

УДК 539.184.5  
 PACS 34.80.Dp, 34.80.Gs  
 DOI 10.24144/2415-8038.2020.48.58-66

В.І. Роман, О.М. Поп, І.В. Пилипчинець

Інститут електронної фізики НАН України, 88000, Ужгород, вул. Університетська, 21  
 Україна, e-mail: viktoriyaroman11@gmail.com

## ТЕОРЕТИЧНІ РОЗРАХУНКИ ЕЛЕКТРОННОГО ЗБУДЖЕННЯ НАЙНИЖЧИХ АВТОІОНІЗАЦІЙНИХ СТАНІВ АТОМА Rb

У рамках релятивістського наближення спотворених хвиль досліджено електронне збудження дублетних  $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2,1/2}$ , та кватретних  $(4p^5 4d5s)^4 P_{1/2,3/2,5/2}$  автоіонізаційних станів атома рубідію в діапазоні енергій зіткнень від порогів збудження до 700 еВ. Представлено результати дослідження параметра  $R_0$  відношення інтенсивностей для станів  $^2 P_{3/2}$  та  $^2 P_{1/2}$  конфігурації  $4p^5 5s^2$ . Проведено всебічний аналіз одержаних результатів із залученням наявних експериментальних та теоретичних даних.

**Ключові слова:** атом, електронне збудження, автоіонізаційні стани, переріз збудження.

### Вступ

Зарядовий склад і енергетичний баланс різних плазмових середовищ визначається в основному двома процесами - прямою іонізацією та автоіонізацією. Як було показано при дослідженнях цих процесів у важких атомах калію, рубідію і цезію [1], внесок автоіонізації у повний переріз іонізації електронним ударом становить більше 30%. Дослідження цих атомів також показали, що величина перерізу автоіонізації і форма його енергетичної залежності при низьких і високих значеннях енергії зіткнень у значній мірі визначаються збудженням і наступним електронним розпадом найбільш низькоенергетичних станів  $np^5(n+1)s^2 ^2 P_{3/2,1/2}$  та  $np^5 nd(n+1)s ^4 P_{1/2,3/2,5/2}$  ( $n=3, 4, 5$  для K, Rb, Cs, відповідно) [2–4].

Відомо, що найбільш повну інформацію про сукупність процесів, які беруть участь у формуванні певного збудженого атомного стану, а саме тип електронного переходу, каскадне заселення, утворення резонансів негативних іонів, дає енергетична залежність його перерізу збудження. Недавно, методом електронної спектроскопії з ви-

користанням техніки електрон-атомних пучків, вдалося експериментально отримати перерізи збудження найнижчих автоіонізаційних станів (AIC) для атома Rb [5–7]. Внаслідок значного спин-орбітального розщеплення рівнів в атомі Rb, крім дублетних станів  $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2,1/2}$  [5], в роботі [6] також досліджено електронне збудження кожної компоненти з  $J = 1/2, 3/2, 5/2$  кватретного стану  $(4p^5 4d5s)^4 P_J$ . Детальний аналіз припорогової резонансної структури даних AIC, здійснений авторами в роботі [8]. В ній, на базі теоретичних розрахунків методом  $R$ -матриці з  $V$ -сплайнами показано, що резонансна структура на перерізах збудження для  $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2,1/2}$  AIC є результатом суперпозиції кількох станів негативного іона рубідію, а також встановлено, що майже всі резонанси є резонансами типу Фешбаха. Щодо кватретних AIC, то авторами роботи [8] представлено перерізи збудження цих AIC в діапазоні енергій зіткнень до 50 еВ, але їм не вдалося ідентифікувати стани негативного іона рубідію через складність механізму збудження та розпаду цих AIC.

Що стосується енергій зіткнень вище 50 еВ, то на даний момент була відома

тільки одна теоретична робота [9], де представлено перерізи збудження та досліджено роль  $nr^5(n+1)s^2\ ^2P_{3/2,1/2}$  АІС в процесі іонізації нейтральних лужних атомів електронним ударом. В цій роботі проведено релятивістські розрахунки ефективних перерізів збудження у наближеннях Борна та спотворених хвиль (РСХ), аналіз мультиплетного розщеплення та встановлено відношення величини перерізів найнижчих дублетних АІС лужних атомів Na, K, Rb та Cs при різних енергіях налітаючого електрона від порогів збудження до 1.5 кеВ, але без порівняння з експериментальними даними для атомів Rb та Cs. Для квартетних  $(4p^54d5s)^4P_J$  АІС теоретичні дані перерізів збудження для енергій зіткнень вище 50 еВ були відсутні.

