

A HÉLIUM SZÖGFÜGGŐ AUTOIONIZÁCIÓS SPEKTRUMAI KIÉRTÉKELÉSÉNEK NÉHÁNY EREDMÉNYE

SOME RESULTS OF THE EVALUATION OF THE ANGLE- DEPENDENT AUTOIONIZATION SPECTRA OF HELIUM

Paripás Béla¹ és Palásthy Béla²

¹PhD egyetemi tanár, ²PhD egyetemi docens

Miskolci Egyetem, Fizikai Intézet, 3515 Miskolc-Egyetemváros

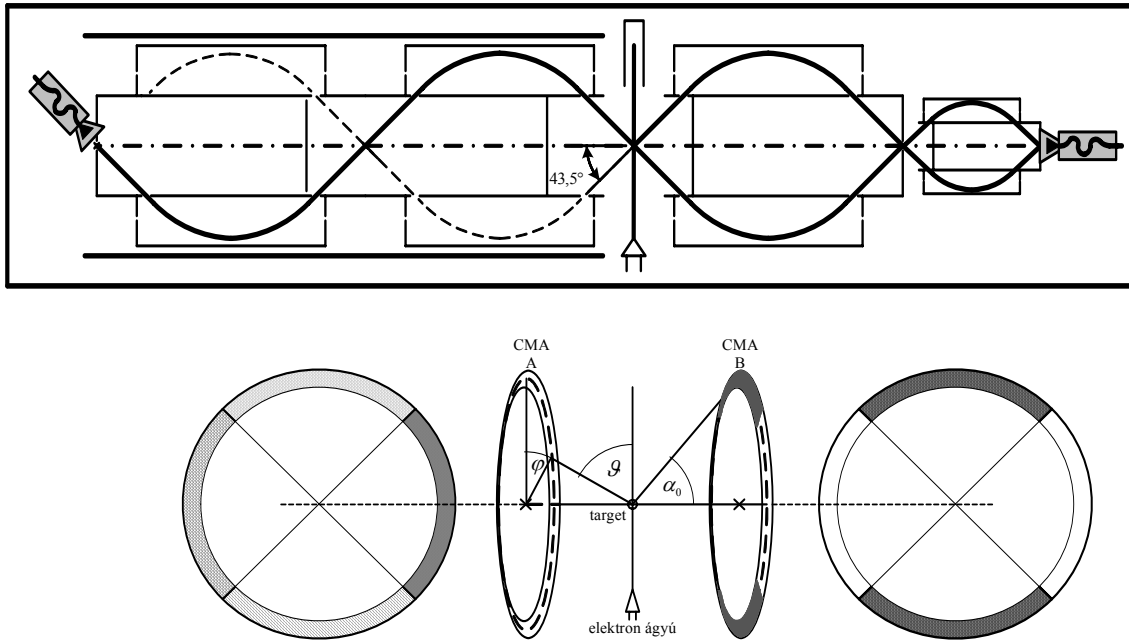
Abstract: *In this work – on our way towards the experimental study of the state-to-state interference – we have dealt with the particular question of interference between the direct and indirect ionization of He by electron impact. The measured electron spectra include both the autoionizing and scattered electron peaks. The primary energy values were chosen in the neighbourhood of the critical energy of the interference between the $2s^2(^1S)$ and $2p^2(^1D)$ autoionizing resonances in such a way that the groups of the autoionizing electron peaks and the scattered electron peaks are well-separated and hereby their evaluation is more reliable. On the basis of a computer fitting procedure we have determined the parameters of the Fano-type peaks below and above the critical energy.*

BEVEZETÉS

A hélium autoionizációs állapotait, azok lehetséges interferenciáit már kb. két éve tanulmányozzuk a Fizikai Intézet Elektronspektrometriai laboratóriumában. A méréseinkben az autoionizációs állapotot elektron lövedékkel keltettük, a két végállapotú elektront (szórt- ill. autoionizációs elektron) pedig két elektronspektrométerrel koincidenciában detektáltuk ((e,2e) mérések) [1,2]. A munkánk során nyilvánvalóvá vált, hogy az interferencia effektusokat pontosabban kimutathatnánk, ha (1) a spektrométereink a mérés során kisebb – de mérés közben változtatható – szögtartományt „látnának” (ellenkező esetben a nagy szögtartományban az interferencia effektusok kiátlagolódnak) és ha (2) elvégezzük a spektrumok számítógépes kiértékelését. Az előző konferencia közleményünkben bemutattuk [3] e két cél érdekében végzett munkánkat, tehát a spektrométer rendszer négy szektorra bontását, a szektorokban felvett első spektrumokat, valamint a számítógépes kiértékelésük matematikai formuláit. Jelen cikkben a kiértékelés azon eredményeit mutatjuk be, amelyeket a direkt és indirekt folyamatok interferenciáját érintik és az állapot-állapot interferencia újabb fajta mérésére történő felkészülést jelentik [4].

