальна установка “Електронний спектрометр” виготовлена в Інституті електронної фізики НАН України, і її основними вузлами є електронний спектрометр та системи вакуумного помпування, електроживлення та детектування корисного сигналу [58, 72].

Загальний вигляд установки представлено на рис. 1.1а. Електронний спектрометр розташований у вакуумній камері 1, до якої за допомогою фланцевих з’єднань під’єднана система помпування установки, що складається з двох послідовно з’єднаних pomp – форвакуумної помпи 3 з цеолітовою пасткою та дифузійної паромасляної помпи 4 з охолоджуваною водою пасткою, а також магніторозрядної помпи 5. Форвакуумна та дифузійна помпи забезпечували попереднє розрідження у камері, а далі високий вакуум одержувався за допомогою тільки магніторозрядної помпи. Для зменшення впливу магнітного поля цієї помпи на роботу спектрометра вакуумна камера була відокремлена від неї перехідним вакуумпроводом 6 довжиною 0.7 м і внутрішнім діаметром 0.15 м, який мав окрему систему обігріву. Система вакуумних клапанів забезпечувала автоматичне перекриття камери у разі відключення електроживлення. При проведенні досліджень робочий вакуум у камері становив не гірше $2 \cdot 10^{-5}$ Па.

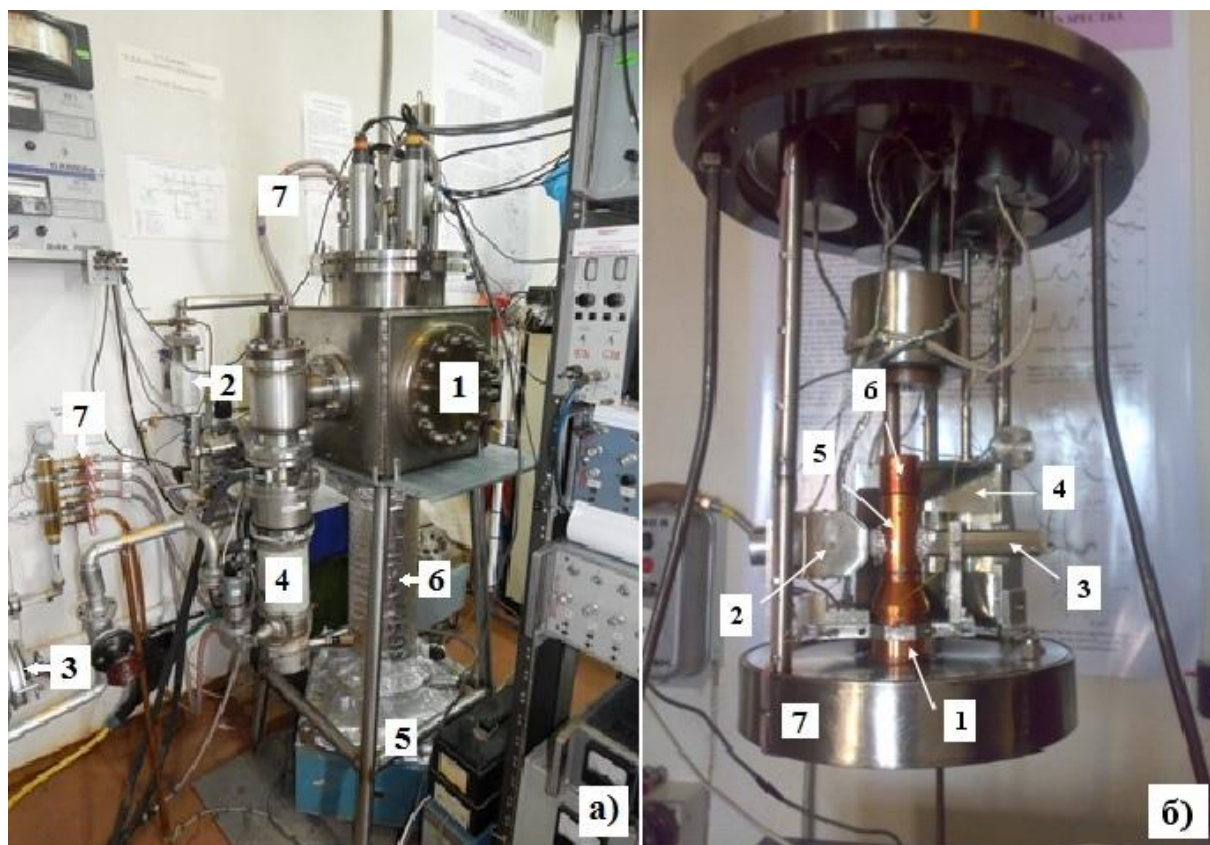


Рис. 1.1. Зовнішній вигляд експериментальної установки для дослідження енергетичних спектрів ежектованих і розсіяних електронів атома рубідію та взаємне розташування основних вузлів електронного спектрометра

а): 1 – вакуумна камера, 2 – система напуску сухого повітря або інертного газу, 3 – форвакуумна помпа НВР-16Д, 4 – дифузійна паромасляна помпа НВД-0.15, 5 – магніторозрядна помпа НМД-0.4-1, 6 – перехідний вакуум-провід, 7 – система водяного охолодження;

б): 1 – джерело атомного пучка, 2 – монохроматор, 3 – циліндр Фарадея, 4 – аналізатор енергій електронів, 5 – камера зіткнень, 6 – колектор атомного пучка, 7 – система водяного охолодження.

1.2. Електронний спектрометр

Електронний спектрометр складався з 127° електростатичного монохроматора первинного електронного пучка, джерела атомного пучка, колектора електронного пучка (циліндра Фарадея) та 127° електростатич-

ного енергоаналізатора розсіяних і ежектованих електронів, взаємне розташування яких показано на рис. 1.1б.

Загальну схему електронно-оптичної системи спектрометра показано на рис. 1.2. Пучок первинних електронів, сформований вихідною електронно-оптичною системою L_1 - L_3 монохроматора, перетинав під кутом 90° пучок нейтральних атомів. Ежектовані електрони, що утворилися в результаті розпаду АІС, та первинні електрони, розсіяні під кутом спостереження 54.7° фокусувалися вхідною електронно-оптичною системою лінз L_4 - L_5 на вхід 127° електростатичного конденсатора. Після аналізу за енергією електрони потрапляли на вхід детектора – вторинного електронного помножувача (ВЕР), сигнал з якого попадав на вхід системи детектування. Залежність інтенсивності сигналу на виході помножувача від енергії аналізованих електронів являє собою спектр ежектованих або розсіяних електронів. Кожна лінія в спектрі ежектованих електронів відповідає розпаду певного АІС атома. Розглянемо більш детально принцип роботи кожного з основних вузлів спектрометра.

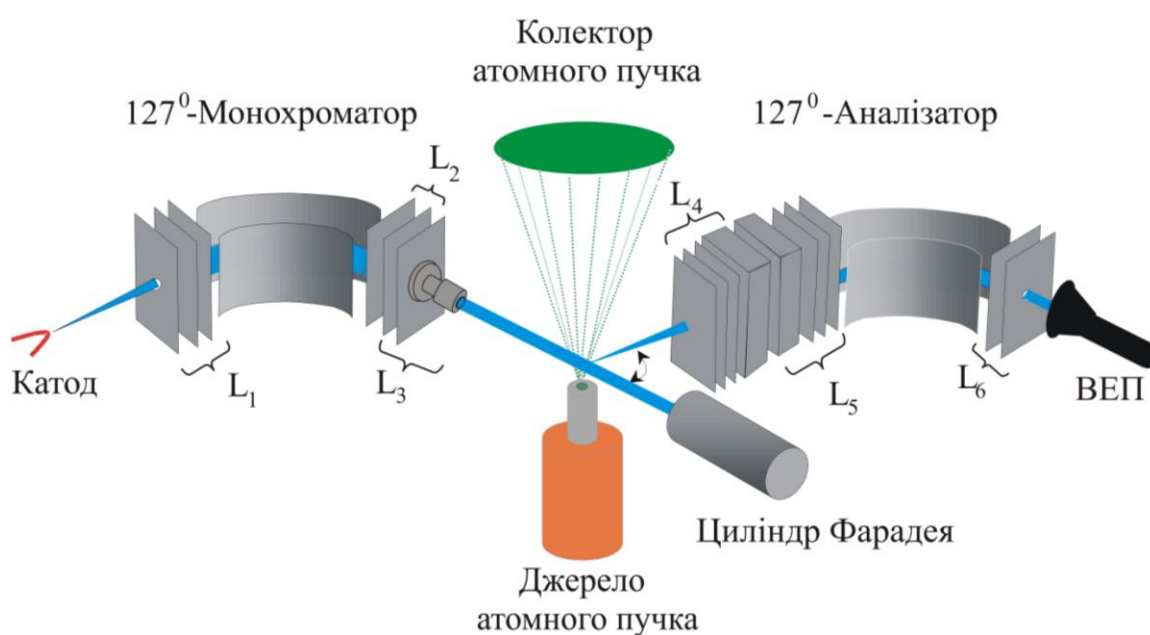


Рис. 1.2. Загальна схема електронно-оптичної системи спектрометра.

1.2.1. Монохроматор первинного електронного пучка. У якості джерела первинних електронів був використаний електронний монохроматор [73], основними елементами якого є катодний вузол, блок електронно-оптичних лінз щілинного (L_1 - L_2) і циліндричного (L_3) типу, 127° електростатичний конденсатор та магнітні екрани. Конструкція монохроматора представлена на рис. 1.3.

Джерелом електронів служив катод 1 із торованого вольфраму (дріт діаметром 0.15 мм у формі трикутника з кутом при вершині 45°). Катоди такого типу характеризуються стабільністю електронної емісії, вакуумною чистотою і дозволяють працювати тривалий час без погіршення емісійних властивостей. Із катодного вузла пучок потрапляв на вхід трьохелектродної

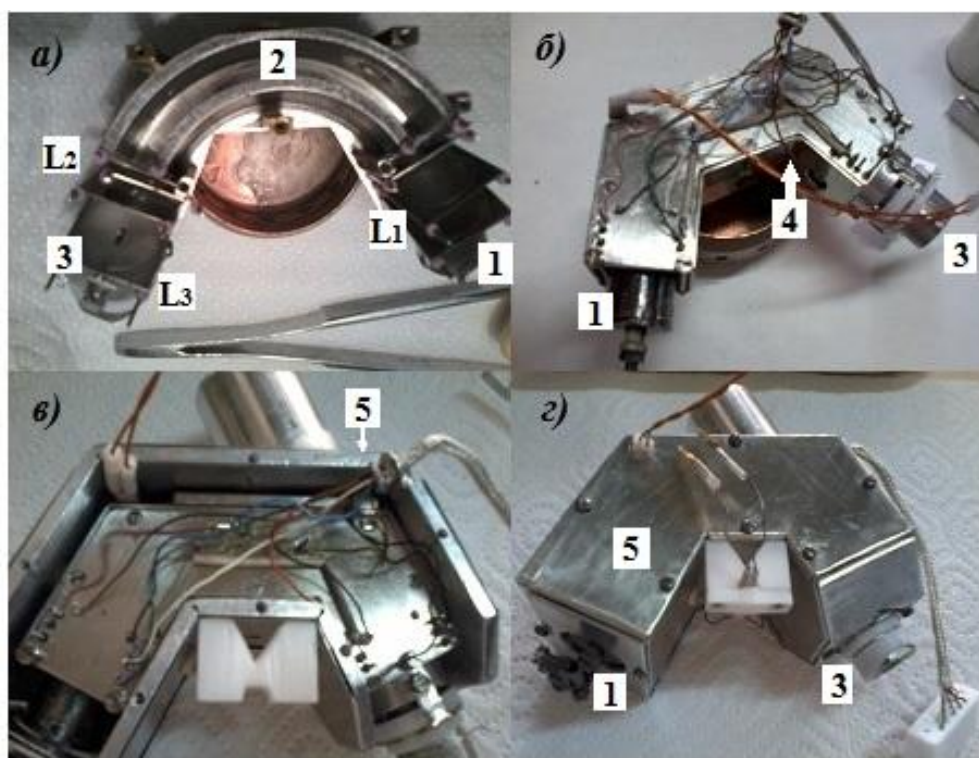


Рис. 1.3. Монохроматор електронного пучка: 1 – катодний вузол; 2 – 127° циліндричний електростатичний конденсатор; 3 – вихідна лінза монохроматора; 4 – внутрішній корпус (матеріал – пермалой); 5 – зовнішній корпус (матеріали – алюміній та Skudotech).

діафрагменної лінзи L_1 , із співвідношенням потенціалів на діафрагмах 1:10:3 [72]. Така система, на вході в конденсатор 2, забезпечувала інтенсивність електронного пучка ≥ 55 мкА при енергії 10 еВ, це дозволяло ефективно використовувати емісійні властивості катода навіть при низьких значеннях вихідної енергії електронного пучка. Селекція електронного пучка за енергіями здійснювалася в електростатичному полі конденсатора циліндричного типу 2 (сектор 127°) із радіусами обкладинок $R_1=26$ мм $R_2=30$ мм і висотою $h=20$ мм. Для налаштування електронного пучка у вертикальній площині до напрямку поля конденсатора 2 використовувався плоско-паралельний конденсатор.

Щоби нейтралізувати вплив зовнішніх електромагнітних полів на роботу монохроматора, останній був розміщений у двох корпусах (див. рис. 1.3б-г), з яких внутрішній 4 (рис. 1.3б) виготовлений з пермалою, а зовнішній 5 (рис. 1.3г) – з алюмінію та фольги зі сплаву Skudotech [74], товщиною 0.2 мм. Особливістю останнього матеріалу є те, що він зменшує вплив магнітного поля більш ніж на 90%. Таке екранування повністю виключило вплив зовнішніх магнітних полів та суттєво поліпшило роздільну і пропускну здатність монохроматора.

Електронно-оптична система монохроматора працювала за принципом “прискорення–гальмування–прискорення”, що дозволяло з максимальною ефективністю використовувати фокусуючі здатності лінз і зберігати пропускну здатність системи в широкому інтервалі енергій первинних електронів [75]. Особлива увага була приділена вихідній системі лінз, оскільки саме вони визначають геометрію та інтенсивність вихідного електронного пучка у всьому досліджуваному діапазоні енергій зіткнень. Короткофокусуючі властивості базової конструкції лінзи L_2 [73] дозволяли працювати при енергії пучка не більше 20 еВ (див. рис. 1.4а,б). Спроба працювати при більших енергіях призводила до значного погіршення пропускну здатності монохроматора за рахунок “провисання”

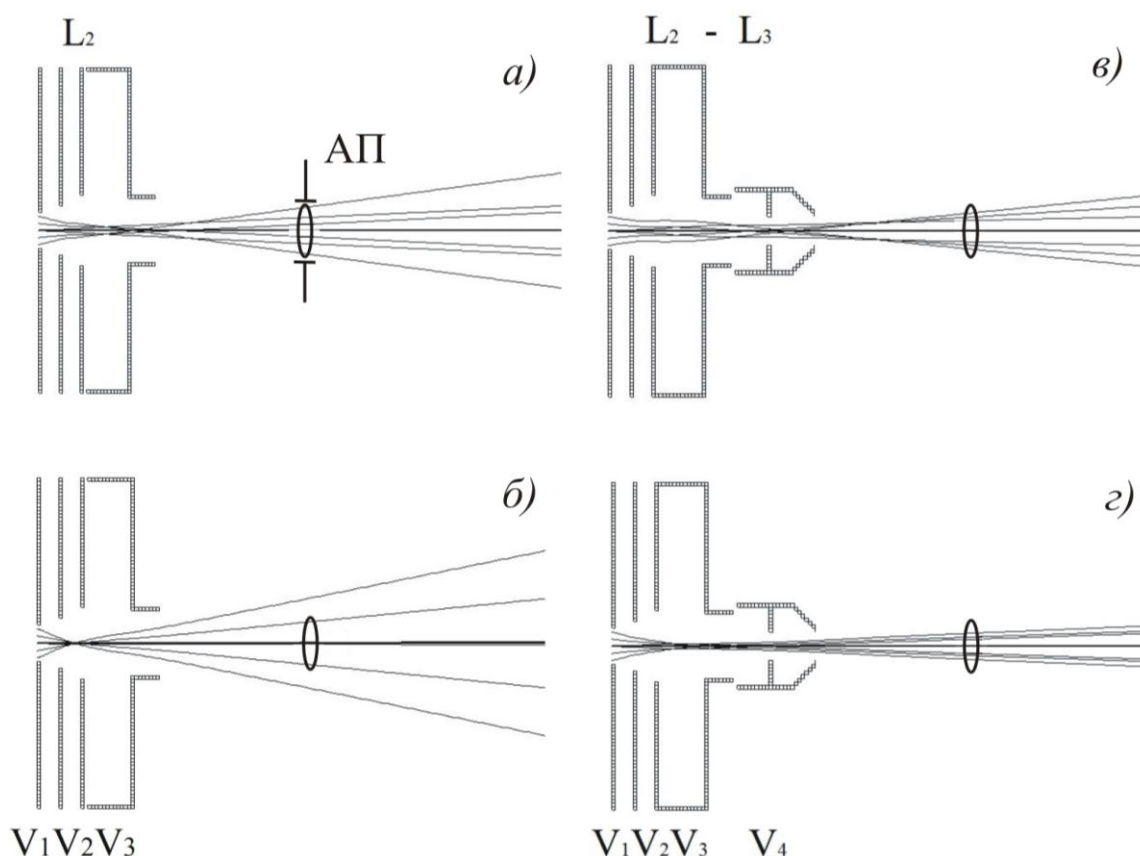


Рис. 1.4. Моделювання режимів роботи вихідної лінзи L_2 [73] та комбінованої лінзи L_2-L_3 монохроматора при потенціалах на електродах $V_1=10$ eB, $V_2=40$ eB, $V_3=10$ eB, $V_4=10$ eB для значень вихідної енергії пучка $E_0=17$ eB (а, в) та 600 eB (б, г). АП – переріз атомного пучка.

потенціалу останнього електрода V_3 лінзи L_2 (див. рис. 1.4б), що задає енергію електронного пучка. Задля уникнення цих ефектів до лінзи L_2 було додано двохелектродну циліндричну лінзу V_3-V_4 (див. рис. 1.4в,г). Така конструкція надала всій вихідній електронно-оптичній системі монохроматора довгофокусного характеру, що дозволило стабілізувати геометрію пучка у всьому робочому діапазоні енергій зіткнень 15-600 eB (рис. 1.4в,г). Як видно з поведінки вольт-амперної характеристики (ВАХ), представлені на рис. 1.5, нова конструкція дозволяє також стабілізувати інтенсивність електронного пучка. Для контролю інтенсивності та геометрії первинного електронного пучка використовувався приймач, що складався з глибокого внутрішнього циліндра із центральним конусним електродом та зовнішнього охоронного циліндра.

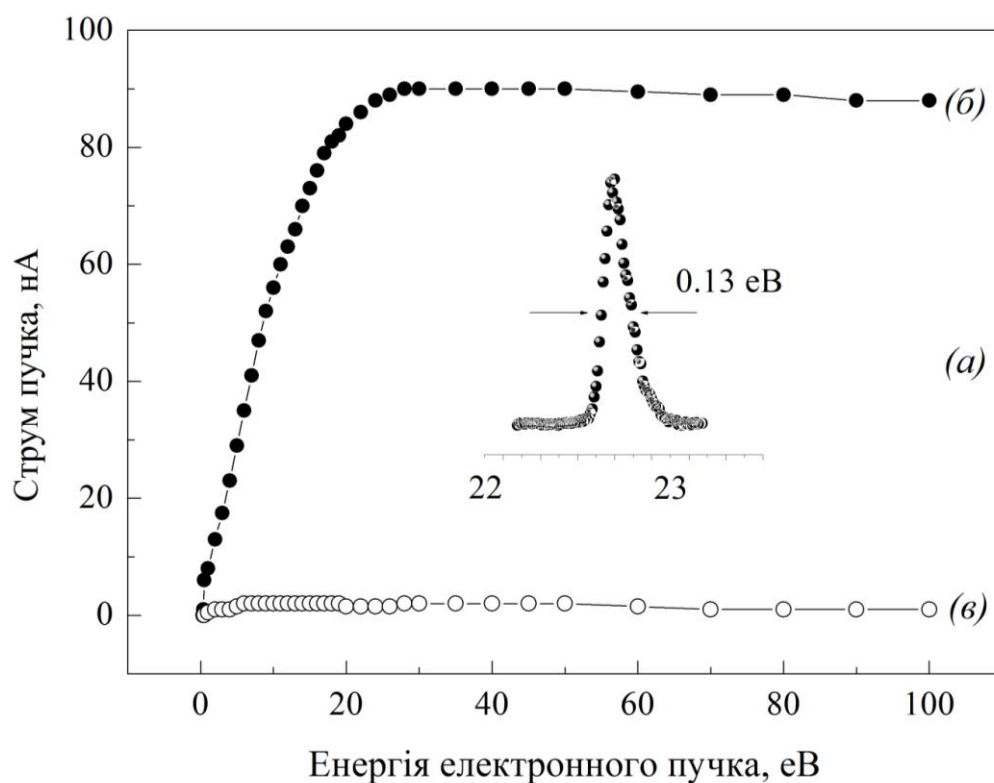


Рис.1.5. ВАХ монохроматора та моноенергетичність електронного пучка: *a* – пік пружного розсіювання для енергії електронного пучка 22.8 еВ; *б* – струм на внутрішній циліндр Фарадея; *в* – струм на охоронний циліндр.

Для зменшення вторинної електронної емісії внутрішня поверхня обох циліндрів покривалась шаром аквадагу. Для додаткового запобігання проникненню у камеру зіткнень вторинних електронів на внутрішній циліндр подавався невеликий (<10 В) додатний потенціал відносно охоронного циліндра.

Визначення ступеня монохроматизації (моноенергетичності) первинного електронного пучка $\Delta E_{1/2}$ проводилось у спектрах енергетичних втрат за повною шириною на половині висоти (ПШПВ) піку енергетичного розподілу пружно розсіяних електронів на атомах залишкового газу (див., наприклад, рис. 1.5*a*). Дослідження показали, що дана конструкція монохроматора дозволяє одержувати електронні пучки з моноенергетичністю $\Delta E_{1/2}=0.12-0.2$ еВ та інтенсивністю 0.1-0.2 мкА.

1.2.2. Джерело атомного пучка. Серед широкого класу методів отримання атомного пучка (метод газодинамічного струменя, метод розпилення, НВЧ-дуга, ефузійний та ін. [76]) найбільш простим і ефективним є ефузійний метод, який дозволяє одержувати стабільні атомні пучки заданої геометрії у широкому діапазоні температур випаровування. Саме цей метод був використаний у даній роботі, а конструкція джерела такого типу представлена на рис. 1.6. Основними елементами джерела є ефузійна камера з робочою речовиною, транспортний та колімаційний канали, нагрівач та теплові екрани.

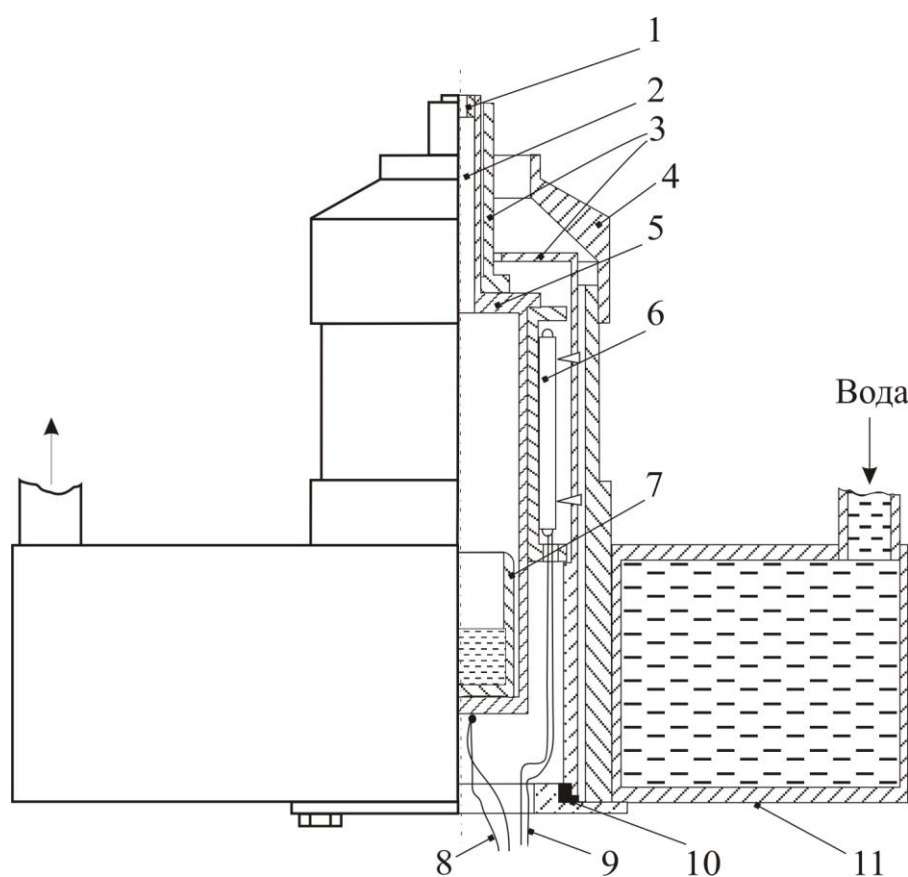


Рис. 1.6. Конструкція джерела атомного пучка: 1 – колімаційний канал; 2 – транспортний канал; 3, 4 – теплові екрани; 5 – ефузійна камера (тигель); 6 – нагрівач; 7 – ампула з робочою речовиною; 8 – термопара; 9 – виводи нагрівача; 10 – ізолююча прокладка; 11 – система водяного охолодження.

Ефузійна камера, в якій розміщена робоча речовина, представляє собою циліндр із немагнітної нержавіючої сталі діаметром $d=1.6$ см та довжиною $l=12$ см. Колімаційний канал 1 атомного пучка довжиною $l=4$ мм та діаметром $d=1$ мм розташований на верхній частині транспортуючого каналу 2 ($l=30$ мм, $d=3$ мм). Транспортний канал 2 дозволяє максимально віддалити нагрівач ефузійної камери від області зіткнень, а також максимально наблизити колімаційний канал до центра зіткнень. У першому випадку значно зменшується вплив магнітного поля нагрівача на роботу електронного спектрометра та на кутовий розподіл розсіяних електронів у камері зіткнень. Наближення колімаційного каналу до області зіткнень дозволяє працювати при максимальній концентрації атомного пучка. Для зменшення теплових втрат транспортуючий канал оточено екраном 3 із немагнітної нержавіючої сталі. Задля забезпечення можливості прикладання напруги на ефузійну камеру та вимірювання струму розсіяних електронів первинного електронного пучка (при юстуванні монохроматора) ефузійна камера разом із тепловим екраном 3 ізольовані тефлоновою прокладкою 10.

Нагрівач ефузійної камери виготовлено із танталового дроту діаметром 0.25 мм. Для зведення до мінімуму впливу власного магнітного поля нагрівача застосовувався біфілярний тип намотування спіралі з використанням спеціальної чотирьохканальної кераміки. Конструкція та розташування нагрівача дозволяли одержувати перепад температур між колімаційним каналом і робочою речовиною до 50°C , що виключало можливість залипання каналу в процесі роботи. Екран 4, який виготовлений із безкисневої міді, забезпечував тепловий контакт із зовнішньою системою водяного охолодження і стабілізував температурний режим камери зіткнень.

Рубідій завантажувався у тигель у скляній ампулі 7, наповненій петролейним ефіром (див. детальніше опис методики в підрозділі 1.3).

Температура робочої речовини вимірювалася термопарою 8 хромель-алюмельового типу, що встановлена у нижній, найбільш холодній частині ефузійної камери.

Джерело атомного пучка дозволяло одержати геометрично визначений атомний пучок густиною 10^{11} - 10^{12} ат·см⁻³ в зоні зіткнень при температурі нагріву 120° С, що відповідає тиску насичених парів металу 1.33 Па [14].

1.2.3. Аналізатор енергій розсіяних та ежектованих електронів.

Для енергетичного аналізу розсіяних внаслідок непружних зіткнень з атомами рубідію електронів та ежектованих електронів, що утворилися в результаті розпаду АІС, використовувався електростатичний аналізатор, в основу якого була покладена конструкція, описана у [72]. До складу аналізатора входять 127° циліндричний конденсатор, електронно-оптичні лінзи L₄-L₆ та блок детектора електронів (див. рис. 1.2). Зовнішня обкладинка конденсатора виготовлена із молібденової фольги у виді 127° циліндричного сектора, а внутрішня – у виді суцільного молібденового циліндра.

Вхідна електронно-оптична система аналізатора складалась із електронно-оптичних лінз L₄-L₅ щілинного типу з прямокутною та круговою симетрією отворів (рис. 1.7), яка виконувала функцію фокусування електронів, що вилетіли із зони зіткнень в напрямі аналізатора, на вхід електростатичного конденсатора. Для геометричного обмеження та енергетичної селекції електронного пучка, а також для розділення електронних лінз L₄-L₅ в еквіпотенціальній області між електростатичними дефлекторами розміщувалась діафрагма з прямокутним отвором 1×4 мм. Аналогічна діафрагма з прямокутним отвором шириною 0.5×4 мм обмежувала електронний пучок на вході в електростатичний конденсатор. Електростатичні

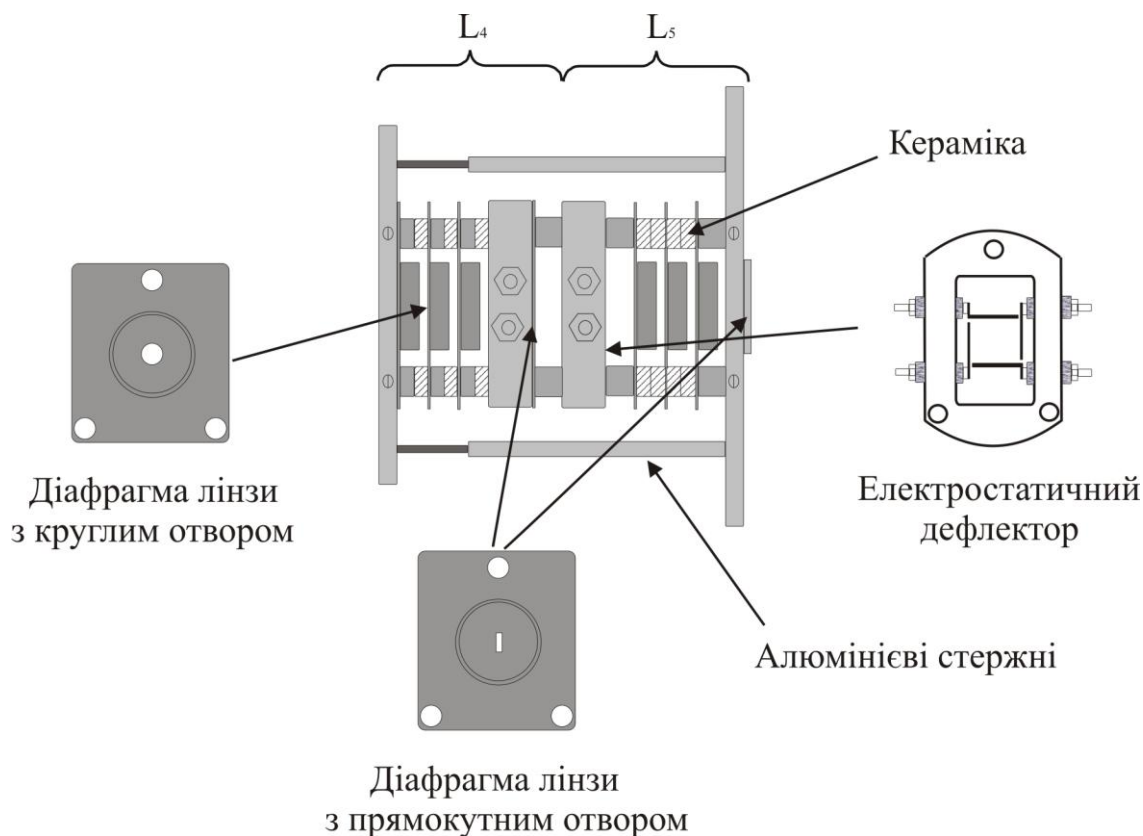


Рис. 1.7. Конструкція вхідної електронно-оптичної системи аналізатора L_4 - L_5 .

дефлектори дозволяли здійснювати геометричну корекцію пучка по осях X і Y відносно вихідного отвору. Електроди лінз ізолювані між собою за допомогою прецизійної стеатитової кераміки. Вся конструкція є легко-розбірною, та при цьому зберігається необхідна точність налаштування електродів один відносно одного. Для забезпечення стабільності пропускання та роздільної здатності протягом експерименту температура аналізатора підтримувалась у межах 40 - 50°C . Енергетична роздільна здатність аналізатора $\Delta E_{1/2}$ при проведенні експериментів оцінювалася шляхом вимірювання ширин добре відокремлених ліній у спектрах ежектованих електронів і становила $\leq 0.05 \text{ eV}$. Кутова роздільна здатність α аналізатора була не гірше 3° .

1.2.4. Системи електроживлення та детектування корисного сигналу. Як показали контрольні виміри енергетичних спектрів електронів (див. далі підрозділ 1.3), низький рівень корисного сигналу в області припорогових енергій зіткнень (20-30 імп./с) зумовлював необхідність довготривалого накопичування сигналу. Одержання прийнятної статистики вимагало від системи детектування та електроживлення високої стабільності їх параметрів. Блок-схема цих систем представлена на рис. 1.8.

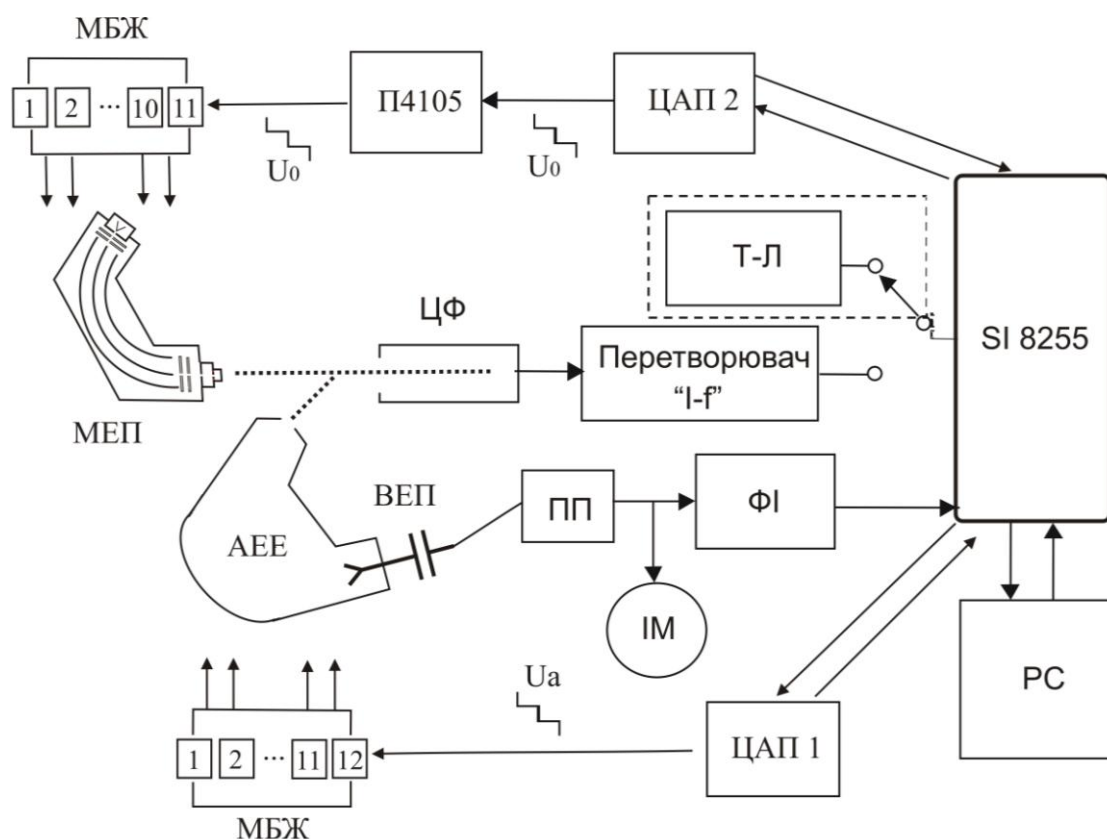


Рис. 1.8. Системи електроживлення та детектування корисного сигналу спектрометра [72]: МЕР – монохроматор первинного електронного пучка; АЕЕ – аналізатор енергій розсіяних та ежекттованих електронів; ЦФ – циліндр Фарадея; ПП – попередній підсилювач імпульсів; ІМ – інтенсиметр; ФІ – формувач імпульсів TTL; SI-8255 – програмована карта інтерфейсу; ЦАП-1,2 – цифро-аналогові перетворювачі напруги; МБЖ – модульні блоки живлення.