В даній роботі ми приводимо результати теоретичного дослідження електронного збудження найнижчих дублетних та квартетних автоіонізаційних станів атома рубідію в широкому діапазоні енергій зіткнень від порогів збудження до 700 еВ методом релятивістських спотворених хвиль з врахуванням конфігураційного змішування (наближення РСХ-ВК) та без нього (наближення РСХ) у порівнянні із наявними теоретичними та експериментальними даними.

## Методика досліджень

Теоретичні розрахунки проводились з використанням універсального програмного пакету Flexible Atomic Code [10], який враховує релятивістський характер збудження складних атомів шляхом використання гамільтоніана Дірака-Кулона. Цей програмний пакет добре зарекомендував себе при теоретичній класифікації АІС атома рубідію в роботі [11], а також при дослідженні перерізу збудження  $4p^6$  оболонки атома Rb [12, 13].

Слід відмітити, що точність отриманих теоретичних результатів суттєво залежить від того, як нараховані одноелектронні функції мішені та які конфігурації змішуються між собою. Однозначно, універсального рецепту як покращити результати розрахунків не має, все залежить від вдалого і повного врахування конфігураційного змішування. Але, разом з тим, кількість конфігура-

цій не може бути надмірно великою, оскільки неможливим є врахування взаємодії електрона, що налітає з усіма можливими конфігураціями. Змішування конфігурацій зазвичай найбільше, коли енергії різних конфігурацій близькі один до одного, воно може порушувати серіальні закономірності і навіть змінювати характер мультиплетного розщеплення рівнів. Тому врахування конфігураційного змішування у таких випадках часто призводить до суттєвих змін величини імовірності розпаду окремих АІС, особливо для слабких переходів.

Радіальні орбіталі для конструювання базисних релятивістських хвильових функцій були одержані розв'язком рівняння Дірака-Фока-Слетера. Набір конфігурацій, у порівнянні із роботою [11] було дещо зменшено, так як наші дослідження показали, що найкращий опис експериментальних перерізів збудження дають включення кореляційних поправок в розрахунки саме підібраних нами конфігурацій, хоча енергії збудження при цьому мають більші розбіжності з експериментальними значеннями. Для оптимізації локального центрального потенціалу, який має відображати поляризацію остова, що містив також обмінний член, використовувалися наступні одноелектронні конфігурації  $4p^6nl$  ( $n = 5, 6, 7, l = 0, 1, 2, 3$ ). Для врахування кореляційних ефектів (ВК) використовувалися такі конфігурації  $4p^6nl$  ( $n = 5, 6, 7, l = 0, 1, 2, 3$ ),  $4p^5nl'n'l'$  ( $nl = 5s, 6s, 5p, 4d, 5d, n'l' = 5s, 6s, 5p, 6p, 4d, 5d, 4f, 5f, 5g$ ) для основного  $4p^65s$  стану атома Rb та для  $4p^6$ ,  $4p^5nl$  ( $nl = 5s, 6s$ ),  $4p^4nl'n'l'$  ( $nl = 5s, 5p, n'l' = 5s, 5p, 4d, 5d$ ) кінцевого стану  $Rb^+$ . Розрахунки проведені в  $jj$  зв'язку.

## Результати та їх обговорення

На рис. 1 представлено порівняння експериментальних перерізів збудження [5] дублетних  $(4p^55s^2)^2P_{3/2,1/2}$  АІС із нашими теоретичними розрахунками та даними [9]. Експериментальні дані були нормовані на наші розрахунки РСХ при енергії зіткнень 650 еВ. В області енергій вище 100 еВ наші теоретичні перерізи збудження РСХ та РСХ-ВК  $(4p^55s^2)^2P_{1/2,3/2}$  станів, в межах експеримен-

тальної похибки задовільно описують експериментальні дані. Перерізи збудження методом Борна та РСХ [9] в цій області енергій занижують абсолютні значення перерізів. Проте, слід зауважити, що як наші дані, так і дані [9] відповідають правилу співвідношення величин перерізів  ${}^2P_{3/2} : {}^2P_{1/2} \approx 2 : 1$  [14]. Чому правильним є нормування саме на наші дані для порівняння, а не на дані [9]? За даними [8], а метод R-матриці є найбільш точним методом розрахунку перерізів у припороговій області енергій, перерізи збудження мали б мати ще вищі абсолютні значення ефективних перерізів, тобто наші дані є ближчими до них. На даному рисунку ми не приводимо порівняння із ними, так як перерізи збудження  $(4p^5 5s^2) {}^2P_{1/2,3/2}$  станів в роботі [8] представлені у дуже вузькому діапазоні 15-20 еВ.

