

УДК 539.184.5

PACS 34.80.Dp, 34.80.Gs

DOI 10.24144/2415-8038.2018.43.74-80

В.І. Роман, Л.О. Бандурина

Інститут електронної фізики НАН України, вул.Університетська, 21, 88017, Ужгород, Україна, e-mail: viktoriyaroman11@gmail.com

ІОНІЗАЦІЯ ТА АВТОІОНІЗАЦІЯ АТОМА РУБІДІЮ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ

Здійснено розрахунки перерізів збудження субвалентних $4p^6$ і $4s^2$ оболонок та перерізів іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок атома рубідію електронним ударом в діапазоні енергій зіткнень від порогів до 600 еВ. Розрахунки перерізів проведено у наближенні спотворених хвиль та бінарних зіткнень з використанням релятивістських хвильових функцій, отриманих у стандартному методі Дірака-Фока-Слейтера. Проведено детальний аналіз одержаних результатів із залученням наявних експериментальних та теоретичних даних.

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

Вступ

При зіткненні електронів з атомними системами, у залежності від енергії первинного електронного пучка, крім пружного розсіяння можуть відбуватися також процеси збудження та іонізації. Суттєвий внесок у повний переріз іонізації, порівняний із внеском від прямої іонізації, вносить розпад станів утворених через збудження із внутрішньої оболонки на вільні дискретні рівні – процес автоіонізації [1]. В традиційних методах дослідження іонізації визначити експериментально абсолютне значення внеску від такого непрямого процесу в повний переріз однократної іонізації атомів, а також перерізів прямої іонізації окремих електронних оболонок практично неможливо. Річ у тому, що результатом обох процесів є утворення однозарядного іона та вивільнення іонізаційного електрона, енергетичні параметри яких не залежать від типу вихідного процесу [2, 3]. На даний час теоретичні розрахунки парціальних та повних перерізів іонізації також не дозволяють визначити їх внесок у зв'язку з великими розбіжностями в енергетичній поведінці та абсолютних значеннях перерізів, одержаних в різних теоретичних наближеннях (див. [4] та посилання в ній). Ця ситуація пов'язана зі складністю повного врахування у розрахунках релятивістських і кореляційних ефектів, що відіграють надзвичайно важливу роль при збудженні та іонізації глибоких електронних оболонок, особливо у важких атомів.

Розробка та впровадження методики прецизійних досліджень динаміки збудження електронних спектрів [5] зробили можливими прямі виміри перерізу автоіонізації лужних атомів шляхом визначення сумарної інтенсивності ліній в електронних спектрах, вимірних для різних значень енергії зіткнень [6]. Порівняння з експериментальним повним перерізом іонізації дозволило визначити відносний внесок автоіонізації в цей переріз. Для важких лужних металів він складає більше 30% [7-9]. Наявність таких експериментальних даних є підґрунтям для розробки нових або удосконалення існуючих теоретичних моделей.

На початок даної роботи для атома рубідію були відомі теоретичні дані зі збудження найнижчих автоіонізаційних $4p^5 5s^2$ 2P_j станів в релятивістському наближенні спотворених хвиль (РСХ) [10] і найнижчих $4p^5 5s 4d$ 2,4P_j станів методом R -матриці з B -сплайнами [11]. Також в роботах [12, 13] було одержано сумарний переріз збудження $4p^6$ і $4s^2$ оболонок в плоскохвильовому наближенні Борна (ПХБ). Однак, відсутність експериментальних даних, не дало змогу авторам [10, 12, 13] оцінити точність проведених розрахунків.