Електроживлення електронно-оптичних систем аналізатора та монохроматора забезпечували модульні блоки стабілізованої напруги аналогового типу на ± 100 і ± 200 В. Усі модулі мали відокремлений від корпусу вихід та захист від короткого замикання. Живлення джерела атомного пучка, катода, систем обігріву спектрометра забезпечували регульовані стабілізатори струму.

Для розгортки енергетичної шкали в спектрах ежектованих електронів у діапазоні 0-10 В використовувався цифро-аналоговий перетворювач напруги ЦАП 1 з мінімальним кроком розгортки 0.01 В. Для автоматичної зміни енергії первинного електронного пучка в діапазоні 15-600 еВ використовувався аналогічний перетворювач ЦАП 2, який слугував джерелом опорної напруги для стабілізатора П4105. Крок зміни енергії електронного пучка можна було змінювати від 0.05 еВ до 10 еВ в залежності від енергетичного діапазону, в якому проводилися виміри. Робота обох перетворювачів керувалась персональним комп'ютером через програмовану карту інтерфейсу SI-8255 за допомогою спеціально розробленого програмного пакету *ES* на мові C⁺⁺.

1.3. Методика вимірів та обробка одержаних даних

Методика підготовки та проведення вимірів у даній роботі складалась із таких етапів:

- зборка та налаштування основних вузлів спектрометра: монохроматора, аналізатора та джерела атомного пучка;
- завантаження рубідію у джерело атомного пучка;
- повторне юстування та завантаження спектрометра у вакуумну камеру;
- одержання робочого вакууму у камері;
- налаштування основних параметрів аналізатора та монохроматора та проведення контрольних вимірів;
- проведення запланованих вимірів.

При налаштуванні основних вузлів спектрометра перевірявся збіг геометричних осей монохроматора, аналізатора відносно центру зіткнення пучків. Наступним етапом підготовки проведення вимірів було завантаження рубідію у джерело атомного пучка. Оскільки рубідій є хімічно активним елементом, завантаження робочої речовини необхідно було проводити в найкоротший термін і за спеціальною методикою. У камері з ущільненого поліетилену [77], яка була приєднана до системи помпування та напуску інертного газу (рис. 1.9,*а*), рубідій розфасовувався у кількості 0.7-1.4 г у скляні ампули (рис. 1.9,*б*). Ампули щільно закривалися пробками і у вертикальному положенні зберігалися у спеціальному контейнері, який заповнювався під тиском аргону.



Рис. 1.9. Розфасовування рубідію в скляні ампули (*а*) та загальний вигляд скляної ампули з рубідієм (*б*). Показане обладнання розташоване у маніпуляційній камері з ущільненого поліетилену, наповненій аргоном.

Перед завантаженням у джерело атомного пучка ампула з рубідієм відкривалась у маніпуляційній камері в атмосфері аргону і частково наповнювалась петролейним ефіром. У такому стані ампула виймалась з камери і встановлювалась у вертикальному положенні в ефузійну камеру, яка щільно закривалась притертою пробкою з безкисневої міді. Ефузійна ка-

мера встановлювалась у корпус джерела і, після повторного налаштування, увесь спектрометр завантажувався у вакуумну камеру для помпування.

На етапі знегажування та одержання робочого вакууму (див. підрозділ 1.1) відбувався постійний прогрів основних вузлів спектрометра при температурах монохроматора $\approx 100^\circ \text{C}$, аналізатора $40\text{--}50^\circ \text{C}$ та джерела атомного пучка $20\text{--}40^\circ \text{C}$. Після одержання робочого вакууму – $2 \cdot 10^{-5}$ Па виконувалось налаштування робочого режиму монохроматора з метою отримання електронних пучків стабільної інтенсивності $0.1\text{--}0.2 \text{ мкА}$ в обраному робочому діапазоні енергій. При цьому досліджувалась поведінка ВАХ та кутова розбіжність (за співвідношенням струмів на циліндр Фарадея та охоронний циліндр) (див. рис. 1.5). Наступним кроком було налаштування аналізатора енергій розсіяних та ежектованих електронів на пік пружного розсіювання первинних електронів на атомах залишкового газу. Ці дані дозволяли одержати максимальну пропускну та роздільну здатність, а також монокінетичність електронного пучка.

Наступним етапом було підвищення температури атомного джерела до 120°C з метою одержання інтенсивних енергетичних спектрів розсіяних при збудженні валентних рівнів електронів та ежектованих електронів. Також повторно перевірялась ВАХ монохроматора і геометрія пучка у всьому робочому діапазоні енергій.

Після закінчення вимірів, на етапі розвантаження джерела, вакуумна камера наповнювалась сухим повітрям або аргоном. Це уповільнювало реакцію окислення шару металу, що осів впродовж вимірів на охолоджувані поверхні, і робило безпечною процедуру демонтажу вузлів спектрометра та їх очистку.

Основні виміри передбачали одержання енергетичних спектрів розсіяних або ежектованих електронів у певній області енергій первинного електронного пучка та в обраній області енергій ежектованих електронів. Для на-

дійної статистики вимірів та перевірки повторюваності результатів такі виміри проводились не менш як у 3-5 незалежних експериментах. Кожен експеримент тривав понад 48 годин, що супроводжувалося постійною зміною експериментальних умов у камері зіткнень. Причиною цього була зміна розподілу температур на вузлах електронного спектрометра, що оточують джерело атомного пучка, постійне напilenня атомного пучка на електронно-оптичні системи монохроматора і аналізатора. Це призводило до зміни інтенсивності первинного електронного пучка та пропускної здатності аналізатора. Для контролю та врахування цих змін впродовж усього експерименту вимірювались тестові спектри до і після вимірювання 3-5 основних енергетичних спектрів ежектованих електронів. При дослідженні припорогових областей, де вимоги до стабільності були особливо критичними, тестовий спектр вимірювався після вимірювання кожного основного енергетичного спектра. Тестовий спектр являє собою частину повного спектра, яка містить одну або дві енергетично добре розділені автоіонізаційні лінії, а також частину спектра енергетичних втрат розсіяних електронів при збудженні валентних рівнів (див. рис. 1.10).

Отже, основні виміри починалися із одержання тестових спектрів та калібрування енергетичних шкал ежектованих електронів та первинного електронного пучка. Калібрування енергетичної шкали в спектрах ежектованих електронів здійснювалось шляхом пошуку у спектрі лінії, що відповідає розпаду АІС, енергія якого є визначеною у спектрах фотопоглинання [34]. Такою лінією у даних вимірах була лінія у спектрі ежектованих електронів, що відповідає розпаду найнижчого за енергією $(4p^5 5s^2) \ ^2P_{3/2}$ АІС з порогом збудження при 15.312 еВ [36, 34] (див. рис. 1.10). Калібрування енергії первинного електронного пучка, тобто визначення дійсного значення енергії зіткнень E^0 , здійснювалось за оцінкою відносного розташування автоіоніза-

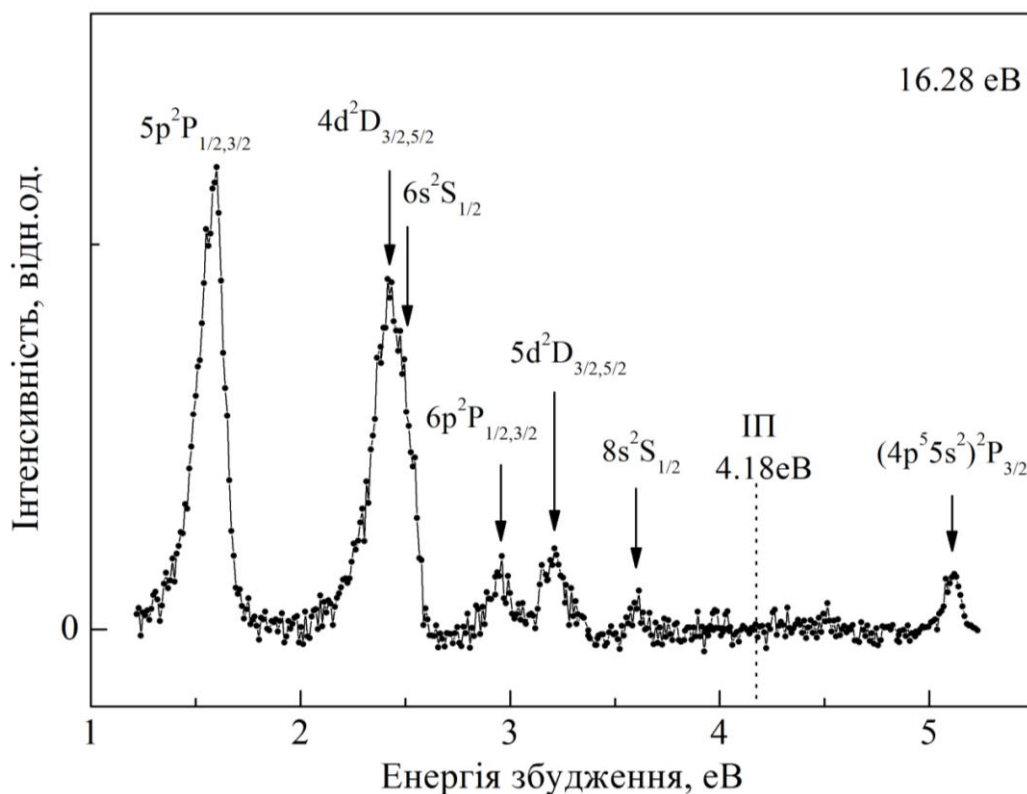


Рис. 1.10. Тестовий енергетичний спектр розсіяних електронів атома рубідію, одержаний при енергії зіткнень 16.28 eV.

ційної лінії $(4p^5 5s^2) ^2P_{3/2}$ та лінії, що відповідає енергетичним втратам первинних електронів при збудженні валентного рівня $5p ^2P_{3/2}$ при енергії збудження 1.58 eV [78].

Процедура калібрування проводилася для кожного тестового спектра, що дозволяло контролювати стабільність енергетичних шкал упродовж вимірів. Невизначеності шкал енергій первинних і автоіонізаційних електронів атома рубідію становили ± 0.05 eV і ± 0.04 eV, відповідно. У деяких випадках, при дослідженні збудження АІС молекули Rb_2 , за рахунок перекриття із сусідньою атомною лінією невизначеність положення цієї молекулярної лінії зростала до ± 0.1 eV. Невизначеності при встановленні енергетичного положення ліній при дослідженні ефекту ВПЗ будуть розглянуті нижче (див. підрозділ 4.1).

Результатом проведення основних вимірів були енергетичні спектри ежектованих електронів для різних значень первинного електронного пучка

та спектри енергетичних втрат первинних електронів при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію.

Процедура обробки одержаних спектрів складалась із таких етапів:

- визначення функції неперервного фону в спектрах та його віднімання;
- аналіз профілів ліній з метою оцінки їх симетричності і можливості використання для фітування функції Гауса;
- фітування профілів ліній з метою визначення їх енергетичного положення та інтенсивності;
- зведення цих даних у вигляді таблиці.

На рис. 1.11а представлено типовий енергетичний спектр електронів атома рубідію, одержаний при енергії зіткнень 18.82 еВ. Як видно, спектр складається з інтенсивного неперервного фону (про природу фону див. детальніше у підрозділі 2.1) та окремих ліній, що відповідають розпаду АІС. Процедура віднімання фону складалась із наступних етапів. Спочатку зі спектра вилучалися ділянки, де присутні досліджувані лінії (див. рис. 1.11,б). Залишковий спектр *б* апроксимувався поліноміальною функцією виду:

$$y = a_0 + a_1E + a_2E^2 + \dots + a_nE^n, \quad (1.1)$$

де a_n – параметр фітування. Максимальна степінь полінома n залежить від форми фону в даному спектрі і зазвичай становив 2-3. Одержана функція віднімалась від експериментального спектра *а* і результуючий спектр *в* складався лише з ліній, що відповідають розпаду АІС. Саме цей спектр використовувався для подальшого визначення інтенсивності ліній. Для цього проводилося фітування профілів ліній з використанням методу найменших квадратів, закладеного у стандартний програмний пакет *ORIGIN* [79]. У спектрах, одержаних при середніх та великих значеннях енергії зіткнень, профілі ліній апроксимувалися функцією Гауса [80]:

$$I(\text{\AA}) = \frac{A}{w\sqrt{\pi/2}} \exp\left(\frac{-2(x-x_c)^2}{w^2}\right), \quad (1.2)$$

де A – площа (інтенсивність) лінії; w – ширина лінії; x_c – енергетичне положення центра контуру лінії. У випадку припорогових енергій зіткнень, де профілі ліній можуть бути спотворені ефектом ВПЗ, фітування ліній здійснювалося з використанням спеціальної функції (див. нижче підрозділ 4.1).

Контрольною величиною стабільності експериментальних умов служувало нормоване значення інтенсивності автоіонізаційної лінії $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$

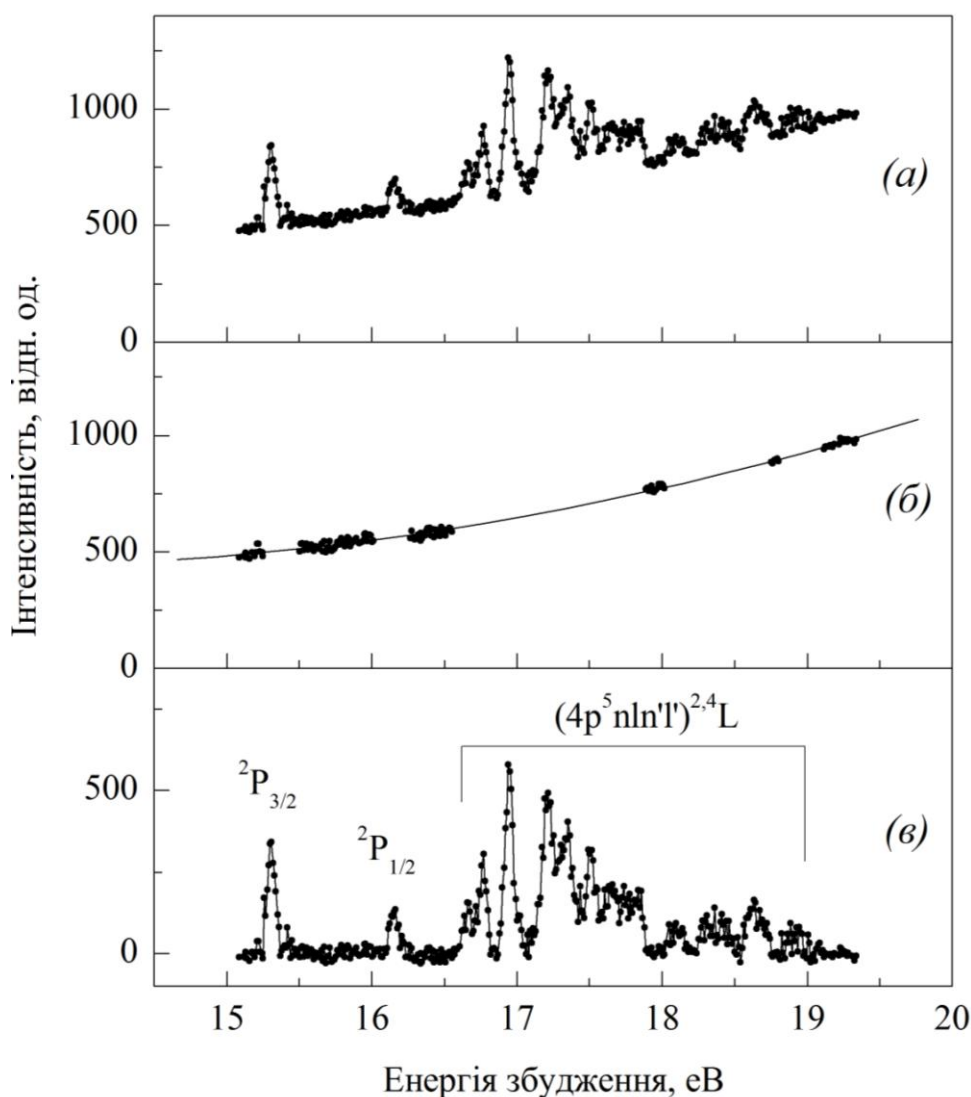


Рис. 1.11. Спектр ежктованих електронів атома рубідію, одержаний при енергії зіткнень $E_0 = 18.82$ eV: *a* – експериментально отриманий спектр; *б* – залишок спектра, що не містить дискретних ліній (точки) та результат його фітування поліномом 2-го ступеня (суцільна крива); *в* – спектр, одержаний шляхом віднімання від спектра *a* поліноміальної функції.

у спектрі ежекованих електронів або лінії $5p\ ^2P_{3/2}$ у спектрі енергетичних втрат. Приклад зміни у часі експериментальних умов наведено на рис. 1.12. Видно, що за повний час вимірів (близько 33 годин) інтенсивність змінювалася у бік зростання з максимальним відхиленням від початкового значення на $\approx 30\%$. Нормування інтерполяційної кривої на початкове значення інтенсивності лінії $^2P_{3/2}$ визначало фактор корекції для кожного із 32 виміряних у даному експерименті повних спектрів ежекованих електронів.

Невизначеності енергетичних шкал первинного електронного пучка та ежекованих електронів були розглянуті вище, тут ми зупинимось на встановленні невизначеності при дослідженні інтенсивності ліній.

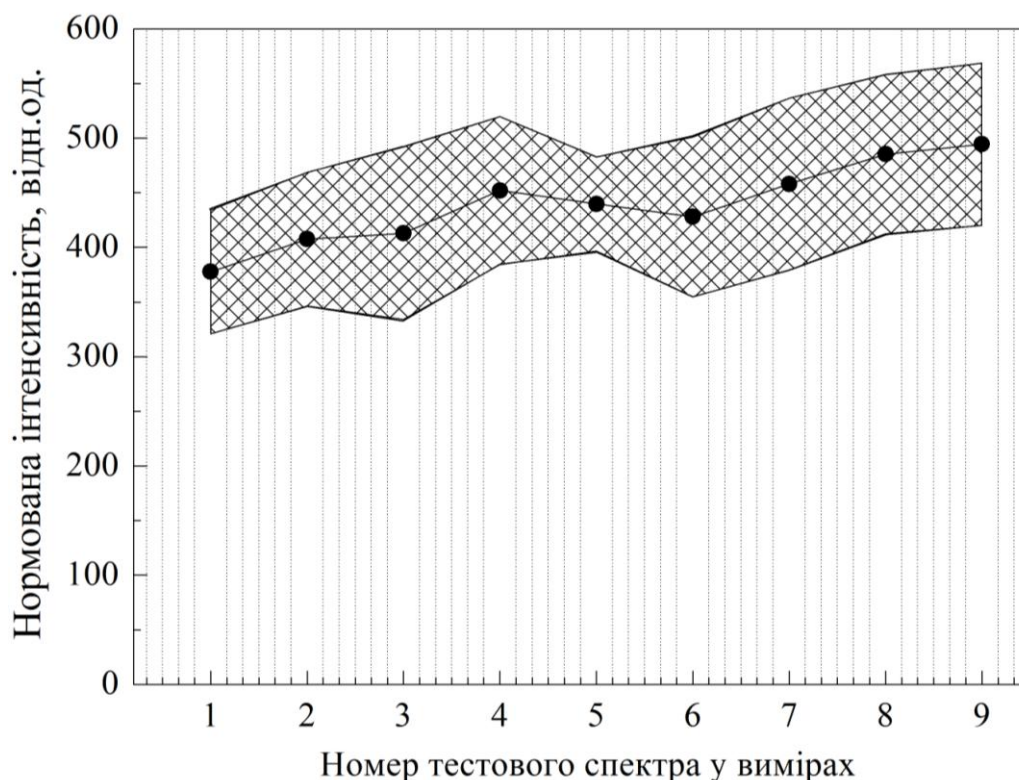


Рис. 1.12. Зміни експериментальних умов (точки) на прикладі нормованої на струм первинного пучка інтенсивності лінії $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$. Інтерполяційна крива (суцільна лінія) визначає фактор корекції інтенсивності ліній у спектрах ежекованих електронів. Заштрихована ділянка позначає діапазон статистичної невизначеності процедури корекції інтенсивності ліній.

Як було зазначено вище, експериментальні дані з визначення інтенсивності ліній одержувалися із 3-5 незалежних вимірів з часом накопичення спектрів, при якому статистичний розкид сигналу не перевищував 10% для середніх та високих за інтенсивністю ліній. Цей параметр міг погіршуватися у разі дослідження припорогових областей енергій зіткнень, де інтенсивність ліній була мінімальна. Остаточні дані з інтенсивності ліній являли собою середні значення результатів I_i окремих вимірів:

$$\bar{I} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I_i, \quad (1.3)$$

визначені із середньою квадратичною невизначеністю:

$$S_n = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \Delta I_i^2}{n-1}}, \quad (1.4)$$

де $\Delta I_i^2 = (\bar{I} - I_i)^2$ [80].

З урахуванням невизначеності фактора корекції максимальне значення повної відносної невизначеності для основної частини одержаних даних не перевищувало 25%. Однак у припороговій області енергій це значення могло зростати до 45-50%.

Висновки до розділу 1

1. Порівняльний аналіз основних експериментальних методів дослідження явища автоіонізації дозволив визначити найбільш оптимальну методику вимірів та обробки спектрів ежектованих і розсіяних електронів при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію.

2. З урахуванням методики налаштування апаратури, проведення вимірів та обробки результатів, встановлено можливі джерела невизначеностей та їх граничні значення у проведених дослідженнях.

3. Розглянуті принцип роботи, конструкції та параметрів монохроматора первинного електронного пучка, джерела атомного пучка, аналізатора енергій розсіяних та ежектованих електронів, систем вакуумного помпування, електроживлення та детектування корисного сигналу дали змогу визначити оптимальні умови вимірів енергетичних спектрів розсіяних та ежектованих електронів атома рубідію. А саме:

- діапазон енергій зіткнень – $E_0 = 15-600 \text{ eV}$;
- інтенсивність первинного електронного пучка – $I_0 = 0.1-0.2 \text{ мкА}$;
- монокінетичність первинного електронного пучка – $\Delta E_{1/2} \leq 0.2 \text{ eV}$;
- енергетична роздільна здатність аналізатора – $\Delta E_{1/2} \leq 0.05 \text{ eV}$;
- температура джерела атомного пучка – 120° C ;
- густина атомного пучка у зоні зіткнень – $n \sim 10^{11}-10^{12} \text{ ат/см}^3$;
- робочий вакуум – $P \leq 2 \cdot 10^{-5} \text{ Па}$.

РОЗДІЛ 2

ЕНЕРГЕТИЧНІ СПЕКТРИ РОЗСІЯНИХ ТА ЕЖЕКТОВАНИХ ЕЛЕКТРОНІВ АТОМА РУБІДІЮ

2.1. Енергетична структура спектрів

Енергетичні спектри розсіяних та ежектованих електронів, що утворюються при непружних електрон-атомних зіткненнях, є первинним джерелом інформації про енергетичну структуру атома. Стосовно атома рубідію при його взаємодії з електронами, що мають енергію меншу за потенціал іонізації $4p^6$ оболонки ($IP = 20.71$ eV [31]), є можливими такі реакції збудження та іонізації у порядку їх енергетичних порогів:



Реакції (2.1) та (2.2) являють собою збудження та іонізацію валентної $5s$ оболонки, відповідно. Реакція (2.3) відображає збудження субвалентної $4p^6$ оболонки атома рубідію з утворенням АІС $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$. Розсіяні електрони e_p , що втратили частину початкової енергії на збудження атома (реакції (2.1), (2.3)), формують спектр енергетичних втрат первинних електронів, в якому кожна лінія відображає збудження певного атомного рівня. Електронний розпад АІС $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$ (див. у вступі реакцію (2)), що утворилися в результаті реакції (2.3), формує енергетичний спектр ежектованих електронів атома рубідію. Електрони e_p та e_i , що утворилися у результаті реакції (2.2), складають основну частину неперервного фону в спектрах ежектованих та розсіяних електронів. Додають свій внесок до фону також електрони, що утворюються за рахунок розсіювання на атомах залишкового газу та на внутрішній поверхні камери зіткнень.

Характерною особливістю енергетичних спектрів розсіяних електронів є те, що вони дозволяють вивчити збудження усіх типів атомних переходів – оптично дозволених, оптично заборонених, а також збудження метастабільних станів. На початок даних досліджень були відомі спектри розсіяних електронів при збудженні валентної $5s$ оболонки атома рубідію [81]. Для них були визначені табульовані дані з енергій збудження та ідентифікації станів $4p^6nl$ [78, 82, 83]. Наявність цих даних дала змогу використовувати їх в нашій роботі для калібрування шкали енергій та контролю стабільності експериментальних умов, про що детально йшлося у підрозділі 1.3. Дані про спектри розсіяних електронів при збудженні $4p^6$ оболонки атомів рубідію були відсутні.

Наголосимо, що дослідження спектрів ежектованих електронів при збудженні субвалентної $4p^6$ оболонки було проведено тільки для трьох значень енергій зіткнень – 27, 400, 500 еВ [35, 36]. У роботі [35] спектр ежектованих електронів було одержано при енергії зіткнень 500 еВ та куті спостереження 90° , в якому було виявлено тільки 17 ліній. Покращення енергетичної роздільної здатності та чутливості вимірів дозволило авторам [36] у спектрах при 27 та 400 еВ під кутом спостереження 75° виявити вже 66 ліній, з яких 26 ліній відповідали даним фотопоглинання [34].

У даній роботі енергетичні спектри розсіяних електронів (2.1), (2.3) та спектри ежектованих електронів (див. у вступі реакцію (2)), що утворилися при розпаді АІС $4p^5n_1l_1n_2l_2$ (2.3), були досліджені в діапазоні енергій зіткнень від порогу збудження станів до 600 еВ. Нижче розглянемо ці дані окремо для кожного типу спектрів.

Енергетичні спектри розсіяних електронів. У даній роботі енергетичні спектри втрат первинних електронів при збудженні валентної $5s$ оболонки в атомі рубідію досліджувалися у рамках вимірів тестових спектрів (див. підрозділ 1.3). На рис. 2.1 наведено приклад енергетичного спектра

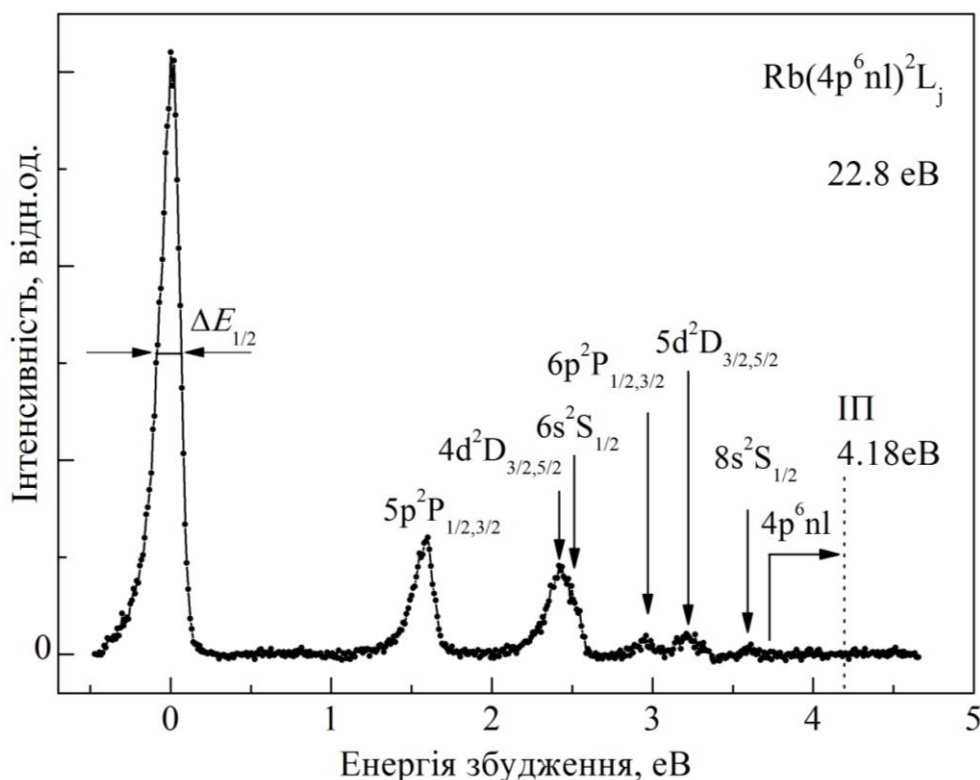


Рис. 2.1. Енергетичний спектр розсіяних електронів при збудженні валентної $5s$ оболонки атома рубідію при енергії зіткнень 22.8 еВ [60].

Фон був апроксимований поліноміальною функцією і віднятий від експериментальних даних.

розсіяних електронів, одержаного при енергії зіткнень 22.8 еВ. Домінуючий за інтенсивністю пік при нульовій втраті енергії характеризує процес пружного розсіювання електронів на атомах рубідію. Значення ПШПВ для цього піка відповідає моноенергетичності первинного електронного пучка (див. підрозділ 1.3.), що у даному випадку становить $\Delta E_{1/2} = 0.12$ еВ. Далі у спектрі спостерігається п'ять максимумів, які відповідають збудженню ду-блетних рівнів $4p^6 nl$. Усі максимуми є результатом суперпозиції кількох ліній. Перший максимум відображає збудження $5p^2 P_{1/2,3/2}$ рівнів з енергетичними порогоми 1.56 та 1.58 еВ, а друга лінія при 2.4 еВ є результатом збудження $4d^2 D_{3/2,5/2}$ та $6s^2 S_{1/2}$ рівнів [83]. Наступні, незначні за інтенсивністю піки в діапазоні енергій 2.7 - 3.8 еВ є результатом суперпозиції ліній, що відповідають збудженню рівнів конфігурацій np , nd та ns ($n \geq 6$).

На рис. 2.2 представлений спектр розсіяних електронів при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію при енергії зіткнень 24.7 еВ в інтервалі енергетичних втрат 15-19 еВ. Зазначимо, що даний спектр відображає збудження всіх $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$ атомних станів, тобто: автоіонізаційних, квазіметастабільних та метастабільних. Повністю енергетично відокремленими є перші дві лінії 1 та 2 при енергіях 15.31 та 16.16 еВ, а в області енергій 16.5-18 еВ спостерігаються найбільш інтенсивні максимуми, які формуються від злиття кількох близько розташованих ліній. Енергетична роздільна здатність у даному спектрі, який відображає непружне розсіювання первинного електронного пучка, визначається його моноенергетичністю.

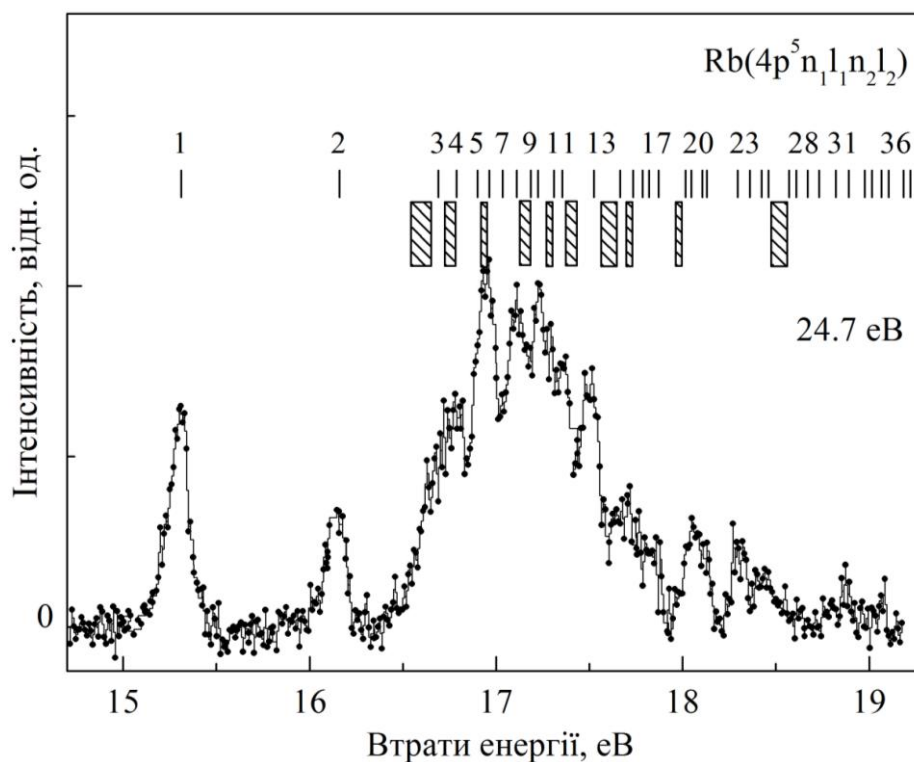


Рис. 2.2. Спектр розсіяних електронів при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію при енергії зіткнень 24.7 еВ [60]. Фон був апроксимований поліноміальною функцією і віднятий від експериментальних даних. Асиметричність профілів ліній 1, 2 відображає енергетичний розподіл первинного електронного пучка. Заштриховані області вказують на енергетичне положення ліній, які не спостерігались раніше в електронних спектрах [36] та спектрах фотопоглинання [34].

Енергетичні спектри ежектованих електронів. На рис. 2.3 представлено повний енергетичний спектр ежектованих електронів при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію електронним пучком з енергією 22.6 еВ. У спектрі спостерігається 82 лінії, з них 16 ліній виявлено нами вперше. З аналізу енергетичного діапазону 11-17 еВ, в якому лежить спектр, випливає, що всі лінії мають відповідати збудженню та розпаду атомних АІС $(4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2)^{2,4}L$, які лежать нижче від першого збудженого стану іона $Rb^+ 4p^5(^2P_{3/2})5s^2[3/2]_2^0$ з порогом збудження 20.712 еВ [31].

Незважаючи на високу роздільну здатність вимірів ($\Delta E_{1/2} \leq 0.05$ еВ), у спектрі спостерігається злиття близько розташованих ліній з максимумом інтенсивності в області енергій збудження 12.5-13.5 еВ. Згідно з даними [32, 34-36], лінії 1 та 2, при енергіях 11.14 та 11.99 еВ відповідають розпаду дублетних АІС $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$.

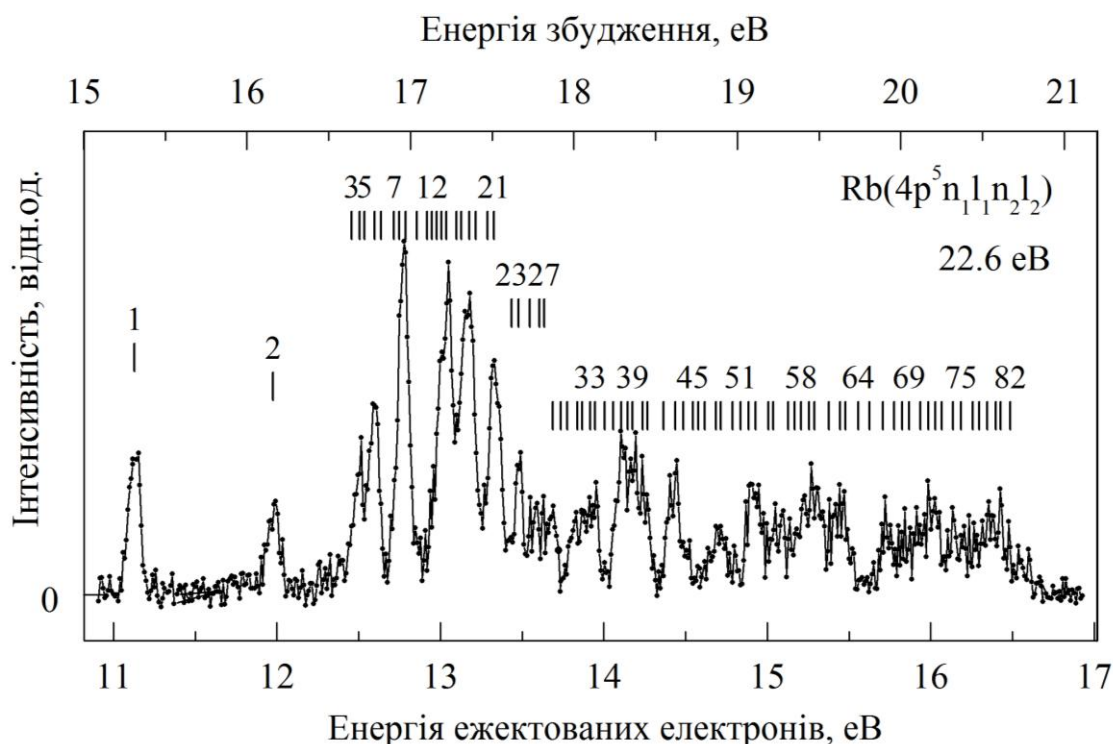


Рис. 2.3. Енергетичний спектр ежектованих електронів атома рубідію при енергії зіткнень 22.6 еВ [63]. Фон був апроксимований поліноміальною функцією і віднятий від експериментальних даних.