Суттєва різниця між експериментом і теорією існує при малих та середніх значеннях енергії зіткнень. Відмітимо, що опис процесів в області енергій 20-90 еВ є проблемою для всіх існуючих теоретичних наближень, оскільки вимагає одночасного врахування великої кількості високоенергетичних конфігурацій як  $4p^6$  оболонки, так і збудження з більш глибоких оболонок атома рубідію. Також необхідно враховувати внески від можливих каскадних та радіаційних переходів, що є дуже складною теоретичною задачею. І дійсно, як показує аналіз експериментального перерізу збудження стану  $(4p^5 5s^2) {}^2P_{1/2}$ , при енергіях зіткнень 18-30 еВ спостерігається осциляційна поведінка та збільшення величини перерізу до 20 %. Як впливає з даних [15, 16], 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 перерізу збудження 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. Найкраще описує процес збудження в цій області наближення РСХ-ВК. З рисунка видно, що в

припороговій області енергій зіткнень експериментальні дані обох рівнів мають виразний резонансний характер. Величина перерізів останніх перевищує ефективність прямого процесу майже у півтора рази. Детальний аналіз цієї ділянки у [8] показав, що всі резонанси тут є резонансами типу Фешбаха зі спільною конфігурацією  $4p^5 6s 5p^2$  у випадку  $(4p^5 5s^2) {}^2P_{3/2}$  та спільною конфігурацією  $4p^5 5s 4d 6s$  для автоіонізаційного стану  $(4p^5 5s^2) {}^2P_{1/2}$ . Теоретичні наближення РСХ та Борна в припороговій області енергій зіткнень не можуть якісно описати такі резонансні процеси.

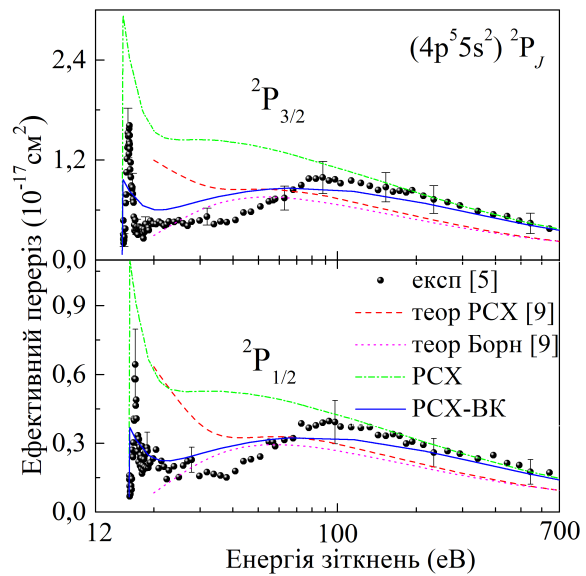


Рис. 1: Ефективні перерізи збудження дублетних  $(4p^5 5s^2) {}^2P_{3/2,1/2}$  АІС атома рубідію.

Переріз РСХ без врахування конфігураційного змішування суттєво завищує ефективність припорогового збудження, проте все таки передбачає його наявність, як і наближення РСХ [9]. Проведені в [9] розрахунки в наближенні Борна зовсім не враховують можливість резонансного збудження, про що свідчить поведінка відповідного перерізу збудження в припороговій області енергій зіткнень. Оскільки, Борнівське наближення – це розсіяння в потенціальному полі і воно не описує деталей процесу розсіювання при низьких енергіях зіткнень. Наближення РСХ-ВК хоч і відрізняється від експериментальних даних в припороговій області, та разом з тим, прогнозує різке збільшення ефективності резонансного збуджен-

ня даних АІС. А це свідчить про те, що даний метод в більшій мірі враховує збурення налітаючої та розсіяних хвиль полем атомного залишку і в порозі збудження передбачає можливість захоплення налітаючого електрона в стан дискретного спектру з одночасним збудженням зв'язаного електрона з внутрішньої оболонки.

