

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. М. Смирнов, Сечения возбуждения синглетных уровней YII в столкновениях $e-Y$, *ТВТ*, 2001, том 39, выпуск 6, 879–884

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.14.91

23 марта 2025 г., 16:29:30



УДК 539.186

СЕЧЕНИЯ ВОЗБУЖДЕНИЯ СИНГЛЕТНЫХ УРОВНЕЙ YII В СТОЛКНОВЕНИЯХ e–Y

© 2001 г. Ю. М. Смирнов

Московский энергетический институт

Поступила в редакцию 25.04.2001 г.

Экспериментально исследовано возбуждение синглетных уровней однозарядного иона иттрия в столкновениях медленных электронов с атомами иттрия. При энергии электронов 50 эВ измерены сечения возбуждения 32 спектральных линий YII; для 30 из них зарегистрирована зависимость сечений от энергии электронов в диапазоне энергий 0–200 эВ. На основе полученных данных рассчитаны полные сечения возбуждения 11 энергетических уровней, а также вклад каскадного возбуждения для семи уровней. Абсолютные значения сечений возбуждения четных и нечетных уровней различаются менее чем на порядок.

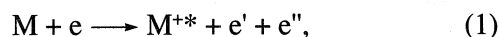
ВВЕДЕНИЕ

В ШВ группе периодической системы элементов иттрий занимает промежуточное положение между скандием и лантаном, в значительной мере сочетая в себе их свойства. Так, при почти одинаковой со скандием температуре плавления иттрий имеет существенно более низкое давление насыщенного пара, приближаясь по этой характеристике к лантану. Большинство термодинамических, механических, электрических характеристик иттрия имеют промежуточные значения между соответствующими характеристиками скандия и лантана.

В строении электронных оболочек этих элементов проявляются иные закономерности. У всех трех обсуждаемых атомов основным состоянием является $ds^2 a^2D$, наименее возбужденным четным – $d^2s a^4F$. В ScI и LaI наименее возбужденное нечетное состояние $dsp z^4F^o$, а в атоме иттрия оно оказывается вторым, несколько ниже него расположено состояние $s^2p z^2P^o$. Однозарядные ионы этих элементов, напротив, имеют различные основные состояния: ScI – $ds a^3D$, YI – $s^2 a^1S$, LaI – $d^2 a^3F$. Кроме того, в большинстве низколежащих нечетных конфигураций однозарядного иона лантана принимает участие 4f-электрон, тогда как соответствующие конфигурации ScII и YII расположены очень высоко ($E > 70000 \text{ см}^{-1}$). Исходя из вышеизложенного, нет оснований считать, что поведение атомных констант атомов и однозарядных ионов металлов ШВ группы будет подчиняться простым закономерностям. Это относится как к излучательным характеристикам (вероятности переходов, силы осцилляторов), так и к столкновительным (сечения неупругих столкновений).

Процесс возбуждения ионных состояний элементов ШВ группы в результате однократного

соударения с электроном относится к числу малоизученных. Этот процесс может быть записан следующим образом:



где M – атом металла; e и e' – налетающий и рассеянный электроны; e'' – электрон, выбитый из атома металла при его ионизации. До настоящего времени исследовано возбуждение триплетных уровней однозарядного иона скандия [1] и синглетных уровней однозарядного иона лантана [2]. Какая-либо информация о сечениях возбуждения однозарядного иона иттрия отсутствует. В данной работе предпринято экспериментальное изучение возбуждения синглетных уровней YII в процессе (1) (возбуждение с одновременной однократной ионизацией).

Эксперимент. Как и в предшествующих работах [1, 2], основой эксперимента по изучению столкновений e–Y является метод протяженных пересекающихся пучков. Использование единой техники и методики исследования позволяет существенно повысить корректность сравнения результатов при изучении различных объектов. Вместе с тем отпадает необходимость повторного детального описания постановки эксперимента, поскольку оно содержится в ряде более ранних публикаций [3–5].