A SPEKTRUMOK FELVÉTELÉNEK ÉS KIÉRTÉKELÉSÉNEK FŐBB JELLEMZŐI

Az előző konferencia közleményünkben [3] ezeket a jellemzőket már részletesen bemutattuk, itt csak összefoglaljuk. A mérőrendszerünk két, közös tengelyen lévő, hengertükör típusú (CMA = Cylindrical Mirror Analyser) elektrosztatikus spektrométerből áll (1. ábra). A cikkben bemutatott spektrumok mindegyikét az ábrán bal oldalt lévő „A” jelű dupla (azaz két „doboz” típusú analizátor ütemből álló) spektro-



1. ábra: Az (e,2e) koincidencia spektrométer-rendszer vázlatja és bemeneti geometriája

méterrel vettük fel, amelynek energia felbontása (FWHM) 200 eV-en 0,55%. A jelen mérésekben használt belépési szögtartományokat az ábra bal alsó részén különböző csíkozások jelzik: előre ($\varphi_0=0^\circ$, $\varphi=315^\circ-45^\circ$), felfelé ($\varphi_0=90^\circ$, $\varphi=45^\circ-135^\circ$), hátra ($\varphi_0=180^\circ$, $\varphi=135^\circ-225^\circ$) és lefelé ($\varphi_0=270^\circ$, $\varphi=225^\circ-315^\circ$). Kiszámítható, hogy közepes belépési szögre ($\alpha_0=43,5^\circ$) a következő szórési szögtartományok adódnak: az előre szektorra $46,5^\circ-60,9^\circ$, a fölfelé és lefelé szektorokra $60,9^\circ-119,1^\circ$, a hátra szektorokra pedig $119,1^\circ-133,5^\circ$. Összességében megállapítható, hogy az előre és hátra szektorok szórési szögtartománya sokkal kisebb ($\Delta\vartheta=14,4^\circ$), mint a fölfelé és lefelé szektoroké ($\Delta\vartheta=58,2^\circ$).

A hélium legkisebb energiájú és egyúttal legfontosabb autoionizációs állapotai az 57,83 eV, 58,31 eV, 59,91 eV és 60,14 eV gerjesztési energiájú (E_{ai}) $2s^2(^1S)$, $2s2p(^3P)$, $2p^2(^1D)$ és $2s2p(^1P)$ állapotok. Ezek mindegyike ugyanabba a He^+1s^{-1} végállapotba bomlik ($E_F=24,59\text{eV}$), a kibocsájtott autoionizációs elektronok energiái ($(E_{ej}=E_{ai}-E_F)$ tehát rendre 33,24 eV, 33,72 eV, 35,32 eV és 35,55 eV. A természetes vonalszélességek (Γ) pedig 138, 8, 72 és 38 meV, amelyek sokkal kisebbek (kivéve talán a legkisebb energiájú $2s^2(^1S)$ állapotot) a spektrométerek felbontásánál.

Ahogy a korábbi cikkeinkben is leírtuk, elsősorban a $2s^2(^1S)$ és $2p^2(^1D)$ állapotok állapot-állapot interferenciájára koncentrálunk, amely 93,15 eV kritikus primer energián következhet be. Ekkor az autoionizációs állapotok keltéséhez tartozó szórési csúcsok ($E_{sc} = E_0 - E_{ai}$) és a bomlásuk során kibocsájtott elektronok csúcsainak átfedése a legnagyobb. A direkt és indirekt folyamatok interferenciáját célszerű olyan ehhez közeli primer energiákon vizsgálni, ahol a kibocsájtott (ej) és szórt (sc) elektronokhoz tartozó csúcsok már jól elkülönülnek. Ez 89 eV, ill. 97 eV környékén következik be. Az első esetben a szórt elektronokhoz tartozó csúcsok az autoionizációs csúcsok kis energiás oldalán vannak, a másik esetben fordítva. Az

irodalomban számos mérés található az általunk vizsgált energia és szögtartományra is [5-7]. A méréseinkben három–három szórt- ill. kibocsájtott elektron csúcsot kb. hasonló intenzitásúnak (de eltérő szögeloszlásúnak) várunk. A kivétel a 2s2p(³P) csúcs, amely küszöb környékén még dominál, de ebben az energiatartományban már elég kicsi (20-30 %).

