

Se³⁺ viengubos jonizacijos elektronais tyrimas

Investigation of single ionization by electron impact for Se³⁺

Saulius Pakalka, Sigitas Kučas, Šarūnas Masys, Aušra Kynienė, Valdas Jonauskas
Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius
saulius.pakalka@tfai.vu.lt

Selenas (Se) yra svarbūs astrofizikiniuose tyrimuose, nes šis cheminis elementas buvo aptiktas kosminiuose ūkuose ir mažo metalingumo žvaigždėse. Taip pat, pastaruoju metu susidomėjimas selenu yra išaugęs dėl nepaprastos savybės – elektrinio laidumo padidėjimo jį apšvietus ir sėkmingo jo taikymo didinant saulės fotovoltinių elementų našumą.

Darbo tikslas yra ištirti seleno jono pagrindinės konfigūracijos [Ar] 3d¹⁰ 4s² 4p viengubą jonizaciją elektronų smūgiais, nagrinėjant šuolius tarp lygmenų. Vienguba elektrono smūginė jonizacija yra tas procesas, kuris dominuoja jonizacijos procesuose.

Pilnas viengubos jonizacijos skerspjūvis $\sigma_{ik}(\epsilon)$ prie energijos ϵ išreiškiamas per tiesioginę ir netiesioginę dalis:

$$\sigma_{ik}(\epsilon) = \sum_k \sigma_{ik}^{DI}(\epsilon) + \sum_{jk} \sigma_{ij}^{EA}(\epsilon) B_{jk} \quad (1)$$

čia $\sigma_{ik}^{DI}(\epsilon)$ yra tiesioginės viengubos smūginės jonizacijos elektronu skerspjūvis. $\sigma_{ik}^{DI}(\epsilon)$ sužadavimo elektronais skerspjūvis. $\sigma_{ij}^{EA}(\epsilon)$, padaugintas iš šakojimosi koeficiento B_{jk} . Indeksas i žymi lygmenį iš kurio vyksta jonizacijos procesas, indeksas k atitinka jonizuoto jono lygmenį, o indeksas j – pradinio jono sužadinto lygmens, iš kurio vyksta autojonizacijos šuolis, indeksą.

Skaičiavimai buvo atlikti naudojant FAC (Flexible Atomic Code) programą [1], kurioje realizuotas Dirako – Foko – Sleiterio metodas. Iškraipytųjų bangų metodas naudotas gaunant sužadimų ir jonizacijos elektronais skerspjūvius. Netiesioginio proceso tyrime atsižvelgta į radiacinio gesinimo įtaką. Ankstesnių tyrimų metu nagrinėjant volframo jonus su atviru 4f sluoksniu pagrindinėje konfigūracijoje buvo nustatytas didelis sužadimų į aukštesnius sluoksnius indėlis netiesioginiam jonizacijos elektronais procesui [2]. Šiame tyrime taip pat pasirinkti sužadiniai į sluoksnius su pagrindiniu kvantiniu skaičiumi $n \leq 25$ ir orbitiniu skaičiumi $l \leq 6$. Išorinio sluoksnio sužadimai elektronu nebuvo nagrinėti, nes susidariusios konfigūracijos negali suirti vykstant Ožė šuoliams.

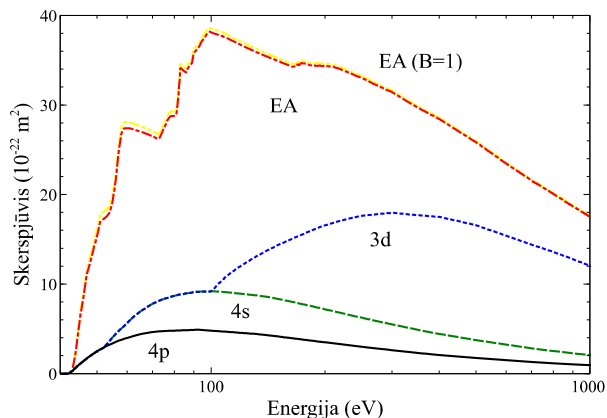
Iš 1 pav. matosi, kad netiesioginės jonizacijos indėlis yra didesnis nei tiesioginio proceso ties skerspjūvių maksimumu. Didėjant elektrono energijai netiesioginio proceso įtaka mažėja. Netiesioginės jonizacijos procesui didžiausią indėlį duoda 3d → 4p ir 3d → 4d sužadiniai. Jų indėlis sudaro apie pusę netiesioginio proceso skerspjūvio, kurio maksimumas susidaro ties 100 eV.

Didžiausią indėlį tiesioginės jonizacijos procesui duoda jonizacija iš 3d sluoksnio. Reikia pastebėti, kad 4p sluoksnio jonizacijos slenkstis yra mažesnis nei 4s

sluoksnio. 3d sluoksnio jonizacijos slenkstis yra apytiksliai ties 100 eV energija, kaip ir 4p ir 4s sluoksnių jonizacijos skerspjūvių maksimumai. Bendras tiesioginio jonizacijos proceso maksimumas yra ties 300 eV.

Didžiausias pilnas jonizacijos skerspjūvis (1 pav. geltona linija) yra gautas, kuomet šakojimosi koeficientas $B_{jk} = 1$. Žemiau esanti raudona linija yra mūsų gautas pilnas sužadavimo jonizacijos skerspjūvis su įvertinta radiacinio gesinimo proceso įtaka. Matome, kad radiacinio gesinimo indėlis nėra didelis.

Gautos jonizacijos skerspjūvių vertės gerai sutampa su eksperimento rezultatais [3]. Tai leidžia daryti išvadą, kad atliekant Se³⁺ jono viengubos jonizacijos procesų tyrimus būtina atsižvelgti į sužadimus į aukštesnius sluoksnius $n \leq 25$, o radiacinio gesinimo įtaka yra neįreikiama. Tuo tarpu, ankstesniame tyrime [4], nagrinėjant šuolius tarp konfigūracijų pseudorelatyvistiniame artinyje, gautos skerspjūvių vertės viršija eksperimentines vertes elektrono energijos didesnėms už 200 eV.



1 pav. Jonizacijos skerspjūviai: EA ($B=1$) (geltona) – pilnas jonizacijos skerspjūvis, kai šakojimosi koeficientas lygus 1; EA (raudona) – pilnas jonizacijos skerspjūvis su radiaciniu gesinimu. Tiesioginės jonizacijos indėlis iš 3d, 4s ir 4p sluoksnių pažymėtas prie atitinkamų kreivių.

Reikšminiai žodžiai: jonizacija, selenas, plazma, jonizacijos skerspjūvis.

Literatūra

- [1] M. F. Gu, Can. J. Phys. **86**, 675 (2008).
- [2] A. Kynienė, Š. Masys and V. Jonauskas, Phys. Rev. A **91**, 062707 (2015).
- [3] G. A. Alnawashi, K. K. Baral, N. B. Aryal, C. M. Thomas ir R. A. Phaneuf, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **47**, 105201 (2014).
- [4] M.S. Pindzola and S.D. Loch, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **49**, 125202 (2016).