При проведении экспериментов с иттрием металл испарялся из медного тигля, охлаждаемого проточной водой. Нагрев иттрия осуществлялся электронным лучом. При температуре расплавленной зоны 1870 К концентрация атомов в области пересечения атомного и электронного пучков составляла $4.3 \times 10^9 \text{ см}^{-3}$. При указанной выше температуре заселенность уровней основного терма a^2D с $J = 3/2$ и $5/2$ оказывается одинаковой, так что процесс (1) имеет в качестве исходных

Таблица 1. Сечения возбуждения однозарядного иона иттрия

λ , нм	Переход	$J_{\text{low}}-J_{\text{up}}$	E_{low} , см ⁻¹	E_{up} , см ⁻¹	Q_{50} , 10 ⁻¹⁸ см ²	Q_{max} , 10 ⁻¹⁸ см ²	$E(Q_{\text{max}})$, эВ	OEF
224.306	$a^1S-y^1P^o$	0-1	0	44568	11.4	13.0	36	2
242.219	$a^1D-y^1P^o$	2-1	3296	44568	6.39	7.25	36	2
275.020	$z^1D^o-g^1D$	2-2	26147	62497	0.64	0.77	28	8
278.556	$z^3P^o-f^1D$	2-2	24647	60535	1.40	1.57	36	7
283.440	$z^3F^o-g^1D$	2-2	27227	62497	0.48	0.58	28	8
285.787	$z^1P^o-g^1D$	1-2	27516	62497	0.74	0.89	28	8
290.708	$z^1D^o-f^1D$	2-2	26147	60535	0.46	0.51	36	7
294.879	$z^3D^o-g^1D$	1-2	28595	62497	0.52	0.63	28	8
295.312	$z^1P^o-f^1S$	1-0	27516	61369	3.97	4.10	45	5
300.132	$z^3F^o-f^1D$	2-2	27227	60535	0.44	0.49	36	7
302.766	$z^1P^o-f^1D$	1-2	27516	60535	0.90	1.01	36	7
305.031	$z^3D^o-f^1S$	1-0	28595	61369	0.70	0.72	45	5
332.788	$a^1D-z^1F^o$	2-3	3296	33336	6.40	7.81	33	4
333.087	$z^1F^o-e^1G$	3-4	33336	63350	1.01	1.29	35	9
336.199	$b^1D-y^1P^o$	2-1	14832	44568	0.91	1.04	36	2
337.989	$z^1D^o-e^1D$	2-2	26147	55725	0.50	0.55	40	6
363.312	$a^1S-z^1P^o$	0-1	0	27516	15.8	16.8	35	1
367.553	$z^1F^o-f^1D$	3-2	33336	60535	0.74	0.82	36	7
368.487	$z^3D^o-e^1D$	1-2	28595	55725	0.29	0.32	40	6
370.326	$z^3D^o-e^1D$	2-2	28730	55725	0.52	0.57	40	6
374.755	$a^3D-z^1P^o$	1-1	840	27516	2.56	2.72	35	1
377.656	$a^3D-z^1P^o$	2-1	1045	27516	2.92	3.10	35	1
380.846	$y^3P^o-e^1F$	2-3	32283	58533	0.25	-	-	-
389.670	$y^1P^o-h^1D$	1-2	44568	70224	0.64	-	-	-
395.035	$a^3D-z^1D^o$	1-2	840	26147	1.60	1.88	30	3
398.259	$a^3D-z^1D^o$	2-2	1045	26147	1.83	2.18	30	3
406.498	$a^3F-z^1F^o$	4-3	8743	33336	0.71	0.87	33	4
437.493	$a^1D-z^1D^o$	2-2	3296	26147	6.76	8.05	30	3
446.527	$z^1F^o-e^1D$	3-2	33336	55725	1.27	1.38	40	6
512.321	$a^3F-z^1P^o$	2-1	8003	27516	0.98	1.04	35	1
519.642	$a^3P-z^1F^o$	2-3	14098	33336	0.24	0.29	33	4
540.277	$b^1D-z^1F^o$	2-3	14832	33336	0.61	0.74	33	4

атомы иттрия, находящиеся с равной вероятностью на каждом из этих уровней [6]. В то же время заселенность вышележащих уровней ничтожно мала. Более подробно этот вопрос, так же как и другие условия проведения эксперимента, ранее обсуждался в работе [6], поскольку исследования возбуждения атомных и ионных состояний иттрия осуществлялись в одном и том же цикле экспериментов.

Погрешность измерения относительных значений сечений находилась в пределах от 10% для наиболее интенсивных линий до 20% для малоинтенсивных. Абсолютные значения сечений определены с погрешностью от ± 25 до $\pm 35\%$ соответственно.