Az autoionizációs rezonanciák környékén a hatáskeresztmetszetet (TDCS) az alábbi formába lehet írni [8]:

$$\frac{d^3\sigma}{dE d\Omega_a d\Omega_b} = f(\vec{k}, \vec{K}) + \sum_{\mu=1}^4 \frac{a_{\mu}(\vec{k}, \vec{K}) \varepsilon_{\mu} + b_{\mu}(\vec{k}, \vec{K})}{\varepsilon_{\mu}^2 + 1} \quad \text{ahol} \quad \varepsilon_{\mu} = \frac{E - E_{\mu}}{0.5\Gamma_{\mu}}. \quad (1)$$

Az f paraméter a direkt ionizációs hatáskeresztmetszet, amely az energiának lassan változó függvénye. Az a_{μ} és b_{μ} paraméterek a kibocsájtott elektron lendület ($\vec{k}$) és lendület átadás ($\vec{K}$) függő Shore-paraméterek, tehát rögzített kinematikához tartoznak. Erősen szögfüggőek tehát (még adott primer energián is), emiatt a különböző szögtartományainkra jellemző csúcsalakok jelentősen eltérnek.

Ebben a munkában nem célunk a hatáskeresztmetszetek pontos meghatározása, viszont tekintetbe kell vennünk a szórt elektronok járulékát is. Emiatt a modellspektrumban az elektron intenzitás energia függését

$$I(E) = I_d(E) + \sum_{\mu=1}^4 I_{\mu} \frac{S_{\mu} \varepsilon_{\mu} + 1}{\varepsilon_{\mu}^2 + 1} + \sum_{\nu=1}^4 I_{\nu} \frac{S_{\nu} \varepsilon_{\nu} + 1}{\varepsilon_{\nu}^2 + 1}, \quad (2)$$

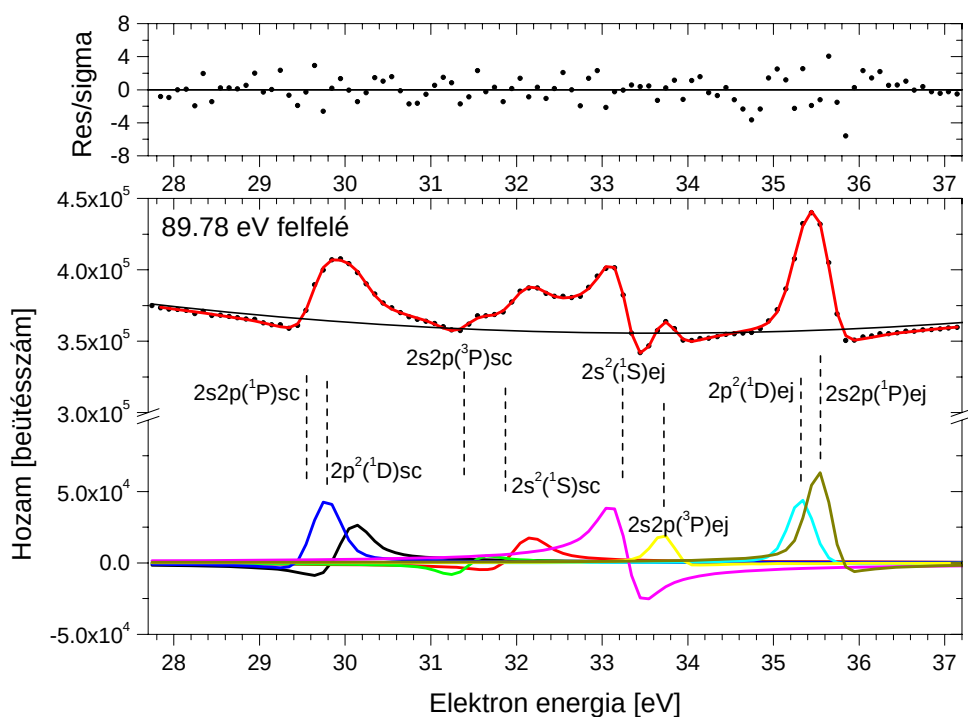
alakúnak gondoljuk, ahol a második összegzés a négy autoionizációs állapot keletkezésekor szóródott elektron csúcsokra vonatkozik. Ha az elektronokat nagyobb szögtartományból detektáljuk, a $\vec{k}$ és $\vec{K}$ értékek, és ezáltal a Shore-paraméterek értékei, még egyetlen spektrum felvétele közben is sokat változhatnak. A nagyon különböző paraméterű csúcsok szuperpozíciójával adódó csúcsok megillesztése ezzel az egyenlettel problematikus is lehetne. Ennek ellenére nekünk elég jól sikerültek ezek az illesztések.