В нашій роботі досліджено також параметр відношення  $R_0 = \sigma_{3/2} / \sigma_{1/2}$  інтенсивностей ліній  $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}$  та  $(4p^5 5s^2)^2 P_{1/2}$ , який за даними [14] має співвідноситись як 2:1 або 100% до 50%. На рис. 2 наведено порівняння експериментальних даних з теоретичними розрахунками в наближенні Борна, РСХ та релятивістському наближенні спотворених хвиль з обміном (РСХО) [9]. Загальна поведінка залежності відношення експериментальних інтенсивностей ліній характеризується різким припороговим резонансом, осциляційною структурою до 30 еВ і далі – майже лінійна класична залежність до 650 еВ. Така поведінка в першу чергу пов'язана із домінуючою роллю станів негативних іонів у припороговому збудженні АІС  $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2,1/2}$ , і впливом каскадного заселення при енергіях до 30 еВ, про що вже йшла мова вище. Теоретичні розрахунки РСХ та Борна в області енергій зіткнень до 30 еВ, як вже було показано і при описі перерізів збудження, відрізняються суттєво. Важко говорити про якість теоретичних значень параметру відношення  $R_0$  в цій області, так як і експериментальні дані мають великий розкид значень, але видно ідеальне співпадіння наших теоретичних розрахунків РСХ із даними РСХ [9] як з обміном, так і без нього. Та необхідно відмітити чудове співпадіння теоретичних та експериментальних даних в області енергій зіткнень 35-650 еВ. Це означає, що у випадку теоретичних розрахунків РСХ в розкладі сильного зв'язку вдало підібрані конфігурації, що враховують кореляційне змішування рівнів та правильно обраний модельний потенціал, що використовується для визначення одноелектронних радіальних хвильових функцій. Також, таке хороше узгодження показує достовірність експериментальних вимірювань. На рисунку 3 наведено експериментальні перерізи збудження [6] най-

нижчих кватетних  $(4p^5 4d5s)^4 P_{1/2,3/2,5/2}$  АІС у порівнянні із нашими теоретичними розрахунками РСХ-ВК в діапазоні енергій зіткнень 16-700 еВ та даними  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами [8] (16-50 еВ).

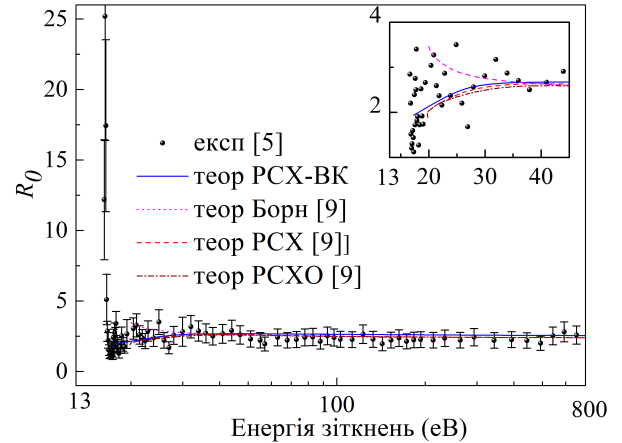


Рис. 2: Відношення інтенсивностей  $R_0 = \sigma_{36}[(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2}] / \sigma_{36}[(4p^5 5s^2)^2 P_{1/2}]$  АІС атома рубідію.

Експериментальні дані нормовані на дані РСХ-ВК при енергії зіткнень 350 еВ для станів  $^4 P_{3/2,5/2}$  та 110 еВ для  $^4 P_{1/2}$ . Слід відмітити, що у випадку кватетних АІС метод РСХ без кореляційних поправок давав незадовільні результати, які були відкинуті. Це якраз і вказує на складність процесу збудження та розпаду цих станів, а також на те, що конфігураційне змішування тут відіграє більш суттєву роль. Загальний вигляд всіх експериментальних перерізів в цілому подібний і відображає обмінний характер збудження цих кватетних рівнів. Теоретичні дані хоч і відрізняються суттєво загальною поведінкою, проте по абсолютним значенням добре корелюють між собою при описі експериментальних даних. Обидва типи теоретичних даних не суперечать правилу співвідношення інтенсивності спектральних ліній в межах однієї серії  $^4 P_{5/2} : ^4 P_{3/2} : ^4 P_{1/2} \approx 3:2:1$  [14]. 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, на це вказують і дослідження [8] та наші теоретичні розрахунки. В енергетичному діапазоні 17-24 еВ на всіх перерізах помітне деяке зростання ефективності збудже-

ння, яке найбільш виразно проявляється для рівня  $4P_{1/2}$ .