Результаты и их обсуждение. При регистрации эмиссионного оптического спектра, возбуждаемого моноэнергетичным пучком электронов с энергией 50 эВ в столкновениях с атомами иттрия, в области спектра 224–540 нм обнаружены 32 спектральные линии YII , возникающие в результате возбуждения синглетных уровней однозарядного иона иттрия. Почти для всех переходов зарегистрирована зависимость сечений возбуждения от энергии налетающих электронов в диапазоне энергий 0–200 эВ (оптические функции возбуждения, ОФВ).

Результаты измерений вместе с необходимой спектроскопической информацией представлены в табл. 1. Здесь даны длина волны λ , переход, вну-

треннее квантовое число J и энергия (отсчитанная от основного уровня однозарядного иона иттрия) нижнего E_{low} и верхнего E_{up} уровней, значения сечений возбуждения при энергии электронов 50 эВ Q_{50} и в максимуме ОФВ Q_{max} , положение максимума $E(Q_{\text{max}})$. Номера ОФВ в графе OEF соответствуют нумерации кривых на рис. 1. Все ОФВ на рисунке нормированы на единицу в максимуме, каждая кривая имеет индивидуальный нуль отсчета по оси ординат. Шкала по оси абсцисс логарифмическая, по оси ординат линейная.

Диаграмма синглетных состояний YII с исследованными переходами показана на рис. 2. Обращает на себя внимание значительное число интеркомбинационных переходов как с высоколежащих четных, так и с более низко расположенных нечетных уровней. Поскольку атом иттрия помещается в пятом периоде периодической системы элементов, наличие значительного числа интеркомбинационных переходов не является неожиданным. Для элементов, следующих за переходными, схема сложения моментов уже не соответствует LS -связи, как у более легких элементов. Вследствие этого ряд квантовых запретов фактически перестает действовать; для иттрия почти в полной мере сохраняют силу лишь правила отбора по четности и по ΔJ .

Помимо интеркомбинационных переходов с нарушением правила отбора только по мультиплетности у четырех интеркомбинационных переходов имеет место также нарушение правила отбора по $|\Delta L|$, устанавливаемого для электрических дипольных переходов в рамках LS -связи. При этом для двух переходов $\Delta L = \pm 2$ и еще для двух $\Delta L = -2$. Возможность таких переходов определяется тем, что, по меньшей мере, для одного из пары комбинирующих уровней имеет место смешивание конфигураций. Наиболее новая и детальная информация о спектре и энергетических уровнях YII содержится в работе [7], в которой исследованы спектры иттрия в области 100–4880 нм, возбуждаемые в лампе с полым катодом. Идентифицированы 1284 новые линии и установлены 174 новых уровня энергии. По сравнению с наиболее надежным предшествующим источником (компиляцией Мур [8]) в [7] не только внесены значительные дополнения, прежде всего за счет высокорасположенных уровней, но и уточнено положение многих низколежащих уровней. Для всех нечетных уровней, а также для четных с $E < 81000 \text{ см}^{-1}$ определены параметры смешивания конфигураций. Кроме того, на основании этих данных изменено отнесение к конфигурациям для трех ранее известных четных синглетных уровней f^1D_2 , g^1D_2 , h^1D_2 , переходы с которых рассматриваются в данной работе.

Для четырех упомянутых выше запрещенных переходов с $|\Delta L| = 2$ в табл. 2 приведен состав