EREDMÉNYEK, DISZKUSSZIÓ

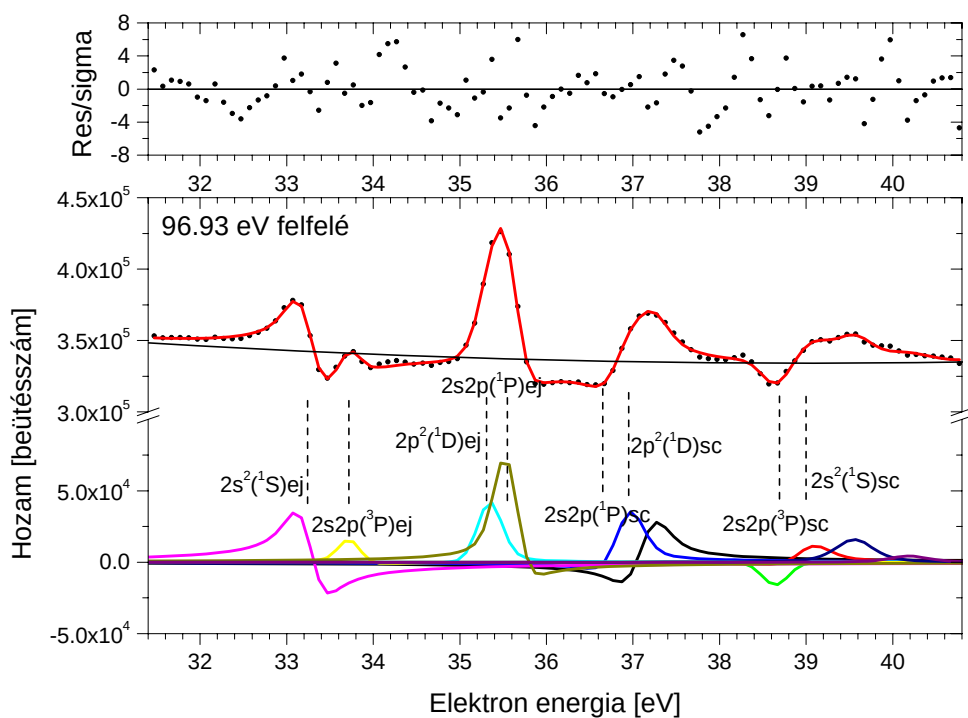
A kísérleti spektrumok megillesztése egy IGOR Pro programmal történt. Az illesztés során a fenti formulákkal szintetizált spektrumot konvolálni kell a Gauss-görbe formájú spektrométer függvényével is, amelynek a szélessége az elektron energiának lineáris függvénye. Ezen túlmenően a szórt elektron csúcsokat a primer nyaláb kb. 0.35 eV energia kiszélesedésével is konvolálni kell. Az illesztés akkor lenne igazán megbízható, ha a (2) egyenlet 4+4 csúcsa jól szeparált lenne. Sajnos nem ez a helyzet, mert a 2p²(¹D) és 2s2p(¹P) autoionizációs csúcsok energia távolsága (0.235 eV) egy picit kisebb, mint a kísérletek során használt dupla spektrométer energia felbontása (35 eV-nél kb. 0.28 eV). Ez a tény az illesztés pontosságára erős korlátot jelent. Végeredményben e két csúcs relatív arányát tipikusan 10% pontossággal, a hozzájuk tartozó szórt csúcsokét pedig (az extra kiszélesedésük miatt) csak 20% pontossággal tudtuk megbecsülni.

Az $I_d(E)$ háttérrel kvadrátikus függvényvel illesztettük. Minden csúcshoz 4 paraméter (I , S , E , Γ) tartozik, közülük a Γ Lorentz szélességeket és a 4 autoionizációs csúcs energiáját az előző fejezetben megadott értékeken rögzítettük.

E cikk terjedelme nem teszi lehetővé, hogy bemutassuk mind a három szögtartományon elvégzett mérőorozatunkat, ezért a továbbiakban a “felfelé” szektorra koncentrálnunk. A 2. és 3. ábrák egy-egy ilyen a spektrumot mutatnak kb.