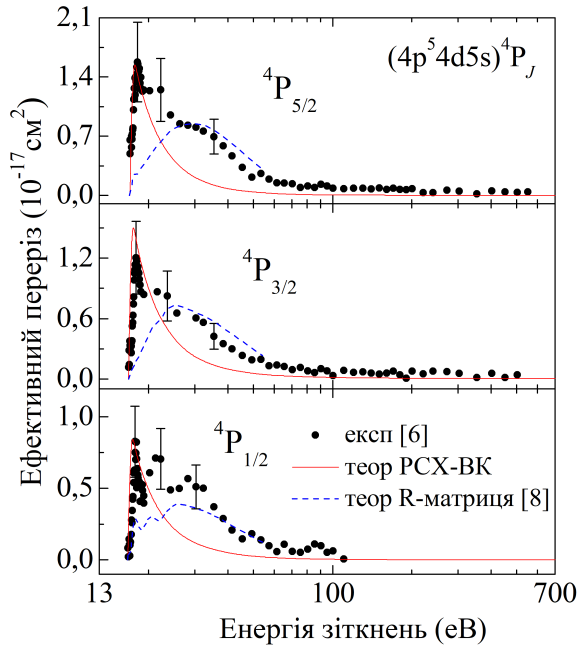


Рис. 3: Ефективні перерізи збудження квартетних  $(4p^5 4d5s)^4P_{1/2,3/2,5/2}$  АІС атома рубідію.

Таке збільшення перерізу має каскадне

походження внаслідок радіаційного розпаду високоенергетичних станів. Якщо наші теоретичні розрахунки в цій області суттєво занижують значення всіх перерізів збудження, то дані [8] чудово прогнозують ріст величини перерізів через наявність додаткового вкладу за рахунок радіаційного розпаду із верхніх рівнів  $4p^5 4d5s$ ,  $4p^5 5s5p$ ,  $4p^5 5p^2$ ,  $4p^5 4d5p$  конфігурацій. Недоліком наших теоретичних розрахунків якраз і є неможливість врахування каскадних переходів, що є дійсно дуже складною теоретичною задачею. В області енергій зіткнень вище 70 еВ наші теоретичні дані РСХ-ВК якісно описують процес збудження даних квартетних АІС, що якраз і дозволяє нам нормувати експериментальні дані з метою отримання абсолютних значень ефективних перерізів збудження  $(4p^5 4d5s)^4P_{1/2,3/2,5/2}$  АІС атома рубідію. Енергії збудження та абсолютні значення експериментальних перерізів збудження, які були отримані при нормуванні на наші теоретичні розрахунки РСХ-ВК приведені в Таблиці 1.

Табл. 1: Розраховані та експериментальні енергії електронного збудження ( $E_{зб}$ , еВ), перерізи збудження ( $\sigma$ ,  $10^{-17}$  см<sup>2</sup>) у максимумах  $\sigma_{max}$  та при енергіях зіткнень 100 і 500 еВ, а також ймовірності електронного розпаду ( $A$ , с<sup>-1</sup>) АІС  $4p^5 nl(L_1S_1)n'l'LSJ$  атома рубідію.