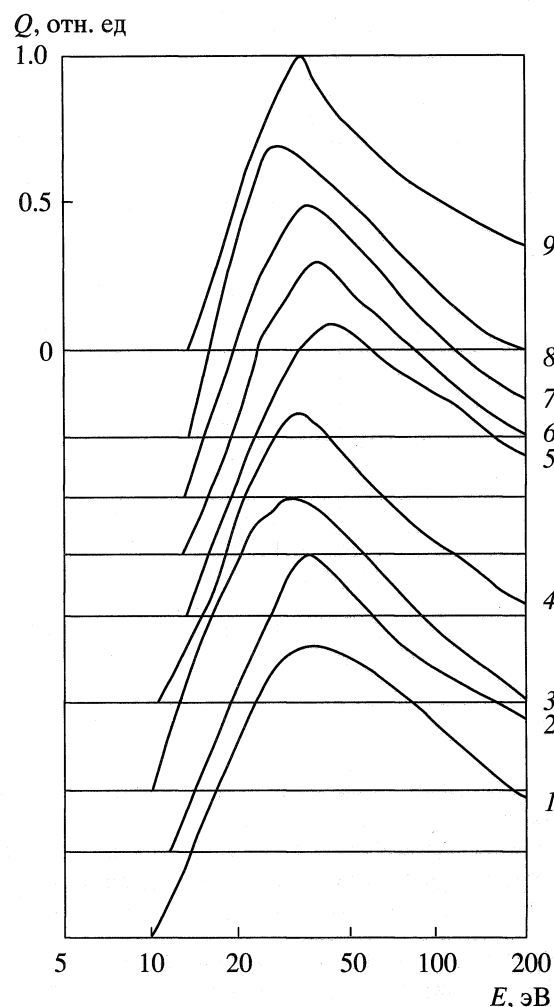


Рис. 1. Оптические функции возбуждения YII.

верхних и нижних уровней по данным работы [7]. Для первой компоненты указаны конфигурация, терм, внутреннее квантовое число J , энергия уровня и процентное содержание компоненты P , а для второй и третьей компонент – процентное содержание, конфигурация и терм. Как видно из этих данных, вполне чистым (однокомпонентным) является только нижний уровень $4d^2 a^3F_2$. Близок к чистому верхний синглетный уровень $4d5p z^1F_3^o$ с содержанием основной компоненты 97%. Для остальных уровней содержание примесных компонент достаточно велико, чтобы обеспечить вполне эффективные переходы в обход запретов, действующих для основной компоненты. Для каждого перехода в табл. 2 подчеркнуты те пары компонент, которые могут комбинировать без нарушения электродипольных запретов. Ранее в ряде работ (например [9, 10]) был сделан вывод о том, что учет смешивания конфигураций в теоретических расчетах сечений даже в приближении Борна существенно приближает теоретические зна-

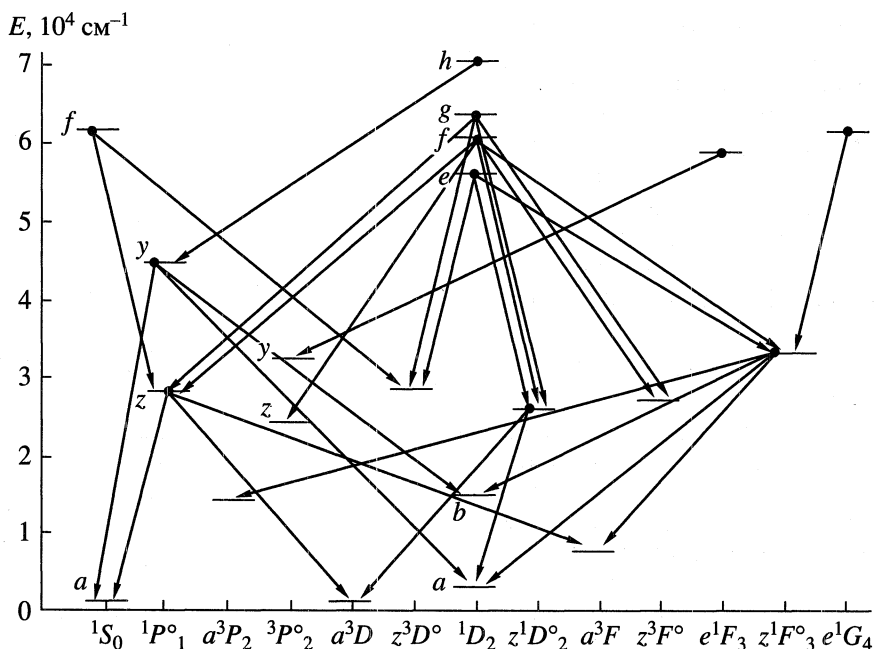


Рис. 2. Диаграмма синглетных состояний YII с исследованными переходами.

чения сечений к экспериментальным. Это дает основания ожидать, что удовлетворительные результаты могут быть получены и при расчете сечений возбуждения YII с учетом смешивания конфигураций (например в приближении Бете–Борна).

Экспериментальные данные о сечениях возбуждения спектральных линий Q_{ki} , представленные в табл. 1, могут быть использованы для определения сечений возбуждения энергетических уровней q_k . Последняя величина находит более широкое применение, чем Q_{ki} , и обычно является непосредственным результатом теоретических расчетов сечений. Связь между этими величинами устанавливается соотношением

$$q_k = \sum_i Q_{ki} - \sum_l Q_{lk} \equiv \Sigma Q_{50} - \Sigma Q', \quad (2)$$

в котором первая сумма учитывает конкуренцию излучательных переходов с уровня k на нижележащие уровни i (ветвление), а вторая – заселение уровня k каскадными переходами с вышележащих уровней l . В правой части тождества даны упрощенные обозначения этих сумм, систематически используемые в работах автора.