2. ábra: A “felfelé” szektorban mért elektron spektrum 89,78 eV primer energián és annak legjobb illesztése



3. ábra: Ugyanaz, mint a 2. ábra, de 96,93 eV primer energián mérve

3,5 eV-vel a kritikus energia (93,15eV) alatt és fölött, ahol a várakozásaink szerint a kibocsájtott és szórt elektronokhoz tartozó csúcsok már jól elkülönülnek.

A két spektrum autoionizációs része (kb. 32,5-36 eV) nagyon hasonló. A nagy különbség abban van, hogy a szórt elektronokhoz tartozó csúcsok a két ábrán kb. 7,2 eV-vel eltolódtak egymáshoz képest. Azaz az autoionizációs rész kis energiás oldaláról (kb. 29-32,5 eV) a nagy energiás oldalra (kb. 36,5-40 eV). Az is látszik, hogy kibocsájtott és szórt elektronokhoz tartozó csúcsok elkülönülése nem tökéletes, mivel a 2. ábrán a $2s^2(^1S)$ szórt és autoionizációs csúcsok egymásra csúsztak, mert a Fano-interferencia egymás felé tolta őket. (Emiatt később az előre és hátra szektorok esetén ezen a kis energiás oldalon 2 eV-vel kisebb primer energián mértünk.)

Az ábrákon a spektrumok legjobb illesztésének az eredménye is látható, a spektrum komponenseket az ábrák alsó részén külön is bemutatjuk. Láthatjuk, hogy a csúcsok aszimmetriájáért felelős Fano-interferencia a csúcs egyik oldalán mindig destruktív. Ez azt eredményezheti, hogy itt a teljes elektron intenzitás a direkt folyamat által okozott háttér alá csökken. Ez az interferenciának természetes következménye, és semmiképpen sem jelenti azt, hogy az indirekt folyamathoz negatív elektron intenzitás tartozna. A destruktív interferencia különösen szembeötlő a 3. ábrán a 36-36,5 eV-es tartományban, ahol a különböző csúcsok destruktív oldalai éppen egybeesnek.

Az illesztés jóságát az ábrák tetején a szigma egységekben megadott reziduálokkal jellemezzük. (A reziduál a mért és a szintetizált adatok különbsége.) A reziduál spektrumban helyenként nagy, a véletlen hibákkal nem magyarázható különbségek is vannak. Ezeknek a szisztematikus hibáknak az oka, a nem Gauss-szerű spektrométer függvény mellett, a nem teljesen rögzített kinematika lehet. A reziduál spektrum nem különbözik lényegesen a szórt- és az autoionizációs tartományokban.

A 3. ábra nagy energiás vége nem magyarázható meg csupán a $2s2p(^3P)$ and $2s^2(^1S)$ szórt csúcsokkal, a kielégítő illeszkedés eléréséhez két extra csúcsot is be kellett illesztenünk 40 eV környékére. Ezek a csúcsok [5] alapján a hélium magasan fekvő $2pnp(^1D)$ ($n=3,4,5,\dots$) autoionizációs állapotainak bomlásakor keletkeznek a 39-41 eV tartományban.

Autoioniz./ szórt csúcs	89.78(5) eV			96.93(5) eV		
	E (eV)	S	I_μ/I_4	E (eV)	S	I_μ/I_4
$2s^2(^1S)$	33.24	-11(2)	0.09(8)	33.24	-12(2)	0.05(3)
$2s2p(^3P)$	33.72	-0.17(4)	0.26(3)	33.72	0.29(12)	0.23(3)
$2p^2(^1D)$	35.32	-0.27(10)	0.75(4)	35.32	-0.18(10)	0.68(5)
$2s2p(^1P)$	35.55	-0.41(2)	1	35.55	-0.42(3)	1
$2s2p(^1P)$	29.71(5)	0.11(10)	0.8(1)	36.88(5)	-0.14(10)	0.7(2)
$2p^2(^1D)$	29.93(5)	2.3(10)	0.43(5)	37.03(5)	2.0(5)	0.5(1)
$2s2p(^3P)$	31.36(5)	1.1(5)	0.04(3)	38.63(3)	0.0(5)	-0.2 (2)
$2s^2(^1S)$	32.03(5)	0.9(2)	0.31(3)	39.00(2)	0.4(2)	0.4(2)

1. táblázat: A “felfelé” szektorban mért csúcsok paramétereinek átlagai (és szórásai).