В роботах [8, 9] представлено результати експериментального дослідження перерізу автоіонізації атома рубідію в широкому діапазоні енергій зіткнень 15-600 еВ. В них визначено роль окремих електронних конфігурацій у формуванні цього перерізу та

встановлено, що в області енергій зіткнень до 50 еВ основний внесок в переріз автоіонізації дає електронний розпад дублетних і кватерних автоіонізаційних станів (АІС) з конфігураціями $4p^55s^2$, $4p^54d5s$, $4p^54d5p$ і $4p^55s5p$, $4p^55s5d$, $4p^55s6p$ конфігурацій. При великих енергіях зіткнень, поведінка перерізу повністю визначається динамікою збудження лише дублетних рівнів $(4p^5n_1l_1n_2l_2)^2L$. Зауважимо також, що аналіз порогів збудження ліній в спектрах ежектіваних електронів [8, 9] не виявив наявності розпаду АІС, пов'язаних із збудженням більш глибоких оболонок, зокрема $4s^2$ оболонки.

Дана робота є продовженням досліджень [8, 9] і присвячена теоретичному розгляду збудження субвалентних $4p^6$ та $4s^2$ оболонок та іонізації атома рубідію в діапазоні енергій зіткнень від порогів до 600 еВ. Проведено аналіз внеску парціальних перерізів збудження та іонізації окремих оболонок в повний переріз однократної іонізації атома рубідію.

Методика розрахунків

Розрахунки перерізів збудження $4p^6$ та $4s^2$ оболонок проводились у релятивістському наближенні спотворених хвиль (РСХ) з включенням кореляційних поправок (ВК). Перерізи іонізації розраховані у релятивістському наближенні бінарних зіткнень (РБЗ). Всі розрахунки проведені в рамках універсального програмного пакету Flexible Atomic Code (FAC) [14]. Радіальні орбіталі для конструювання базисних релятивістських хвильових функцій були одержані розв'язком рівняння Дірака-Фока-Слетера. Розрахунки проведені в схемі jj зв'язку. Для оптимізації локального центрального потенціалу, який відображає поляризацію острова, використовувалися наступні одноелектронні орбіталі $4p^6nl$, $n = 5, \dots, 12$, $l = 0, 1, 2$ і $nl = 4f, \dots, 10f$; $5g, \dots, 10g$. Для врахування кореляційних ефектів використовувалися такі конфігурації $4p^5nln'l'$, $nl = 5s, \dots, 8s$; $5p, \dots, 8p$; $4d, \dots, 7d$; $4f, 5f$; $n'l' = 5s, \dots, 10s$; $5p, \dots, 10p$; $4d, \dots, 10d$; $4f, \dots, 7f$; $5g, \dots, 7g$.

Теоретичний переріз збудження $4p^6$ оболонки σ_{exc} був одержаний як сума розрахованих перерізів збудження окремих АІС. Тобто, $\sigma_{exc} = \sum \sigma_{exc}(nl)$, де $\sigma_{exc}(nl)$ – це парціальні перерізи збудження 55 АІС із конфігураціями $4p^55s^2$, $4p^55s6s$, $4p^54d5s$, $4p^55s5d$.

Аналогічно, переріз збудження $4s^2$ оболонки є сумою 37 розрахованих перерізів збудження АІС із конфігураціями $4s4p^65s^2$, $4s4p^65s5p$, $4s4p^65s6s$, $4s4p^65s4d$, $4s4p^66s6p$, $4s4p^65s7s$, $4s4p^65s5d$. Наші теоретичні оцінки показали, що сумарний внесок збудження глибоких $3d^{10}$, $3p^6$ і т.д. оболонок у повний переріз автоіонізації не перевищує 1%, тому в роботі вони не розглядаються.

Відомо, що конкуруючим з автоіонізацією є радіаційний канал розпаду збуджених $4p^5n_1l_1n_2l_2$ і $4s4p^6n_1l_1n_2l_2$ станів. Наші теоретичні оцінки співвідношення кількості станів, що мають електронний або радіаційний канал розпаду, а також розрахунки [15] показали, що радіаційний розпад для станів $4p^5n_1l_1n_2l_2$ і $4s4p^6n_1l_1n_2l_2$ є малоімовірним, тому переріз електронного збудження $4p^6$ і $4s^2$ оболонок фактично можна розглядати як повний переріз автоіонізації атома рубідію.