2.2. Динаміка збудження ліній в енергетичних спектрах ежектованих електронів

Динаміка збудження спектрів ежектованих електронів досліджувалась у діапазоні енергій первинних електронів від порогу збудження $4p^6$ оболонки при 15.31eV [34] до 600 eV.

На рис. 2.4, 2.5 представлені приклади таких спектрів, одержаних для припорогових та високих значень енергій зіткнень, які відображають динаміку збудження АІС $4p^5n_1l_1n_2l_2$. Зазначимо, що шкала інтенсивності у представлених спектрах є нормованою на струм первинного електронного пучка.

Як видно з рис. 2.4, першою у спектрах з'являється лінія 1, що відповідає розпаду $(4p^55s^2)^2P_{3/2}$ АІС з порогом збудження 15.31 eV [34]. Із збільшенням енергії зіткнень спостерігається різке зростання її інтенсивності з максимальним значенням при енергії зіткнень ≈ 1 eV над порогом (див. спектр при 16.43 eV). Така поведінка інтенсивності лінії свідчить про те, що відповідний АІС має резонансний характер збудження. У першому спектрі при енергії 15.36 eV профіль лінії 1 є уширеним, а також спостерігається її зміщення у сторону більших енергій на 0.05 eV. Це вказує на існування ефекту ВПЗ при розпаді даного АІС (див. розділ 4).

У спектрі при енергії зіткнень 16.43 eV спостерігається асиметричність профілю лінії 1 з боку високих енергій (позначено стрілкою). Ретельний аналіз поведінки інтенсивності спектра у цій області енергій, представлений на рис. 2.6, показав, що ця асиметрія пов'язана з присутністю широкої лінії з порогом збудження 15.4 ± 0.1 eV, яка відповідає електронному розпаду автоіонізаційного стану C_x молекули Rb_2 .

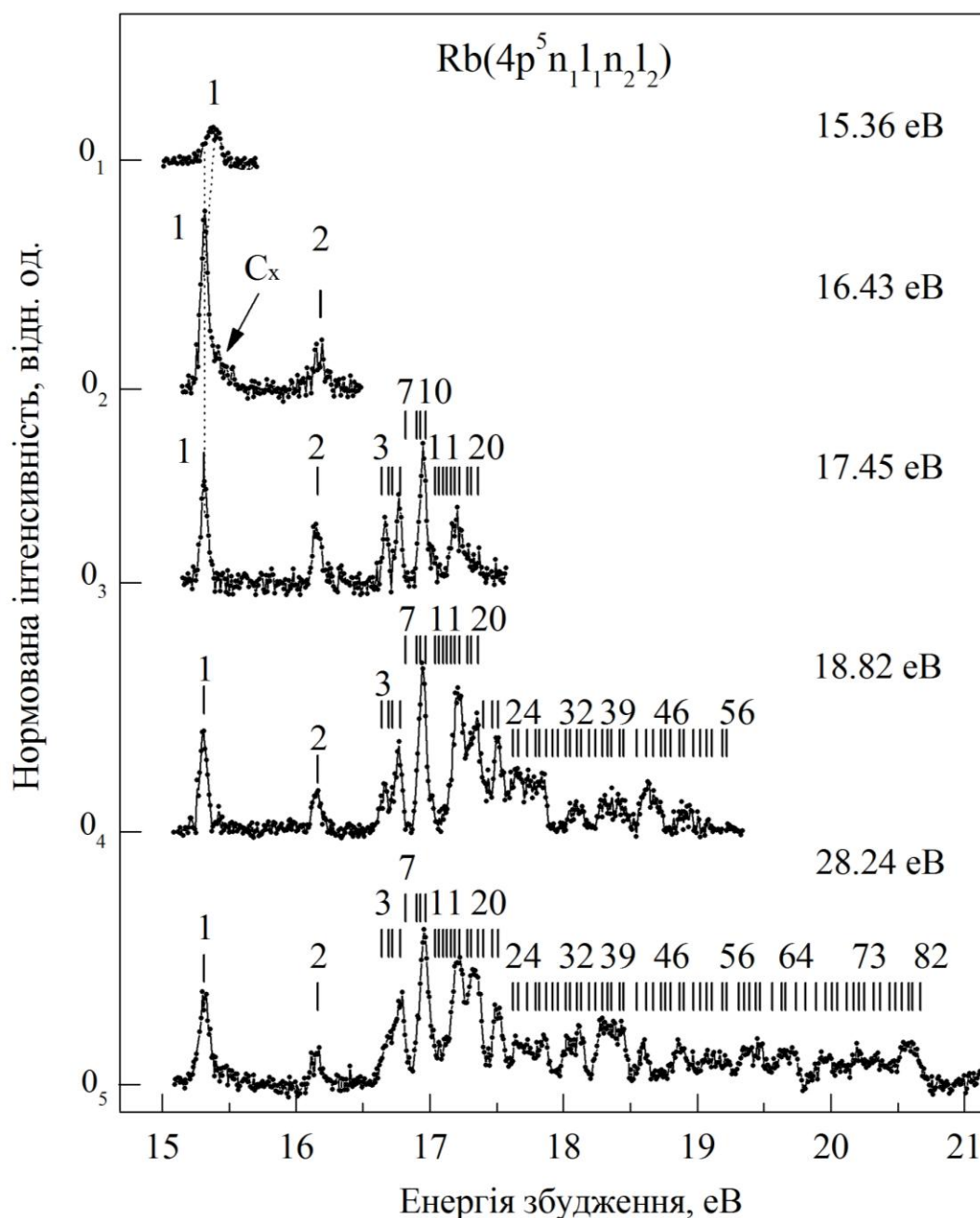


Рис. 2.4. Спектри ежектованих електронів атома рубідію, одержані для різних значень енергії зіткнень [63]. Фон був апроксимований поліноміальною функцією і віднятий від експериментальних даних.

Подібну до лінії 1 динаміку збудження має лінія 2, що відповідає розпаду $(4p^5 5s^2) ^2P_{1/2}$ АІС з порогом збудження 16.16 eV [34]. Нами визначено, що максимального значення інтенсивність лінії 2 набуває при енергії зіткнень ≈ 17 eV. Це вказує на наявність припорогового резонансного збудження.

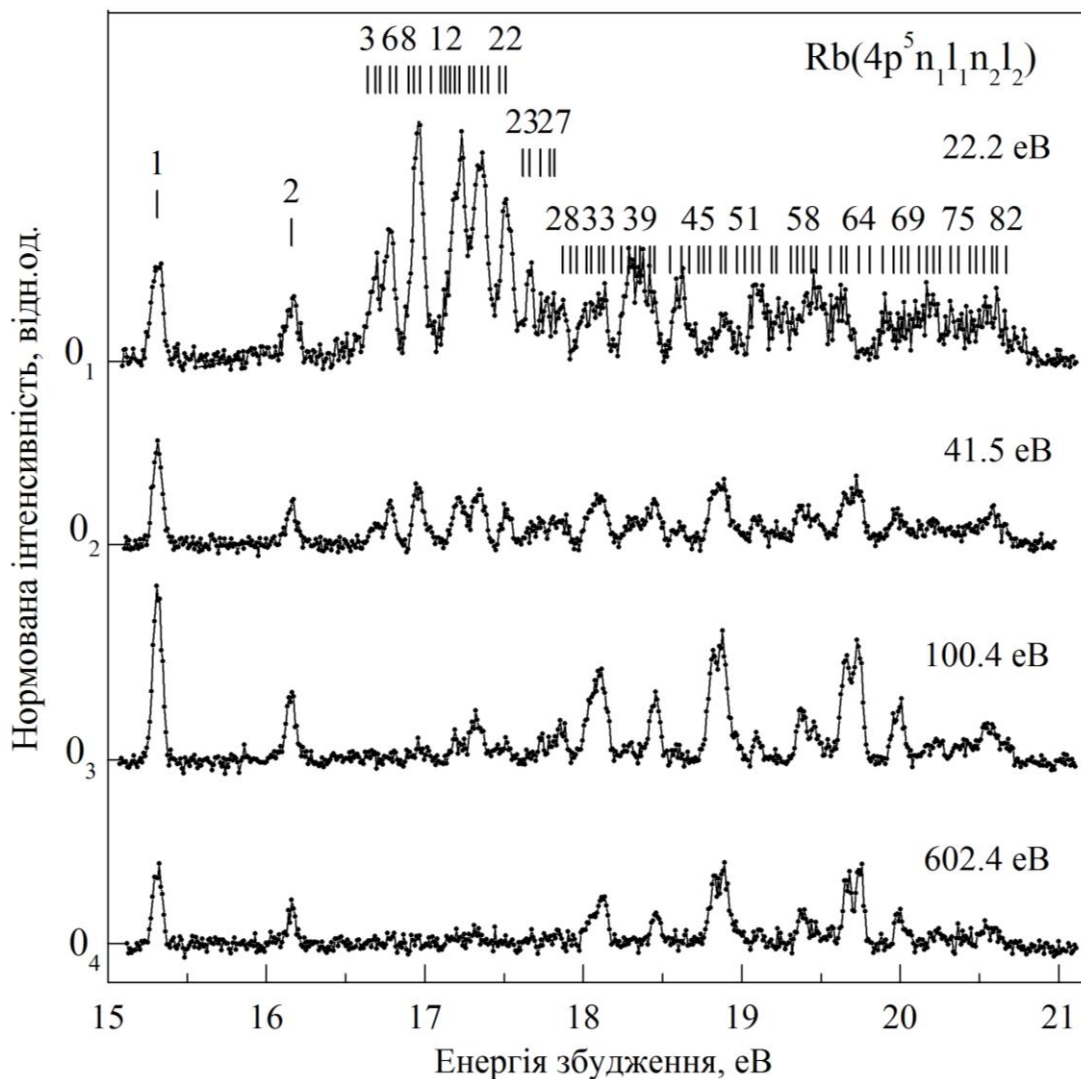


Рис. 2.5. Енергетичні спектри електронів атома рубідію, одержані для різних значень енергії зіткнень [59]. Фон був апроксимований поліноміальною функцією і віднятий від експериментальних даних.

Група інтенсивних ліній 3-20 має відмінний від попередніх двох ліній характер збудження. Хоча тут також наявне різке зростання ефективності при енергіях, близьких до порогу збудження, але максимум інтенсивності досягається при енергії ≈ 30 еВ. Із подальшим збільшенням енергії зіткнень спостерігається різкий спад інтенсивності цих ліній (див. рис. 2.5) й вони практично відсутні у спектрах при 100 та 600 еВ. Така динаміка збудження ліній вказує на дипольно заборонений характер збудження відповідних АІС.

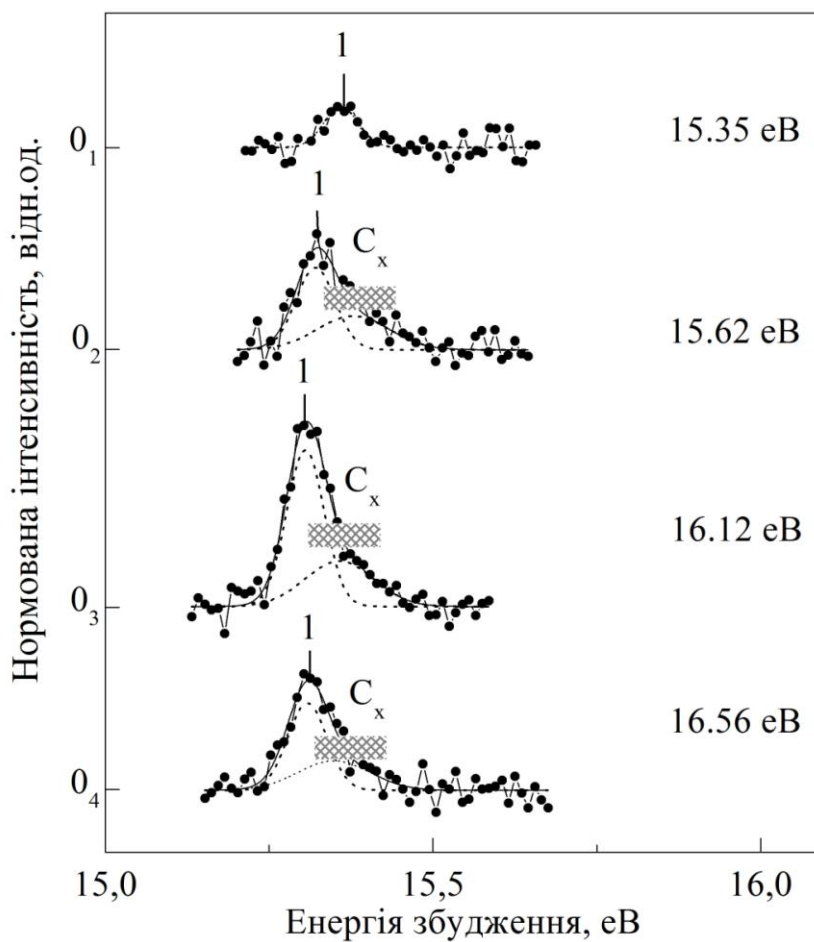


Рис. 2.6. Спектри електронних парів рубідію при збудженні електронним ударом, при енергіях зіткнень, близьких до порогу збудження атомного стану $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$ [84]. Пунктиром позначено профілі ліній, одержані в результаті фітування функцією Гауса [80].

Лінії 1, 2, а також ті, що мають пороги збудження понад 18 eV, проявляють дипольний характер збудження відповідних АІС, оскільки максимум їх інтенсивності лежить в області енергій зіткнень 100-200 eV. Зауважимо, що аналіз порогів збудження ліній не виявив наявності розпаду АІС, пов'язаних із збудженням більш глибоких оболонок, зокрема $4s^2$ оболонки.

Таким чином, розглянута динаміка збудження спектрів дозволила поділити всі спостережувані лінії на дві групи, а саме: такі, що утворюються внаслідок дипольно дозволених та дипольно заборонених переходів з основного стану атома.

2.3. Спектроскопічна ідентифікація ліній в енергетичних спектрах розсіяних та ежектрованих електронів

Спектроскопічна ідентифікація АІС $4p^5n_1l_1n_2l_2$ в атомі рубідію має довгу історію – від виявлення збудження найнижчого дублету $(4p^55s^2)^2P_{3/2}$ у спектрах фотопоглинання [32] до вибіркової ідентифікації найнижчих метастабільних та квазіметастабільних станів з конфігураціями $4p^54d5s$ та $4p^55s5p$ в оптичних спектрах (див. [7, 85] і посилання в них). Спроби здійснити ідентифікацію станів $4p^5n_1l_1n_2l_2$ з порогами збудження понад 17 еВ [37-40] наражалися на надзвичайно складну структуру як спектрів фотопоглинання [32, 34, 40], так і електронних ежекційних спектрів [35, 36]. Аналіз цих результатів показав, що для надійної ідентифікації високоенергетичних станів необхідною умовою є знання їх динаміки збудження у широкому діапазоні енергій зіткнень, а також наявність якісних теоретичних розрахунків енергій, перерізів збудження та ймовірностей їх розпаду. В останньому випадку, як було показано для атомів калію та цезію [29], теоретичний розгляд електронного збудження зовнішньої p^6 оболонки у цих атомах, а також у важкого атома рубідію повинен максимально враховувати релятивістський характер збудження.

При спектроскопічній ідентифікації АІС атома рубідію в даній роботі використовувались розрахунки їх параметрів у наближеннях Хартрі-Фока та взаємодії конфігурацій.

Метод Хартрі-Фока (ХФ), або метод самоузгодженого поля дозволяє звести складну багатоелектронну квантовомеханічну задачу дослідження структурних характеристик до розв'язування окремих одноелектронних задач [86]. Головним припущенням у цьому наближенні є те, що повна хвильова функція багатоелектронної системи являє собою детермінант з одноелектронних хвильових функцій. Процедура загального розв'язку якої складається із кількох етапів. На першому етапі розв'язується задача про рух електрона в певному модельному потенціалі,

який має якомога краще відображати взаємодію вибраного електрона з ядрами атомів та іншими електронами. Далі знайдені одноелектронні хвильові функції використовуються для визначення потенціалу такої взаємодії. Для одержаного значення нового потенціалу знову розв'язується задача знаходження одноелектронних хвильових функцій. Процедура продовжується до досягнення збіжності розв'язку за енергіями та хвильовими функціями електронів.

Для врахування кореляційних ефектів, які безумовно відіграють суттєву роль у важких атомах [41], додатково використовувалося *наближення взаємодії конфігурацій* (ВК або CI – configurations interaction [87]). Суть цього методу полягає у тому, що багатеелектронна хвильова функція розкладається по детермінантах, які описують основний та всі можливі збуджені стани атома. Перевага методу ВК полягає у тому, що він застосовний для достатньо адекватного опису збуджених станів, систем із відкритими оболонками і високозбуджених систем [87]. Тобто він дає можливість одержати якісні хвильові функції як для зв'язаних, так і для автоіонізаційних станів.

Часткове врахування релятивістських ефектів при теоретичних розрахунках енергетичної структури АІС атома здійснюється у рамках наближення Брейта-Паулі [39]. Повне врахування релятивістських поправок проводиться шляхом розв'язування рівняння Дірака для електронів в центральному полі ядра атома [88].

Перші теоретичні розрахунки енергетичної структури $4p^5n_1l_1n_2l_2$ АІС атома рубідію були проведені в нерелятивістському одноконфігураційному наближенні ХФ [38]. Для досягнення деякої відповідності теоретичних значень енергії з експериментальними даними [36, 37] було здійснено налаштування параметрів Слетера-Кондона для штучного зсуву рівнів у конфігураціях $4p^54d5p$, $4p^55s5p$. Недоліком цих розрахунків було нехтування релятивістськими поправками. Часткове врахування останніх вперше було здійснено у межах наближення Брейта-Паулі [39]. Ці результати виявили суттєві

зміни в розташуванні АІС у порівнянні із попередньою ідентифікацією [38] навіть у найнижчих $4p^5 4d 5s$ і $4p^5 5s 5p$ конфігураціях. Така ситуація показала, що для важкого атома рубідію при теоретичних розрахунках необхідне максимально повне врахування як релятивістських, так і кореляційних ефектів.

Теоретичні розрахунки енергій, швидкостей розпаду і перерізів електронного збудження рівнів $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$ атома рубідію в [71] були одержані з урахуванням конфігураційної взаємодії у базисі релятивістських радіальних орбіталей Дірака-Фока-Слетера [89]. Вони були використані нами для спектроскопічної ідентифікації ліній в енергетичних спектрах розсіяних та ежектованих електронів атома рубідію. Розрахунки проводилися в Інституті теоретичної фізики Вільнюського університету провідним науковим співробітником А. Купліаускіене та аспірантом Г. Керявічусом у рамках програми наукового співробітництва Інституту електронної фізики НАН України та Вільнюського університету Литви.

При розрахунках було розглянуто збудження рівнів таких конфігурацій: $4p^6 n l$ ($n l = 5s, \dots, 10s; 5p, \dots, 10p; 4d, \dots, 10d; 4f, \dots, 6f$), $4p^5 n l n' l'$ ($n l = 5s, \dots, 7s; 5p, \dots, 7p; 4d, \dots, 7d; 4f, \dots, 7f; 5g, \dots, 7g; n' l' = 5s, \dots, 10s; 5p, \dots, 10p; 4d, \dots, 10d$) та $4p^5 n l^2$ ($n l^2 = 5s^2, \dots, 10s^2; 5p^2, \dots, 10p^2; 4d^2, \dots, 10d^2; 4f^2, \dots, 7f^2; 5g^2, \dots, 7g^2$). Загальна кількість рівнів, які використовувались у розрахунках, становила 22159.

Теоретичні розрахунки показали сильне змішування дублетних та квартетних рівнів. Тому ще одним фактором при спектроскопічній ідентифікації АІС було врахування кореляційного впливу між рівнями. Тобто кінцеве визначення LS -терму кожного АІС виконувалось шляхом аналізу відповідного розкладу за власними векторами. Коефіцієнти такого розкладу разом із розрахованими енергіями та перерізами збудження для деяких АІС, а також імовірностями їх розпаду наведено як приклад в табл. 2.1. Дійсно, з таблиці видно, що тільки кілька нижніх АІС конфігурацій $5s^2$ та $4d 5s$ піддані впливу конфігураційного змішування не більше 10%, для інших більш високоенергетичних АІС цей коефіцієнт міг зростати до 50%.

Перерізи збудження для кожного АІС були розраховані в релятивістському наближенні спотворених хвиль.

Таблиця 2.1

Розраховані енергії електронного збудження (E , еВ), перерізи збудження (σ , 10^{-18} см²) при енергіях зіткнень 27 і 400 еВ, ймовірності електронного розпаду (A^a , с⁻¹) та коефіцієнти розкладу за власними векторами для деяких АІС $4p^5 nl(L_I S_I) n' l' L S J$ атома рубідію [71].

$(L_I S_I) L S J$	E	Коефіцієнти розкладу за власними векторами	σ	A^a
$5s^2 \ ^2P_{3/2}$	15.258	$0.98 \ 5s^2 \ ^2P + 0.12 \ 5p^2 \ (^1S)^2P$	10.42, 2.55	$7.65+12^a$
$5s(^3P)5p \ ^4S_{3/2}$	16.125	$0.92 \ 5s(^3P)5p^4S - 0.29 \ 5s(^3P)5p^4P$	1.89, 0.00	$1.07+08$
$5s^2 \ ^2P_{1/2}$	16.140	$0.95 \ 5s^2 \ ^2P + 0.21 \ 4d(^3P)5s^2P$	4.63, 1.05	$1.00+13$
$4d(^3P)5s \ ^4P_{1/2}$	16.647	$0.97 \ 4d(^3P)5s^4P - 0.19 \ 5s(^3P)5d^4P$	4.39, 0.02	$9.10+08$
$4d(^3P)5s \ ^4P_{3/2}$	16.768	$0.94 \ 4d(^3P)5s^4P - 0.28 \ 4d(^3D)5s^4D$	8.60, 0.07	$6.00+07$
$5s(^3P)5p \ ^4P_{5/2}$	16.870	$0.82 \ 5s(^3P)5p^4P + 0.44 \ 5s(^1P)5p^2D$	1.00, 0.07	$5.22+11$
$4d(^3F)5s \ ^4F_{7/2}$	17.173	$0.92 \ 4d(^3F)5s^4F + 0.27 \ 4d(^1F)5s^2F$	5.81, 0.01	$1.32+11$
$4d(^3P)5s \ ^2P_{1/2}$	17.431	$0.84 \ 4d(^3P)5s^2P - 0.38 \ 4d(^3D)5s^4D$	3.33, 0.00	$1.86+13$
$4d(^3P)5s \ ^2P_{3/2}$	17.563	$0.78 \ 4d(^3P)5s^2P + 0.47 \ 4d(^1D)5s^2D$	6.11, 0.15	$1.59+13$
$4d(^3F)5s \ ^2F_{5/2}$	17.649	$0.58 \ 4d(^1D)5s^2D + 0.52 \ 4d(^3F)5s^2F$	3.33, 0.07	$7.61+12$
$4d(^1F)5s \ ^2F_{7/2}$	18.359	$0.68 \ 4d(^1F)5s^2F - 0.50 \ 4d(^3D)5s^4D$	4.09, 0.30	$1.65+12$
$4d(^3D)5s^2D_{5/2}$	18.634	$0.70 \ 4d(^3D)5s^2D + 0.41 \ 4d(^3F)5s^2F$	2.78, 0.04	$1.21+13$
$4d(^1P)5s \ ^2P_{1/2}$	18.791	$0.69 \ 5s(^3P)5d^2P + 0.50 \ 4d(^1P)5s^2P$	2.77, 0.58	$2.29+12$
$4d(^1P)5s \ ^2P_{3/2}$	18.886	$0.45 \ 5s(^3P)5d^2P - 0.45 \ 5s(^3P)5d^2D$	2.79, 0.52	$5.83+12$
$5s(^3P)5d \ ^2P_{1/2}$	19.410	$0.38 \ 4d^2(^3P)^2S - 0.35 \ 5s(^3P)6d^2P$	1.19, 0.25	$3.72+12$
$5s(^1P)6s \ ^2P_{3/2}$	19.449	$0.78 \ 5s(^1P)6s^2P - 0.50 \ 5s(^3P)6s^4P$	1.93, 0.46	$3.17+10$

^a $7.65 + 12$ означає 7.65×10^{12}

Результати теоретичних розрахунків були отримані у позначеннях JJ -зв'язку, однак для зручності порівняння з іншими спектроскопічними даними ці позначення були переведені у систему LS -зв'язку, яка добре себе зарекомендувала в попередніх дослідженнях (див. роботу [29] та посилання в ній).

Окрім цих даних, при спектроскопічній ідентифікації АІС, що спостерігалися у спектрах розсіяних та ежекттованих електронів, нами враховувались й інші характеристики збудження та розпаду АІС. Зокрема, динаміка збудження ліній у спектрах (див. рис. 2.4, 2.5) порівнювалась із поведінкою розрахованих перерізів збудження σ , а також враховувалась імовірність їх електронного розпаду A^a . При цьому, оскільки із ростом енергії збудження рівнів точність теоретичного визначення їх значень погіршується (див. роботу [29] та посилання в ній), при спектроскопічній ідентифікації враховувалися не їх розраховані значення, а енергетичні проміжки між енергіями збудження станів однакових конфігурацій. Результати нашої спектроскопічної ідентифікації АІС $4p^5n_1l_1n_2l_2$, складають зміст табл. 2.2 та схеми розташування рівнів і каналів їх розпаду (рис. 2.7). Невизначеність у значеннях енергій збудження АІС E_{36} становила ± 0.05 еВ для атомних станів [61] і ± 0.1 еВ — для молекулярного стану C_x [61].

Із 82 ліній, що спостерігаються в енергетичних спектрах атома рубідію, 76 ідентифіковано як розпад станів $4p^5n_1l_1n_2l_2$ з порогамі одноелектронного та двоелектронного збудження не вище 20.71 еВ. У процесі розпаду АІС домінуючим є електронний канал з утворенням однозарядного іона в основному стані. Тільки для двох найнижчих квазіметастабільних $5s(^3P)5p^4S_{3/2}$ та $4d(^3P)5s^4P_{5/2}$ АІС мають місце радіаційні переходи на збуджені валентні рівні $5p$ і $4d$ атома (див. схему на рис. 2.7). Щодо квазіметастабільних станів з порогамі збудження понад 18.4 еВ (див. лінії 42, 45, 47, 49, 52), то тут ефективними є радіаційні переходи на рівень $5s(^3P)5p^4S_{3/2}$ з енергією збудження 16.64 еВ.

Таблиця 2.2

Спектроскопічна ідентифікація ліній [61], що спостерігаються в енергетичних спектрах електронів та розсіяних електронів атома рубідію. (Літерами А, Р позначений автоіонізаційний та радіаційний тип каналу розпаду, відповідно. Літерою М позначено метастабільний стан атома).

<i>Лінія</i>	<i>E_{36} (eV)</i>	<i>Стан (перехід)</i>	<i>Тип розпаду</i>	<i>Автори ідентифікації</i>
1	2	3	4	5
1	15.31	$5s^2\ ^2P_{3/2}$	A	[32, 38, 63]
C _x	15.40	$Rb_2^* \rightarrow Rb_2^+ (^2\Sigma_g^+)$	A	[84]
2	16.16	$5s^2\ ^2P_{1/2}$	A	[32, 38, 63]
3	16.64	$5s(^3P)5p\ ^4S_{3/2}$	A, P	[90, 7, 91, 92]
4	16.69	$4d(^3P)5s\ ^4P_{1/2}$	A	[38, 63]
5	16.72	$5s(^3P)5p\ ^4D_{7/2}$	M	[60, 93]
6	16.78	$4d(^3P)5s\ ^4P_{3/2}$	A	[32, 38, 63, 91]
7	16.82	$5s(^3P)5p\ ^4D_{5/2}$	A	[60]
8	16.90	$5s(^3P)5p\ ^4P_{5/2}$	A	[71]
9	16.93	$5s(^3P)5p\ ^4P_{3/2}$	A	[71]
10	16.97	$4d(^3P)5s\ ^4P_{5/2}$	A, P	[7, 63]
11	17.04	$5s(^1P)5p\ ^2S_{1/2}$	A	[71]
12	17.07	-	A	-
13	17.10	-	A	-
14	17.13	$4d(^3F)5s\ ^4F_{9/2}$	M	[38, 71]
15	17.16	$5s(^3P)5p\ ^4P_{1/2}$	A	[71]
16	17.19	$4d(^3F)5s\ ^4F_{7/2}$	A	[38, 71]
17	17.22	$4d(^3P)5s\ ^2P_{1/2}$	A	[38, 63]
18	17.28	$5s(^3P)5p\ ^2P_{3/2}$	A	[71]
19	17.31	$4d(^3F)5s\ ^4F_{5/2}$	A	[38, 63]
20	17.36	$4d(^3P)5s\ ^2P_{3/2}$	A	[38, 63]
21	17.40	$5s(^3P)5p\ ^2D_{5/2}$	A	[71]
22	17.47	$5s(^1P)5p\ ^2D_{3/2}$	A	[71]
23	17.51	$4d(^3F)5s\ ^4F_{3/2}$	A	[38, 63]
24	17.62	$5s(^1P)5p\ ^2P_{1/2}$	A	[71]
25	17.66	$4d(^3F)5s\ ^2F_{7/2}$	A	[38, 63, 71]
26	17.73	$4d(^3F)5s\ ^2F_{5/2}$	A	[38, 63, 71]

Продовження табл. 2.2

<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>
27	17.79	$5s(^1P)5p\ ^2D_{5/2}$	A	[38]
28	17.82	$4d(^1F)5s\ ^2F_{5/2}$	A	[71]
29	17.87	$5s(^3P)5p\ ^2P_{1/2}$	A	[71]
30	17.92	$4d(^3D)5s\ ^4D_{7/2}$	A	[71]
31	17.96	-	A	-
32	18.02	$4d(^3D)5s\ ^4D_{1/2}$	A	[38, 71]
33	18.05	$4d(^3D)5s\ ^4D_{3/2}$	A	[38, 71]
34	18.10	$4d(^3D)5s\ ^4D_{5/2}$	A	[38, 71]
35	18.13	-	A	-
36	18.19	$4d(^3P)5p\ ^4D_{1/2}$	A	[71]
37	18.24	$4d(^3P)5p\ ^4D_{3/2}$	A	[71]
38	18.29	$4d(^1F)5s\ ^2F_{7/2}$	A	[71]
39	18.33	$5s(^3P)6s\ ^2P_{3/2}$	A	[38]
40	18.36	$4d(^1D)5s\ ^2D_{3/2}$	A	[71]
41	18.42	$5s(^3P)5p\ ^2S_{1/2}$	A	[71]
42	18.45	$4d(^3D)5s\ ^2D_{3/2}$	A, P	[85, 71]
43	18.55	$5s(^3P)6s\ ^2P_{1/2}$	A	[71]
44	18.62	$4d(^3D)5s\ ^2D_{5/2}$	A	[71]
45	18.67	$5s(^3P)6s\ ^4P_{5/2}$	A, P	[85]
46	18.73	$5s(^3P)6p\ ^2D_{5/2}$	A	[71]
47	18.76	$5s(^3P)6s\ ^4P_{3/2}$	P	[85]
48	18.80	$4d(^1P)5s\ ^2P_{1/2}$	A	[38, 63]
49	18.87	$5s(^1P)6s\ ^2P_{1/2}$	A, P	[85]
50	18.90	$4d(^1P)5s\ ^2P_{3/2}$	A	[38, 63]
51	18.97	$5s(^3P)5d\ ^4P_{3/2}$	A	[71]
52	19.02	$5p\ ^2^4D_{5/2}$	A, P	[85]
53	19.07	$5s(^3P)5d\ ^4F_{9/2}$	M	[60]
54	19.11	$5s(^3P)5d\ ^2D_{3/2}$	A	[63]
55	19.19	$5s(^3P)6s\ ^4P_{1/2}$	A	[71]
56	19.22	$5s(^1P)6s\ ^2P_{3/2}$	A	[38]
57	19.31	$4d^2(^3P)\ ^2D_{5/2}$	A	[71]
58	19.35	$4d^2(^3F)\ ^4D_{3/2}$	A	[71]
59	19.39	$5s(^3P)6p\ ^2S_{1/2}$	A	[63]

Продовження табл. 2.2

<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>
60	19.44	$5s(^3P)5f\ ^2D_{3/2}$	A	[71]
61	19.47	$4d(^3F)5p\ ^4D_{1/2}$	A	[71]
62	19.56	-	A	-
63	19.63	$5s(^3P_1)5d$	A	[40]
64	19.66	$5s(^3P)5d\ ^2P_{1/2}$	A	[63]
65	19.74	$5s(^1P)6s\ ^2P_{3/2}$	A	[63]
66	19.81	$5s(^3P_1)7s$	A	[40]
67	19.89	-	A	-
68	19.96	$5s(^1P)6d\ ^2P_{3/2}$	A	[63]
69	20.01	$4d(^3P_1)6s$	A	[40]
70	20.05	$4d(^3P_2)6s$	A	[40]
71	20.12	$5s(^3P_2)8s$	A	[40]
72	20.17	$5s(^3P_0)5d$	A	[40]
73	20.21	$5s(^1P)6p\ ^2S_{1/2}$	A	[63]
74	20.25	$5s(^3P_2)7d$	A	[40]
75	20.32	$5s(^3P_2)9s$	A	[40]
76	20.37	$5s(^3P_2)8d$	A	[40]
77	20.44	$5s(^1P_1)5d$	A	[40]
78	20.48	$5s(^3P_1)9s$	A	[40]
79	20.53	$5s(^3P_1)8d$	A	[40]
80	20.58	$4d(^1D)5p\ ^2P_{1/2}$	A	[63]
81	20.61	$5s(^1P_1)7s$	A	[40]
82	20.67	$4d(^3P_0)5d$	A	[40]

Слід окремо зупинитись на виявленні та ідентифікації метастабільних станів атома рубідію. На рис. 2.8 наведено порівняння енергетичних спектрів ежектованих (*a*) і розсіяних (*б*) електронів при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію, отриманих в одному експерименті при енергії зіткнень 25.5 еВ.

Аналіз представлених спектрів виявляє цікаву особливість – у спектрі ежектованих електронів (*a*) ділянкам з мінімальною інтенсивністю ліній (заштриховані) у енергетичному спектрі розсіяних електронів (*б*) відпові-

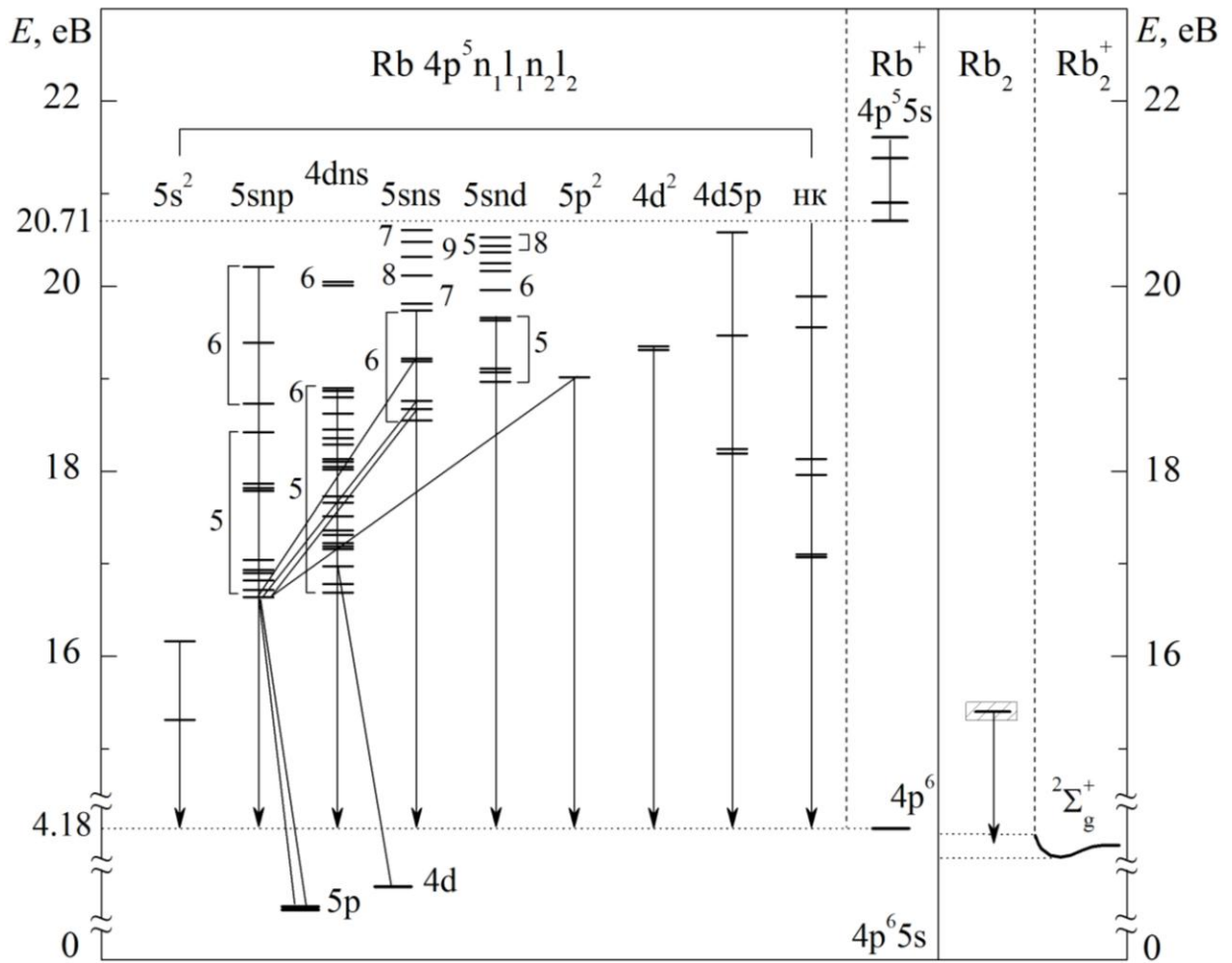


Рис. 2.7. Схема енергетичного розташування та каналів розпаду АІС $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$ в атомі та молекулі рубідію. Лінії зі стрілками позначають електронний канал розпаду, лінії без стрілок – радіаційний канал; нк – некласифіковані стани.