$(L_1S_1)LSJ$	$E_{зб}$ , розрахунок	$E_{зб}$ , експеримент [12]	$\sigma$ , $10^{-17}$ см <sup>2</sup>			$A$ , с <sup>-1</sup>
			$\sigma_{max}$	$\approx 100$ еВ	$\approx 500$ еВ	
$5s^2 \ ^2P_{3/2}$	15.134	15.31	1.61	0.92	0.47	$7.65 \cdot 10^{12}$
$5s^2 \ ^2P_{1/2}$	16.040	16.16	0.64	0.37	0.20	$1.04 \cdot 10^{13}$
$4d(^3P)5s \ ^4P_{1/2}$	16.665	16.69	0.08	0.06	0	$9.08 \cdot 10^8$
$4d(^3P)5s \ ^4P_{3/2}$	16.754	16.79	1.21	0.08	0.04	$6.12 \cdot 10^7$
$4d(^3P)5s \ ^4P_{5/2}$	16.907	16.97	1.57	0.08	0.03	$5.31 \cdot 10^{11}$

## Висновки

В роботі представлено порівняння експериментальних перерізів збудження дублетних  $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$  та квартетних  $(4p^5 4d5s)^4P_{1/2,3/2,5/2}$  автоіонізаційних станів з наявними теоретичними даними та нашими релятивістськими розрахунками. Представлено результати дослідження параметра  $R_0$  відношення інтенсивностей для станів  $^2P_{3/2}$  та  $^2P_{1/2}$  конфігурації  $4p^5 5s^2$ . Показано, що в

області енергій вище 70 еВ наші розрахунки в наближенні спотворених хвиль добре описують експериментальні дані. При низьких енергіях зіткнень, наші розрахунки якісно передбачають наявність припорогового резонансного збудження, та в області середніх енергій 20-50 еВ тільки метод R-матриці якісно описує складний характер збудження та розпаду найнижчих квартетних автоіонізаційних станів атома рубідію. Всебічний аналіз одержаних результатів із залученням

наєвних експериментальних та теоретичних даних показав, що наближення релятивістських спотворених хвиль з врахуванням конфігураційного змішування є вдалим інструментом опису автоіонізаційних станів атома рубідію в широкому діапазоні енергій зіткнень і дав змогу отримати абсолютні значення експериментальних перерізів збудже-

ння  $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$  та  $(4p^5 4d5s)^4P_{1/2,3/2,5/2}$  станів.

Робота підтримана науковим проектом молодих вчених НАН України “Динаміка формування збуджених станів атомів та іонів у плазмі на парі металів: механізми елементарних процесів”.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Borovik, A. (2013), «Excitation-autoionization cross section of alkali atoms by electron impact», [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., V.46., 215201.](#)
- [2] Evrij, M.J., Borovik Jr., A.A., Shimon, L.L., Kontros, J.E., Borovik, A.A. (2005), «Resonance excitation of the  $3p^6$ -subshell in potassium: Contribution to the single ionization», [Nucl. Instrum. and Meth. B., V.233., pp. 280–283.](#)
- [3] Borovik A., Roman V., Kupliauskiene A. (2013), «The autoionization cross section of rubidium atoms excited by electron impact», [Reports of NASU, V.3., pp.58–64.](#)
- [4] Borovik, A., Kupliauskiene, A. (2009), «The  $5p^6$  autoionization cross section of cesium atoms: contribution to single ionization by electron impact», [J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys., V.42., N 16., pp. 165202-1–165202-5.](#)
- [5] Borovik, A., Ilyashevych, V., Kupliauskiene, A. (2012), «Ejected-electron excitation functions of the  $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2, 1/2}$  autoionizing states of rubidium atoms excited by 15 to 640 eV electrons », [Journal of Physics: Conference Series, N 388., 042007.](#)
- [6] Roman, V., Tymchyk, R., Kupliauskiene, A., Borovik A. (2012), «Electron-impact excitation of the  $(4p^5 4d5s)^4P_J$  autoionizing states in Rb atoms», Book of abstracts, EGAS 44., Gothenburg. Sweden, P. 163.
- [7] Borovik, A. (2013), «Resonance excitation of autoionizing states in alkali atoms by electron impact », [Scientific Herald of Uzhhorod University Series Physics, N 34., P. 173–181.](#)
- [8] Borovik, A., Roman, V., Zatsarinny, O., Bartschat, K. (2013), «Electron impact excitation of the lowest doublet and quartet core-excited autoionizing states in Rb atoms» [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., N 46., N 1., P.015203–015209.](#)
- [9] Kaur, S., Srivastava, R. (1999), «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., V.32., N 10., pp.2323–2342.](#)
- [10] Gu, M.F. (2008), «The flexible atomic code» [Can. J. Phys., V.86., pp.675–689.](#)
- [11] Kupliauskiene, A., Kerevicius, G. (2013), «Theoretical study of the  $4p^5 n l n' l'$  autoionizing states of Rb excited by electron impact» [Phys. Scr., V.88., pp.065312–065319.](#)
- [12] Borovik, A., Roman, V., Kupliauskiene, A. (2012), «The  $4p^6$  autoionization cross section of Rb atoms excited by low-energy electron impact» [J. Phys. B., V.45., N 4., pp.045204–045214.](#)
- [13] Roman, V., Kupliauskiene, A., Borovik, A. (2015), «Excitation and ionization of outer shells in Rb by electron impact», [J. Phys. B., V.48., pp. 205204–205209.](#)