Форма та величина повного перерізу іонізації σ_{tot} визначається сумарним внеском парціальних перерізів прямої іонізації та перерізів збудження окремих електронних оболонок $\sigma_{tot} = \sigma_{ion}(5s + core) + \sigma_{exc}(4p^6+4s^2)$. Проведений нами аналіз показав, що основний внесок в повний переріз однократної іонізації дає пряма іонізація двох зовнішніх оболонок $\sigma_{ion}(5s)$ та $\sigma_{ion}(4p^6)$, а пряма іонізація $\sigma_{ion}(4s^2)$ та $\sigma_{ion}(3d^{10})$ в максимумі перерізів в сумі дають внесок в розмірі $\approx 10\%$. Всі інші більш глибокі оболонки дають сумарний внесок не більше 1%. Тому в даній роботі $core = 4p^6 + 4s^2 + 3d^{10}$.

Результати та їх обговорення

На рис. 1 наведено експериментальний переріз автоіонізації σ_{exc} [9] атома рубідію в діапазоні енергій первинних електронів від порогу збудження $4p^6$ оболонки до 600 еВ, розраховані нами перерізи збудження РСХ-ВК та теоретичні результати [12, 13], одержані в ПХБ. Дані [12, 13] представляють сумарний переріз збудження $4p^6$ та $4s^2$ оболонок у наближенні ПХБ без урахування релятивістських та кореляційних ефектів. За оцінками авторів [12, 13] збудження $4s^2$ оболонки дає вклад в їх сумарний переріз збудження менше 1%.

Як бачимо, поведінка експериментально отриманого нами перерізу характеризується наявністю трьох максимумів при енергіях зіткнень 16, 22 і 113 еВ, відповідно.

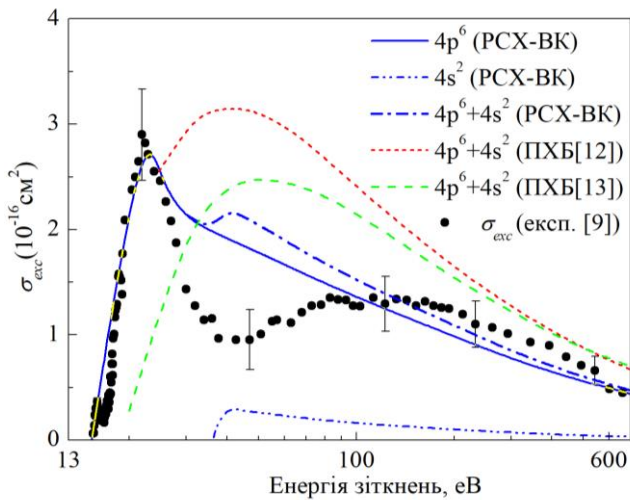


Рис. 1. Переріз автоіонізації σ_{exc} при збудженні $4p^6$ оболонки атома рубідію у порівнянні з розрахованими в даній роботі перерізами збудження $4p^6$ і $4s^2$ оболонок РСХ-ВК та теоретичними результатами ПХБ [12, 13]

Між усіма розрахованими перерізами збудження $\sigma_{exc}(4p^6+4s^2)$, представленими на рис.1, є суттєва різниця за формою і положенням максимумів: різкий максимум в припороговій області в наших розрахунках і широкий максимум при 40 еВ в даних [12, 13].

Автори роботи [13] провели розрахунки з врахуванням 37 АІС, 34 з яких є дипольно-забороненими і мають максимум перерізу при 30-55 еВ, що і стало результатом такої енергетичної залежності сумарного перерізу збудження.