дають області з високою інтенсивністю (див. лінії із стрілками 5, 14, 53 на рис. 2.8). Причиною такої відмінності може бути ефективне припорогове збудження кватетних метастабільних станів, розпад яких, однак, не виявляється у спектрі ежектованих електронів внаслідок великих часів їх життя ($>10^{-6}$ с). У роботі [8] найбільш низькоенергетичний стан $^4F_{9/2}$ було виявлено з порогом збудження при 15.8 ± 0.3 еВ. Проте подальші дослідження [93] встановили цей поріг при енергії 16.77 еВ і пов'язали його зі збудженням рівня $5s(^3P)5p^4D_{7/2}$. Як показують проведені в нашій роботі дослідження, у

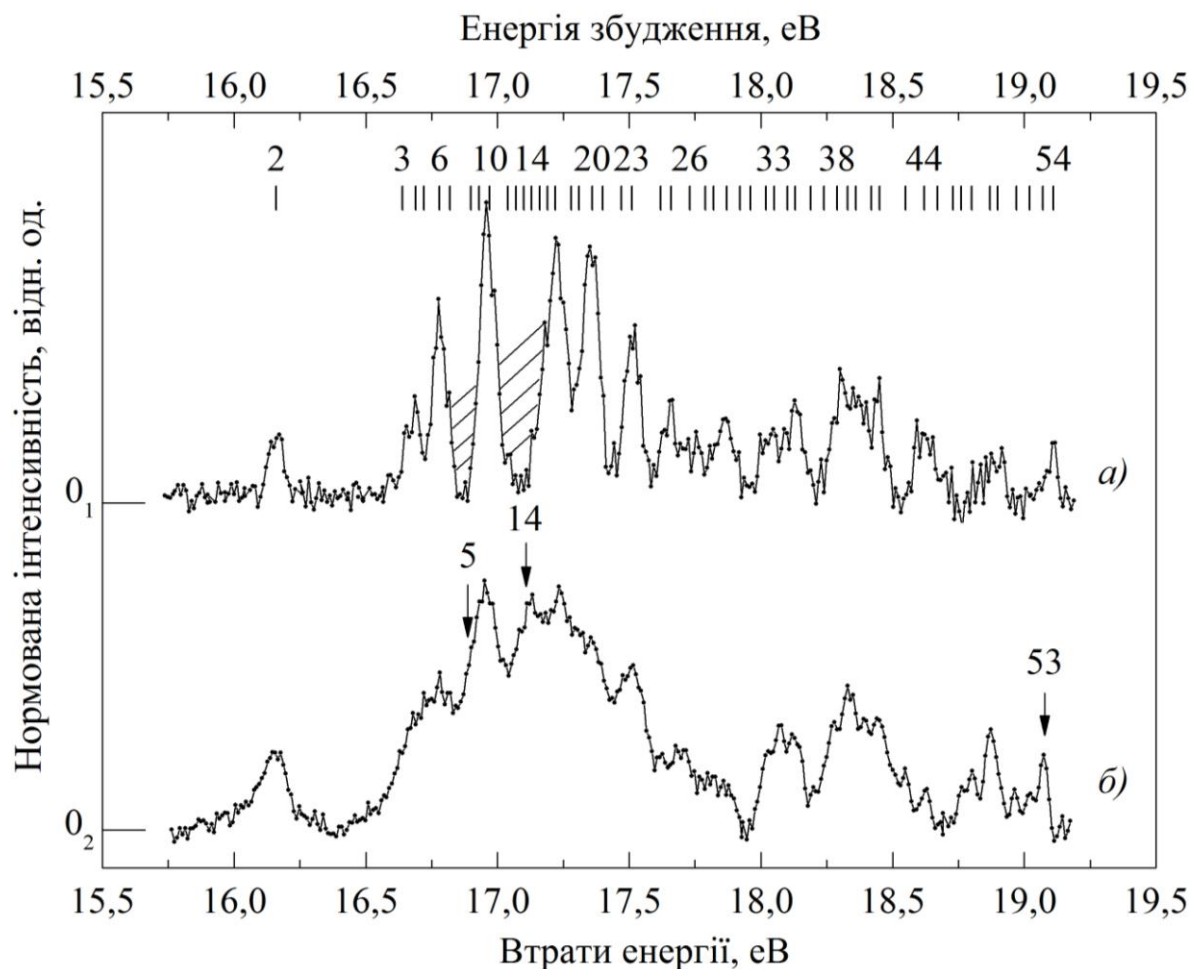


Рис. 2.8. Енергетичні спектри ежкетованих (а) і розсіяних (б) електронів при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію при енергії зіткнень 25.5 eV [60]. Фон апроксимований поліноміальною функцією і віднятий від експериментальних даних.

спектрі (б) на рис. 2.8 цьому рівню відповідає лінія 5 при енергії 16.72 ± 0.05 eV. Лінії 14 і 53, розташовані при енергіях збудження 17.13 і 19.07 eV, ідентифіковані як лінії, відповідні збудженню більш високоенергетичних метастабільних $4d(^3F)5s^4F_{9/2}$ і $5s(^3P)5d^4F_{9/2}$ станів.

Із даних табл. 2.2 та схеми на рис. 2.7 видно, що за кількістю станів домінують конфігурації $5s5p$ та $4d5s$ одноелектронного збудження. Стани цих же конфігурацій домінують за інтенсивністю у спектрах ежкетованих електронів (див. спектри на рис. 2.4, 2.5). Малоінтенсивні лінії 63, 66,

69-72, 74-79, 81, 82 віднесені до станів конфігурацій $4d5s$, $4d6s$, $5s5d$, $5s7s$, $5s8s$, $5s9s$. Більш інтенсивні лінії 28, 49, 52, 57, 58, 80 класифіковані як збудження станів конфігурацій $5p^2$, $4d^2$, $4d5p$, $4d6s$, утворених внаслідок двоелектронних переходів.

Аналіз спектроскопічної ідентифікації АІС вказує на домінуючу роль кватретних станів у формуванні енергетичних спектрів розсіяних та ежектованих електронів атома рубідію при малих енергіях зіткнень. Дублетні АІС практично повністю визначають поведінку енергетичних спектрів в області середніх та високих енергій первинного електронного пучка (див. рис. (2.2)-(2.5)).

Слід також зауважити, що внаслідок сильного конфігураційного змішування декілька високоенергетичних станів були ідентифіковані не у відповідності із динамікою збудження цих ліній у спектрах. Так, наприклад, лінія 17, ідентифікована нами як дублетний $4d(^3P)5s\ ^2P_{1/2}$ АІС, у енергетичних спектрах ежектованих електронів мала ефективне припорогове збудження і майже нульову інтенсивність при енергіях понад 50 еВ, що є типовим для кватретних АІС. Такий характер поведінки пов'язаний із впливом ефекту кореляційного змішування з сусідніми кватретними АІС тієї ж конфігурації (див. табл. 2.1).

Що стосується молекулярної смуги C_x , то у відповідності з її динамікою збудження у спектрах ежектованих електронів (див. рис. 2.6), її слід віднести до розпаду оптично забороненого стану. Враховуючи дані попередніх досліджень збудження молекулярних АІС інших лужних атомів [22], ця молекулярна смуга була ідентифікована нами як електронний канал розпаду молекулярного АІС Rb_2^* з утворенням молекулярного іона в основному стані $Rb_2^+ (^2\Sigma_g^+)$ (див. схему на рис. 2.7).

Нам не вдалося ідентифікувати в енергетичних спектрах ежектованих та розсіяних електронів атома рубідію шість ліній, а саме лінії 12, 13, 31, 35, 62, 67. Це пов'язано з їх слабкою інтенсивністю та частковим перек-

риттям із сусідніми більш інтенсивними лініями (див. рис. 2.4, 2.5). Однак їх присутність в електронних спектрах при низьких енергіях (див. рис. 2.4) і майже повна відсутність при великих енергіях зіткнень (див. рис. 2.5) дозволяє віднести ці лінії до розпаду АІС з дипольно забороненим ($\Delta L > 1$, $\Delta S \geq 1$, $\Delta J > 1$) характером збудження. Можна стверджувати, що, зважаючи на енергетичне розташування, вони можуть належати до 4d5s (лінії 12, 13, 31, 35) та 5s6d (лінії 62, 67) конфігурацій [40].

Висновки до розділу 2

1. Результати дослідження енергетичних спектрів розсіяних та ежектованих електронів атома рубідію дозволили виявити 82 лінії із порогами збудження від 15.31 до 20.67 eV та широку лінію, що відповідає збудженню автоіонізаційного стану молекули Rb_2 .

2. Аналіз динаміки збудження ліній у спектрах ежектованих електронів у діапазоні енергій зіткнень 15-600 eV дав змогу визначити характер збудження відповідних автоіонізаційних станів та виявити наявність резонансних процесів збудження АІС у припороговій області енергій зіткнень.

3. Шляхом порівняльного аналізу енергетичних спектрів розсіяних та ежектованих електронів, отриманих при однакових експериментальних умовах, виявлено три метастабільні стани атома рубідію та визначено їх пороги збудження.

4. На базі теоретичних розрахунків встановлено спектроскопічну ідентифікацію для 76 із 82 атомних АІС та молекулярного автоіонізаційного стану, а також визначено схему енергетичного розташування цих станів і каналів їх розпаду.

5. Встановлено, що за кількістю та ефективністю збудження домінують автоіонізаційні стани конфігурацій $5s5p$ та $4d5s$.

6. Показано, що за ефективністю розпаду домінуючим є електронний канал розпаду АІС атома рубідію з утворенням однозарядних іонів в основному стані.

РОЗДІЛ 3

ЕФЕКТИВНІ ПЕРЕРІЗИ ЕЛЕКТРОННОГО ЗБУДЖЕННЯ АВТОІОНІЗАЦІЙНИХ СТАНІВ АТОМА РУБІДІЮ

3.1. Основні визначення та методи теоретичного аналізу

Припустимо, що пучок первинних електронів з енергією E потрапляє в камеру зіткнень, заповнену газом концентрацією атомів в одиниці об'єму N_0 . Інтенсивність пучка через розсіювання зменшується по мірі його руху. Оскільки величина спаду інтенсивності пучка dI повинна бути пропорційна концентрації атомів N та елементарному відрізку dx , який пройшов електрон, цю пропорційність можна представити у вигляді [94]:

$$dI = -\sigma_n I N dx \quad (3.1)$$

або, після інтегрування:

$$I = I_0 \exp(-\sigma_n X N), \quad (3.2)$$

де: X – довжина камери зіткнень; I_0 та I – інтенсивності первинного та розсіяного пучків. Як видно з (3.1), стала σ_n має розмірність площі і одержала назву *ефективного перерізу (ЕП) розсіювання* [94]. Його абсолютна величина залежить від енергії первинних електронів, а також визначається властивостями атомів мішені. Дослідження залежності $\sigma_n(E)$ є однією із найважливіших задач атомної фізики та фізики зіткнень [95].

Якщо розглядається збудження атома мішені, а розсіяний при цьому електрон рухається всередині малого тілесного кута $d\Omega$ у напрямі (θ, φ) , то йдеться про *диференціальний за кутом переріз розсіювання (ДП) $\sigma_{\text{диф}}$* :

$$\sigma_{\text{диф}}(E, \theta, \varphi) = \frac{d\sigma}{d\Omega}. \quad (3.3)$$

Зазвичай, у експериментах по розсіянню частинки мішені орієнтовані хаотично. У цьому разі $\sigma_{\text{диф}}(E, \theta, \varphi)$ стає незалежним від азимутального кута φ і тому після інтегрування (3.3) по ньому буде:

$$\sigma_{\text{æò}}(E, \theta) = 2\pi \frac{d\sigma}{d\theta}. \quad (3.4)$$

Інтегрування ДП по всіх кутах розсіювання дає *інтегральний переріз розсіювання* σ_{int} , що характеризує конкретний процес (пружне розсіяння, збудження атомів, іонізація):

$$\sigma_{\text{int}}(E) = \int \sigma_{\text{diff}}(E, \theta, \varphi) d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \sigma_{\text{diff}}(E, \theta) \sin\theta d\theta. \quad (3.5)$$

Повний переріз розсіювання являє собою суму інтегральних перерізів усіх можливих процесів:

$$\sigma_n(E) = \sum \sigma_{\text{int}}(E). \quad (3.6)$$

Якщо ми розглядаємо непружне зіткнення, в результаті якого атом збуджується в певний АІС, то залежність диференціального ефективного перерізу збудження АІС від енергії налітаючих електронів E та кута спостереження θ є *функцією збудження (ФЗ)* цього АІС. Як було показано в підрозділі 1.1, при “магічному” куті спостереження $\theta = 54.7^\circ$ для всіх АІС з $J \leq 3/2$ виключається вплив анізотропії кутового розподілу електронів і в цьому випадку ФЗ АІС відображає енергетичну залежність його повного ефективного перерізу збудження (ЕПЗ) [70].

Вивчення ФЗ в широкому діапазоні енергій, особливо в області порогу збудження дозволяє отримати цінну інформацію про перебіг процесу збудження даного стану, вплив на цей перебіг інших процесів та явищ. Як уже згадувалось вище, особливо важливим для проведення таких досліджень є використання для збудження атома монохроматизованого за енергією електронного пучка. Вперше це було продемонстровано в роботі [96] на прикладі електронного збудження спектральних ліній атома ртуті. Розвиток цих досліджень з атомами металів із подальшим покращенням роздільної здатності вимірів дозволив виявити і дослідити природу нових атомних явищ, пов’язаних з кореляційною взаємодією в системі “налітаю-

чий електрон – атом мішені” у припороговій області енергій зіткнень, а саме – утворення станів негативних іонів та ефект ВПЗ [69].

При розсіянні на нейтральних атомах електронів з енергіями, близькими до порогів збудження атомних АІС, можливе утворення короткоживучої системи “збуджений атом – повільний електрон”, яка може розглядатися як проміжний стан при збудженні АІС атома. Такий тип збудження, на відміну від прямого збудження, називають резонансним, а особливості, що проявляються при цьому в енергетичних залежностях ЕПЗ рівнів, одержали назву резонансів [9]. Зрозуміло, що про утворення такого резонансу можна говорити лише у тому разі, коли його час життя буде більшим за час взаємодії електрона з атомом у процесі прямого розсіювання.

Ймовірність утворення негативного іона значною мірою визначається здатністю атома поляризуватися під дією налітаючого електрона і тим самим ефективно формувати потенціальний бар’єр, який сприяє утворенню іона через захоплення цього електрона [10]. Оскільки поле атома у збудженому стані вже є поляризованим, більшість резонансів утворюються саме на базі таких станів (“батьківських” станів). Розглянутий механізм утворення притаманний *резонансам форми*, які розташовуються енергетично вище від порогів збудження відповідних атомних станів [9]. Оскільки для цих резонансів існує прямий канал електронного розпаду на “батьківський” стан, їхній час життя, як правило, малий і тому ширини резонансів форми лежать у межах від 0.1 до 1-2 еВ [23].

У випадку, коли електрон захоплюється полем збудженого атома і утворюється атомна система “негативний іон”, цей електрон стає одним із електронів новоутвореного негативного іона. У цьому разі має місце утворення *резонансу Фейнбаха* [9]. Його енергія зв’язку позитивна, що викликано сильною взаємодією між налітаючим електроном і збудженим станом

атома. Оскільки розпад у “батьківські” стани в цьому випадку енергетично заборонений, а розпад в інші стани пов’язаний із зміною електронної конфігурації збудженого стану атома, то резонансам Фешбаха притаманні відносно великі часи життя (у порівнянні з резонансами форми), що приводить до утворення вузьких структурних особливостей в перерізах збудження, ширина яких становить менше 0.1 еВ.

Теоретично загальний вигляд енергетичної залежності ЕПЗ можна одержати шляхом використання базових теоретичних наближень Борна та спотворених хвиль (СХ). При високих енергіях зіткнень розрахунки цими методами практично збігаються, та при низьких енергіях зіткнень тільки метод СХ з включенням релятивістських поправок (наближення РСХ) дозволяє виявити особливості припорогового збудження АІС, але тільки для простих атомних систем [26]. Для більш складних атомів, таких як рубідій та цезій, цей метод дозволяє лише передбачити наявність резонансного збудження і проявляється це в розрахованих ФЗ як сингулярність [20].

Наближення РСХ було використано для розрахунку збудження двох найнижчих $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ АІС атома рубідію в широкому діапазоні енергій зіткнень [20]. Відсутність експериментальних даних не дозволила авторам оцінити правильність цих результатів.

Найкращі результати з послідовного квантовомеханічного розрахунку перерізів збудження АІС в припорогових областях енергій зіткнень для важких атомів на даний час одержані методом *R*-матриці (*R*-matrix) [97]. Цей метод дозволяє описати структурні особливості, пов’язані з наявністю припорогового резонансного збудження АІС. Необхідно при цьому зауважити, що метод *R*-матриці не дає конкретної інформації про спектроскопічну ідентифікацію резонансної структури на ЕПЗ. Тому розрахунки перерізів доповнюються розрахунками енергетичної структури рівнів у

конкретних конфігураціях негативного іона з використанням багатоконфігураційного методу ХФ [98].

Зауважимо, що методом R -матриці було вперше здійснено припорогове дослідження ефективних перерізів електронного збудження АІС атома літію [98], калію [26, 99] та натрію [23]. У цих роботах лише частково враховувалися релятивістські ефекти через використання гамільтоніана Брейта-Паулі [100]. Використання гамільтоніана Дірака-Кулона [101] дало змогу провести розрахунки для атомів калію та цезію [101, 97] вже з повним врахуванням релятивізму. В останніх роботах теоретичні розрахунки добре описують експериментальні дані як у плані поведінки енергетичних залежностей, так і в плані абсолютних значень перерізів збудження. Також, що особливо важливо, вони дозволили виявити та ідентифікувати стани негативних іонів у порозі збудження найнижчих АІС цих лужних атомів. Саме тому у нашій роботі для дослідження припорогового збудження АІС атома рубідію були використані теоретичні розрахунки методом R -матриці з використанням гамільтоніана Дірака-Кулона.

Нижче будуть розглянуті одержані нами експериментальні та теоретичні дані з ЕПЗ АІС атома рубідію в діапазоні енергій зіткнень від порогу збудження до 600 еВ.

3.2. Функції електронного збудження автоіонізаційних станів

Досліджені в даній роботі експериментальні ФЗ АІС становили собою сукупності значень нормованих на струм первинного електронного пучка інтенсивностей відповідних ліній, визначених у спектрах ежектованих електронів. Останні вимірювались при енергіях зіткнень від порогу збудження станів до 600 еВ та під кутом спостереження 54.7° . Усі ФЗ одержані при моноенергетичності електронного пучка не гірше 0.2 еВ.

Одержані таким чином ФЗ являють собою енергетичні залежності повного ефективного перерізу збудження АІС у відносних одиницях. Переріз в абсолютних одиницях (у см^2) визначався шляхом нормування відносних експериментальних даних на теоретичні розрахунки. Отримане відносне значення перерізу збудження $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}$ АІС було приведено до абсолютної шкали шляхом нормування інтенсивності лінії $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}$ на теоретичне значення ЕПЗ [65] при енергії 19,07 еВ. У разі відсутності теоретичних розрахунків абсолютний переріз збудження АІС визначався так. Для обраної точки (при певній енергії зіткнень) на ФЗ цього АІС визначалось співвідношення інтенсивності відповідної лінії у спектрах ежекованих електронів і інтенсивності лінії, що відповідає розпаду $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}$ стану. Оскільки співвідношення інтенсивностей цих ліній у спектрі є прямо пропорційним співвідношенню абсолютних значень їх перерізів збудження, знаючи абсолютне значення перерізу стану $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}$, при обраній енергії зіткнень, ми визначали абсолютне значення перерізу іншого досліджуваного АІС. Невизначеності абсолютних перерізів збудження розглядаються нижче для кожного АІС окремо.

3.2.1. Загальна характеристика функцій збудження та роль каскадних процесів заселення рівнів. Згідно з ідентифікацією АІС, наведеною в табл. 2.2, найбільш низькоенергетичними станами є дублети $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2,1/2}$, ФЗ яких від порогу збудження до 600 еВ наведено на рис. 3.1. Невизначеність даних для перших двох точок обох ФЗ становила $\leq 60\%$, для інших точок у діапазоні енергій зіткнень до 20 еВ вона не перевищувала 35%, при енергіях зіткнень 20-600 еВ становила не більше 25%. Як видно, основні максимуми, що відповідають прямому збудженню станів $(4p^5 5s^2)^2 P_{1/2,3/2}$, розташовані при енергії зіткнень ≈ 100 еВ, що повністю відповідає дублетному характеру цих рівнів.

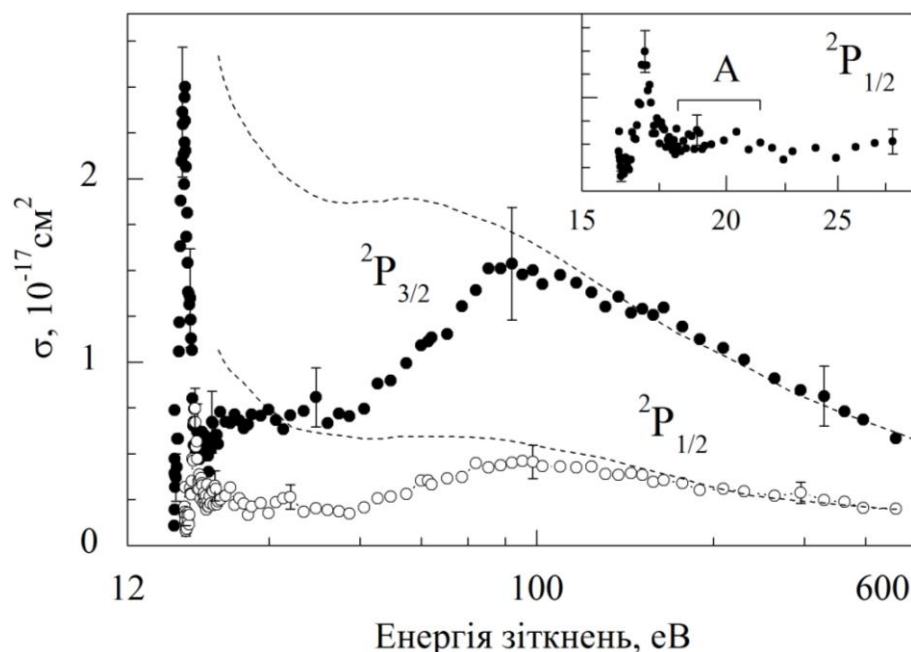


Рис. 3.1. Енергетична залежність перерізів збудження дублетних $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ АІС атома рубідію [102]. Пунктирними лініями показано перерізи збудження $^2P_{3/2,1/2}$ АІС, розраховані в наближенні РСХ [20]. На вставці показано припорогову частину перерізу збудження $(4p^5 5s^2)^2P_{1/2}$ АІС.

З подальшим збільшенням енергії зіткнень ефективність збудження повільно падає. В області енергій вище 100 еВ теоретичні перерізи збудження станів $(4p^5 5s^2)^2P_{1/2,3/2}$, розраховані в наближенні РСХ [20], добре збігаються з експериментальними даними. Суттєва різниця між експериментом і теорією РСХ існує при малих та середніх енергіях зіткнень. Слід зазначити, що опис області енергій 20-90 еВ є проблемою для всіх теоретичних наближень, оскільки вимагає врахування у розрахунках великої кількості додаткових високоенергетичних конфігурацій як $4p^6$ оболонки, так і більш глибоких оболонок атома рубідію.

У припороговій області енергій зіткнень процес збудження обох рівнів має виразний резонансний характер з максимумами перерізів $(2.5 \pm 0.9) \times 10^{-17} \text{ см}^2$ ($^2P_{3/2}$) і $(7 \pm 2) \times 10^{-18} \text{ см}^2$ ($^2P_{1/2}$) при енергіях 16.2 еВ та 17.0 еВ, відповідно. Із порівняння припорогового і основного максимумів ФЗ видно, що ефективність резонансного збудження майже у півтора рази

перевищує ефективність прямого процесу.

Як показує аналіз ФЗ стану $(4p^5 5s^2)^2P_{1/2}$, при енергіях зіткнень 18-21 еВ спостерігається збільшення величини ЕПЗ до 20% (див. область А на вставці рис. 3.1). Як впливає з даних фотопоглинання [34, 40], в діапазоні довжин хвиль між 624 Å і 577 Å (19.8-21.5 еВ) спектр фотопоглинання $4p^6$ оболонки загалом містить 46 ліній, з яких тільки 8 мають уширений автоіонізаційний профіль. Це означає, що більшість АІС, розташованих вище 19 еВ, розпадаються переважно через радіаційні переходи на низькоенергетичні АІС, зокрема на $(4p^5 5s^2)^2P_{1/2}$. Щодо ФЗ стану $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$, то в області енергій 20-30 еВ для нього помітний вплив каскадних процесів заселення із високоенергетичних рівнів не спостерігається.

Стани $(4p^5 4d 5s)^4P_{1/2, 3/2, 5/2}$ є найнижчими в системі кватетних АІС атома рубідію (див. табл. 2.2). Внаслідок значного спіно-орбітального розщеплення рівнів в атомі рубідію і високої роздільної здатності вимірів ($\Delta E_{1/2} < 0.05$ еВ) лінії, що відповідають розпаду нижніх рівнів у конфігурації 4d5s, практично не перекриваються (див. рис. 2.4, 2.5). Це дозволило дослідити електронне збудження стану $(4p^5 4d 5s)^4P_J$ окремо для кожної компоненти з $J = 1/2, 3/2, 5/2$.

На рис. 3.2 представлено загальний вигляд функцій збудження кватетних рівнів $(4p^5 4d 5s)^4P_{1/2, 3/2, 5/2}$ від порогів збудження до 600 еВ. Невизначеність даних для припорогових областей енергій становила $\leq 45\%$ і $\leq 25\%$ – для інших точок. Загальний вигляд ФЗ в цілому подібний і відображає обмінний характер збудження цих кватетних рівнів. Усі функції починаються з інтенсивних вузьких максимумів ($\Delta E < 1$ еВ), які розташовані зразу за порогом збудження, що вказує на наявність ефективного резонансного збудження у припороговій області енергій. В енергетичному діапазоні 17-24 еВ на всіх ФЗ помітне деяке зростання ЕПЗ, яке найбільш виразно проявляється для рівня $^4P_{1/2}$. Таке збільшення перерізу має каскадне походження внаслідок радіаційного розпаду високоенергетичних станів. Аналогічна висока ефектив-

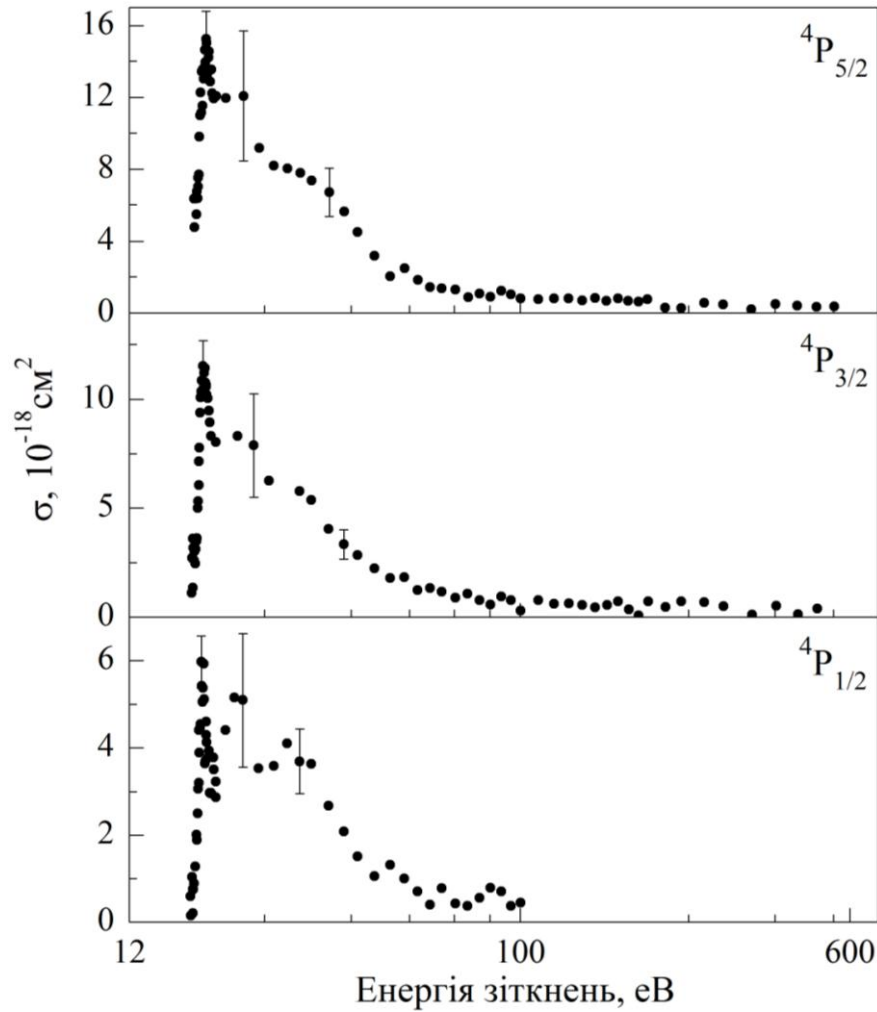


Рис. 3.2. Енергетична залежність перерізів збудження кватетних $(4p^5 4d 5s) {}^4P_{1/2,3/2,5/2}$ АІС атома рубідію [103].

ність каскадних процесів при збудженні кватетних $(3p^5 3d 4s) {}^4P_J$ станів раніше була виявлена для атома калію [104].

На рис. 3.3, 3.4 наведені ФЗ високоенергетичних $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$ АІС атомів рубідію. Для цих даних загальна невизначеність не перевищувала 35% у всьому дослідженому енергетичному діапазоні. Динаміка поведінки ФЗ кватетного стану $4d({}^3F)5s {}^4F_{7/2}$ має типовий обмінний характер збудження – максимум поблизу порогу збудження і швидке зменшення перерізу практично до нуля при енергіях зіткнень вище 50 еВ. Привертає увагу той факт, що подібний характер збудження мають також високоенергетичні АІС, які ідентифіковані як дублети $4d({}^3P)5s {}^2P_{1/2}$, $4d({}^3P)5s {}^2P_{3/2}$, $4d({}^3F)5s {}^2F_{5/2}$, $4d({}^1F)5s {}^2F_{7/2}$ та

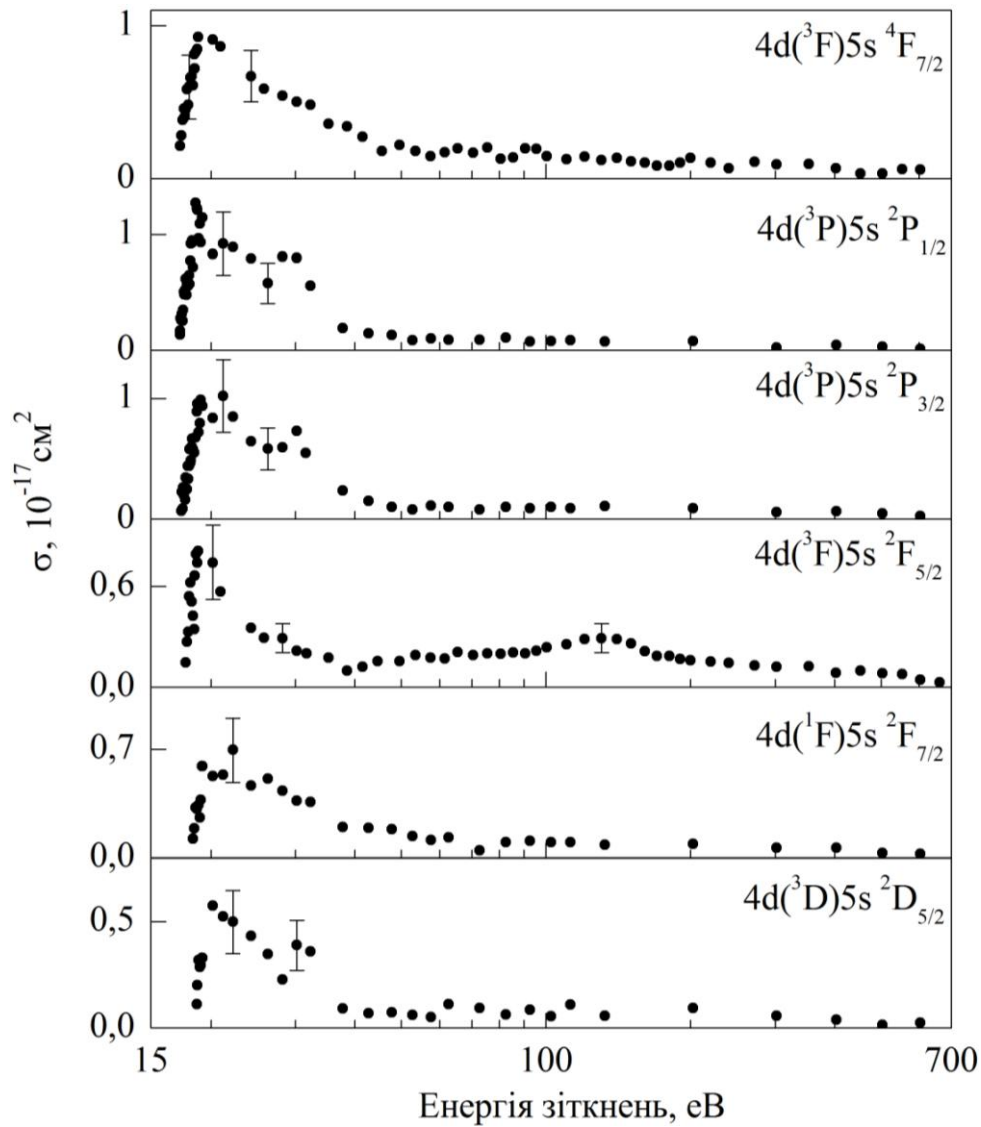


Рис. 3.3. Енергетична залежність перерізів збудження високоенергетичних $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$ АІС атома рубідію [61, 105].

$4d(^3D)5s\ ^2D_{5/2}$. Така “нетипова” поведінка ФЗ може бути пов’язана із зростанням ролі ефекту змішування конфігурацій при збудженні високоенергетичних АІС (див. табл. 2.1). Як також видно з рис. 3.3, різке зростання ЕПЗ на всіх ФЗ в межах до 1.5 еВ над порогом свідчить про ефективне утворення і наступний електронний розпад станів негативних іонів Rb^- . Повільне зменшення перерізу та наявність структури в діапазоні енергій збудження 20-30 еВ вказують на наявність внеску каскадних процесів через радіаційний розпад більш високоенергетичних АІС.