- [14] Frisch, S.E. (1968), «Optical spectra of atoms», Moscow, FM, 640 p.
- [15] Connerade, J.P. (1970), «Absorption spectrum of Rb in the vacuum ultraviolet», [Astrophys. J.](#), V.159., pp. 695–702.
- [16] Baig, M., Mahmood, M., Akram, M., Hormes, J. (2010), «Inner-shell and double-excitation spectrum of rubidium involving 4p and 5s subshells», [J. Phys. B.](#), V.28., pp. 1777–1792.

Стаття надійшла до редакції 17.08.2020

В.И. Роман, О.М. Поп, И.В. Пилипчинец

Институт электронной физики НАНУ, Украина, 88000, Ужгород, ул. Университетская, 21,  
Украина, e-mail: viktoriyaroman11@gmail.com

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ЭЛЕКТРОННОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ НИЗКИХ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМА Rb

В рамках релятивистского приближения искаженных волн исследовано электронное возбуждение дублетных  $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$  и квартетных  $(4p^5 4d 5s)^4P_{1/2,3/2,5/2}$  автоионизационных состояний атома рубидия в диапазоне энергий столкновений от порогов возбуждения до 700 эВ. Представлены результаты исследования параметра  $R_0$  отношения интенсивностей для состояний  $^2P_{3/2}$  та  $^2P_{1/2}$  конфигурации  $4p^5 5s^2$ . Проведен всесторонний анализ полученных результатов с привлечением имеющихся экспериментальных и теоретических данных.

**Ключевые слова:** атом, электронное возбуждение, автоионизационные состояния, сечение возбуждения.

V.I. Roman, O.M. Pop, I.V. Pylypchynets

Institute of Electron Physics, NAS of Ukraine, Universitetska Str., 21, 88017, Uzhhorod,  
Ukraine, e-mail: viktoriyaroman11@gmail.com

## THEORETICAL CALCULATIONS OF ELECTRON EXCITATION THE LOWEST AUTOIONIZING STATES IN Rb ATOM

**Purpose.** The value of the autoionization cross section and its energy dependence are determined to a great extent by excitation and subsequent electron decay of the lowest energy states. Recently, experimental data on the excitation cross sections of the rubidium atom lowest doublet  $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$  and quartet  $(4p^5 4d 5s)^4P_{1/2,3/2,5/2}$  autoionizing states were obtained which promoted their theoretical investigations.

**Methods.** Theoretical calculations were performed using the Flexible Atomic Code universal program package which takes account of the relativistic nature of the complex atoms excitation by the use of the Dirac-Coulomb Hamiltonian. The radial orbitals for basic relativistic wavefunctions were obtained by solving the Dirac-Fock-Slater equation.

**Results.** Comparison of the experimental excitation cross sections for the doublet  $(4p^5 5s^2)^2P_{3/2,1/2}$  and quartet

$(4p^5 4d5s)^4 P_{1/2,3/2,5/2}$  autoionizing states with available theoretical data and our relativistic calculations is presented. The results of the study of the parameter  $R_0$  for the intensity ratio for the  $^2P_{3/2}$  and  $^2P_{1/2}$  states of the  $4p^5 5s^2$  configuration are presented. Our calculations in the distorted waves approximation is shown to well describe the experimental data in the energy region above 70 eV. At low collision energies our calculations qualitatively predict the presence of the threshold resonant excitation; however in the energy region 20–50 eV only the R-matrix method qualitatively describes the complex nature of excitation and decay of the lowest quartet autoionizing states of the rubidium atom.