Дані [8] показали, що при енергіях зіткнень до 50 еВ переріз автоіонізації атома рубідію формується внесками переважно кватетних АІС, з максимальними значеннями перерізів у порозі збудження (17-20 еВ). Як показали наші експериментальні дані та попередні теоретичні розрахунки методом R -матриці з V -сплайнами [11], ці припорогові максимуми перерізів є результатом резонансного збудження, що за ефективністю перевищує прямий процес збудження майже в півтори рази. Як згадувалось вище, при енергіях зіткнень вище 50 еВ енергетична залежність перерізу автоіонізації визначається внеском розпаду переважно тільки дублетних АІС.

Із перерізів збудження 55 АІС $4p^6$ оболонки, які ми отримали в РСХ-ВК, 12 перерізів збудження вказують на дипольно-дозволений характер збудження відповідних АІС (з двома максимумами перерізів: у порозі збудження та при 100-200 еВ)

та 43 перерізи збудження із максимумами у порозі при 17-19 еВ і плавним спадом перерізів майже до нульових значень при 50-100 еВ (дипольно-заборонений характер поведінки перерізів). З аналізу енергетичних залежностей перерізів збудження 37 АІС з $4s^2$ оболонки, можна сказати, що 11 АІС утворюються внаслідок дипольно-дозволенних, а 26 АІС внаслідок дипольно-заборонених переходів з основного стану атома. Результатом поведінки парціальних перерізів збудження окремих АІС якраз і є така енергетична залежність сумарних перерізів збудження оболонок $4p^6$, $4s^2$ та ($4p^6+4s^2$), що представлені на рис.1.

В області середніх енергій 20-80 еВ усі теоретичні наближення дають суттєво завищені значення перерізів збудження. Як впливає з аналізу, проведеному в [8, 9], в області енергій вище 19 еВ можлива присутність квазіметастабільних станів, які розпадаються через радіаційний канал розпаду на низькоенергетичні АІС (каскадні переходи) та у звичайні збуджені стани атома, що розташовані нижче його потенціалу іонізації. Це підтверджують і дані фотопоглинання [16, 17], в яких показано, що 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. Тобто більшість АІС, розташованих вище 19 еВ, розпадаються переважно саме через радіаційні переходи на низькоенергетичні АІС. Врахування внесків від можливих радіаційних та каскадних переходів під час розрахунків перерізів збудження є дуже складною теоретичною задачею, яка в даній роботі не була розв'язана. Це якраз і може бути причиною розбіжностей між теоретичними і експериментальними даними в цій області.

Здійснений нами детальний аналіз у [18, 19] всіх відомих на даний момент теоретичних даних та наших розрахунків в релятивістських наближеннях Кулон-Борна, РБЗ та РСХ у порівнянні з експериментальними даними показав, що якісний опис перерізу прямої іонізації $\sigma_{ion}(5s+core)$ найкраще дає наближення РБЗ (в рамках програмного пакету FAC), але по абсолютних значеннях дає суттєво завищені значення перерізів.

На рис. 2 представлено перерізи іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$, та $3d^{10}$ оболонок, розрахованих в релятивістському наближенні РБЗ. Сума одержаного перерізу іонізації $\sigma_{ion}(5s+core)$ та перерізу збудження $\sigma_{exc}(4p^6+4s^2)$, одержаного в РСХ-ВК (див. рис. 1), являє собою повний переріз однократної іонізації атома рубідію σ_{tot} . Розрахований переріз прямої іонізації $\sigma_{ion}(5s+core)$ пронормований нами на експериментальне значення повного перерізу однократної іонізації роботи [2] в першому максимумі при ≈ 10 еВ (коефіцієнт нормування рівний 0.6). Порівняння розрахованого нами перерізу σ_{tot} з експериментальними даними [2] (що є найбільш повними даними з перерізу однократної іонізації атома рубідію) показує їх співпадіння у всьому енергетичному діапазоні.