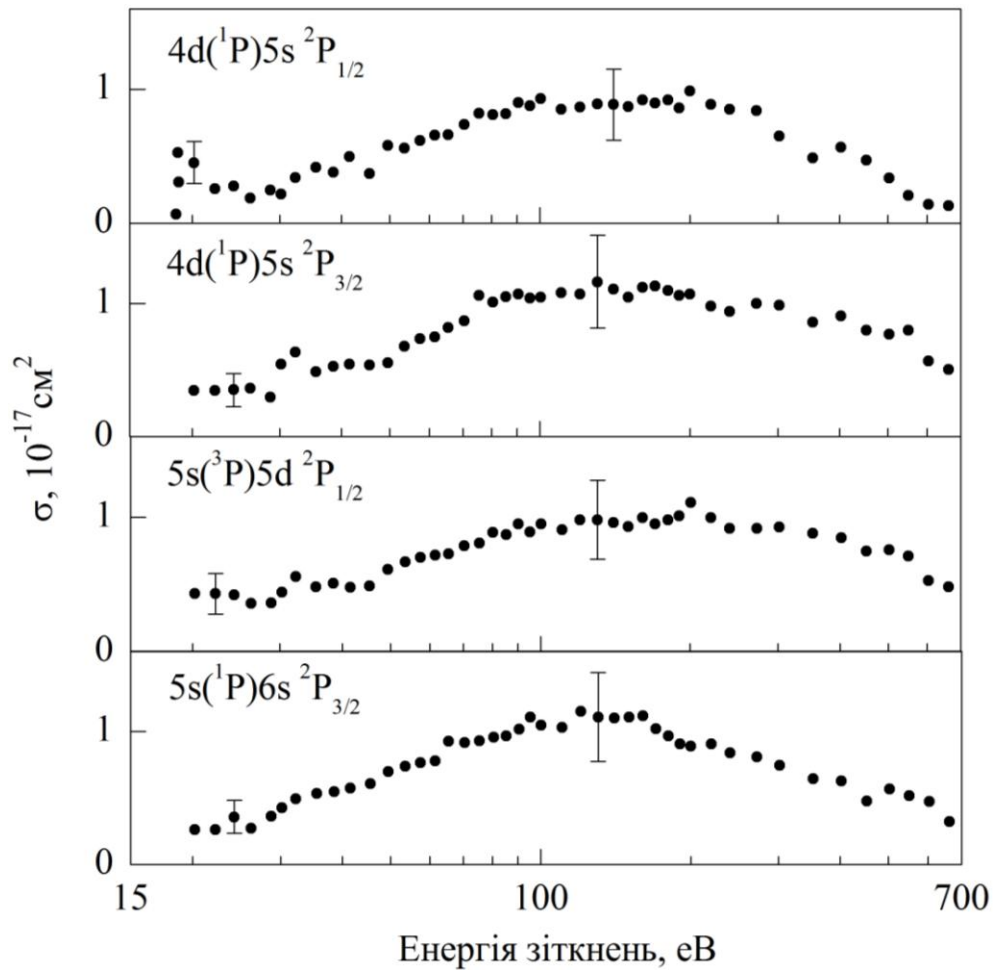


Рис. 3.4. Енергетична залежність перерізів збудження високоенергетичних $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$ АІС атома рубідію [61, 105].

Загальний вигляд наведених на рис. 3.4 енергетичних залежностей ФЗ дублетних станів $4d(^1P)5s\ ^2P_{1/2}$, $4d(^1P)5s\ ^2P_{3/2}$, $5s(^3P)5d\ ^2P_{1/2}$, $5s(^1P)6s\ ^2P_{3/2}$ показує, що вони схожі за енергетичною поведінкою, яка в області енергій вище 30 еВ має типову для дипольних переходів форму – поступове збільшення перерізу збудження до максимального значення в області 100-200 еВ і подальше його повільне зменшення зі збільшенням енергії зіткнень. Лише для стану $4d(^1P)5s\ ^2P_{1/2}$, в області енергій 18-26 еВ спостерігається різке припорогове зростання ефективності збудження рівня, що є проявом резонансного процесу збудження.

На рис. 3.5 представлено загальний вигляд ФЗ квазіметастабільного стану $5s(^3P)5p^4S_{3/2}$. Невизначеність при одержанні ефективного пере-

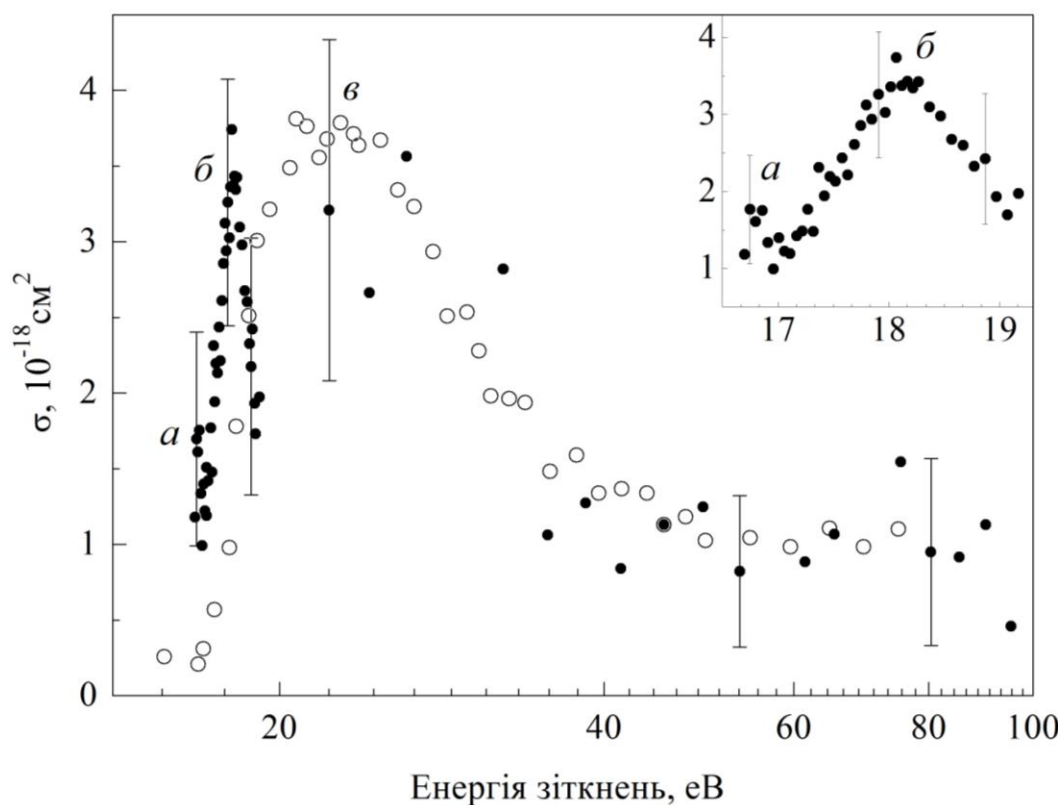


Рис. 3.5. Енергетична залежність перерізів збудження $5s(^3P)5p\ ^4S_{3/2}$ стану атома рубідію: ● – наші дані [92] (одержані при монокінетичності 0.12 eV); ○ – оптичні дані [106] (одержані при монокінетичності ~1.5 eV). На вставці показано припорогову область енергій 16.7-19.2 eV. Дані [106] пронормовані на наші дані [92] при енергії зіткнень 45.5 eV.

різу збудження сягала 40%. Це наслідок того, що відповідна лінія 3 (див. табл. 2.2) перекривається сусідньою, більш інтенсивною лінією 4, що відповідає розпаду стану $4d(^3P)5s\ ^4P_{1/2}$ з енергією збудження 16.69 eV (див. спектри на рис. 2.4, 2.5).

Як видно з рис. 3.5, ФЗ характеризується двома припороговими максимумами *а*, *б*, основним максимумом *в* при енергії ≈ 24 eV і повільним зменшенням перерізу зі збільшенням енергії зіткнень. На вставці рис. 3.5 присутні два максимуми *а* і *б* при енергіях зіткнень 16.8 та 18 eV, відповідно. Дана структура зумовлена процесом резонансного збудження, тоді як ос-

новний максимум *в* відповідає обмінному характеру електронного збудження стану $4S_{3/2}$. Як видно, ефективність обох процесів є приблизно рівною.

Наявність радіаційного каналу розпаду (див. реакцію (3)) дозволяє порівняти наші дані з ФЗ оптичної лінії ($\lambda=82.37$ нм) [106], ідентифікованої в [7] як перехід $5s(^3P)5p\ 4S_{3/2} \rightarrow 4p^65p^2P_{3/2}$. Порівняння показує, що існує досить хороше узгодження обох типів даних при енергіях вище 20 еВ. Виявлення додаткових припорогових максимумів (див. вставку на рис. 3.5) зумовлено використанням в нашій роботі первинного електронного пучка із значно кращою моноенергетичністю (0.12 еВ) у порівнянні із даними [106], одержаними при монокінетичності не краще 1.5 еВ.

3.2.2. Резонанси в перерізах збудження автоіонізаційних станів.

Для розрахунків припорогових перерізів збудження станів $(4p^55s^2)^2P_{3/2,1/2}$ був використаний метод *R*-матриці [65] з урахуванням релятивістських поправок. У ці розрахунки було включено 69 станів, у тому числі три зв'язані стани $(4p^66s)\ ^2S_{1/2}$, $(4p^65p)\ ^2P_{1/2}$ і $(4p^65p)\ ^2P_{3/2}$, разом із найнижчими 66 збудженими станами з основними конфігураціями $4p^55s^2$, $4p^55s5p$, $4p^54d5s$, $4p^55s6s$ і $4p^54d5p$ атома рубідію.

На рис. 3.6 представлені припорогові ділянки експериментальних ФЗ станів $(4p^55s^2)^2P_{3/2,1/2}$ у порівнянні з даними теоретичних розрахунків [65]. Як видно, обидві ФЗ мають невеликі за інтенсивністю вузькі максимуми *а*, *б* одразу у порозі збудження та інтенсивні широкі максимуми з структурою *в*, *г*, *д* приблизно при 0.8 еВ за порогом збудження. Як видно, теоретичні дані [65] добре описують експериментальний переріз збудження у всій області енергій.

На рис. 3.7 наведено парціальний склад припорогових резонансів ефективних перерізів збудження станів $(4p^55s^2)^2P_{3/2,1/2}$. Аналіз резонансів на рис. 3.7 показує, що широкий припороговий максимум із структурою *б*, *в*, *г*

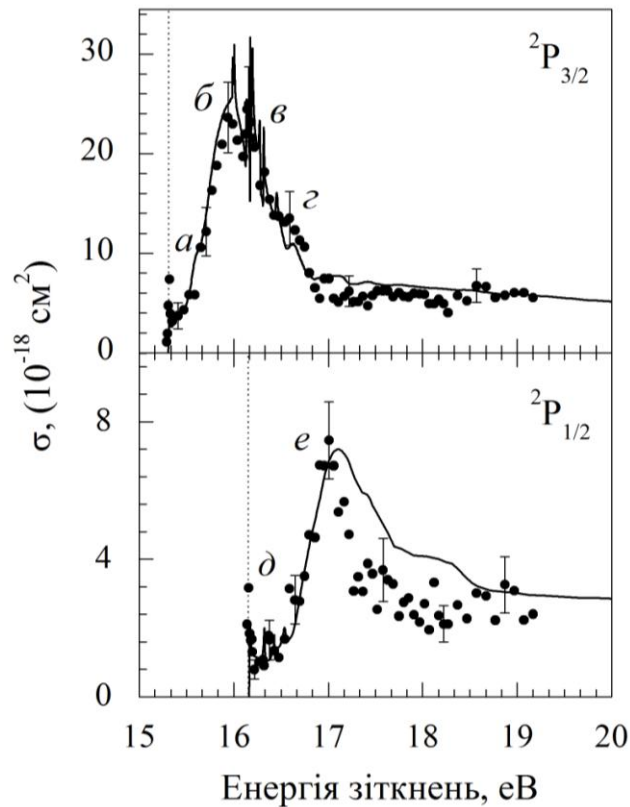


Рис. 3.6. Енергетична залежність перерізів збудження $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ АІС атома рубідію: • – експеримент, — – розрахунок методом R -матриці [65].

на рис. 3.6 на функціях збудження стану $^2P_{3/2}$ є сумою чотирьох парціальних перерізів збудження станів негативного іона рубідію (див. табл. 3.1) з повними моментами $J^\pi = 1^0 - 4^0$ із основним внеском від компоненти $J^\pi = 4^0$. Всі резонанси в цій області енергій є резонансами типу Фешбаха зі спільною конфігурацією $4p^5 5s 5p^2$. Припороговий резонанс a згідно з його енергетичним положенням має відповідати резонансу форми.

Резонанс на функціях збудження стану $^2P_{1/2}$ є результатом суперпозиції трьох парціальних перерізів збудження станів негативного іона Rb^- з повним моментом $J^\pi = 1^0 - 3^0$. Резонанс у цій області енергій є також типу Фешбаха з можливою конфігурацією $4p^5 5s 4d 6s$. Однак, на відміну від випадку збудження стану $^2P_{3/2}$, всі парціальні компоненти відіграють приблизно однакову роль (їх внесок $\approx 20\%$) у формуванні повного перерізу збудження в припороговій області енергій.

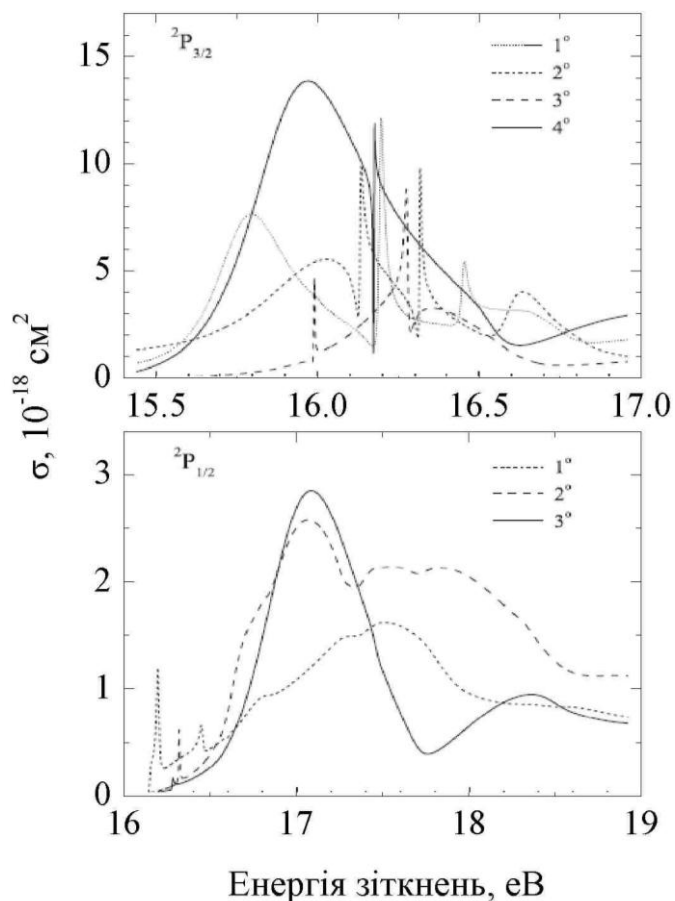


Рис. 3.7. Парціальний склад ефективних перерізів збудження станів $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ в атомі рубідію [65]. Парціальні перерізи позначено згідно зі значеннями повного моменту J та парності π .

Таблица 3.1

Енергії збудження, спектроскопічна ідентифікація та канали розпаду станів негативного іона Rb^- [65].

<i>Резонанс</i>	<i>Енергія, eV</i>	<i>Спектроскопічна ідентифікація</i>	<i>Канали розпаду</i>
<i>a</i>	15.32	?	$(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$
<i>б</i>	15.94	$4p^5 5s(^3P)5p^2$	$(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$
<i>в, д</i>	16.16	$4p^5 5s(^3P)5p^2 + 4p^5 5s(^1P)5p^2$	$(4p^5 5s^2)^2P_{3/2, 1/2}$
<i>е</i>	16.59	$4p^5 5s(^3P)5p^2$	$(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$
<i>e</i>	17.01	$4p^5 5s(^3P)4d(^2P)6s$	$(4p^5 5s^2)^2P_{1/2}$

На рис. 3.8 представлені функції збудження кватетних станів $(4p^5 4d 5s)^4P_{1/2}$, $(4p^5 4d 5s)^4P_{3/2}$ та $(4p^5 4d 5s)^4P_{5/2}$ у діапазоні енергій зіткнень від порогу збудження до 50 еВ разом із відповідними теоретичними розрахунками методом R -матриці [65]. Порівняння цих даних показує, що найкраще узгодження має місце лише для найнижчого за енергією стану $^4P_{1/2}$, де теорія прогнозує наявність принаймні двох резонансів негативного іона. Вище 25 еВ розрахунок непогано узгоджується з експериментальними даними

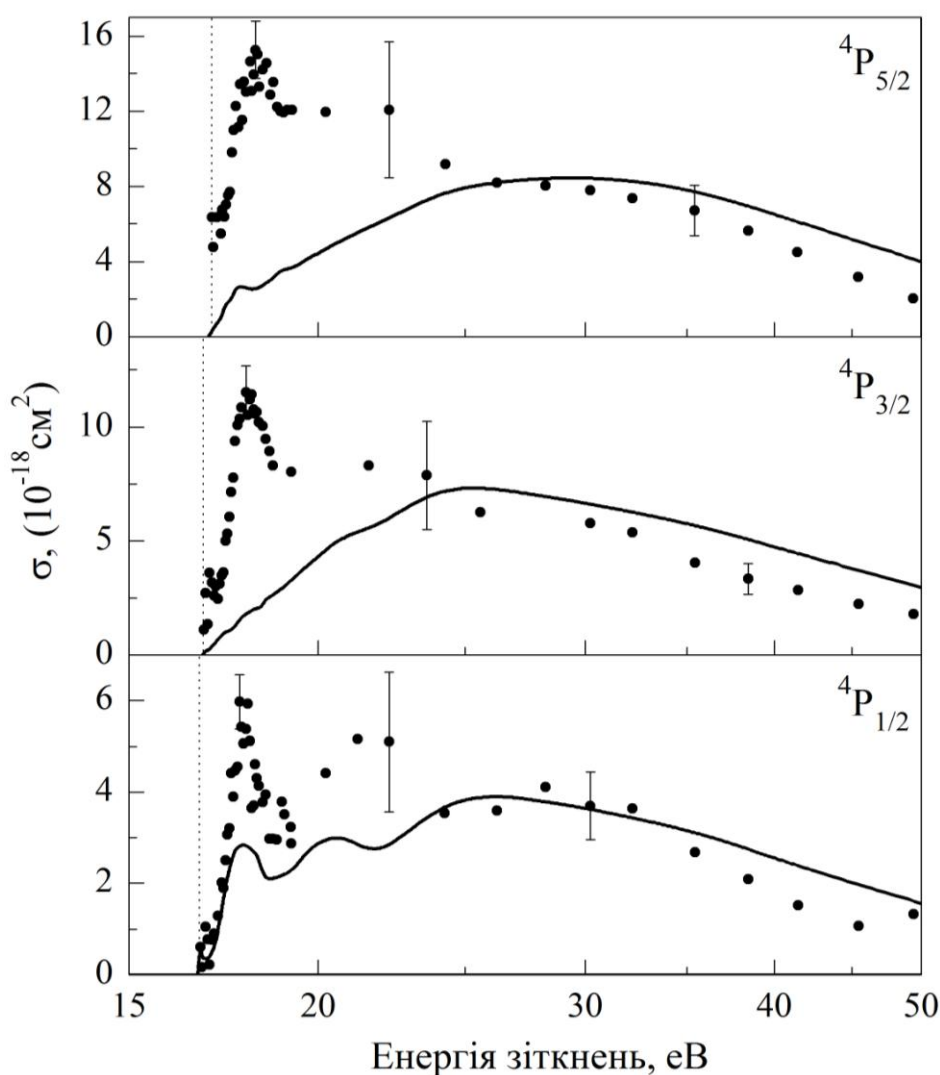


Рис. 3.8. Енергетична залежність перерізів збудження кватетних $(4p^5 4d 5s)^4P_{1/2,3/2,5/2}$ АІС атома рубідію: • – наш експеримент [103],
— – розрахунок методом R -матриці [65].

для всіх АІС. Розбіжність даних розрахунку і експерименту для цих високоенергетичних станів зумовлена, можливо, неповним врахуванням ефекту змішування конфігурацій, який для таких АІС відіграє більш суттєву роль.

3.3. Електронне збудження молекули Rb_2

Як було показано в попередньому розділі (див. рис. 2.4, 2.5, табл. 2.2), при дослідженні збудження $4p^6$ оболонки атома рубідію було виявлено молекулярну смугу S_x , яка за своїм енергетичним положенням перекривається високоенергетичним крилом автоіонізаційної лінії $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$. Це значно ускладнило визначення площі цієї смуги, оскільки, крім накладання двох профілів в припороговій області енергій зіткнень, можливий додатковий вплив ефекту ВПЗ на положення і форму обох профілів. Саме ці фактори зумовили вузький досліджений діапазон енергій та достатньо високу невизначеність ЕПЗ молекулярного АІС. Дані були одержані при температурі атомної гармати близько 130°C . Для цієї температури тиск парів становив для атомів $\text{Rb} \sim 10^{-3}$ Па і для молекул $\text{Rb}_2 \sim 10^{-6}$ Па [14]. Переріз збудження молекулярного АІС був приведений до абсолютної шкали шляхом нормування функції збудження стану S_x на теоретичне значення перерізу збудження атомного стану $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$ АІС при енергії 16.04 eV [65]. При цьому було враховано як співвідношення інтенсивності ліній, що відповідають розпаду атомного $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$ і молекулярного станів ($\approx 1:4$), так і співвідношення концентрацій атомів і молекул у пучку [14]. Для даних, отриманих у припороговій області, де інтенсивність спектрів була мінімальною, невизначеність становила близько 45%. Для інших даних невизначеність не перевищувала 35%.

На рис. 3.9 дано порівняння припорогової ділянки ФЗ молекулярного АІС ($\text{Rb}_2^* \rightarrow \text{Rb}_2^+ (^2\Sigma_g^+) + e_{\text{еж}}$) та атомного стану $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$. На відміну від останнього, на ФЗ молекулярного стану присутнє різке припорогове зрос-

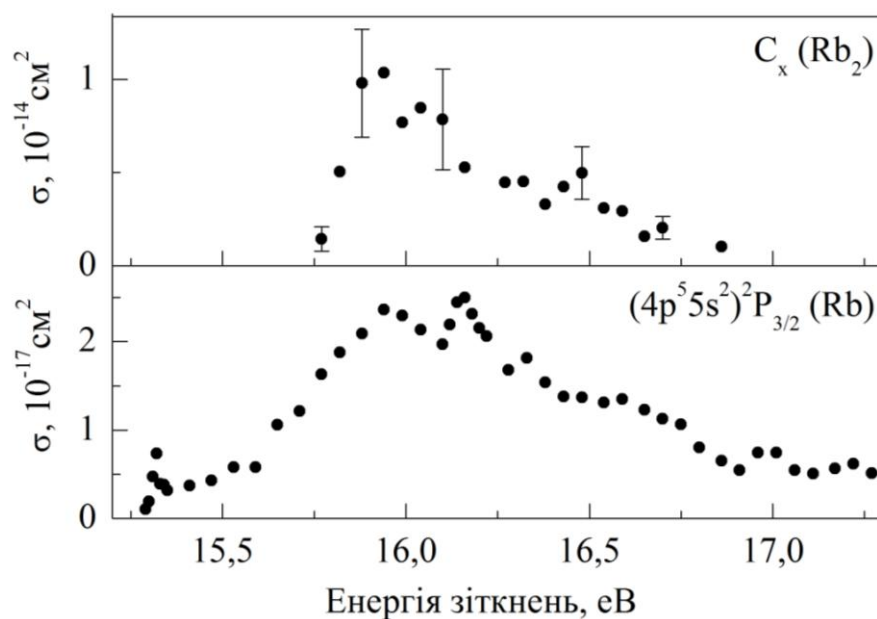


Рис. 3.9. Енергетична залежність перерізів збудження атомного $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$ і молекулярного C_x АІС [61].

тання перерізу збудження, що може бути результатом наявності резонансів негативних іонів $(\text{Rb}_2^*)^-$. Суттєва різниця існує і в значеннях абсолютного перерізу, який у разі молекулярного стану є на три порядки більшим за ЕПЗ атомного стану і становить у максимумі $(1.1 \pm 0.3) \times 10^{-14} \text{ cm}^2$.

Висновки до розділу 3

1. Одержано енергетичні залежності та абсолютні значення перерізів збудження 11 дублетних та 5 квартетних автоіонізаційних станів атома рубідію, а також АІС молекули Rb_2 .

2. Встановлено, що максимальні абсолютні значення ефективних перерізів збудження мають порядок величини 10^{-18} - 10^{-17} см^2 для атомних АІС та 10^{-14} см^2 для молекулярного АІС.

3. Із аналізу перерізів збудження автоіонізаційних станів та теоретичних розрахунків показано, що для важкого атома рубідію при збудженні високоенергетичних АІС суттєво зростає роль ефекту змішування конфігурацій.

3. Виявлено, що електронне збудження всіх досліджених автоіонізаційних станів у припороговій області енергій має виключно резонансний характер, пов'язаний з утворенням станів негативних іонів.

4. На базі теоретичних розрахунків показано, що резонансна структура на перерізах збудження для найнижчих $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ АІС є результатом суперпозиції перерізів збудження кількох станів негативного іона рубідію. На основі аналізу парціальної структури перерізів збудження станів $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ визначено енергії, спектроскопічну ідентифікацію та канали розпаду станів негативних іонів, що формують цю структуру.

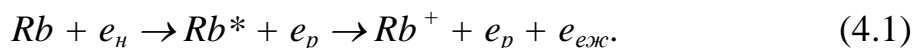
5. Досліджено, що каскадні процеси заселення мають місце лише для найнижчих квартетів $4p^5 4d 5s$ конфігурації та деяких високоенергетичних дублетів.

РОЗДІЛ 4

ЕФЕКТ ВЗАЄМОДІЇ ПІСЛЯ ЗІТКНЕННЯ ПРИ ЗБУДЖЕННІ 4p⁶ ОБОЛОНКИ АТОМА РУБІДІЮ

4.1. Основні визначення та методика досліджень

Розглянемо припорогове збудження та наступний розпад АІС атома Rb налітаючим електроном e_n :



Між двома новоутвореними електронами, один з яких є “повільним” розсіяним e_p , а другий – “швидким” ежектованим e_{ej} , існує електростатична взаємодія. Вона відбувається у полі позитивного іона Rb^+ . При цьому розсіяний електрон e_p частково екранує поле іона. Ця взаємодія приводить до обміну між електронами енергією – ежектований електрон e_{ej} збільшує свою енергію на величину $\Delta\epsilon$, а розсіяний електрон e_p (згідно із законом збереження енергії) зменшує свою енергію на таку ж саму величину $\Delta\epsilon$. Цей процес одержав назву *взаємодії після зіткнення (ВПЗ)* [10]. В енергетичних спектрах ежектованих електронів цей ефект проявляється як зсув лінії, що відповідає розпаду АІС на величину $\Delta\epsilon$ у бік більших енергій (ВПЗ-зсув) [10].

Ефект ВПЗ вперше спостерігався Баркером і Бері [11] у процесі збудження АІС атома гелію повільними іонами He^+ та Ne^+ . Окрім ВПЗ-зсуву автоіонізаційної лінії, автори спостерігали спотворення її гаусівського симетричного профілю, який набуває асиметричного вигляду. На основі аналізу одержаних даних автори запропонували модель (класична модель Баркера-Бері), в якій зміна енергії ежектованого електрона $\Delta\epsilon$ пов’язана з енергетичною шириною відповідного АІС та енергією розсіяного електрона E_1 . Для значень енергії $E_1 \gg \Delta\epsilon$ ця залежність має вигляд:

$$\Delta\varepsilon = 0.5\Gamma\left(\frac{R}{E_1}\right)^{0.5}, \quad (4.2)$$

де: Γ – автоіонізаційна ширина рівня з порогом збудження E_{36} ; R – стала Рідберга. Енергію $E_1 = E_0 - E_{36}$ ще називають надпороговою енергією. Для випадку $E_1 \ll \Delta\varepsilon$, формула Баркера-Бері (4.2) набуває вигляду:

$$\Delta\varepsilon = \Gamma\left(\frac{R}{E_1}\right)^{0.5}. \quad (4.3)$$

Згідно з виразами (4.2) та (4.3), енергетична залежність зсуву $\Delta\varepsilon$ має асимптотичний характер, а сам зсув є завжди *додатним*, а, отже, ежектований електрон *завжди* збільшує свою енергію.

Пізніше, на класичних уявленнях була запропонована більш загальна модель, яка застосовна для всіх можливих значень E_1 , в якій енергетична залежність зсуву лінії $\Delta\varepsilon$ визначається виразом [107]:

$$\frac{1}{A}(E_1 + 0.5\Delta\varepsilon) = \frac{1}{A^{2.5}}(2\Delta\varepsilon E_1^{1.5} + 0.5\Delta\varepsilon^2 E_1^{0.5}), \quad (4.4)$$

де $A = (\Gamma^2 R)^{1/3}$.

Атоми лужних металів за своїми характеристиками є зручними об'єктами для досліджень ефекту ВПЗ у спектрах ежектованих електронів, оскільки вони мають велику різницю між енергіями зв'язку валентної та субвалентної оболонок, одноканальність електронного розпаду АІС, незначну інтерференцію між автоіонізаційним і іонізаційним каналами збудження. Це дозволяє дослідити ефект ВПЗ безпосередньо за зсувом ліній у спектрах ежектованих електронів. Оскільки припорогове електронне збудження АІС проходить виключно через утворення станів негативних іонів (див. попередні розділи 2 та 3, а також дані [97] для інших атомів лужних металів), цей процес може впливати на обмін енергією розсіяного та ежектованого електронів [108]. Такі дані на початок даної роботи були відомі для атомів літію [109], натрію [110, 111], калію [28] та цезію [111]. Для

атомів натрію та калію було виявлено відхилення від асимптотичної залежності $\Delta\epsilon(E_1)$, а саме, отримано її осциляційний характер, екстремуми якого розташовані як у додатній, так і у від'ємній областях значень зсуву $\Delta\epsilon$ (див. рис. 4.1). Цікаво, що аналогічні дослідження для більш важкого атома цезію не виявили такого ефекту [111].

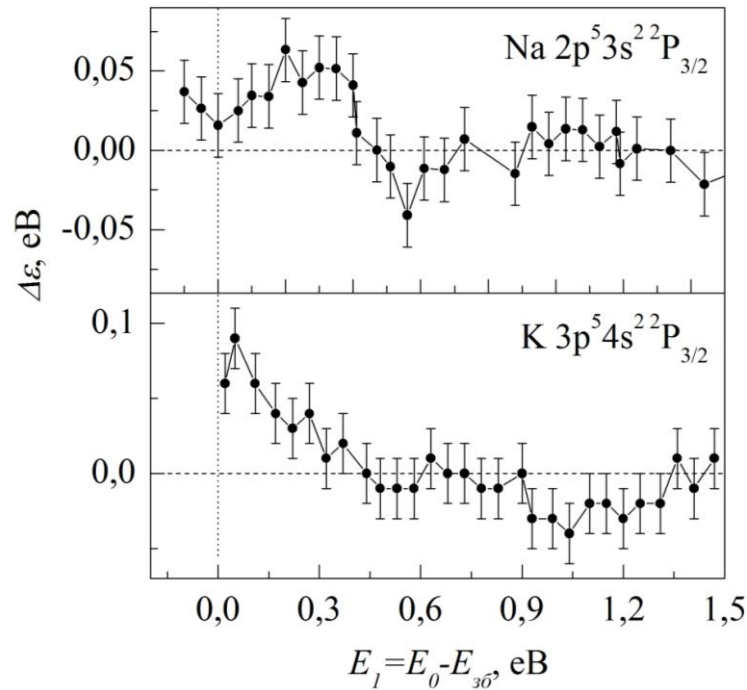


Рис. 4.1. Енергетична залежність ВПЗ-зсуву ліній $\Delta\epsilon$ для станів $(np^5[n+1]s^2)^2P_{3/2}$ в атомах Na ($n=2$) [110] та K ($n=3$) [28].

Досліджені в даній роботі спектри ежектованих електронів атома рубідію при низьких енергіях зіткнень також показали наявність ефекту ВПЗ (див. рис. 2.4). На рис. 4.2 наведено приклади спектрів ежектованих електронів атома рубідію, одержаних при дійсних значеннях енергії зіткнень $E^0=15.35, 16.16$ і 17.73 еВ. Перші два спектри при енергіях, близьких до порогу збудження цих АІС, показують наявність зсуву ліній $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ у порівнянні із їх положеннями у спектрі при 17.73 еВ. Також видно уширення ліній, особливо у випадку $(4p^5 5s^2)^2P_{1/2}$, та спотворення симетричності їх профілю.

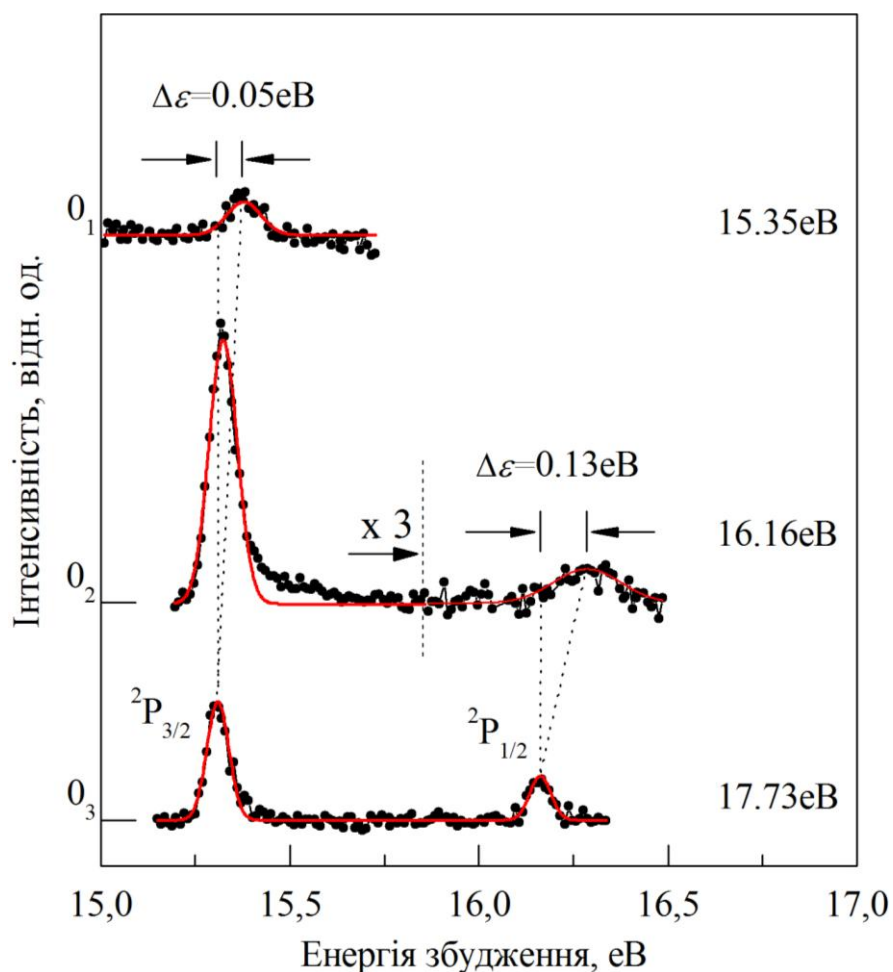


Рис. 4.2. Енергетичний зсув ліній ${}^2P_{3/2}$ і ${}^2P_{1/2}$ у спектрах електронів при енергіях зіткнень, близьких до порогів збудження рівнів $(4p^5 5s^2){}^2P_{3/2,1/2}$ [112]. Суцільними лініями позначено фітування функцією Гауса.

Рубідій залишався єдиним лужним атомом, для якого була невідома енергетична залежність ВПЗ-зсуву в енергетичних спектрах електронів, а також вплив на цю поведінку припорогового резонансного збудження АІС.

Методика досліджень. Суть методики досліджень ефекту ВПЗ у спектрах електронів полягає у точному визначенні енергетичного положення лінії при енергії зіткнень до 1-1.5 eV вище порогу збудження відповідного АІС.

Дослідження спектрів ежектованих електронів (див. розділ 2) показали, що зміна енергії первинного електронного пучка є лінійною функцією від зміни потенціалу, прикладеного до катода, для значень енергії зіткнень $E_i > E_{зб} + 3$ еВ. Для таких значень енергії зіткнень енергетичний інтервал ΔE між розташуванням певної лінії в енергетичному спектрі ежектованих і у спектрі розсіяних електронів (див. тестовий спектр на рис. 2.2) є пропорційним до кроку зміни енергії первинного електронного пучка:

$$\Delta E = E_{i+1} - E_i = -e (U_{i+1} - U_i), \quad (4.5)$$

де U_i, U_{i+1} – значення напруг, прикладених до катода при вимірах спектрів i та $i+1$.