Поскольку $Q_{ki}/Q_{km} = A_{ki}/A_{km}$, где A_{ki} , A_{km} – вероятности спонтанных переходов, данные о значениях A_{ki} в ряде случаев могут быть использованы для уточнения расчетов q_k по соотношению (2). Как правило, точность и подробность измерения вероятностей переходов выше, чем сечений возбуждения, так как для измерения A_{ki} в основном используют газоразрядные источники излучения, интенсивность которых на несколько порядков выше, чем интенсивность излучения атомов в пе-

Таблица 2. Параметры переходов с $|\Delta L| = 2$

Нижние уровни				Верхние уровни					
Конфигурация, терм, J	$E_{low}, \text{см}^{-1}$	$P, \%$			конфигурация, терм, J	$E_{up}, \text{см}^{-1}$	$P, \%$		
		1	2	3			1	2	3
$4d5p z^3 D_1^0$	28595	76	$14 \ 4d5p^1 P^0$	$9 \ 5s5p^1 P^0$	$5s6s f^1 S_0$	61369	88	$10 \ 4d5d^1 S$	
$4d^2 a^3 F_2$	8003	100			$4d5p z^1 P_1^0$	27516	50	$25 \ 5s5p^1 P^0$	$23 \ 4d5p^3 D^0$
$4d5p y^3 P_2^0$	32283	87	$11 \ 5s5p^3 P^0$		$4d5d e^1 F_3$	58533	82	$8 \ 4d5d^3 G$	$8 \ 4d5d^3 D$
$4d^2 a^3 P_2$	14098	86	$10 \ 4d^2 1 D$		$4d5p z^1 F_3^0$	33336	97		

Таблица 3. Сечения возбуждения энергетических уровней YII и вклад каскадного заселения

Уровень	J	$E_{ур}, \text{см}^{-1}$	$\Sigma Q_{50}, 10^{-18} \text{см}^2$	$\Sigma Q', 10^{-18} \text{см}^2$	$q_k, 10^{-18} \text{см}^2$	$\Sigma Q'/\Sigma Q_{50}, \%$
$5s^2 a^1S$	0	0		29.2		
$5s6s f^1S$	0	61369	4.67			
$4d5s a^1D$	2	3296		24.0		
$4d^2 b^1D$	2	14832		1.52		
$4d6s e^1D$	2	55725	2.58			
$5p^2 f^1D$	2	60535	3.94			
$4d5d g^1D$	2	62497	2.38			
$5s5d h^1D$	2	70224	0.64			
$4d5d e^1F$	3	58533	0.25			
$4d5d e^1G$	4	63350	1.01			
$4d5p z^1P^o$	1	27516	22.3	6.57	15.7	29.4
$5s5p y^1P^o$	1	44568	18.7	0.64	18.1	3.42
$4d5p z^1D^o$	2	26147	10.2	2.96	7.24	29.0
$4d5p z^1F^o$	3	33336	7.96	3.46	4.50	43.5

ресекающихся пучках. Однако в случае YII ситуация оказывается неблагоприятной: даже в работе [11] данных о вероятностях переходов YII существенно меньше, чем полученных в настоящей работе данных о сечениях. Поэтому при проведении расчетов q_k использована только собственная информация о сечениях из табл. 1.

Результаты расчета q_k при энергии электронов 50 эВ представлены в табл. 3, где указан также процентный вклад каскадного заселения $\Sigma Q'/\Sigma Q_{50}$ в полные сечения возбуждения уровней ΣQ_{50} (т.е. в сечения, учитывающие как прямое возбуждение уровня k электронным ударом из исходного состояния, так и его каскадное заселение). Естественно, для основного уровня a^1S_0 и низколежащих метастабилей a^1D_2 и b^1D_2 могли быть учтены только каскадные переходы. Для уровней, расположенных выше 40000см^{-1} , напротив, каскадные переходы не могли быть зарегистрированы, поскольку они расположены в ИК-области и при этом имеют малые значения сечений.