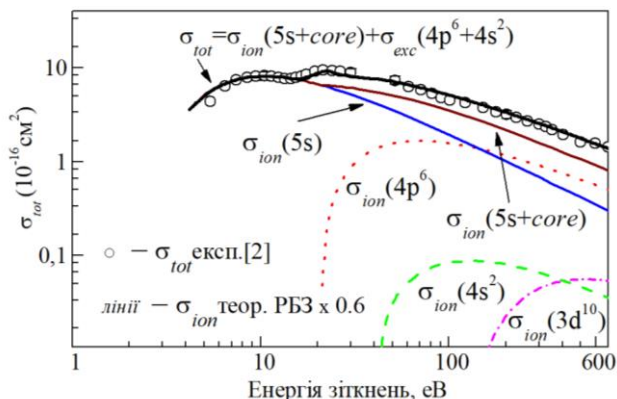


Рис. 2. Повний переріз σ_{tot} однократної іонізації атома рубідію: \circ – експериментальні дані [2] нормовані на абсолютне значення $(1.6 \pm 0.2) \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ [3] при енергії зіткнень 500 еВ; — — — теоретичний переріз $\sigma_{tot} = \sigma_{ion}(5s+core) + \sigma_{exc}(4p^6+4s^2)$. Лініями позначено розрахунки в РБЗ парціальних перерізів іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок. Всі теоретичні перерізи прямої іонізації приведені з коефіцієнтом 0.6

Таке хороше узгодження обох типів даних показує, що використане нами наближення РБЗ є дієвим методом розрахунку перерізів прямої іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок. А також, це підтвердження як правильного нарахування релятивістських хвильових функцій при дослідженні збудження $4p^6$ та $4s^2$ оболонок атома рубідію методом РСХ-ВК, так і вдалого врахування кореляційних поправок.

Так як розрахований сумарний переріз σ_{tot} чудово співпадає з експериментальним перерізом у всьому енергетичному діапазоні, ми можемо провести оцінки парціальних внесків у повний переріз

однократної іонізації атома рубідію від збудження та іонізації окремих електронних оболонок, які його формують. Наші розрахунки показали, що збудження $4p^6$ та $4s^2$ оболонок дає внесок до 30% та 4%, відповідно. Процес прямої іонізації $4p^6$, $4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок – до 24%, 1.8% та 2.4%, відповідно. Оцінки внеску обчислені у максимумах відповідних перерізів збудження та іонізації.

Аналіз вищенаведених даних показує, що для важкого атома рубідію збудження субвалентних $4p^6$ та $4s^2$ оболонок є ще більш ефективним, ніж їх прямий процес іонізації.

Висновки

У роботі представлено теоретичне дослідження процесу автоіонізації при збудженні субвалентних $4p^6$ та $4s^2$ оболонок атома рубідію. Розрахунки перерізів у релятивістському наближенні спотворених хвиль з включенням кореляційних поправок показали задовільне узгодження з експериментальними даними. Це підтверджує необхідність включення кореляційних та релятивістських поправок при розрахунках перерізів збудження важкого атома рубідію.

Також, у порівнянні з експериментальними даними повного перерізу однократної іонізації атома рубідію встановлено, що використане нами релятивістське наближення бінарних зіткнень є дієвим методом розрахунку перерізів прямої іонізації $5s$, $4p^6$, $4s^2$ та $3d^{10}$ оболонок.

Проаналізовано оцінки парціальних внесків у повний переріз однократної іонізації атома рубідію від збудження та іонізації окремих електронних оболонок. Встановлено, що для важкого атома рубідію збудження субвалентних оболонок є ще більш ефективним процесом, ніж процес їх іонізації. Це ще раз підтверджує необхідність активного як експериментального, так і теоретичного дослідження основного непрямого процесу іонізації – процесу автоіонізації.