Для енергій зіткнень $E_i < E_{зб} + 3$ еВ калібрування шкали енергій первинних електронів, тобто визначення дійсного значення енергії зіткнень E_i^0 , при якій був виміряний спектр i , проводилося шляхом віднімання від значення енергії зіткнень E , при якій був виміряний найближчий тестовий спектр, кроку зміни енергії зіткнень:

$$\Delta E = -e (U_{тест} - U_i), \quad (4.6)$$

де $U_{тест}$ і U_i – напруги, прикладені до катода при вимірі тестового та основного i спектрів.

Також було виявлено, що для енергій зіткнень < 1.5 еВ більше порогу збудження відповідного АІС наявність ефекту ВПЗ призводить до асиметричності профілю лінії, що ускладнює визначення її реального енергетичного положення. Це вимагає використання для фітування лінії спеціальної функції Гауса із додатковим множником, який враховує припорогове спотворення профілю лінії [80]:

$$k(E, \xi) = \frac{\pi \xi}{\sinh(\pi \xi)} \exp\left(2\xi \arctan \frac{2(E - E^a)}{\tilde{A}}\right), \quad (4.7)$$

де Γ – енергетична ширина відповідного стану.

Однак наші дослідження показали, що додатковий зсув енергетичного положення лінії за рахунок асиметричного профілю був завжди менший за ціну кроку (0.01 eV) зміни енергії ежекторованих електронів.

Отже, за відносним енергетичним розташуванням ліній у спектрах розсіяних і ежекторованих електронів та відомими енергіями збудження відповідних АІС визначалося “видиме” значення енергії зіткнень E_i^e , яке, в свою чергу, пов’язане з ВПЗ-зсувом $\Delta\epsilon_i$ та дійсним значенням енергії зіткнень E_i^o :

$$E_i^e = E_i^o + \Delta\epsilon_i. \quad (4.8)$$

Звідси ВПЗ-зсув:

$$\Delta\epsilon_i = E_i^e - E_i^o. \quad (4.9)$$

Нижче будуть розглядатися результати досліджень ефекту ВПЗ у спектрах ежекторованих електронів при електронному припороговому збудженні станів $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ атома рубідію. ВПЗ-зсув ліній був отриманий як середнє значення даних п’яти незалежних експериментів. Невизначеність для перших трьох точок енергетичної залежності $\Delta\epsilon(E_1)$, де $E_1 < 0.1$ eV і інтенсивність ліній у спектрах була мінімальна, становила ± 50 меВ. Для більш високих енергій зіткнень її значення не перевищувало ± 40 меВ.

4.2. Ефект взаємодії після зіткнення в енергетичних спектрах ежекторованих електронів

На рис. 4.3 представлені енергетичні залежності ВПЗ-зсуву ліній $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$ і $(4p^5 5s^2)^2P_{1/2}$ в енергетичних спектрах ежекторованих електронів атома рубідію. Як видно з рисунку, обидві залежності мають явний асимптотичний характер. Максимальні значення ВПЗ-зсуву становлять 70 меВ для $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$ і 130 меВ для $(4p^5 5s^2)^2P_{1/2}$ стану. Для над-

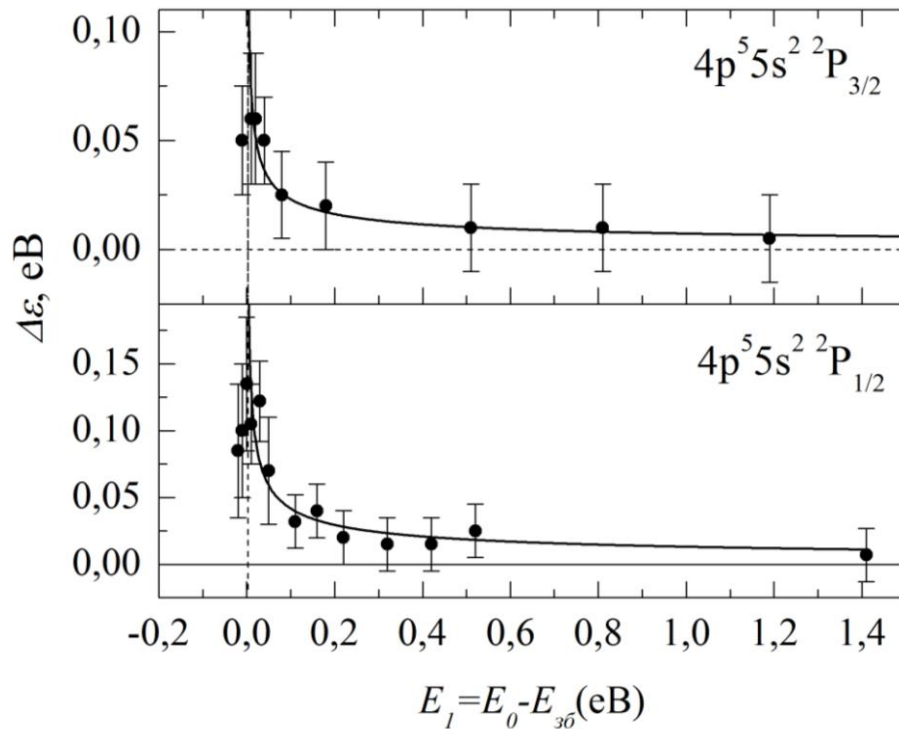


Рис. 4.3. Енергетична залежність ВПЗ-зсуву $\Delta\varepsilon$ для станів $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ атома рубідію [66, 112]. Суцільна лінія – апроксимація за формулою Баркера-Бері (4.2). Вертикальні штриховані лінії – пороги збудження станів $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$ та $(4p^5 5s^2)^2P_{1/2}$ при 15.31 та 16.16 еВ [61].

порогових енергій більше $E_1 > 1$ еВ значення ВПЗ-зсуву прямує до нуля. Наявність ВПЗ-зсуву при енергіях $E_1 < 0$ пов'язана зі збудженням АІС електронами, що присутні в енергетичному розподілі електронів первинного електронного пучка (див. рис. 2.1).

Апроксимація даних за формулою Баркера-Бері (4.2), де параметром була автоіонізаційна ширина Γ , дозволило нам визначити автоіонізаційну ширину досліджених рівнів. Для рівня $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$ вона становить 4.4 ± 0.7 меВ, що близько до експериментального значення 4.9 меВ [113]. Визначена так само автоіонізаційна ширина для стану $(4p^5 5s^2)^2P_{1/2}$ становить 7.0 ± 2 меВ. З іншого боку, із теоретичних розрахунків [63] відношення ймовірностей електронного каналу розпаду цих станів $A^a(^2P_{3/2})/A^a(^2P_{1/2}) = 0.8$

впливає, що автоіонізаційна ширина рівня $^2P_{1/2}$ не може бути меншою за 5,7 меВ. Це не суперечить одержаному в даній роботі значенню 7.0 ± 2 меВ.

4.3. Загальні риси і відмінності перебігу ефекту взаємодії після зіткнення в атомі рубідію та в інших лужних металах

Наявність даних про дослідження ефекту ВПЗ у більш легких атомах Na і K та у важкому атомі Cs дало змогу порівняти їх з нашими даними для атома Rb. На рис. 4.4 наведено порівняння енергетичних залежностей ВПЗ-зсуву ліній, що відповідають розпаду дублетних станів $(np^5[n+1]s^2)^2P_{3/2,1/2}$ у спектрах ежектованих електронів атомів Na ($n=2$), K ($n=3$), Rb ($n=4$) та Cs ($n=5$). Для атомів натрію та калію на залежностях $\Delta\epsilon(E_1)$ спостерігається

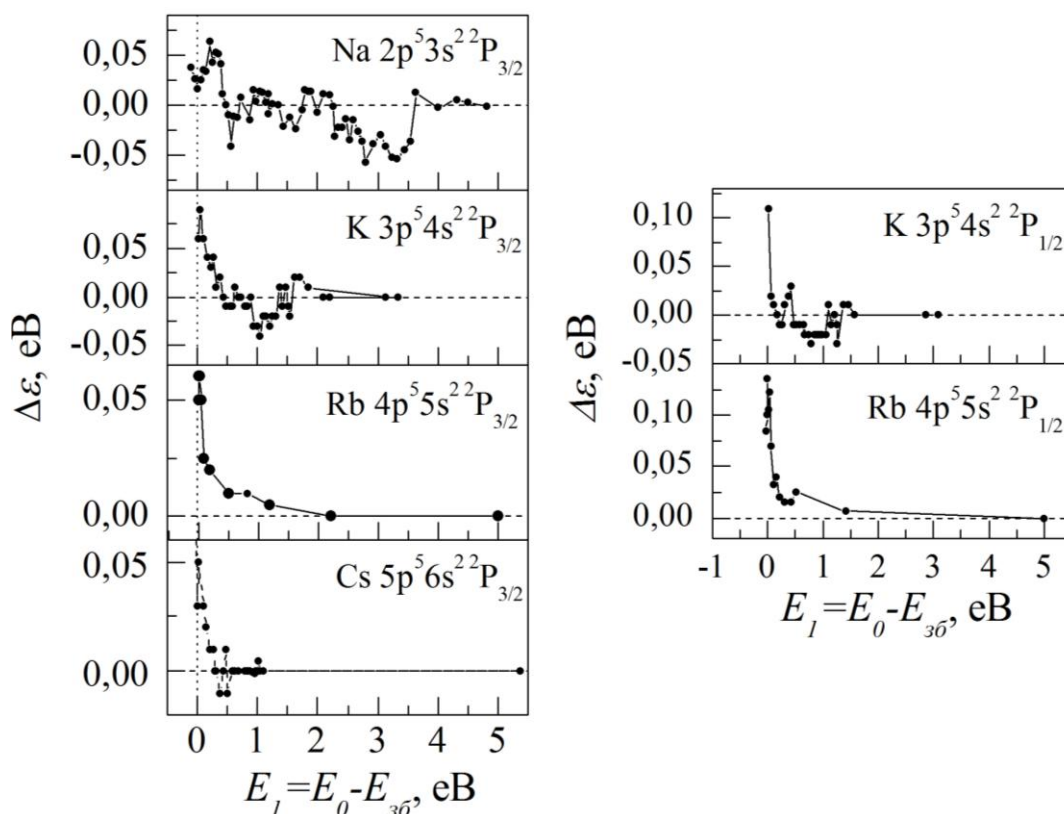


Рис. 4.4. Енергетична залежність ВПЗ-зсувів ліній $\Delta\epsilon$ для станів $(np^5[n+1]s^2)^2P_{3/2,1/2}$ в атомах Na ($n=2$) [110], K ($n=3$) [28], Rb ($n=4$) [66] та Cs ($n=5$) [111].

осциляційна структура із значеннями зсуву $\Delta\epsilon$ як у додатній, так і у від'ємній областях. Особливо чітко це проявляється для натрію в діапазоні енергій 1-4 еВ та в меншій мірі для калію в діапазоні енергій 0.5-1.5 еВ. На відміну від цих даних, наші дані для атома рубідію та дані [111] для атома цезію мають простий асимптотичний характер поведінки енергетичної залежності $\Delta\epsilon$, який вже задовільно описується класичною моделлю Баркера-Бері.

Максимальне значення ВПЗ-зсуву ліній $(np^5[n+1]s^2)^2P_{3/2}$ $\Delta\epsilon$ змінюється від 0.06 еВ для натрію до 0.16 еВ для цезію. Для лінії $(np^5[n+1]s^2)^2P_{1/2}$ максимальні значення $\Delta\epsilon$ становлять 0.11 та 0.135 еВ для атомів калію і рубідію, відповідно. ВПЗ-зсув відмінний від нуля в області надпорогових енергій E_1 до 4 еВ у натрія, 2 еВ – у калія, 1 еВ – у рубідія і тільки до 0.5 еВ – у цезія. Така поведінка ВПЗ-зсуву для подібних за конфігурацією атомних станів наводить на думку про зв'язок перебігу ефекту ВПЗ із певними особливостями припорогового електронного збудження цих станів.

На рис. 4.5 та 4.6 представлено порівняння припорогових ділянок перерізів збудження станів $(np^5[n+1]s^2)^2P_{3/2,1/2}$ з енергетичними залежностями ВПЗ-зсуву відповідних ліній. З поверхневого аналізу обох типів даних можна сказати, що існує помітна кореляція поведінки залежностей $\Delta\epsilon(E_1)$ та ФЗ станів $(np^5[n+1]s^2)^2P_{3/2,1/2}$. Зокрема, прослідковується, що зі зменшенням енергетичного проміжку між припороговими резонансами від максимального значення 2.5 еВ у натрію до 0.35 еВ у калію та повного їх злиття в один припороговий резонанс у рубідію і цезію, паралельно зникає і осциляційна структура ВПЗ-зсуву та зменшується енергетичний діапазон існування ефекту ВПЗ.

Для опису такої поведінки двох припорогових процесів автори роботи [111] запропонували якісну модель ефекту ВПЗ в умовах резонансного збудження АІС в атомах лужних металів. В основу моделі покладено дві,

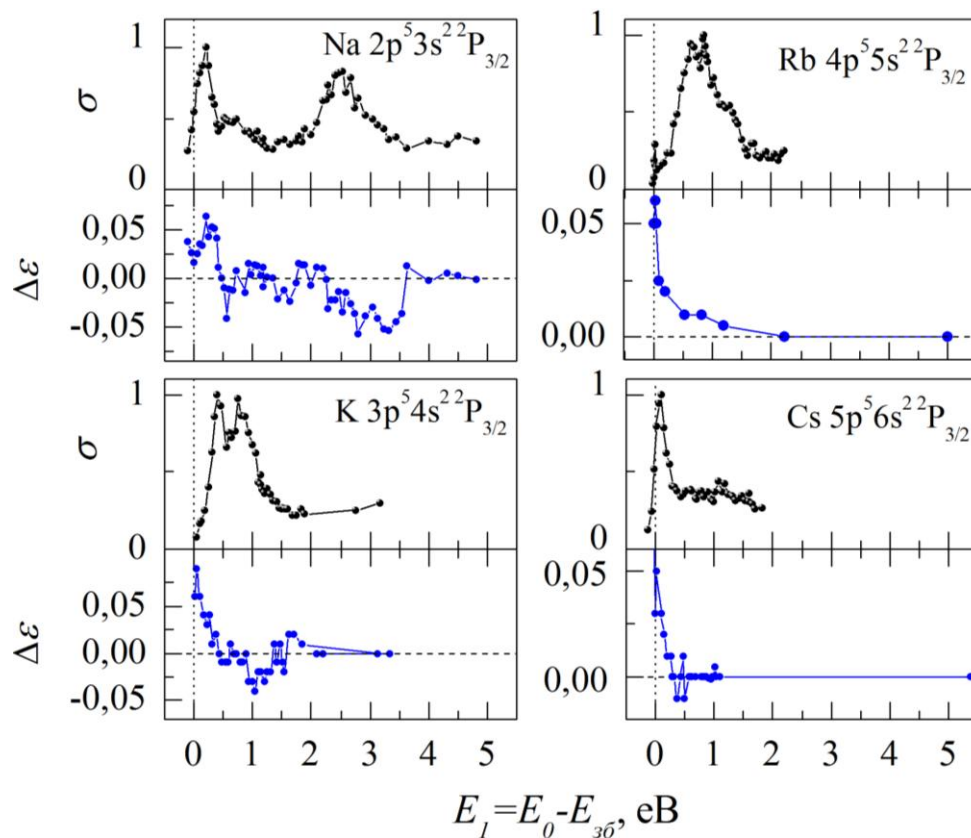


Рис. 4.5. Енергетичні залежності ФЗ та ВПЗ-зсувів ліній $\Delta\varepsilon$ для станів $(np^5[n+1]s^2)^2P_{3/2}$ в атомах Na ($n=2$) [110], K ($n=3$) [28], Rb ($n=4$) [66] та Cs ($n=5$) [111].

притаманні тільки цим атомним системам властивості – високий ступінь поляризованості та домінуюча роль резонансного збудження АІС у припороговій області енергій. Розглянемо більш детально цю модель. Відомо, що атоми лужних металів відрізняються від інших атомних систем найбільшою поляризаційною здатністю ($\alpha > 100$ а.о.) [114]. Як було показано вище, класичний ефект ВПЗ є результатом взаємодії повільного розсіяного електрона e_p та швидкого ежектованого електрона e_{ejc} (див. реакцію (4.1)). На відміну від цього, при електронному розпаді резонансно збудженого АІС має місце взаємодія двох ежектованих електронів – повільного e_{ejc}^1 , утвореного при розпаді стану негативного іона, та “швидкого” автоіонізаційного e_{ejc}^2 . Перед розпадом відповідного АІС повільний електрон e_{ejc}^1

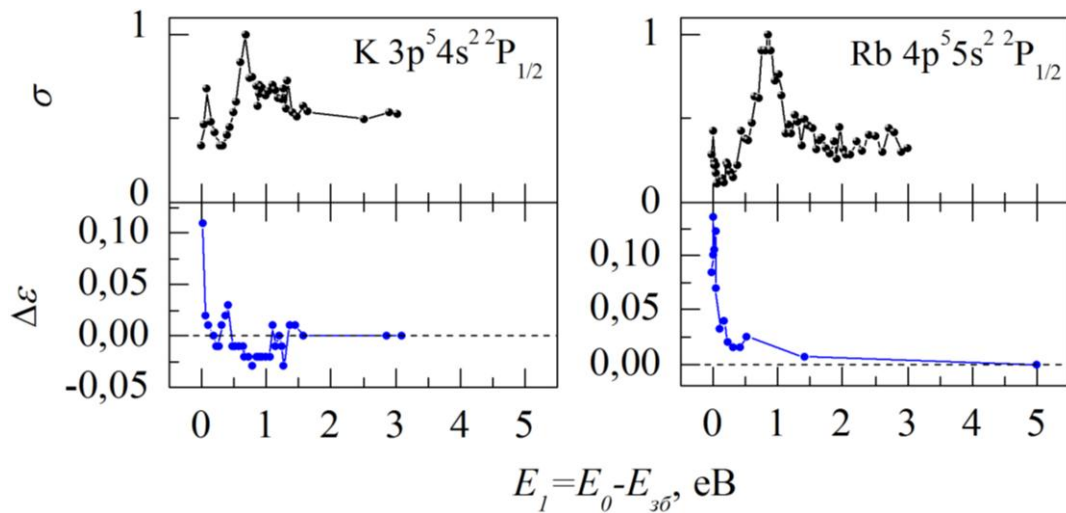


Рис. 4.6. Енергетичні залежності ФЗ та ВПЗ-зсувів ліній $\Delta\epsilon$ для станів $(np5[n+1]s^2)^2P_{1/2}$ в атомах К ($n=3$) [28] та Rb ($n=4$) [66].

під впливом ефективного поля поляризаційного притягання і потенціалу відцентрового відштовхування є локалізованим поблизу збудженого атома на певній віддалі r_0 . Після розпаду АІС утворюється іон Rb^+ та швидкий автоіонізаційний електрон e^2_{ejc} , а для електрона e^1_{ejc} поляризаційний потенціал ефективного поля змінюється на кулонівський. У цій ситуації зміна енергії електрона e^1_{ejc} (для електрона e^2_{ejc} вона буде протилежного знаку) визначається виразом $\Delta\epsilon \cong 1/r_0 - \alpha/2r_0^4$. Залежно від віддалі r_0 і величини α , ВПЗ-зсув $\Delta\epsilon$ може мати додатне або від'ємне значення.

Дана якісна модель вказує на важливу роль поляризаційної здатності атома і на прямий зв'язок енергетичної залежності $\Delta\epsilon(E_1)$ з парціально-хвильовою структурою резонансів у перерізах збудження АІС $(np^5[n+1]s^2)^2P_{3/2,1/2}$. Атом рубідію, який залишався єдиним недослідженим із групи лужних металів, повністю підтвердив фізичні засади даної моделі. Дослідження парціальної структури припорогових резонансів на перерізах збудження станів $(4p^55s^2)^2P_{3/2,1/2}$ показали, що резонансні максимуми становлять собою комбінацію перерізів збудження кількох станів негативного іона Rb^- . Якби енергії збудження останніх станів були енергетично більш

рознесені, як у випадку атомів натрію та калію, то енергетична залежність ВПЗ-зсуву відповідних ліній мала б осциляційний характер. Однак суперпозиція щільно розташованих багатьох окремих резонансів Фешбаха з домінуючою конфігурацією $3p^5 3d 4s 4p$ в результаті дає нероздільний одиночний резонансний максимум на кожній ФЗ станів $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$, що призводить, за аналогією із атомом цезію, до асимптотичного характеру поведінки енергетичної залежності $\Delta\epsilon(E_1)$ відповідних ліній у спектрах ежектованих електронів атома рубідію.

Висновки до розділу 4

1. Результати досліджень ефекту ВПЗ у спектрах ежектованих електронів атома рубідію для дублетних станів $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$, показали, що енергетична залежність ВПЗ-зсувів ліній $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ у діапазоні надпорогових енергій від 0 до 5 еВ має асимптотичний характер і описується класичною моделлю Баркера-Бері.

2. Виявлено, що максимальних значень ВПЗ-зсув ліній набуває саме у порозі збудження станів $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ і становить 70 меВ і 130 меВ, відповідно.

3. Апроксимація даних за формулою Баркера-Бері дозволила визначити автоіонізаційну ширину досліджених рівнів. А саме, для рівня $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$ вона становить 4.4 ± 0.7 меВ, що близько до визначеного раніше експериментального значення 4.9 меВ, для стану $(4p^5 5s^2)^2P_{1/2}$ автоіонізаційна ширина становить 7.0 ± 2.0 меВ.

4. Досліджено загальні закономірності і відмінності перебігу енергетичної залежності ВПЗ-зсуву ліній для атома рубідію та інших лужних металів (натрію, калію, цезію), зокрема, показано прямий зв'язок ефекту ВПЗ та резонансного збудження АІС у припороговій області енергій зіткнень.

РОЗДІЛ 5

АВТОІОНІЗАЦІЯ ТА ІОНІЗАЦІЯ АТОМА РУБІДІЮ

Незважаючи на тривалу історію досліджень, початок яких припадає на тридцять років минулого століття [42], іонізація електронним ударом атомів лужних металів залишається однією з найскладніших проблем експериментальної і теоретичної атомної фізики. Справді, навіть поверхневий порівняльний аналіз наявних експериментальних (див. роботу [47] та посилання у ній) та теоретичних (див. роботу [54] та посилання у ній) даних демонструє значні розбіжності як за абсолютною величиною, так і за формою енергетичної залежності перерізів іонізації у досліджуваному діапазоні енергій зіткнень. Проаналізуємо причини такої ситуації.

У традиційних експериментальних дослідженнях, які виконуються шляхом вимірювання сумарного потоку іонів, що утворюються в області зіткнень, основними причинами розкиду даних є висока невизначеність вимірів густини парів мішені та іонного струму. Як показали експериментальні дослідження електронної іонізації атомів лужних металів [42-48], а також теоретичний аналіз [49-54], у важких атомах калію, рубідію та цезію внесок від збудження та розпаду АІС веде до суттєвого ($>20\%$) збільшення абсолютного значення повного перерізу однократної іонізації [42-45]. Однак визначити експериментально абсолютне значення внеску від такого непрямого процесу в повний переріз однократної іонізації атомів лужних металів, а також перерізів прямої іонізації окремих електронних оболонок практично неможливо. Річ у тому, що традиційні дослідження іонізації мають інтегральний характер вимірювань, тобто відбувається реєстрація повного потоку іонів, що утворюються в області взаємодії нейтральних атомів з електронами.

Крім того, великі розбіжності у значеннях теоретичних перерізів повної однократної іонізації атомів лужних металів, а також погане узгоджен-

ня з експериментальними даними [42-48] (особливо вище порогу збудження p^6 оболонки) є прямим наслідком неврахування у достатній мірі релятивістських й кореляційних ефектів при розрахунках парціальних перерізів збудження та іонізації окремих оболонок атомів. Ці ефекти відіграють особливу роль у важких атомах калію, рубідію і цезію. Зрозуміло, що дієвість того чи іншого теоретичного наближення при описі автоіонізації чи іонізації можна оцінити тільки порівнявши розрахунки з відповідними експериментальними даними. Зауважимо, що у роботах [56, 57] вперше вдалося експериментально визначити як відносний, так і абсолютний внески автоіонізації в повний переріз однократної іонізації атомів калію та цезію. Для атома рубідію такі дані були відсутні.

З огляду на це, у даному розділі представлені результати експериментального та теоретичного дослідження внеску (відносного та абсолютного) автоіонізації у процес повної однократної іонізації атома рубідію електронним ударом. Також аналізуються можливості найбільш широко використовуваних теоретичних підходів, роль релятивістських та кореляційних поправок в описі електронної однократної прямої іонізації атома рубідію в діапазоні енергії зіткнень від порогу іонізації 5s оболонки до 600 еВ.

5.1. Методика досліджень перерізу автоіонізації

Як уже згадувалося вище, у традиційних дослідженнях іонізації практично неможливо експериментально визначити кількісний внесок процесу автоіонізації в повний переріз однократної іонізації [47]. Проте у вимірах спектрів ежектованих електронів, що утворюються при розпаді АІС атомів, виникає унікальна можливість дослідити процес автоіонізації безпосередньо [56, 57]. Дійсно, оскільки енергетичний розподіл іонізаційних електронів має неперервний характер, вони проявляють себе в енергетичному спе-

ктрі ежектованих електронів лише як фонова складова, на якій розташовані лінії, що відповідають розпаду відповідних АІС (див. рис. 1.11). Віднімання фону від експериментального спектра залишає у спектрах тільки автоіонізаційну компоненту. Сума інтенсивностей усіх ліній у спектрі ежектованих електонів

$$N_e^n = \sum_i N_e^i = k \sum_i n_e^i |_{E^n, \theta}, \quad (5.1)$$

одержаному при певній енергії зіткнень E_0 та куті спостереження θ , при нормуванні на струм первинного електронного пучка I^n , виражає *переріз автоіонізації* атома σ_{aut} . У виразі (5.1) N_e^i – інтенсивність окремої лінії i ; k – апаратурна константа; $n_e^i |_{E^n, \theta}$ – потік електронів, що утворилися при розпаді станів i та вилетіли із зони взаємодії пучків у напрямку аналізатора енергій електронів. Сукупність нормованих на струм первинного електронного пучка сумарних інтенсивностей N_e^n / I^n ліній, виміряних для різних значень енергії зіткнень E_n , формує енергетичну залежність повного перерізу автоіонізації $\sigma_{aut}(E_n)$.

Остаточні дані перерізу автоіонізації атома рубідію являли собою середні значення результатів п'яти незалежних вимірів. Одержані відносні значення з перерізу автоіонізації σ_{aut} за співвідношенням інтенсивностей ліній нормувалися на абсолютне значення ЕПЗ певного АІС. Проведена спектроскопічна класифікація ліній (див. табл. 2.2) дозволила дослідити внесок кожної конфігурації у формування перерізу автоіонізації атома рубідію.

5.2. Переріз автоіонізації атома рубідію

Переріз автоіонізації при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію був одержаний як сукупність нормованих на струм первинних електронів пов-

них інтенсивностей ліній у спектрах ежектованих електронів, що відображають розпад АІС $(4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2)^{2,4}L_J$ з порогами нижче від першого збудженого стану іона Rb^+ $(4p^5 5s)3/2[3/2]^\circ_2$ при 20.71 еВ [31]. Одержані відносні дані були нормовані на розраховане значення $6.94 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2$ [65] перерізу збудження стану $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$ при енергії зіткнень 17.66 еВ. Повна відносна невизначеність перерізу автоіонізації становила 30% – в діапазоні 15.4-16.4 еВ та <20% – для інших значень енергії зіткнень.

На рис. 5.1 представлено переріз автоіонізації σ_{aut} атома рубідію в діапазоні енергій первинних електронів від порогу збудження $4p^6$ оболонки до 600 еВ. На вставці показано припорогову частину перерізу. Як видно, поведінка перерізу характеризується наявністю трьох максимумів А, В і С при енергіях зіткнень $\approx 16, 22$ і 113 еВ, відповідно. Для аналізу походження цих максимумів, на рис. 5.1б наведено також ФЗ дублетних $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ і квартетних $(4p^5 4d5s)^4P_{5/2,3/2,1/2}$ АІС при енергіях зіткнень від порогу збудження до 600 еВ. Неважко помітити, що максимум А формується сумарним внеском резонансного збудження дублетних станів $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$.

Аналізуючи схему розташування рівнів та ФЗ більш високоенергетичних АІС (див. рис. 2.7, 3.2, 3.4), ми бачимо, що різкий підйом перерізу σ_{aut} (максимум В) до максимального значення $(2.9 \pm 0.6) \times 10^{-16} \text{ см}^2$ напряму пов'язаний з резонансним збудженням у цій області квартетних рівнів $(4p^5 4d5s)^4P_{5/2,3/2,1/2}$, а також високоенергетичних дублетів конфігурацій $4d5s, 5s5p$ із порогами збудження вище 17.2 еВ (див. вставку на рис. 5.1а). Наступний повільний спад перерізу в області енергій 22-50 еВ викликаний суперпозицією перерізів квартетних та дублетних рівнів, які домінують у спектрах при високих енергіях зіткнень (рис. 2.5). Широкий профіль максимуму В та його затягнутість з боку високих енергій може відображати внесок процесу каскадного заселення квартетних рівнів, що спостерігається

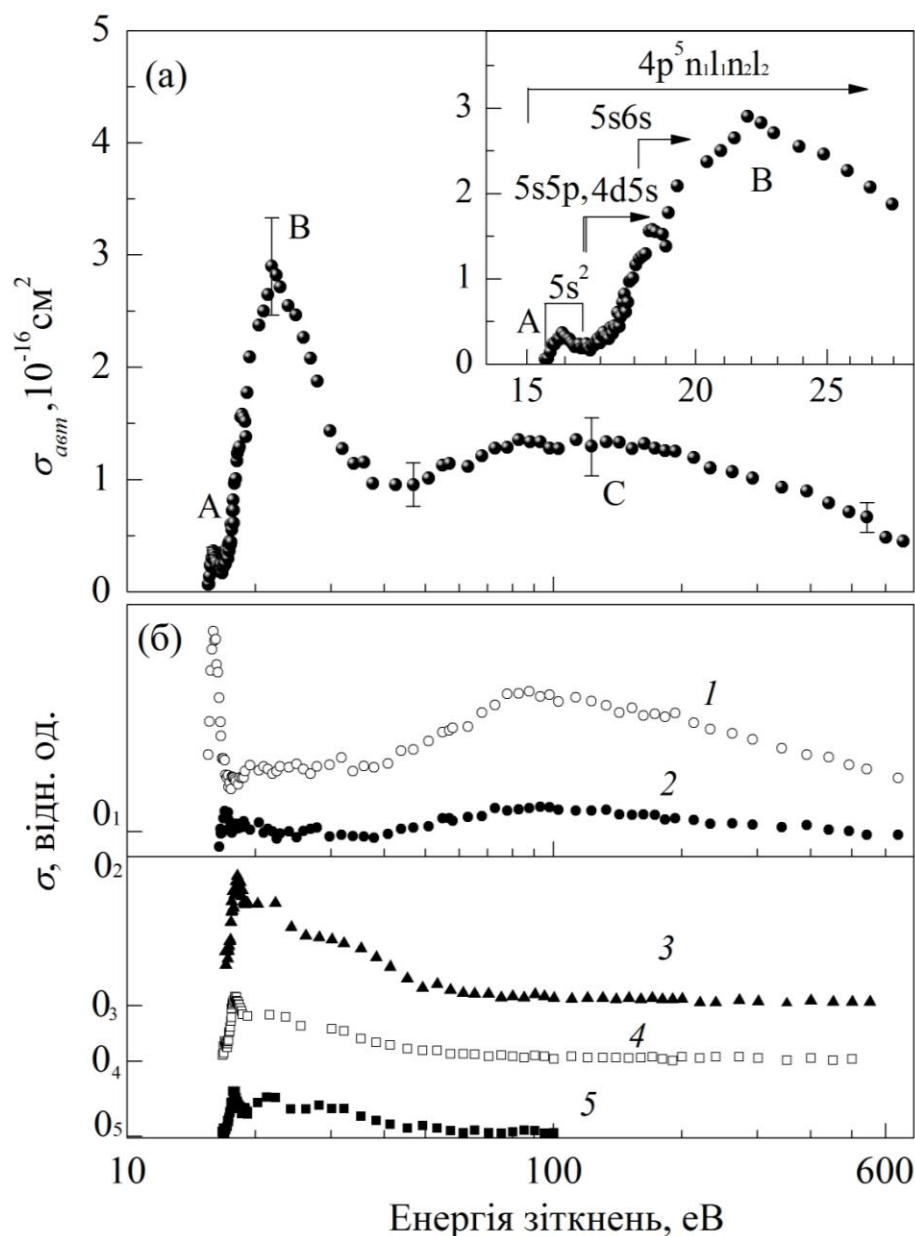


Рис. 5.1. Переріз автоіонізації σ_{aut} при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію – (а) та ФЗ дублетних $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2}$ (1), $(4p^5 5s^2)^2P_{1/2}$ (2) і кватетних $(4p^5 4d5s)^4P_{5/2}$ (3), $(4p^5 4d5s)^4P_{3/2}$ (4), $(4p^5 4d5s)^4P_{1/2}$ (5) АІС [59] – (б). На вставці показано припорогову область перерізу автоіонізації 15-30 еВ [63].

на їх функціях збудження в області енергій 17-30 еВ (на рис. 5.1б ФЗ 3-5). Третій широкий максимум С пов'язаний з внеском розпаду дублетних автоіонізаційних станів, оскільки при енергіях зіткнень 50-600 еВ саме вони формують автоіонізаційні спектри атома рубідію (див. рис. 2.5).

Щоби визначити відносну величину внеску автоіонізації у повний переріз іонізації $\sigma_{\text{іон}}$, нами було здійснено порівняння одержаного перерізу автоіонізації $\sigma_{\text{авт}}$ з експериментальними даними [42, 44] з повного перерізу однократної іонізації $\sigma_{\text{іон}}$ атома рубідію електронним ударом. Для аналізу ми використали дані [42], адже це єдині дані з повного перерізу однократної іонізації в діапазоні енергій зіткнень 4-700 еВ. Оскільки дані роботи [42] наведені у відносних одиницях, вони були нормовані на абсолютне значення перерізу $(1.6 \pm 0.2) \times 10^{-16} \text{ см}^2$, одержане у роботі [44] при енергії зіткнень 500 еВ. Із порівняння цих даних випливає, що відносний внесок процесу автоіонізації у повний переріз однократної іонізації при енергії зіткнень ≈ 22 еВ складає $32 \pm 5\%$.

5.3. Повний переріз однократної іонізації атома рубідію електронним ударом

Одержаний переріз автоіонізації $\sigma_{\text{авт}}$ атома рубідію дає унікальну можливість здійснити аналіз дієвості найбільш поширених теоретичних наближень для опису як процесу автоіонізації, так і процесу прямої однократної іонізації. Такими наближеннями є плоско-хвильове наближення Борна (ПХБ), релятивістські наближення спотворених хвиль (РСХ) і бінарних зіткнень (РБЗ), наближення сильного зв'язку (СЗ), нерелятивістських спотворених хвиль (К-СХ) і бінарних зіткнень (К-БЗ). Для більш широкого аналізу в розгляд також включені емпірична формула Лотца (ЕФ-Л) та класична теорія Грізінського (КТ-Г). Зважаючи на те, що у важкого атома рубідію релятивістські (Р) і кореляційні (ВК) ефекти відіграють суттєву роль [71], вони також були досліджені в роботі при розрахунках перерізу однократної іонізації та перерізу збудження атома рубідію.

5.3.1 Теоретичні методи розрахунку перерізів автоіонізації та іонізації атомів електронним ударом. Повний переріз однократної іонізації $\sigma_{ion}(i, E_0)$ атома, що знаходиться у початковому стані i , електронами з енергією E_0 може бути представлений як сума перерізу прямої іонізації $\sigma_{np}(i, E_0)$ та перерізу автоіонізації атома $\sigma_{авт}(i, E_0)$ [64]:

$$\sigma_{ion}(i, E_0) = \sigma_{np}(i, E_0) + \sigma_{авт}(i, E_0). \quad (5.2)$$

Якщо вважати, що процес іонізації не залежить від непрямих процесів, переріз прямої іонізації визначається як:

$$\sigma_{np}(i, E_0) = \sum_f \sigma_{np}(i \rightarrow f, E_0), \quad (5.3)$$

де: $\sigma_{np}(i \rightarrow f, E_0)$ – переріз іонізації із основного стану атома i в кінцевий стан іона f для кожної окремої оболонки. Сумування виконується за всіма станами іона.