Сравнительно полная информация получена для нечетных уровней. Как видно из табл. 3, для z -уровней вклад каскадного заселения составляет 30–40% от полных сечений возбуждения. Малое значение каскадного вклада для уровня $y^1P_1^o$, по-видимому, является следствием его высокого расположения и вызвано резким возрастанием трудностей регистрации каскадных переходов. Обращает на себя внимание уровень e^1F_3 , с которого зарегистрирован единственный переход, причем запрещенный правилами отбора по мультиплетности и по ΔL . Анализ показал, что с этого уровня происходит значительно более интенсивный раз-

решенный переход на уровень $z^1D_2^o$ с длиной волны 308.685 нм. Однако он блендирован обширной системой полос гидроксидов, интенсивность которой велика даже при давлении остаточных газов менее 10^{-5} Тор. Эти полосы возникают в результате диссоциативного возбуждения при столкновениях $e\text{-H}_2\text{O}$ [12]; пары воды в металлических вакуумных системах присутствуют практически всегда и для их удаления необходим длительный прогрев всей вакуумной системы с применением сверхвысоковакуумной откачки.

Как указано в предыдущем разделе, атомы иттрия до соударения с электронами находятся на четных уровнях $4d5s^2 a^2D_{3/2, 5/2}$. Правила отбора по четности для излучательных электрических и магнитных мультипольных переходов являются абсолютно строгими [13]. Однако в случае переходов под действием электронного удара отсутствуют абсолютные запреты на комбинирование любой пары начальных и конечных состояний, поскольку действие налетающего электрона на атом может рассматриваться как возмущение, включающее в себя электрические и магнитные взаимодействия различной мультипольности, а также обменное взаимодействие. Обычно при возбуждении электронным ударом атомных уровней, четность которых совпадает с четностью исходного состояния, сечения оказываются почти на два порядка меньше, чем при возбуждении с изменением четности. Как показывают данные табл. 3, в процессах возбуждения с одновременной ионизацией это различие уменьшается и составляет около одного десятичного порядка. В заключение необходимо отметить, что метод протяженных пересекающихся пучков позволяет получить довольно подробную информацию о возбуждении одноза-

рядного иона иттрия, даже несмотря на наличие в спектре значительного числа интенсивных линий атома иттрия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кученев А.Н., Смирнов Ю.М. Возбуждение триплетных состояний ScII из основного состояния атома скандия // Журн. прикл. спектр. 1992. Т. 56. № 1. С. 18.
2. Смирнов Ю.М. Возбуждение синглетных уровней LaII в столкновениях электронов с атомами лантана // ТВТ. 1999. Т. 37. № 6. С. 858.
3. Smirnov Yu.M. Excitation Cross-Sections of the Praseodymium Atom // J. Phys. II France. 1994. V. 4. № 1. P. 23.
4. Kuchenev A.N., Smirnov Yu.M. Excitation Cross-Sections for Electron-Impact Excitation of CaI and CaII // Phys. Scripta. 1995. V. 51. № 5. P. 578.
5. Кученев А.Н., Самсонова Е.А., Смирнов Ю.М. Сглаживание потенциального рельефа в протяженных пучках электронов низкой энергии // Автометрия. 1990. № 5. С. 109.
6. Смирнов Ю.М. Возбуждение дублетных состояний атома иттрия электронным ударом // ТВТ. 2000. Т. 38. № 2. С. 181.
7. Nilsson A.E., Johansson S., Kurucz R.L. The Spectrum of Singly Ionized Yttrium, YII // Phys. Scripta. 1991. V. 44. № 3. P. 226.
8. Moore C.E. Atomic Energy Levels. Washington: NBS Circ. 467. 1952. V. 2.
9. Шимон Л.Л. О согласии теоретических и экспериментальных значений сечений возбуждения атомов тулия // Опт. и спектр. 1983. Т. 54. № 5. С. 772.
10. Смирнов Ю.М. Сечения возбуждения $^4D^o$ -уровней атома кобальта электронным ударом // Журн. прикл. спектр. 1997. Т. 64. № 5. С. 561.
11. Корлисс Ч., Бозман У. Вероятности переходов и силы осцилляторов 70 элементов. М.: Мир, 1968. С. 529.
12. Кученев А.Н., Смирнов Ю.М. Диссоциативное возбуждение гидроксила при столкновениях медленных электронов с молекулами H_2O . В кн.: Плазмохимия-89 / Под ред. Полака Л.С. М.: Изд-во ИНХСАН, 1989. С. 227.
13. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Физматгиз, 1963. С. 391.