Автори висловлюють щире подяку своїм співавторам по роботах [8, 9] пр. н. сп. А.В. Купліаускієне за допомогу в проведенні розрахунків та д.ф.-м.н., ст.н.сп. Боровику О.О. за плідне обговорення і аналіз даних.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Majorana E. Theory of incomplete P'triplets // *Nuovo Cimento*. – 1931. – V. 8, – P. 107–113.
2. Tate J., Smith P. Ionization potentials and probabilities for the formation of multiply charged ions in the alkali vapors and in krypton and xenon // *Phys. Rev.* – 1934. – V. 46, – P. 773–776.
3. McFarland R.H., Kinney J.D. Absolute Cross Sections of Lithium and Other Alkali Metal Atoms for Ionization by Electrons // *Phys. Rev.* – 1965. – V. 137, No.4. – P. 1058–1061.
4. Lukomski M., Sutton S., Kedzierski W., Reddish T.J., Bartschat K., Bartlett P.L., Bray I., Stelbovics A.T., McConkey J.W. Electron-impact ionization cross sections out of the ground and 6^2P excited states of cesium // *Phys. Rev. A*. – 2006. – V. 74, No. 3. – P. 032708–032708.
5. Borovik A.A. An electron spectrometer for studying autoionization processes in metal vapors // *UPJ*. – 2008. – V. 53, No. 10. – С. 1021–1027.
6. Borovik A., Kupliauskiene A., Zatsarinny O. Excitation-autoionization cross section of alkali atoms by electron impact // *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* – 2013. – V. 46, No. 21. – P. 215201–215201.
7. Borovik A., Kupliauskiene A. The $5p^6$ autoionization cross section of cesium atoms: contribution to single ionization by electron impact // *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* – 2009. – V. 42, No. 16. – P. 165202–165202.
8. Borovik A., Roman V., Kupliauskiene A. The $4p^6$ autoionization cross section of Rb atoms excited by low-energy electron impact // *J. Phys. B*. – 2012. – V. 45, No. 4. – P. 045204–045214.
9. Боровик О.О., Роман В.І., Купляускієне А.В. Переріз автоіонізації атомів рубідію при збудженні електронним ударом // *Доповіді НАНУ*. – 2013. – № 3. – С.58-64.
10. Kaur S., Srivastava R. 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 // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1999. – V. 32, No. 10 – P. 2323–2342.
11. Borovik A., Roman V., Zatsarinny O., Bartschat K. Electron impact excitation of the lowest doublet and quartet core-excited autoionizing states in Rb atoms // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2013. – V.46, No. 1. – P.015203-015209.
12. McGuire E.J. Systematics of ns subshell electron ionization cross sections // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1997. – V. 30, – P. 1563–1587.
13. Kim Y.K., Migdalek J., Siegel W., Bieron J. Electron impact ionization cross section of rubidium // *Phys. Rev. A*. – 1998. – V. 57, No. 1. – P. 246–254.
14. Gu M.F. The flexible atomic code // *Can. J. Phys.* – 2008. – V. 86, – P.675–689.
15. Kupliauskiene A., Kerevicius G. Theoretical study of the $4p^5nln'l'$ autoionizing states of Rb excited by electron impact // *Phys. Scr.* – 2013. – V. 88, – P. 065312–065319.
16. Connerade J.P. Absorption spectrum of Rb in the vacuum ultraviolet // *Astrophys. J.* – 1970. – V. 159, – P. 695–702.
17. Baig M., Mahmood M., Akram M., Hormes J. Inner-shell and double-excitation spectrum of rubidium involving $4p$ and $5s$ // *J. Phys. B*. – 1995. – V. 28, – P.1777–1792.
18. Роман В.І., Купляускієне А.В., Боровик О.О. Парціальні перерізи іонізації атома рубідію електронним ударом // *Доповіді НАНУ*. – 2015. – № 8. – С. 79–83.
19. Roman V., Kupliauskiene A., Borovik A. Excitation and ionization of outer shells in Rb by electron impact // *J. Phys. B*. – 2015. – V. 48, – P. 205204–205209.