Переріз автоіонізації можна записати так:

$$\sigma_{авт}(i, E_0) = \sum_{j,f} \sigma_{авт}(i \rightarrow j, E_0) B(j \rightarrow f), \quad (5.4)$$

де $\sigma_{авт}(i \rightarrow j, E_0)$ – переріз збудження із внутрішньої оболонки певного автоіонізаційного стану j ; а $B(j \rightarrow f)$ – коефіцієнт розгалуження відносно цього стану j :

$$B(j \rightarrow f) = \frac{A^a(j \rightarrow f)}{\sum_f A^a(j \rightarrow f) + \sum_k A^r(j \rightarrow k)}. \quad (5.5)$$

У формулі (5.5) $A^a(j \rightarrow f)$ – імовірність автоіонізаційного переходу з автоіонізаційного стану атома j у кінцевий стан іона f , а $A^r(j \rightarrow k)$ – імовірність радіаційного переходу із стану j на всі нижні рівні атома k . Теоретичні розрахунки імовірностей розпаду АІС при збудженні 4p⁶ оболонки атома рубідію [71] та експериментальні дані [36] показали, що ймовірність радіаційних переходів є значно меншою, ніж імовірність автоіонізаційних пере-

ходів, тому вони можуть бути не враховані у знаменнику виразу (5.5). Тому для атома Rb, значення коефіцієнта розгалуження становить $B(j \rightarrow f) = 1$.

Переріз прямої іонізації $\sigma_{np}(i \rightarrow f, E_0)$ одержується шляхом інтегрування диференціального перерізу за енергією іонізаційного електрона E :

$$\sigma_{np}(i \rightarrow f, E_0) = \frac{8}{E_0 g_i} \int_0^{(E_0 - I)/2} \frac{d\sigma_{if}(E_0, E)}{dE} dE, \quad (5.6)$$

де g_i – статистична вага початкового стану i ; I – енергія іонізації, а диференціальний переріз іонізації виражається через квадрат матричного елемента електростатичної взаємодії електронів [64]:

$$\frac{d\sigma_{if}(E_0, E)}{dE} = \sum_{\lambda_0, \lambda_1, \lambda, j_0, j_1, j, j', J} \left| \langle \alpha_f J_f, E \lambda s(j) E_1 \lambda_1 s(j_1) j, \right. \\ \left. J | H | \alpha_i J_i, E_0 \lambda_0 s(j_0) J \rangle \right|^2 \quad (5.7)$$

У формулі (5.7) J_i та J_f – повні моменти початкового стану атома i та кінцевого стану іона f , відповідно; α_i та α_f – квантові числа; H – гамільтоніан електростатичної міжелектронної взаємодії, E – енергія ежектованого електрона; $E_1 = E_0 - I - E$ – енергія розсіяного електрона; λ_0, λ_1 , і λ – орбітальні кутові моменти хвильових функцій вільних електронів; j_0, j_1 і j – повні моменти електронів у неперервному спектрі станів ($j = \lambda \pm 1/2$), J – повний кутовий момент системи “атом + електрон” або “іон + два електрони”.

Розрахунки нами проведено з використанням програмного пакету Flexible Atomic Code (FAC) [89], який враховує релятивістський характер збудження складних атомів шляхом використання гамільтоніана Дірака-Кулона та чисельного рішення базису релятивістських радіальних орбіталей Дірака-Фока-Слетера. Парціальні перерізи $\sigma_{np}(i \rightarrow f, E_0)$ іонізації $5s, 4p^6, 4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок (див. (5.4)) були одержані у релятивістських наближеннях РСХ, РБЗ та у цих же наближеннях, але з урахуванням кореляційних ефектів (РСХ-ВК, РБЗ-ВК). Спільним для всіх наближень є викорис-

тання методу факторизації, тобто відокремлення кутових та радіальних орбіталей, що дозволяє набагато спростити та прискорити розв'язок радіальних інтегралів.

Крім цього, нами додатково виконано розрахунки перерізів $\sigma_{np}(i \rightarrow f, E_0)$ з використанням нерелятивістських наближень спотворених хвиль та бінарних зіткнень (програмний пакет Кована) [116] (К-СХ та К-БЗ) для того, щоби визначити роль релятивістських поправок для правильного опису процесу іонізації атома рубідію. Ці розрахунки проведено з використанням нерелятивістського гамільтоніана при чисельному рішенні рівнянь Хартрі-Фока [116] у програмному пакеті LANL (Los Alamos National Laboratory) Atomic Physics Code Package [117].

Урахування кореляційних ефектів. У випадку використання кореляційних поправок при розрахунку перерізів іонізації атома рубідію, нами враховувалося конфігураційне змішування $4p^6nl$ ($n = 5, 6, 7, l = 0, 1, 2, 3$), $4p^5nln'l'$ ($nl = 5s, 6s, 5p, 4d, 5d, 4f, n'l' = 5s, 6s, 5p, 6p, 4d, 5d, 4f, 5f, 5g$ основних $4p^65s$ та $4p^6$ станів, $4p^5nl$ ($nl = 5s, 6s$), $4p^4nln'l'$ ($nl = 5s, 5p, n'l' = 5s, 5p, 4d, 5d$) кінцевих станів Rb^+ , що дозволило врахувати кореляційні ефекти при іонізації $5s$ і $4p$ електронів. У випадку іонізації електрона з $4s^2$ оболонки, базисний набір конфігурацій було доповнено. Конфігурації $4s4p^6nln'l'$ ($nl = 5s, 5p; n'l' = 5s, 6s, 5p, 6p, 4d, 5d, 4f, 5f$) взято для Rb , а $4s4p^65s$, $4s^24p^6$, $4s^24p^5nl$ ($nl = 5s, 6s, 5p, 6p$), $4s^24p^4nln'l'$ ($nl = 5s, 5p; n'l' = 5s, 6s, 5p, 6p, 4d, 5d$) та $4s4p^5nln'l'$ ($nl = 5s, 5p; n'l' = 5s, 6s, 5p, 6p, 4d, 5d$) включено додатково для Rb^+ .

Для врахування кореляційних ефектів при іонізації $3d^{10}$ оболонки у порівнянні з електронною іонізацією $5s$ та $4p$ оболонок, конфігурації було доповнено такими: $3d^94p^6nl$ ($nl = 5s, 6s, 5p, 6p$) і $3d^{10}4p^4nln'l'$ ($nl = 5s, 5p; n'l' = 5s, 6s, 5p, 6p, 4d, 5d$).

Перерізи іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок (парціальні перерізи) були розраховані незалежно. Повний переріз прямої іонізації σ_{np} був отриманий як сума розрахованих парціальних перерізів іонізації $\sigma_{np} = \sum \sigma_{iон}(nl)$, де $\sigma_{iон}(nl)$ – парціальні перерізи іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$ і $3d^{10}$ оболонок.

Пороги іонізації внутрішніх оболонок атома рубідію для розрахованих парціальних перерізів іонізації були взяті нами з бази даних [118]. Зокрема, значення цих порогів становили: 4.177 еВ – для $5s$, 20.71 еВ для $4p_{\{1/2\}}$, 21.77 еВ – для $4p_{\{3/2\}}$, 32 еВ – для $4s$, 116 еВ – для $3d_{\{3/2\}}$ і 117.4 еВ для $3d_{\{5/2\}}$ оболонок.

Перерізи електронного збудження. Розрахунки перерізів електронного збудження $4p^6$ та $4s^2$ оболонок атома рубідію у даній роботі проведено з урахуванням релятивістських та кореляційних поправок у наближенні РСХ-ВК за допомогою програмного пакету FAC [89].

У даній роботі теоретичний переріз автоіонізації $4p^6$ оболонки був одержаний як сума розрахованих перерізів збудження окремих АІС $\sigma_{авт} = \sum \sigma_{зб}(nl)$, де $\sigma_{зб}(nl)$ – це парціальні перерізи іонізації 55 АІС із конфігурацій $4p^5 5s^2$, $4p^5 5s 6s$, $4p^5 4d 5s$, $4p^5 5s 5d$, оскільки саме ці конфігурації вносять найбільший внесок у переріз автоіонізації атома рубідію (див. рис. 5.1). Аналогічно, переріз збудження $4s^2$ оболонки є сумою 37 розрахованих перерізів збудження АІС конфігурацій $4s 5s^2$, $4s 5s 5p$, $4s 5s 6s$, $4s 5s 4d$, $4s 6s 6p$, $4s 5s 7s$, $4s 5s 5d$.

Наші теоретичні оцінки показали, що сумарний внесок від збудження глибоких $3d^{10}$, $3p^6$ і т.д. оболонок у повний переріз автоіонізації не перевищує 1%. Основний внесок у повний переріз автоіонізації дає процес збудження $4p^6$ та $4s^2$ оболонок, тому в роботі розглянуто збудження тільки цих оболонок.

5.3.2. Перерізи прямої іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок. Як було показано вище, переріз процесу прямої іонізації атома рубідію складає основну частину повного перерізу однократної іонізації і тому впливає на величину та енергетичну поведінку останнього.

До початку наших досліджень для атома рубідію були відомі дані з розрахунків перерізу прямої іонізації в наближеннях ПХБ [51, 53, 54] та РБЗ [52], а також дані, отримані у рамках КТ-Г [120] та ЕФ-Л [121].

Оскільки повний переріз прямої іонізації σ_{np} атома рубідію формується сумарним внеском парціальних перерізів прямої іонізації окремих $5s$, $4p^6$, $4s^2$, $3d^{10}$ і т.д. оболонок, для аналізу енергетичної залежності сумарного перерізу іонізації нижче буде розглянуто дослідження поведінки перерізів іонізації кожної із цих оболонок окремо.

На даний час експериментально визначити перерізи іонізації кожної оболонки окремо практично неможливо. Проте для $5s$ оболонки така можливість існує в енергетичному проміжку між іонізаційним потенціалом при 4.18 еВ [31] і порогом збудження $4p^6$ оболонки при 15.31 еВ [61], оскільки у цій області енергій переріз $5s$ іонізації відображає повний переріз однократної іонізації атома рубідію. Тому даний аналіз ми почнемо з розгляду процесу іонізації саме $5s$ оболонки.

На рис. 5.2 представлено розраховані у даній роботі перерізи іонізації $5s$ оболонки атома рубідію в наближеннях РБЗ, РСХ, РБЗ-ВК, РСХ-ВК, К-БЗ, К-СХ і за формулою Лотца [121] та інші дані [51, 52-54, 120] у порівнянні з експериментальними повними перерізами іонізації [42, 46, 47]. Точка А на рисунку показує середнє максимальне значення експериментальних перерізів [42, 46, 47] – $(8.2 \pm 1.2) \times 10^{-16}$ см². Одразу слід зазначити помітну різницю між усіма теоретичними даними за величиною і положенням максимуму $5s$ іонізації (див. також табл. 5.1).

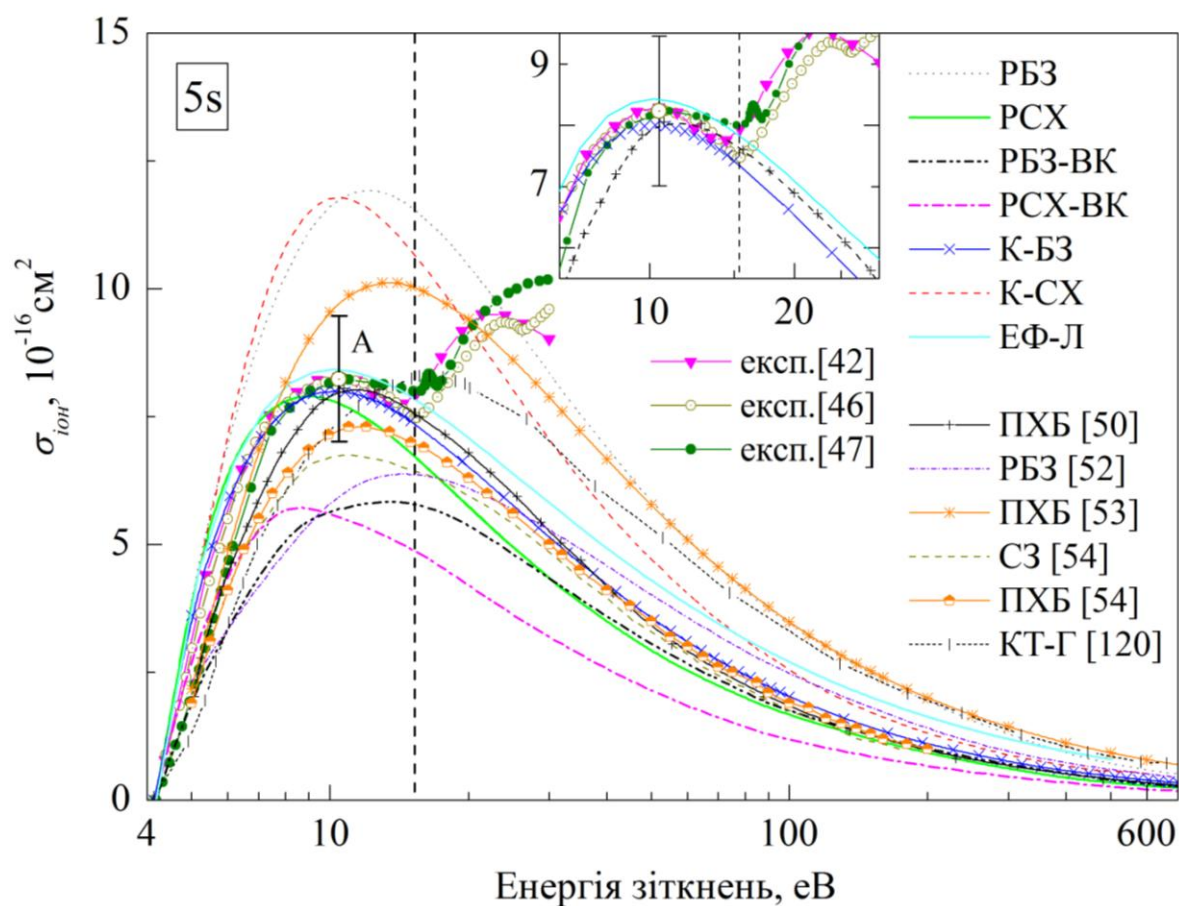


Рис. 5.2. Наші розраховані дані (РБЗ, РСХ, РБЗ-ВК, РСХ-ВК, К-БЗ, К-СХ, ЕФ-Л) та дані [50, 52-54, 120] з перерізів іонізації 5s оболонки у порівнянні з експериментальними повними перерізами іонізації [42-47] атома рубідію.

Вертикальна пунктирна лінія показує поріг збудження

$4p^6$ оболонки (15.31 eV [61]).

Таблиця 5.1

Максимальні значення парціальних перерізів іонізації 5s, $4p^6$, $4s^2$ і $3d^{10}$ оболонок (всі в 10^{-16} cm^2) атома рубідію (див. рис. 5.2, 5.3).

Оболонка	Наближення					
	PCX	PCX-BK	РБЗ	РБЗ-ВК	К-СХ	К-БЗ
5s	7.91	5.75	11.93	5.97	11.86	8.00
$4p^6$	4.56	3.88	2.82	2.84	3.84	2.68
$4s^2$	0.26	0.17	0.15	0.11	0.32	0.18
$3d^{10}$	0.08	0.08	0.09	0.10	0.07	0.29

Різниця в абсолютних значеннях між цими даними існує навіть в області високих енергій зіткнень. Порівняння з експериментальними даними показує, що всі перерізи, отримані в наближеннях РБЗ (наші дані та [52]), К-СХ, СЗ [54], ПХБ [53], КТ-Г [120], лежать далеко від середнього максимального значення експериментальних перерізів [42, 46, 47] (позначено як А). Включення у наближення РСХ та РБЗ кореляційних поправок (ВК) понижує переріз іонізації на 30 і 50%, відповідно, залишивши їх при цьому за межею невизначеності експериментальних даних. Таким чином, усі ці дані виключаються з подальшого аналізу повного перерізу іонізації. Однак з рис. 5.2 видно, що перерізи, одержані в наближеннях К-БЗ, РСХ, ЕФ-Л, ПХБ [51, 54], лежать у межах невизначеностей середнього експериментального значення перерізу А. З цих даних найближчими за абсолютним значенням до експериментальних даних є перерізи, розраховані в наближеннях К-БЗ, ЕФ-Л і ПХБ [51] (див. вставку на рис. 5.2). Однак, як можна бачити, при енергіях зіткнень вище 10 еВ два останні перерізи розходяться з експериментом. Тому для подальшого аналізу повного перерізу однократної іонізації атома Rb були обрані дані, одержані у наближенні К-БЗ, оскільки вони практично збігаються з експериментальним перерізом [42, 46, 47] за величиною і положенням першого максимуму. Різниця між перерізами, розрахованими в наближеннях К-БЗ, ПХБ [51], і перерізом, отриманим за ЕФ-Л, не перевищує 2% у всьому енергетичному діапазоні.

На рис. 5.3 показано перерізи прямої іонізації $4p^6$, $4s^2$ і $3d^{10}$ оболонок, розраховані в даній роботі в наближеннях РБЗ, РСХ, РБЗ-ВК, РСХ-ВК, К-БЗ, К-СХ, максимальні значення яких представлено в табл. 5.1, у порівнянні з даними ПХБ [42, 47]. Як видно з рисунка, всі одержані перерізи мають схожі енергетичні залежності і різняться лише поведінкою в області припорогових енергій зіткнень. Зокрема, в перерізах іонізації $4p^6$ оболонки в наближеннях К-СХ, РБЗ та РБЗ-ВК спостерігається зсув поло-

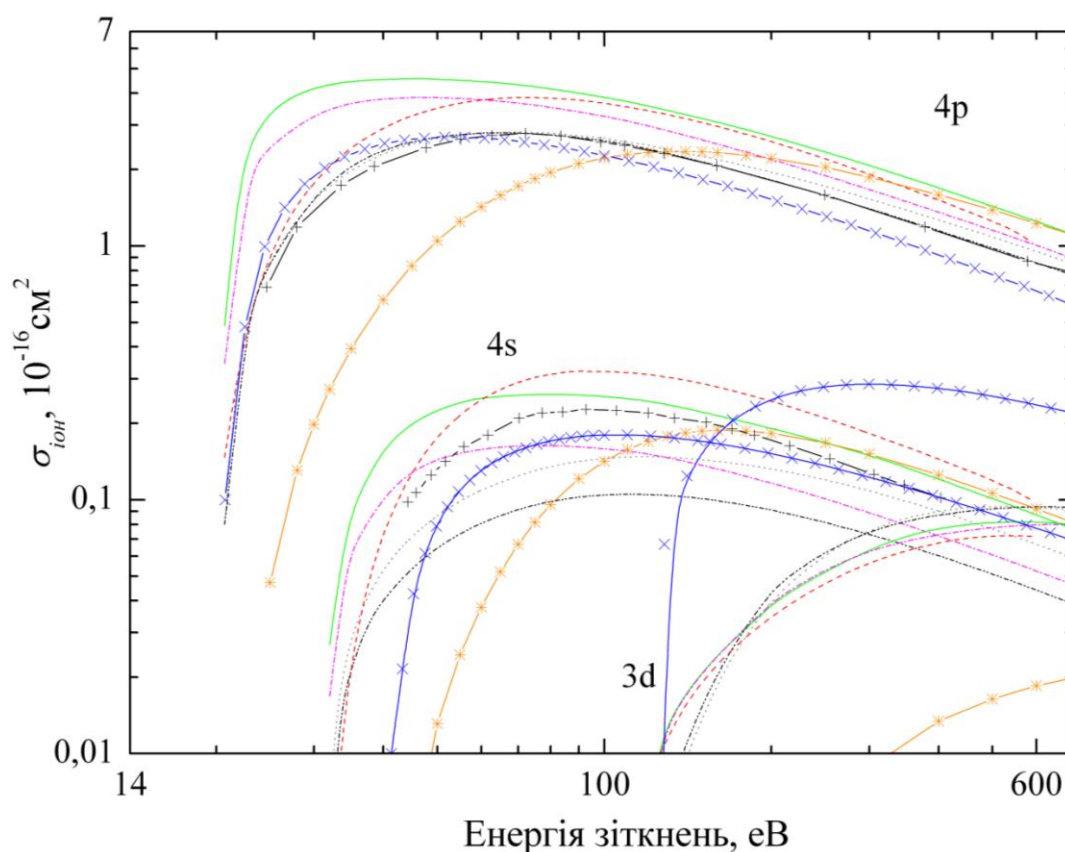


Рис. 5.3. Розраховані в різних наближеннях парціальні перерізи іонізації $4p^6$, $4s^2$ і $3d^{10}$ оболонок у порівнянні з даними [51, 53]: — PCX; - - PCX-BK; ··· RBZ; - · - RBZ-BK; - - K-CX; — x — K-BZ; + ПХБ [51]; * ПХБ [53].

ження максимуму на 20-40 еВ в бік високих енергій. Така ж тенденція зберігається і для $4s^2$ оболонки. Перерізи іонізації $4p^6$ та $3d^{10}$ оболонок зростають у порозі значно швидше в наближеннях PCX та PCX-BK, та K-CX, відповідно. Видно також, що дані, отримані в наближенні ПХБ [53] дають суттєво зсунуті максимуми для перерізів іонізації всіх оболонок. Залежно від методів наближень, парціальні перерізи іонізації суттєво відрізняються між собою і за абсолютною величиною. У разі перерізів іонізації $4s^2$ оболонки, найвищий переріз у наближенні K-CX є в три рази більшим за найменший переріз, одержаний у наближенні RBZ-BK. Що стосується перерізів іонізації $3d^{10}$ оболонки, то для різних наближень, окрім даних K-BZ та ПХБ [53], вони відрізняються приблизно на 20%. Також видно, що враху-

вання кореляційних поправок помітно впливає тільки на переріз іонізації $4s^2$ оболонки, а саме, зменшує величину перерізу в середньому на 20-50%. З цього випливає, що врахування кореляційних поправок завжди зменшує величину перерізів іонізації (особливо суттєво – для $5s$ і $4s^2$ оболонок), та при цьому не змінюється їх форма. Зрозуміло, що розглянуті відмінності не можуть не вплинути на енергетичну поведінку та абсолютне значення повного перерізу прямої іонізації, який є сумою вказаних парціальних перерізів.

Максимальний внесок у повний переріз прямої іонізації від іонізації $4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок не перевищує 5% та 7%, відповідно. Найбільш вагомий внесок, звісно, дає іонізація $4p^6$ оболонки і саме великі розбіжності у значеннях внеску (від 30% до 50%) від її іонізації суттєво впливатимуть на поведінку сумарного перерізу прямої іонізації за порогом іонізації $4p^6$ оболонки (20.71 eV [27]). Перерізи іонізації більш глибоких $3p^6$, $3s^2$ оболонок складають менше 1% від повного перерізу прямої іонізації, тому в даній роботі вони не розглядались.

5.3.3. Повний переріз прямої іонізації атома рубідію: експеримент і теорія. Із проведеного аналізу видно, що іонізаційні перерізи $5s$ і $4p^6$ оболонок дійсно є визначальними при формуванні сумарного перерізу прямої іонізації. Оскільки на даний час не має жодних експериментальних даних з перерізу іонізації $4p^6$ оболонки, висновок про застосовність наближень, використовуваних для його розрахунків, може бути зроблений тільки при порівнянні сумарного теоретичного перерізу з експериментальним перерізом прямої іонізації. У даній роботі виникла унікальна можливість вперше визначити абсолютний переріз прямого процесу іонізації σ_{np} шляхом віднімання від повного перерізу однократної іонізації σ_{ion} [42] одержаного в даній роботі експериментального перерізу автоіонізації σ_{aut} (див. рис. 5.4). Отримана у результаті енерге-

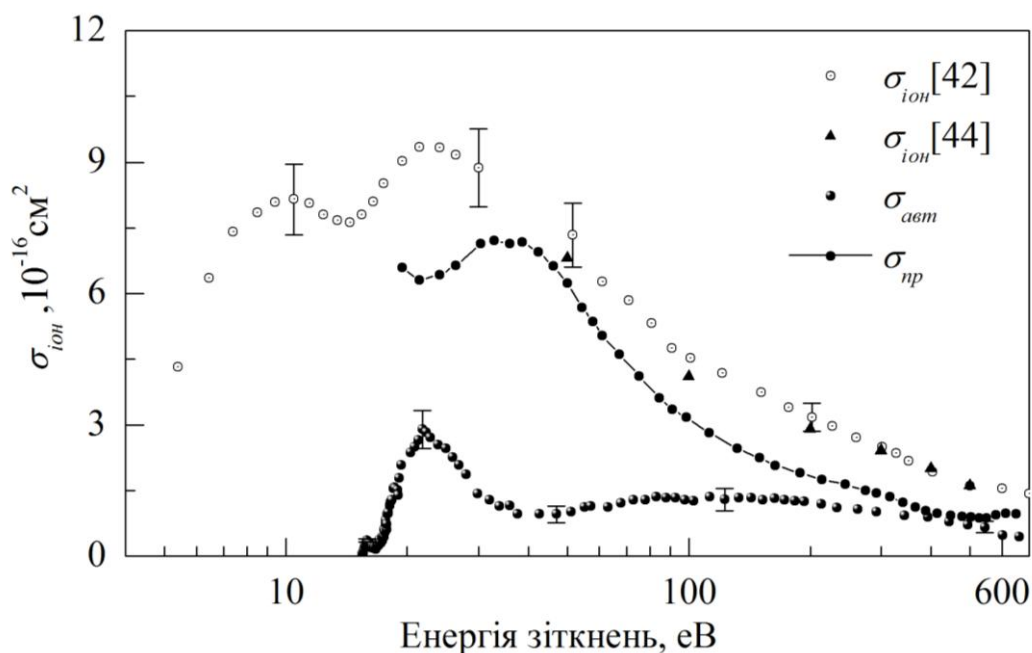


Рис. 5.4. Порівняння експериментальних даних з повного перерізу однократної іонізації σ_{ion} [42, 44], перерізу автоіонізації $\sigma_{авт}$ та перерізу прямої іонізації $\sigma_{пр} = \sigma_{ion}[42] - \sigma_{авт}[59]$ атома рубідію (див. текст). Дані роботи [42] нормовані на абсолютне значення $(1.6 \pm 0.2) \times 10^{-16} \text{ см}^2$ [44] при енергії зіткнень 500 еВ.

тична залежність $\sigma_{пр}$ відображає прямий процес іонізації атома рубідію в діапазоні енергії зіткнень 20-600 еВ із максимальним значенням перерізу $(7.2 \pm 2.2) \times 10^{-16} \text{ см}^2$. Форма та величина повного перерізу прямої іонізації повністю визначається сумарним внеском парціальних перерізів прямої іонізації, тобто $\sigma_{ion}(5s) + \sum \sigma_{ion}(nl)$, де $\sigma_{ion}(5s)$ – це наші дані перерізу 5s іонізації атома рубідію, одержані в наближенні К-БЗ, а $\sigma_{ion}(nl)$ – це парціальні перерізи іонізації $4p^6$, $4s^2$ і $3d^{10}$ оболонок, представлені в табл. 5.1 та на рис. 5.3. Порівняння отриманих таким чином перерізів представлено на рис. 5.5.

Як видно з рисунка, є хороше узгодження у поведінці перерізу прямої іонізації, отриманого в наближенні К-БЗ із експериментальним перерізом $\sigma_{пр}$ у всьому енергетичному діапазоні, що свідчить про те, що дане теоретичне наближення правильно описує процес прямої іонізації атома рубі-

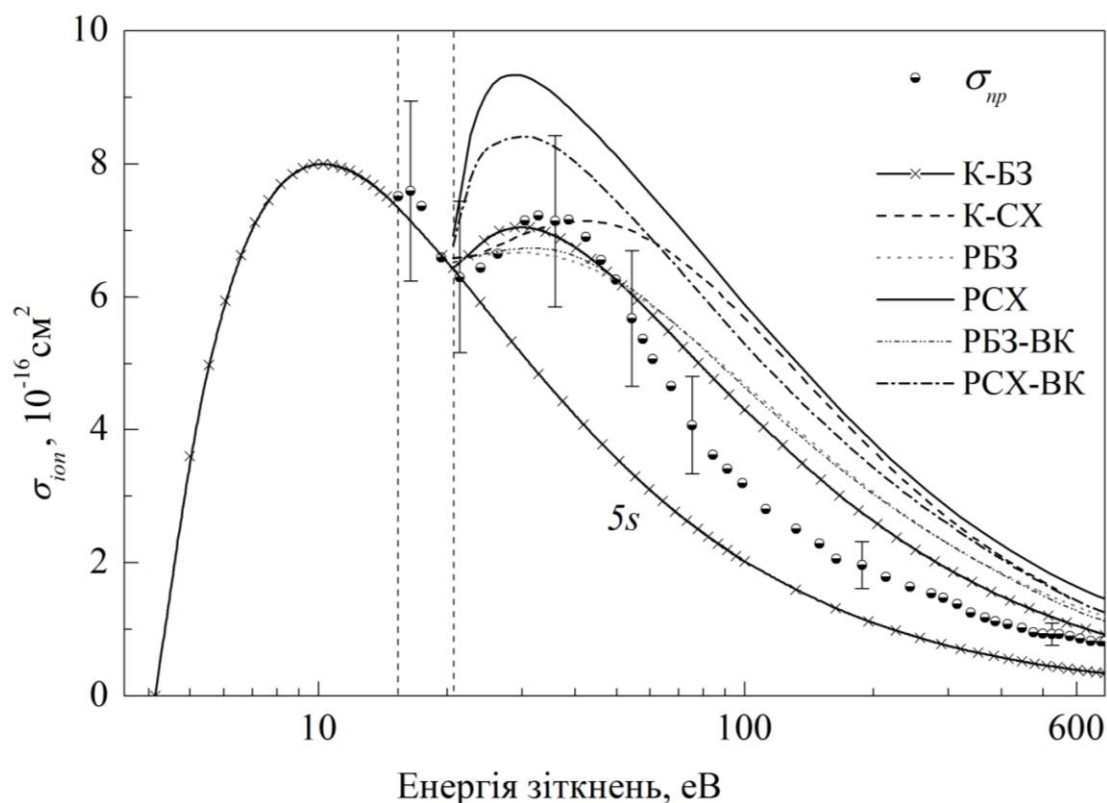


Рис. 5.5. Експериментальний переріз прямої іонізації $\sigma_{np} = \sigma_{ion}[42] - \sigma_{aem}[59]$ та розраховані в різних наближеннях сумарні теоретичні перерізи $\sigma_{ion}(5s) + \sum \sigma_{ion}(nl)$. Вертикальні пунктирні лінії показують поріг збудження та поріг іонізації $4p^6$ оболонки при 15.31 eV [61] при 20.71 eV [31].

дію. Щодо інших даних, то перерізи, одержані в наближеннях К-БЗ і РБЗ є дуже близькими один до одного по абсолютній величині і положенню максимуму, але наближення РБЗ прогнозує уповільнення зростання перерізу іонізації вище іонізаційного порогу $4p^6$ оболонки (20.71 eV). При цьому перерізи, розраховані у наближеннях РСХ, РСХ-БК і К-БЗ, передбачають резонансний характер поведінки експериментального перерізу в припороговій області. Для значень енергії зіткнень до 50 eV всі перерізи, крім перерізу, отриманого в наближенні РСХ, лежать практично в межах експериментальної невизначеності. Найбільша різниця з експериментом спостерігається при енергіях зіткнень 70-300 eV, де всі розраховані перерізи приблизно у два рази більші за експериментальний.

Таким чином, аналіз всіх відомих на сьогодні даних з перерізу іонізації та наших розрахунків показав, що задовільно описати експериментальний переріз прямої іонізації (як за формою, так і за величиною) при енергіях зіткнень до порогу збудження $4p^6$ оболонки (переріз іонізації $5s$ оболонки) можуть наближення К-БЗ, ПХБ [51] та емпірична формула Лотца. При енергіях зіткнень 15-50 еВ усі наближення, крім РСХ, дають результати, що лежать в межах експериментальної невизначеності. Що стосується всієї енергетичної області 4-600 еВ, то можна сказати, що наближення К-БЗ у програмному пакеті LANL може бути використане як найбільш дієвий метод розрахунку для отримання даних перерізу прямої іонізації з $5s$, $4p^6$ та $4s^2$ оболонок в атомі рубідію.

5.3.4. Експериментальний та теоретичний перерізи автоіонізації атома рубідію. На рис. 5.6 представлено переріз автоіонізації [59] атома рубідію у порівнянні з розрахованими перерізами збудження $\sigma_{авт}$ $4p^6$ та $4s^2$ оболонок з раніше розрахованими даними [51, 52], які було одержано в наближенні ПХБ, та з сумарним перерізом п'яти найнижчих автоіонізаційних станів $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ і $(4p^5 4d 5s)^4P_{1/2,3/2,5/2}$ атома рубідію, розрахованих у наближенні R -матриці [65]. Останній переріз демонструє резонансну припорогову поведінку перерізу автоіонізації $\sigma_{авт}$ [65], що є результатом резонансного збудження АІС, які формують цей переріз (див. рис. 3.6, 3.8).

Дані [51, 52] представляють сумарний переріз збудження $4p^6$ та $4s^2$ оболонок у наближенні ПХБ без урахування релятивістських та кореляційних ефектів. Оскільки переріз збудження $4s^2$ оболонки складає тут менше 1%, ми можемо порівняти перерізи [51, 52] з розрахованим нами перерізом збудження $4p^6$ оболонки.

Як видно з рис. 5.6, між усіма розрахованими перерізами є суттєва різниця за формою і положенням максимумів. Переріз автоіонізації [51] є сумою перерізів збудження 37 АІС, 34 з яких мають максимум перерізу

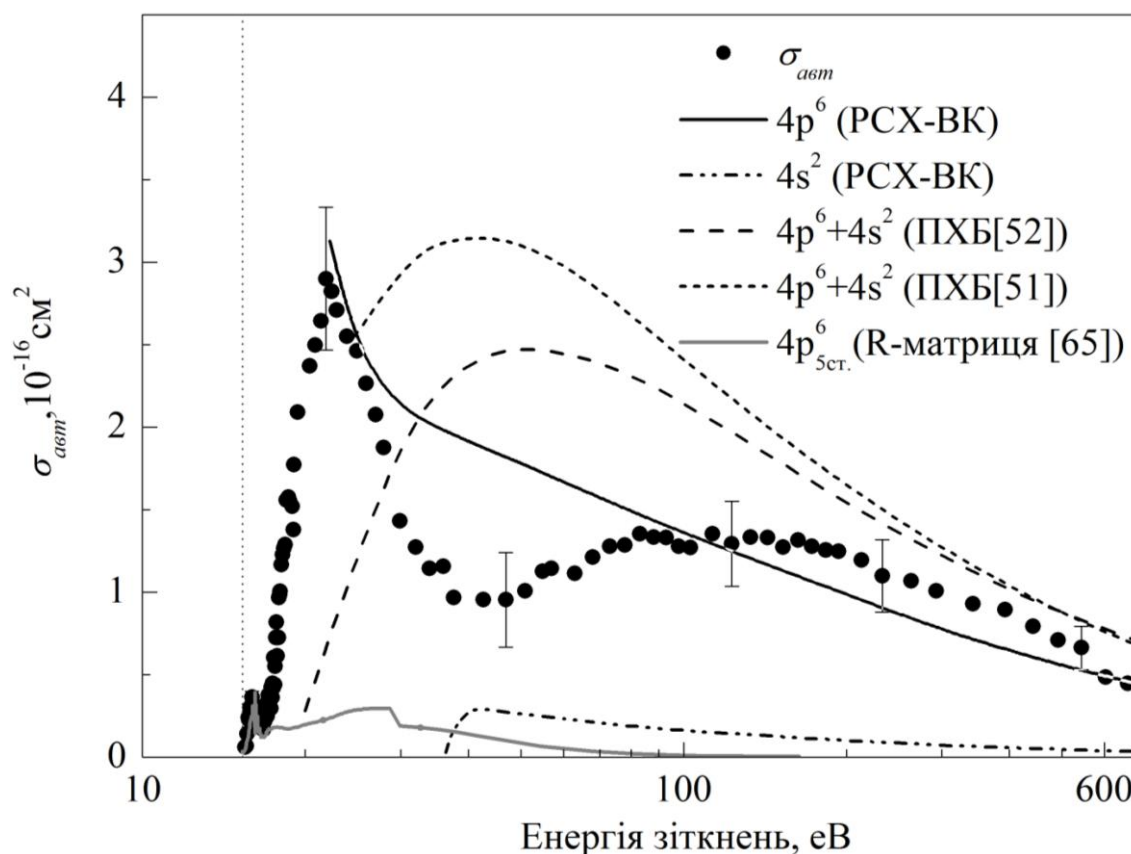


Рис. 5.6. Переріз автоіонізації σ_{ait} [59] при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію у порівнянні з розрахованими нами перерізами збудження $4p^6$ і $4s^2$ оболонок [119] та іншими даними [51, 52, 65]. Вертикальна лінія позначає поріг збудження $4p^6$ оболонки при 15.31 eV [61].