**Conclusions.** Electron excitation of the doublet  $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2,1/2}$  and quartet  $(4p^5 4d5s)^4 P_{1/2,3/2,5/2}$  autoionizing states of the rubidium atom in the collision energy range from the excitation thresholds up to 700 eV was studied in the terms of the distorted waves relativistic approximation. A comprehensive analysis of the obtained results using the available experimental and theoretical data showed that the relativistic distorted waves approximation taking into account the configurational mixing is a suitable tool for describing the autoionizing states of the rubidium atom in a wide range of collision energies and allowed one to obtain the absolute values of the experimental excitation cross sections of the  $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2,1/2}$  and  $(4p^5 4d5s)^4 P_{1/2,3/2,5/2}$  states.

*This work was supported by the grant program the project of young scientists of the National Academy of Sciences of Ukraine "Dynamics of formation of excited states of atoms and ions in plasma on a pair of metals: mechanisms of elementary processes".*

**Keywords:** atom, electron impact excitation, autoionizing states, excitation cross section.

## REFERENCES

- [1] Borovik, A. (2013), «Excitation-autoionization cross section of alkali atoms by electron impact», [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., V.46., 215201.](#)
- [2] Evrij, M.J., Borovik Jr., A.A., Shimon, L.L., Kontros, J.E., Borovik, A.A. (2005), «Resonance excitation of the  $3p^6$ -subshell in potassium: Contribution to the single ionization», [Nucl. Instrum. and Meth. B., V.233., pp. 280–283.](#)
- [3] Borovik A., Roman V., Kupliauskiene A. (2013), «The autoionization cross section of rubidium atoms excited by electron impact», [Reports of NASU, V.3., pp.58–64.](#)
- [4] Borovik, A., Kupliauskiene, A. (2009), «The  $5p^6$  autoionization cross section of cesium atoms: contribution to single ionization by electron impact», [J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys., V.42., N 16., pp. 165202-1–165202-5.](#)
- [5] Borovik, A., Ilyashevych, V., Kupliauskiene, A. (2012), «Ejected-electron excitation functions of the  $(4p^5 5s^2)^2 P_{3/2, 1/2}$  autoionizing states of rubidium atoms excited by 15 to 640 eV electrons », [Journal of Physics: Conference Series, N 388., 042007.](#)
- [6] Roman, V., Tymchyk, R., Kupliauskiene, A., Borovik A. (2012), «Electron-impact excitation of the  $(4p^5 5d5s)4P$  autoionizing states in Rb atoms», Book of abstracts, EGAS 44., Gothenburg. Sweden, P. 163.
- [7] Borovik, A. (2013), «Resonance excitation of autoionizing states in alkali atoms by electron impact », [Scientific Herald of Uzhhorod University Series Physics, N 34., P. 173–181.](#)
- [8] Borovik, A., Roman, V., Zatsarinny, O., Bartschat, K. (2013), «Electron impact excitation of the lowest doublet and quartet core-excited autoionizing states in Rb atoms» [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., N 46., N 1., P.015203–015209.](#)
- [9] Kaur, S., Srivastava, R. (1999), «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., V.32., N 10., pp.2323–2342.](#)
- [10] Gu, M.F. (2008), «The flexible atomic code» [Can. J. Phys., V.86., pp.675–689.](#)



- [11] Kupliauskiene, A., Kerevicius, G. (2013), «Theoretical study of the  $4p^5nln'l'$  autoionizing states of Rb excited by electron impact» [Phys. Scr., V.88., pp.065312–065319.](#)
- [12] Borovik, A., Roman, V., Kupliauskiene, A. (2012), «The  $4p^6$  autoionization cross section of Rb atoms excited by low-energy electron impact» [J. Phys. B., V.45., N 4., pp.045204–045214.](#)
- [13] Roman, V., Kupliauskiene, A., Borovik, A. (2015), «Excitation and ionization of outer shells in Rb by electron impact», [J. Phys. B., V.48., pp. 205204–205209.](#)
- [14] Frisch, S.E. (1968), «Optical spectra of atoms», Moscow, FM, 640 p.
- [15] Connerade, J.P. (1970), «Absorption spectrum of Rb in the vacuum ultraviolet», [Astrophys. J., V.159., pp. 695–702.](#)
- [16] Baig, M., Mahmood, M., Akram, M., Hormes, J. (2010), «Inner-shell and double-excitation spectrum of rubidium involving 4p and 5s subshells», [J. Phys. B., V.28., pp. 1777–1792.](#)

©Ужгородський національний університет