Стаття надійшла до редакції 29.04.2018.

В.И. Роман, Л.А. Бандурина

Институт электронной физики НАНУ, ул. Университетская, 21, Ужгород, 88017, Украина,
e-mail: viktoriyaroman11@gmail.com

ИОНИЗАЦИЯ И АВТОИОНИЗАЦИЯ АТОМА РУБИДИЯ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

Проведены расчеты сечений возбуждения субвалентных $4p^6$ и $4s^2$ оболочек и сечений ионизации $5s$, $4p^6$, $4s^2$ и $3d^{10}$ оболочек атома рубидия электронным ударом в диапазоне энергий столкновений от порогов до 600 эВ. Расчеты сечений проведены в приближении искаженных волн и бинарных столкновений с использованием релятивистских волновых функций, полученных в стандартном методе Дирака-Фока-Слейтера. Проведен детальный анализ полученных результатов с привлечением имеющихся экспериментальных и теоретических данных.

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

V.I. Roman, L.O. Banduryna

Institute of Electron Physics. NAS of Ukraine, Voloshina Str., 54, Uzhgorod, 88017, Ukraine,
e-mail: viktoriyaroman11@gmail.com

IONIZATION AND AUTOIONIZATION OF RUBIDIUM ATOMS BY ELECTRON IMPACT

Background: The autoionization makes a significant contribution to the total ionization cross section of atoms. In recent years, the autoionization cross sections have been experimentally investigated for the subvalent shells of alkali metal atoms. These studies have shown that for heavy rubidium and cesium atoms the autoionization contribution is more than 30% of the total ionization cross section. The availability of such experimental data is the basis for developing new or improving existing theoretical models.

Methods: Calculations of the excitation cross sections were carried out in the relativistic distorted wave approximation with the inclusion of the correlation corrections. Ionization cross sections were calculated in the relativistic binary approximation. All calculations were carried out as part of the universal software package Flexible Atomic Code. Radial orbitals for constructing basic relativistic wave functions were obtained by solving the Dirac-Fock-Slater equation. The calculations were carried out in jj coupling. The theoretical excitation cross section for the $4p^6$ shell was obtained as the sum of the cross sections for 55 autoionizing states from $4p^55s^2$, $4p^55s6s$, $4p^54d5s$, $4p^55s5d$ configurations. Similarly, the excitation cross section of the $4s^2$ shell is the sum of calculated excitation cross sections for 37 autoionizing states from $4s4p^65s^2$, $4s4p^65s5p$, $4s4p^65s6s$, $4s4p^65s4d$, $4s4p^66s6p$, $4s4p^65s7s$, $4s4p^65s5d$ configurations.

Results: The calculated results were compared with the experimental autoionization cross section and the cross section obtained in Born approximation. It was shown that the $(4p^6 + 4s^2)$ cross section satisfactorily describes the experimental cross section. The ionization cross sections for $5s$, $4p^6$, $4s^2$, and $3d^{10}$ shells in binary approximation were obtained. Comparison of obtained data showed that the excitation of the $4p^6$ and $4s^2$ shells contributes up to 30% and 4%, respectively, to the total single ionization cross section. The contributions from direct ionization of the $4p^6$, $4s^2$ and $3d^{10}$ shells are up to 24%, 1.8% and 2.4%, respectively.

Conclusions: The paper presents a theoretical study of the process of autoionization in excitation of the $4p^6$ and $4s^2$ subvalent shells of rubidium atoms. Calculations of the cross sections in the relativistic distorted-wave approximation with configuration interaction corrections showed satisfactory agreement with the experimental data. This confirms the need to include correlation and relativistic corrections when calculating the excitation cross sections for a heavy rubidium atom. A comparative analy-

sis of the total theoretical ionization and excitation cross sections with an experimental total single ionization cross section showed that binary approximation is an efficient method for calculating the direct ionization cross sections of atoms.