при 30-55 eV. Наші експериментальні дані [20, 61, 105] (див. рис. 3.1, 3.4) показали, що максимумами перерізів збудження дублетних АІС розташовані при енергіях зіткнень 100-150 eV (див. рис. 3.1, 3.3). Порівняння, наведене на рис. 5.3, показує задовільне узгодження у межах невизначеності наших експериментальних та розрахованих в наближенні РСХ-БК значень перерізів збудження $4p^6$ оболонки атома рубідію при високих енергіях зіткнень. В області середніх енергій усі теоретичні наближення дають суттєво завищені значення перерізу автоіонізації σ_{ait} . У припороговій області розраховані нами дані передбачають резонансне збудження АІС, що формують переріз автоіонізації σ_{ait} , проте вони не можуть повністю описати експериментальний переріз автоіонізації σ_{ait} .

Щодо перерізу збудження $4s^2$ оболонки атома рубідію, то він характеризується наявністю припорогового максимуму при енергії 45 еВ і подальшим плавним спадом при більш високих енергіях зіткнень. Наші розрахунки показали, що дана оболонка дає внесок у повний переріз збудження не більший 12% [119], а за даними роботи [52] - менше 1%. Ці оцінки підтверджують той факт, що при експериментальних вимірах спектрів ежектованих електронів нами не було виявлено жодних АІС, які могли бути пов'язані зі збудженням глибокої $4s^2$ оболонки атома рубідію (див. розділ 2).

Як впливає з аналізу структури перерізу автоіонізації (див. рис. 5.1а,б), його максимальне абсолютне значення та енергетична структура повністю визначаються характером збудження АІС, які його формують. Підтвердженням цього є розрахунки [49], виконані у класичному наближенні бінарних зіткнень, в яких припущення, що всі АІС $4p^5 n_1 n_2 l_1 l_2$ мають максимальний переріз збудження, сконцентрований у вузькому діапазоні енергій до 1 еВ над порогом їх збудження, дозволило якісно описати резонансний характер зростання автоіонізаційного внеску в повний переріз однократної іонізації атома рубідію та інших лужних металів, хоча їх кількісні оцінки і виявились суттєво завищеними. На даний час жоден з теоретичних методів наближень не може задовільно описати експериментальні дані з перерізу автоіонізації атома рубідію. Причина полягає якраз у тому, що сучасні теоретичні наближення ігнорують при розрахунках резонансний характер електронного збудження $4p^5 n_1 l_1 n_2 l_2$ АІС, що є визначальним у формуванні перерізу автоіонізації атома рубідію.

Висновки до розділу 5

1. Одержано абсолютне значення та досліджено енергетичну залежність перерізу автоіонізації атома рубідію в діапазоні енергій зіткнень 15-600 еВ з максимальним значенням перерізу $(2.9 \pm 0.6) \times 10^{-16} \text{ см}^2$, визначено роль окремих електронних конфігурацій у формуванні цього перерізу.

2. Встановлено, що відносний внесок перерізу автоіонізації у повний переріз однократної іонізації атома рубідію електронним ударом становить $32 \pm 5\%$ та одержано енергетичну залежність абсолютного перерізу прямої іонізації атома рубідію, який у максимумі становить $(7.2 \pm 2.2) \times 10^{-16} \text{ см}^2$.

3. На підставі проведених теоретичних розрахунків парціальних перерізів іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$, $3d^{10}$ оболонок та збудження $4p^6$, $4s^2$ оболонок атома рубідію, визначено роль кожної з цих оболонок у формуванні повного перерізу однократної іонізації атома рубідію.

4. Здійснено аналіз дієвості найбільш поширених теоретичних наближень, а також врахування кореляційних та релятивістських поправок при розрахунках перерізів автоіонізації і однократної іонізації атома рубідію та встановлено, що наближення бінарних зіткнень у програмному пакеті Кована є найбільш дієвим методом розрахунку перерізу прямої іонізації $5s$, $4p^6$ та $4s^2$ оболонок атома рубідію.

5. Досліджено, що врахування релятивістських та кореляційних поправок є необхідною умовою задовільного описання процесу автоіонізації при високих енергіях зіткнень для важкого атома рубідію. Показано, що у припороговій області енергій жодне з відомих на даний час наближень не спроможне адекватно описати повний переріз автоіонізації через відсутність врахування при розрахунках резонансного характеру електронного збудження АІС, який є визначальним у формуванні перерізу автоіонізації атома рубідію.

ВИСНОВКИ

Дана дисертаційна робота присвячена експериментальному дослідженню процесів утворення і розпаду автоіонізаційних станів атома рубідію, а також явищ резонансного збудження і взаємодії після зіткнення, що супроводжують ці процеси. До основних результатів та висновків роботи можна віднести такі:

1. Здійснено реконструкцію експериментальної установки “Електронний спектрометр” шляхом модернізації вакуумної системи та виготовлення нової вихідної електронно-оптичної лінзи монохроматора. Це дозволило з високою точністю дослідити динаміку збудження енергетичних спектрів ежектованих електронів при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію у діапазоні енергій зіткнень 15-600 еВ.

2. В енергетичних спектрах розсіяних та ежектованих електронів атома рубідію виявлено 82 лінії з порогами збудження від 15.31 до 20.67 еВ. Вперше виявлено 16 нових ліній, що відповідають розпаду атомних автоіонізаційних станів $4p^5n_1l_1n_2l_2$, та широку смугу, що відповідає збудженню автоіонізаційного стану молекули Rb_2 . Запропоновано спектроскопічну ідентифікацію для 76 атомних та молекулярного автоіонізаційних станів, визначено схему енергетичного розташування і каналів розпаду цих станів.

3. Вперше одержано енергетичні залежності абсолютних перерізів збудження 11 дублетних та 5 кватетних автоіонізаційних станів атома рубідію, а також автоіонізаційного стану молекули Rb_2 у діапазоні енергій зіткнень від порогу збудження до 600 еВ. Встановлено, що максимальні абсолютні значення ефективних перерізів збудження мають порядок величини 10^{-18} - 10^{-17} см² для атомних автоіонізаційних станів та 10^{-14} см² – для молекулярного автоіонізаційного стану. Показано, що електронне збудження усіх досліджених станів у припороговій області енергій має виключно резонансний характер, пов’язаний з утворенням станів негативних

іонів. На основі аналізу парціальної структури перерізів збудження автоіонізаційних станів $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$ визначено енергії збудження та канали розпаду станів негативних іонів, що формують цю структуру, а також здійснено їх спектроскопічну ідентифікацію.

4. Досліджено ефект взаємодії після зіткнення в енергетичних спектрах ежектованих електронів атома рубідію для ліній $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$. Встановлено, що максимальні значення ВПЗ-зсуву ліній $^2P_{3/2}$ та $^2P_{1/2}$ становлять 70 і 130 меВ, а значення їх автоіонізаційних ширин складають 4.4 ± 0.7 та 7.0 ± 2 меВ, відповідно. Показано прямий зв'язок ефекту взаємодії після зіткнення та резонансного збудження автоіонізаційних станів у припороговій області енергій зіткнень.

5. Вперше одержано абсолютне значення та досліджено енергетичну залежність перерізу автоіонізації атома рубідію у діапазоні енергій зіткнення від порогу збудження $4p^6$ оболонки до 600 еВ, визначено роль окремих електронних конфігурацій у формуванні цього перерізу. Встановлено, що відносний внесок перерізу автоіонізації у повний переріз однократної іонізації атома рубідію електронним ударом складає $32 \pm 5\%$. Також вперше тримано енергетичну залежність абсолютного перерізу прямої іонізації атома рубідію електронним ударом, який у максимумі становить $(7.2 \pm 2.2) \times 10^{-16} \text{ см}^2$.

6. На базі проведених теоретичних розрахунків перерізів іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$, $3d^{10}$ оболонок та перерізів збудження $4p^6$, $4s^2$ оболонок визначено роль кожної з цих оболонок у формуванні повного перерізу однократної іонізації атома рубідію. Здійснено аналіз дієвості найбільш поширених теоретичних наближень для розрахунку перерізів автоіонізації та однократної іонізації атома рубідію та встановлено, що наближення бінарних зіткнень є найбільш дієвим методом розрахунку перерізу прямої іонізації $5s$, $4p^6$ та $4s^2$ оболонок, а необхідною умовою задовільного описання процесу автоіонізації для важкого атома рубідію є врахування релятивістських та кореляційних поправок.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Auger P. Sur les rayons β secondaires produits dans un gaz par des rayons X / P. Auger // Comptes Rendus des séances hebdomadaires de l'Académie des Sciences, Paris. – 1923. – V.177. – P. 169–171.
2. Auger P. Thèse présentée à la Faculté des Sciences de Paris, le 26 juin 1926 / P. Auger // Ann. Phys. (Paris). – 1926. – V. 6. – P. 183–253.
3. Compton K.T. Extreme ultraviolet spectra excited by controlled electron impacts / K.T. Compton, J.C. Boyce // J. Franklin Inst. – 1928. – V. 205, No. 4. – P. 497–513.
4. Majorana E. Teoria dei tripletti P' incompleti [Theory of incomplete P' triplets] / E. Majorana // Nuovo Cimento. – 1931. – V. 8. – P. 107–113.
5. Russel H.N. New Regularities in the Spectra of the Alkaline Earths / H.N. Russel, F.A. Saunders // Astrophys. J. – 1925. – V. 61. – P. 38–69.
6. Nicolaides C.A. Theory of “non-stationary” states in many-electron atoms / C.A. Nicolaides // Nucl. Instrum. Meth. – 1973. – V. 110. – P. 231–240.
7. Mendelson A.J. Emission spectra of quasimetastable levels of alkali-metals atoms / A.J. Mendelson, C.P.J. Barty, M.H. Sher et al. // Phys. Rev. A. – 1987. – V. 35, No. 5. – P. 2095–2101.
8. Feldman P. Auto-Ionizing States in the Alkali Atoms with Microsecond Lifetimes / P. Feldman, R. Novick // Phys. Rev. – 1967. – V. 160, No. 1. – P. 143–160.
9. Schulz G.J. Resonances in electron impact on atoms / G.J. Schulz // Rev. Mod. Phys. – 1973. – V. 45, No. 3. – P. 378–422.
10. Read F.H. The analysis of post-collision interactions in ejected-electron spectra / F.H. Read // J. Phys. B. – 1977. – V. 10. – P. L207–L212.
11. Barker R.B. Electron Energy Distributions from Ionizing Collisions of Helium and Neon Ions with Helium / R.B. Barker, H.W. Berry // Phys. Rev. – 1966. – V. 151. – P. 14–19.

12. Christophorou L.G. Electron collision data for plasma-processing gases / L.G. Christophorou, J.K. Olthoff // *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics*. – 2001. – V. 44, No. 1. – P. 59–98.
13. Lepp S., Stancil P.C., Dalgarno A. Atomic and molecular processes in the early Universe // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2002. – V. 35, No. 10. – P. R57–R80.
14. Несмеянов А.Н. Давление пара химических элементов / А.Н. Несмеянов. – Москва: Изд-во АН СССР, 1961. – 396 с.
15. de Boer J.H. Adsorption of Alkali Metals on Metal Surfaces / J.H. de Boer, C.F. Veenemans // *Physica*. – 1934. – V. 1, No. 7-12. – P. 753–762.
16. Шимон Л.Л. Эффективные сечения возбуждения атомов щелочных металлов при столкновениях с медленными электронами: дисс. ... кандидата физ.-мат. наук : 01.04.04 / Шимон Людвиг Людвигович. – Ужгород, 1965. – 171 с.
17. Алексахин И.С. Неупругие столкновения электронов с атомами щелочных металлов: дисс. ... кандидата физ.-мат. наук : 01.04.04 / Алексахин Илья Сергеевич. – Ужгород, 1968. – 133 с.
18. Рабик Л.Л. Автоионизационные термы атомов щелочных металлов / Л.Л. Рабик // В сб. “Атомные процессы”. – Рига: Зинатне, 1975. – С. 80–123.
19. Zatsarinny O.I. Energy levels and lifetimes for the $2p^5 3snl$ core-excited states in Na / O.I. Zatsarinny, L.A. Bandurina // *J. Phys B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1993. – V. 26, No. 21. – P. 3765–3782.
20. Kaur S. Excitation of the lowest autoionizing $np^5(n+1)s^2$, $^2P_{3/2,1/2}$ states of Na ($n=2$), K ($n=3$), Rb ($n=4$) and Cs ($n=5$) by electron impact / S. Kaur, R. Srivastava // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1999. – V. 32, No. 10 – P. 2323–2342.

21. Боровик А.А. Возбуждение автоионизационных уровней лития монохроматическим электронным пучком / А.А. Боровик, Э.А. Бреза, И.П. Запесочный // XI Всесоюзная конференция по физике электрон-атомных столкновений: Тезисы докладов. – Чебоксары, Россия, 1991. – С.6.
22. Borovik A. The core excitation of Li_2 by low energy electron impact / Borovik A. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2008. – V. 41. – P. 165205–165207.
23. Borovik A. Near-threshold electron-impact excitation of the $(2p^5 3s^2)^2P_{3/2,1/2}$ autoionizing states in sodium / A. Borovik, O. Zatsarinny, K. Bartschat // J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. – 2008. – V. 41. – P. 035206–035210.
24. Borovik A. On cascade transitions between autoionizing doublet levels in sodium / A. Borovik, A. Kupliauskiene // Phys. Scr. – 2008. – V. 77. – P. 055301-055304.
25. Borovik A.A. The post-collision energy shift of the $(np^5(n+1)s^2)^2P_{3/2}$ lines in ejected-electron spectra of sodium ($n = 2$) and caesium ($n = 5$) atoms excited by electron impact / A.A. Borovik, G.N. Ogurtsov // J. Phys. B. – 2010. – V. 43. – P. 045204-045209.
26. Borovik A. Electron impact excitation of the $(3p^5 4s^2)^2P_{3/2,1/2}$ autoionizing states in potassium / A. Borovik, A. Grum-Grzhimailo, K. Bartschat, O. Zatsarinny // J. Phys. B. – 2005. – V. 38. – P. 1081–1092.
27. Evrij M. Resonance excitation of the $3p^6$ -subshell in potassium: Contribution to the single ionization / M. Evrij, A. Borovik (Jr), L. Shimon, J. Kontros, A. Borovik // Nucl. Instrum. Methods B. – 2005. – V. 233. – P. 280–283.
28. Borovik A.A. Dynamics of post-collision interaction in the near-threshold electron excitation of the $(3p^5 4s^2)^2P_{3/2,1/2}$ autoionizing states in potassium / A.A. Borovik, G.N. Ogurtsov // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2009. – V. 42, No. 10. – P. 105202–105206.

29. Borovik A. Excitation cross sections and spectroscopic classification of autoionizing levels in cesium atom / A. Borovik, A. Kupliauskiene, O. Zatsarinny // J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. – 2011. – V. 44. – P. 145203–145208.
30. Michael E. Atomic weights of the elements / E. Michael, H. Norman, B. Tyler // Pure and Applied Chemistry. – 2013. – T. 85, № 5. – C. 1047–1078.
31. Sansonetti J.E. Wavelengths, transition probabilities, and energy levels for the spectra of Rubidium (RbI through RbXXXVII) / J.E. Sansonetti // J. Phys. Chem. Ref. Data. – 2006. – V. 35. – P. 301–421.
32. Beutler H. Über Absorptionsspektren aus der Anregung innerer Elektronen VII. Das Rubidium spektrum zwischen 900 und 600 Å aus der Anregung der (4p⁶) Schale (Rb Ib) // Z. Phys. – 1934. – V. 91. – P. 131–142.
33. Алексахин И.С. Исследование функций возбуждения спектральных линий ионов Na, K, Rb и Cs в вакуумной ультрафиолетовой области спектра / И.С. Алексахин, В.С. Вукстич, И.П. Запесочный // ЖЭТФ. – 1974. – Т. 66, № 6. – С.1973 –1980.
34. Connerade J.P. Absorption spectrum of Rb in the vacuum ultraviolet / J.P. Connerade // Astrophys. J. – 1970. – V. 159. – P. 695–702.
35. Ross K.J. Ejected electron spectrum of rubidium autoionizing levels obtained by electron impact excitation / K.J. Ross, T.W. Ottley // Phys. Lett. – 1975. – V. 54A. – P. 57–58.
36. Pejčev V. High-resolution ejected-electron spectrum of rubidium vapour autoionising levels excited by electrons with kinetic energies in the range 27 to 400 eV / V. Pejčev, D. Rassi, K.J. Ross, T.W. Ottley // J. Phys. B. – 1977. – V. 10. – P. 1653–1659.
37. Mansfield M.W.D. The absorption spectrum of RbI between 350 and 810Å / M.W.D. Mansfield // Astrophysical Journal. – 1973. – V. 183. – P. 691–699.

38. Mansfield M.W.D. A new interpretation of the Rb I 4p subshell excitation spectrum between 15 and 19 eV / M.W.D. Mansfield // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1978. – V. 364. – P. 135–144.
39. Зацаринный О.И. Исследование автоионизационных состояний атомов щелочных и щелочноземельных металлов и их влияние на процессы рекомбинации и фотоионизации: дисс. ... кандидата физ.-мат. наук: 01.04.02 / Зацаринный Олег Иванович. – Ужгород, 1984. – 179 с.
40. Baig M. Inner-shell and double-excitation spectrum of rubidium involving 4p and 5s subshells / M. Baig, M. Mahmood, M. Akram, J. Hormes // J. Phys. B. – 1995. – V. 28. – P.1777–1792.
41. Pangantiwar A.W. Excitation of the rubidium atom by electrons and positrons: differential cross section and correlation parameters / A.W. Pangantiwar, R. Srivastava // J. Phys. B: At. Mol. Phys. – 1988. – V. 21. – P. 4007–4013.
42. Tate J. Ionization potentials and probabilities for the formation of multiply charged ions in the alkali vapors and in krypton and xenon / J. Tate, P. Smith // Phys. Rev. – 1934. – V. 46. – P. 773–776.
43. Brink G.O. Absolute Ionization Cross Sections of the Alkali Metals / G.O. Brink // Phys. Rev. 1964. – V. 134. – P. 345.
44. McFarland R.H. Absolute Cross Sections of Lithium and Other Alkali Metal Atoms for Ionization by Electrons / R.H. McFarland, J.D. Kinney // Phys. Rev. – 1965. – V. 137, No.4. – P. 1058–1061.
45. Korchevoi Yu.P. Effective electron impact excitation and ionization cross sections for cesium, rubidium, and potassium atoms in the pre-threshold region / Yu.P. Korchevoi, A.M. Przonski // Sov. Phys. - JETP. – 1967. – V. 134, No. 6. – P. 345.
46. Zapesochny I.P. Ionization of alkali metal atoms by slow electrons / I.P. Zapesochny, I.S. Aleksakhin // Sov. Phys. - JETP. – 1969. – V. 28. – P. 41–45.

47. Nygaard K. Electron impact autoionization in heavy alkali metals / K. Nygaard // Phys. Rev. A. – 1975. – V. 11. – P. 1475–1478.
48. Schappe R.S. Absolute electron-impact ionization cross section measurements using a magneto-optical trap / R.S. Schappe, T. Walker, L.W. Anderson, C.C. Lin // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V. 76. – P. 4328–4331.
49. Roy B.N. Electron-impact ionization of alkali metals / B.N. Roy, D.K. Rai // Phys. Rev. A. – 1973. – V. 8, No. 2. – P. 849–855.
50. McGuire E.J. Electron ionization cross sections in the Born approximation / E.J. McGuire // Phys. Rev. A. – 1977. – V. 16. – P. 62. –72.
51. McGuire E.J. Systematics of *ns* subshell electron ionization cross sections / E.J. McGuire // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 1997. – V. 30. – P. 1563–1587.
52. Kim Y.K. Electron impact ionization cross section of rubidium /Y.K. Kim, J. Migdalek, W. Siegel, J. Bieron // Phys. Rev. A. – 1998. – V. 57, No. 1. – P. 246–254.
53. Bartlett P. Electron-impact ionization cross sections for elements $Z = 1$ to $Z = 54$ / P. Bartlett, A. Stelbovics // At. Data and Nucl. Data Tabl. –2004. – V. 86. – P. 235–265.
54. Lukomski M. Electron-impact ionization cross sections out of the ground and 6^2P excited states of cesium / M. Lukomski, S. Sutton, W. Kedzierski, T.J. Reddish, K. Bartschat, P.L. Bartlett, I. Bray, A.T. Stelbovics, J.W. McConkey // Phys. Rev. A. – 2006. – V. 74, No. 3. – P. 032708-1–032708-6.
55. Боровик А. Сечение автоионизации атомов лития при возбуждении электронным ударом / А. Боровик // Опт. и спектр. – 2010. – Т. 109, № 3. – С. 355–360.

56. Evrij M. Resonance excitation of the $3p^6$ -subshell in potassium: Contribution to the single ionization / M. Evrij, A. Borovik (Jr), L. Shimon, J. Kontros, A. Borovik // Nucl. Instrum. Methods B. – 2005. – V. 233. – P. 280–283
57. Borovik A. The $5p^6$ autoionization cross section of cesium atoms: contribution to single ionization by electron impact / A. Borovik, A. Kupliauskiene // J. Phys. B. – 2009. – V. 42. – P. 165202–165206.
58. Роман В.І. Експериментальна установка та перші результати дослідження збудження автоіонізаційних станів атомів рубідію електронним ударом / В.І. Роман // Науковий вісник УжНУ. – 2011, № 30. – С. 215–219.
59. Боровик О.О. Переріз автоіонізації атомів рубідію при збудженні електронним ударом / О.О. Боровик, В.І. Роман, А.В. Купляускієне // Доповіді НАНУ. – 2013, № 3. – С. 58–64.
60. Роман В.І. Енергетичні спектри розсіяних електронів на атомах рубідію / В.І. Роман, В.В. Грицько, О.О. Боровик // Науковий вісник УжНУ. – 2013, № 34. – С. 139–142.
61. Роман В.І. Динаміка збудження автоіонізаційних станів атома рубідію і молекули Rb_2 при електрон-атомних зіткненнях / В.І. Роман, А.В. Купляускієне, О.О. Боровик, О.І. Зацарінний // Доповіді НАНУ. – 2014, № 7. – С. 76–81.
62. Роман В.І. Парціальні перерізи іонізації атома рубідію електронним ударом / В.І. Роман, А.В. Купляускієне, О.О. Боровик // Доповіді НАНУ. – 2015, № 8. – С. 79–83.
63. Borovik A. The $4p^6$ autoionization cross section of Rb atoms excited by low-energy electron impact / A. Borovik, V. Roman, A. Kupliauskiene // J. Phys. B. – 2012. – V. 45, № 4. – P. 045204–045214.

64. Roman V. Excitation and ionization of outer shells in Rb by electron impact / V. Roman, A. Kupliauskiene, A. Borovik // J. Phys. B. – 2015. – V. 48. – P. 205204–205209.
65. Borovik A. Electron impact excitation of the lowest doublet and quartet core-excited autoionizing states in Rb atoms / A. Borovik, V. Roman, O. Zatsarinny, K. Bartschat // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2013. – V. 46, No. 1. – P. 015203–015209.
66. Borovik A. The post-collision interaction effect in autoionizing spectra of alkali atoms excited by electron impact / A. Borovik, V. Roman, G. Ogurtsov // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2013. – V.46, No. 5.– P. 055203–055206.
67. Ogurtsov G.N. Charge Exchange of Xe^{3+} and Xe^{4+} in Neon / G.N. Ogurtsov, I.P. Flaks // JETP. – 1962. – V.15, No. 3. – P. 502–508.
68. Гомонай Г.М. Абсолютні перерізи s - і d - іонізації іона In^+ при зіткненнях з повільними електронами / Г.М. Гомонай, Ю.І. Гутич, О.І. Гомонай // Укр. фіз. журн. – 2014. – Т. 59, № 5. – С. 474–479.
69. Шпеник О.Б. Эффекты образования отрицательных ионов и после-
столкновительного взаимодействия при соударениях атомов магния с
электронами / О.Б. Шпеник, И.П. Запесочный, Е.Э. Контрош,
Э.И. Непийпов, Н.И. Романюк, В.В. Совтер // ЖЭТФ. – 1979. – Т. 76,
№ 3. – С. 846–855.
70. Berezhko E. Theoretical study of inner-shell alignment of atoms in
electron impact ionisation: angular distribution and polarisation of x-rays
and Auger electrons / E. Berezhko, N. Kabachnik // J. Phys. B. – 1977. –
V. 10. – P. 2467–2477.
71. Kupliauskiene A. Theoretical study of the $4p^5nln'l'$ autoionizing states of
Rb excited by electron impact / A. Kupliauskiene, G. Kerevicius // Phys. Scr. – 2013. – V. 88. – P. 065312–065319.

72. Borovik A. An electron spectrometer for studying the autoionization processes in metal vapors / A. Borovik // Ukr. J. Phys. – 2008. – V. 53, No. 10. – P. 1021-1027.
73. Боровик А.А. Источники электронных пучков на энергии до 1 КэВ / А.А. Боровик // ПТЭ. – 1991. – Т. 26. – № 3. – С. 124–127.
74. Skudotech [электронный ресурс]: <http://www.skudotech.com>
75. Harting E. Electrostatic Lenses / E. Harting, F.H. Read. – Amsterdam, Elsevier, 1976. – 322 p.
76. Valyi L. Atom and Ion Sources / L. Valyi // London, Wiley, 1977.– 429 p.
77. Sigma-Aldrich Co. [электронный ресурс]: <http://www.sigma-aldrich.com>
78. NIST Data [Электронный Ресурс]:
/ <http://www.physics.nist.gov/PhysRefData/Handbook/Tables>
79. OriginPro 7.5 SR1 [электронный ресурс]: <http://www.OriginLab.com>
80. Касандрова О.Н. Обработка результатов наблюдений / О.Н. Касандрова, В.В. Лебедев. – Москва: Наука, 1970. – 109 с.
81. Hertel I.V. Generalized oscillator strengths in the electron impact spectra of rubidium and caesium / I.V. Hertel, K.J. Ross // J. Phys. B. – 1969. – V. 2, No. 4. – P. 484–489.
82. Moore Charlotte E. Atomic Energy Levels as Derived from the Analyses of Optical Spectra, Volume 2. 24Cr to 41Nb // NSRDS-NBS. – 1971. – V. 35. – 263 p.
83. Радциг А.А. Параметры атомов и атомных ионов : Справочник. 2-е изд., перераб. и доп. / А.А. Радциг, Б.М. Смирнов // М.: Энергоатомиздат, 1986. – 344 с.
84. Roman V. The $4p^6$ core excitation of Rb_2 by low energy electron impact / V. Roman, A. Borovik, A. Kupliauskiene // XVII Int. Conf. on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC), Lanzhou, China, 2013. // J. Phys: Conf. Ser. – 2014. – V. 488. – P. 042005–042006.

85. Spong J.K. Laser Spectroscopy of Core-Excited Levels of Neutral Rubidium / J.K. Spong, J.D. Kmetec, S.C. Wallace, J.F. Young, S.E. Harris // *Phys. Rev. Lett.* – 1987. – V. 58, No. 25. – P. 2631–2634.
86. Hartree D.R. The wave mechanics of an atom with non-coulomb central field . Part II – Theory and Methods / D.R. Hartree // *Proc. Camb. Phil. Soc.* – 1928. – V. 24. – P. 111–132.
87. Sherrill C.D. The Configuration Interaction Method: Advances in Highly Correlated Approaches. *Advances in Quantum Chemistry* / C.D. Sherrill, F. Henry, P.O. Löwdin // San Diego: Academic Press. – 1999. – V. 34. – P. 143–269.
88. Bethe H.A. *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* / H.A. Bethe, E.E. Salpeter. – New York: Plenum Press. 1977. – 181 p.
89. Gu M.F. The flexible atomic code / M. F. Gu // *Can. J. Phys.* – 2008. – V. 86. – P.675–689.
90. Reader J. Accurate energies for the $4p^5 5s 5p^4 S_{3/2}$ and $4p^5 5s 4d^4 P_{5/2}$ levels of neutral rubidium (Rb I) / J. Reader // *Phys. Rev. A.* – 1987. – V. 36, № 1. – P. 415–416.
91. Sakai H. Extreme-ultraviolet laser spectroscopy of core-excited Rb atoms / H. Sakai, K. Miyazaki // *J. Opt. Soc. Am. B.* – 1991. – V. 8, No. 6. – P. 1202–1206.
92. Роман В.І. Електронне збудження стану $(4p^5 4d 5s)^4 S_{3/2}$ атома рубідію / В.І. Роман // В зб.: Матеріали та програма науково-технічної конференції “ФЕЕ-2014” – Суми. – С. 94.
93. Novick R. Identification of the lowest metastable autoionizing level in Rb from rf spectroscopic studies / Novick R., Sprott G., Lucatorto T. // *Phys. Rev. A.* – 1976. – V. 14, № 1. – P. 273–278.
94. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов / С.Э. Фриш. – Москва, ФМ, 1968. – 640 с.

95. Мотт Н. Теория атомных столкновений (пер. с англ.) / Н. Мотт, Г. Месси. – Москва: ИЛ, 1952. – 447 с.
96. Фриш С.Э. Определение функций возбуждения энергетических уровней ртути по оптическим функциям возбуждения // С. Э. Фриш, И.П. Запесочный. – 1954. – ДАН СССР. – № 55. – С. 971–974.
97. Borovik A. Resonance effects in electron and photon impact excitation of the p_6 subvalence subshell in alkali atoms / A. Borovik, O. Zatsarinny, K. Bartschat // J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. – 2009. – V. 42, № 4. – P. 044010–044020.
98. Zatsarinny O. R-matrix calculations of core-excited negative-ion states in Li / O. Zatsarinny // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 1999. – V. 32, No. 19. – P. L565–L571.
99. Grum-Grzhimailo A.N. Excitation of the $3p^5 4s^2 \ ^2P$ autoionizing state in potassium by electron impact at low energies: an R-matrix calculation / A.N. Grum-Grzhimailo, K. Bartschat // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2000. – V. 33, No. 10. – P. 1843–1853.
100. Breit G. Dirac's equation and the spin-spin interactions of two electrons / G. Breit // Phys. Rev. – 1932. – V. 39. – P. 616–624.
101. Zatsarinny O. Relativistic B-spline R-matrix method for electron collisions with atoms and ions: Application to low-energy electron scattering from Cs / O. Zatsarinny, K. Bartschat // Phys. Rev. A. – 2008. – V. 77, No. 6. – P. 062701–062707.
102. Roman V. Excitation functions of high-lying autoionizing states in Rb atoms / V. Roman, A. Borovik, A. Kupliauskiene // XXVII Int. Conf. on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC). – Lanzhou, China, J. Phys: Conf. Ser. – 2014. – V. 488. – P. 042018.
103. Roman V. Electron-impact excitation of the $(4p^5 4d5s)^4P_J$ autoionizing states in Rb atoms / V. Roman, R. Tymchyk, A. Kupliauskiene, A. Borovik // Book of abstracts. EGAS 44. – Gothenburg, Sweden. – 2012. – P. 163.

104. Боровик А.А. Динамика электронного возбуждения кватерных состояний атомов / А.А. Боровик // Опт. спектр. – 2009. – Т. 106, № 2. – С. 187–192.
105. Roman V. Excitation functions of high-lying autoionizing states in rubidium by electron impact / V. Roman, A. Borovik, A. Kupliauskiene // Abstracts of Contributed Papers. – ICPEAC XXVIII. – Lanzhou, China. – 2013. – Мо. P40.
106. Богачев Г.Г. О радиационном распаде автоионизационных состояний атомов калия и рубидия / Г.Г. Богачев // УФЖ. – 1974. – № 12. – С. 2061–2062.
107. Nienhuis G. Profiles and widths of post-collision interaction structures in excitation functions and ejected-electron spectra / G. Nienhuis, H.G.M. Heideman // J. Phys. B: At. Mol. Phys. – 1975. – V. 8, No. 13. – P. 2225–2232.
108. Kuchiev M.Yu. Resonant scattering with low-velocity outgoing charged particles / M.Yu. Kuchiev, S.A. Sheinerman // J. Phys. B. – 1988. – V. 21, No. 11. – P. 2027–2038.
109. Borovik A.A. Excitation dynamics and post-collision interaction for lowest autoionizing states in Li and Li₂ excited by electron impact / A.A. Borovik, G.N. Ogurtsov // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2010. – V. 43, No. 16. – P. 165203–165209.
110. Borovik A. Energy shift of the $(2p^5 3s^2)^2P_{3/2}$ line in ejected-electron spectra of sodium atoms excited by low-energy electron impact / A. Borovik // XXVI Int. Conf. on Photonic, Electronic and Atomic Collisions: Abstr. of Contrib. Papers. – Kalamazoo, USA, 2009. J. Phys: Conf. Ser. – 2009. – V. 194. – P. 042030.
111. Borovik A.A. The post-collision energy shift of the $(np^5(n+1)s^2)^2P_{3/2}$ lines in autoionizing spectra of sodium ($n = 2$) and caesium ($n = 5$) atoms excited by electron impact / A.A. Borovik, G.N. Ogurtsov // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2010. – V. 43, No. 4. – P. 045204–045208.

112. Roman V. Observation of post collision interaction in electron-impact excitation of the 4p6 subshell in Rb / V. Roman, A. Borovik, G. Ogurtsov, O. Zatsarinny // Program and abstracts “Eighth International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications: ICAMDATA-8”. – Maryland, USA. – 2012. – P. 109.
113. Sakai H. Extreme-ultraviolet laser spectroscopy of core-excited Rb atoms / H. Sakai, K. Miyazaki // J. Opt. Soc. Am. B. – 1991. – V. 8. – P. 1202–1206.
114. Mitroy J. Theory and applications of atomic and ionic polarizabilities / J. Mitroy, M.S. Safronova, C.W. Clark // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2010. – V. 43, No. 20. – P. 202001–202038.
115. Kupliauskiene A. Theoretical study of the $5p^5nl n'l'$ autoionizing states of Cs / A. Kupliauskiene // Physica Scripta. – 2011. – V. 84, № 20. – P. 045304–045310.
116. Cowan R.D. Theory of Atomic Spectra / R.D. Cowan. – Berkeley – Los Angeles – London : University of California Press, 1981. – 702 p.
117. Atomic and Optical Theory Group Los Alamos National Laboratory (LANL) Atomic Physics Codes Package [електронний ресурс]: <http://aphysics2.lanl.gov/tempweb/lanl>
118. Karazija R. Introduction to the Theory of X-Ray and Electronic Spectra of Free Atoms / R. Karazija – New York – London: Plenum Press, 1996. – 311 p.
119. Роман В.І. Експериментальний та теоретичний перерізи автоіонізації атома рубідію / В.І. Роман // В зб.: Програма і тези доповідей Конференції молодих учених та аспірантів “ІЕФ-2015”. – Ужгород. – 2015. – С. 224.
120. McFarland R.H. Gryzinski Electron-Impact Ionization Cross-Section Computations for the Alkali Metals / R.H. McFarland // Phys. Rev. – 1965. – V. 139. – P. A40–A42.

121. Lotz W. Electron-Impact Ionization Cross-Sections and Ionization Rate Coefficients for Atoms and Ions from Scandium to Zinc / W. Lotz // Z. Physik. – 1969. – V. 220. – P. 466–472.
122. Nygaard K.J. Total electron impact ionization cross section in rubidium from threshold to 250 eV / K.J. Nygaard, Y.Hahn // J. Chem. Phys. – 1973. – V. 58. – P. 3493–3499.

На закінчення вважаю своїм приємним обов'язком висловити щиру подяку за мудре наставництво, допомогу і підтримку на всіх етапах дослідження, що лягли в основу даної дисертаційної роботи, своєму науковому керівникові, доктору фізико-математичних наук О.О. Боровику.

Глибока вдячність академіку О.Б. Шпенику за постійну підтримку даної роботи.

Також щиру подяку хочу висловити науковим співробітникам Інституту електронної фізики НАН України за доброзичливе ставлення та підтримку, особливо Г.М. Гомонай, О.В. Снігурському, А.М. Завілопуло, Є.Ю. Реметі, Ю.І. Гутичу, Г.Г. Богачову, В.С. Вукстичу, Р.В. Тимчику та О.І. Гомонаю.

Моя окрема подяка Є.Е. Контрошу за цінні поради при виконанні теоретичних розрахунків та їх технічну підтримку, а також аспіранту В.В. Грицьку за допомогу при виконанні частини експериментальних досліджень.

Хочу також подякувати закордонним колегам А.В. Купліаускієне (Вільнюський університет, Литва), О.І. Зацаринному, К. Бартчату (Університет Дрейка, США) та Г.М. Огурцову (ФТІ ім. Йоффе, Росія) за плідну співпрацю при теоретичному аналізі одержаних експериментальних даних.

Своїм рідним я дуже вдячна за розуміння, постійну підтримку та їх терпіння.