Key words: atom, autoionization, ionization, excitation, rubidium.

PACS: 34.80.DP, 34.80.GS

REFERENCES

1. Majorana E. Theory of incomplete P triplets // *Nuovo Cimento*. – 1931. – V. 8, – P. 107–113.
2. Tate J., Smith P. Ionization potentials and probabilities for the formation of multiply charged ions in the alkali vapors and in krypton and xenon // *Phys. Rev.* – 1934. – V. 46, – P. 773–776.
3. McFarland R.H., Kinney J.D. Absolute Cross Sections of Lithium and Other Alkali Metal Atoms for Ionization by Electrons // *Phys. Rev.* – 1965. – V. 137, - No.4. – P. 1058–1061.
4. Lukomski M., Sutton S., Kedzierski W., Reddish T.J., Bartschat K., Bartlett P.L., Bray I., Stelbovics A.T., McConkey J.W. Electron-impact ionization cross sections out of the ground and 6^2P excited states of cesium // *Phys. Rev. A*. – 2006. – V. 74, - No. 3. – P. 032708–032708.
5. Borovik A.A. An electron spectrometer for studying autoionization processes in metal vapors // *Ukr. Phys. J.* – 2008. – V. 53, No. 10. – C. 1021–1027.
6. Borovik A., Kupliauskiene A., Zatsarinny O. Excitation-autoionization cross section of alkali atoms by electron impact // *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* – 2013. – V. 46, No. 21. – P. 215201–215207.
7. Borovik A., Kupliauskiene A. The $5p^6$ autoionization cross section of cesium atoms: contribution to single ionization by electron impact // *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* – 2009. – V. 42, No. 16. – P. 165202–165202.
8. Borovik A., Roman V., Kupliauskiene A. The $4p^6$ autoionization cross section of Rb atoms excited by low-energy electron impact // *J. Phys. B.* - 2012. – V. 45, No. 4. – P. 045204–045214.
9. Borovik A., Roman V., Kupliauskiene A. The autoionization cross section of rubidium atoms excited by electron impact // *Reports of NASU*. – 2013. – V. 3, – P.58–64.
10. Kaur S., Srivastava R. 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 // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1999. – V. 32, – No. 10 – P. 2323–2342.
11. Borovik A., Roman V., Zatsarinny O., Bartschat K. Electron impact excitation of the lowest doublet and quartet core-excited autoionizing states in Rb atoms // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2013. – V.46, No. 1. – P.015203–015209.
12. McGuire E.J. Systematics of ns subshell electron ionization cross sections // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1997. – V. 30, – P. 1563–1587.
13. Kim Y.K., Migdalek J., Siegel W., Bieron J. Electron impact ionization cross section of rubidium // *Phys. Rev. A*. – 1998. – V. 57, No. 1. – P. 246–254.
14. Gu M.F. The flexible atomic code // *Can. J. Phys.* – 2008. – V. 86, – P.675–689.
15. Kupliauskiene A., Kerevicius G. Theoretical study of the $4p5nln'l'$ autoionizing states of Rb excited by electron impact // *Phys. Scr.* – 2013. – V. 88, – P. 065312–065319.
16. Connerade J.P. Absorption spectrum of Rb in the vacuum ultraviolet // *Astrophys. J.* – 1970. – V. 159, – P. 695–702.
17. Baig M., Mahmood M., Akram M., Hormes J. Inner-shell and double-excitation spectrum of rubidium involving $4p$ and $5s$ // *J. Phys. B.* – 1995. – V. 28, – P.1777–1792.
18. Roman V., Kupliauskiene A., Borovik A. Partial ionization cross-sections of rubidium atom by electron impact // *Reports of NASU*. – 2015. – V 8, – P. 79–83.
19. Roman V., Kupliauskiene A., Borovik A. Excitation and ionization of outer shells in Rb by electron impact // *J. Phys. B.* – 2015. – V. 48, – P. 205204–205209.