Az E, S és I paraméterek jelentése a (2) egyenlet szerinti

A „felfelé” szektorban nem csak a 2. és 3. ábrán bemutatott mérések történtek, hanem mind a kritikus energia alatt, mind fölötté, több (5-6) mérés is történt. Az ezekből meghatározott csúcs-paraméterek átlagait (és szórásait) az 1. táblázatban adjuk meg. A szórásokat az egyedi illesztések során adódó szórásokból és a különböző illesztések során kapott értékek középértékének szórásából kombináltuk össze.

A táblázat azt mutatja, hogy - bár az illesztés minősége a kétféle csúcsra kb. egyforma - a szórt csúcsok paramétereinek hibája általában mégis nagyobb, mint az autoionizációsoké. Ez azzal magyarázható, hogy a szórt csúcsok nagyobb Gauss-szélessége a csúcs egyéb paramétereit kevésbé meghatározhatóvá teszi.

ÖSSZEGZÉS ÉS KONKLÚZIÓK

Megmértük és számítógépes illesztéssel kiértékeljük a hélium elektron gerjesztéssel kiváltott autoionizációs spektrumait. A méréseket a hélium $2s^2(^1S)$ és $2p^2(^1D)$ autoionizációs állapotainak interferenciájához tartozó kritikus primer energia (93,15 eV) alatt és fölött (89,78 eV-en ill. 96,93 eV-en) végeztük, ahol a kibocsájtott és szórt elektronokhoz tartozó csúcsok már jól elkülönülnek. A cikkben megadjuk ezeknek a csúcsoknak az egyik szögtartományra („felfelé”) meghatározott paraméter értékeit. Ezek általában összhangban vannak az irodalmi értékekkel, de közvetlenül nem hasonlíthatók velük össze, mivel más energia- és szögtartományon lettek mérve. Viszont a későbbiekben nagy segítségünkre lehetnek az említett két állapot kritikus primer energián várt állapot-állapot interferenciájának tanulmányozása során.

Az is bebizonyosodott, hogy a Fano-interferencia miatt a csúcsok teteje nem a nominális energia értéknél van, attól tipikusan 0,1 eV-rel eltér. Ezért a spektrométer rendszerünk energia kalibrációjának hibája az autoionizációs csúcsok számítógépes illesztése nélkül 0,1 eV alá nem csökkenthető.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A kutató munka a Miskolci Egyetem stratégiai kutatási területén működő Mechatronikai és Logisztikai Kiválósági Központ keretében valósult meg.

HIVATKOZÁSOK

- [1] PARIPÁS B. és PALÁSTHY B.: **A hélium autoionizációs állapotai közötti interferencia (e,2e) kísérleti vizsgálata**, Miskolci Egyetem Közleményei Multidiszciplináris Tudományok, 4. kötet (2014) 1 sz. 59.
- [2] B. PARIPÁS, B. PALÁSTHY and G. PSZOTA: **Experimental (e,2e) study of state-to-state interference between autoionizing states of He**, European Physical Journal D, DOI: 10.1140/epjd/e2014-50635-y (2014)
- [3] PARIPÁS, B. és PALÁSTHY: **A Hélium autoionizációs spektrumainak szögfüggő felvétele és számítógépes kiértékelése**, Multiscience – XXIX. microCAD International Multidisciplinary Scientific Conference, C2: Natural Sciences, ISBN 978-963-358-061-5, University of Miskolc (C2/2) (2015)

- [4] B. PARIPÁS, B. PALÁSTHY and M. BÉRES: **Experimental study on the interference of autoionizing states of He**, Nuclear Instruments & Methods in Physical Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 10.1016/j.nimb.2015.10.044, Vol. 369C. (2016) 34-39.
- [5] ODA, N., TAHIRA, S., NISHIMURA, F. and KOIKE, F.: **Energy and angular distribution of electrons ejected from autoionizing states in helium by electron impact**, Phys. Rev. A 15 (1977) 574.
- [6] MCDONALD, D. G. and CROWE, A.: **Ejected electron spectra from the vicinity of the $2p^2(^1D)$ and $2s2p(^1P)$ autoionizing states of helium**, J. Phys. B 25 (1992) 2129.
- [7] MCDONALD, D. G. and CROWE, A.: **Electron impact excitation-autoionization of the $2s^2(^1S)$ and $2s2p(^3P)$ states of helium**, J. Phys. B 25 (1992), 4313.
- [8] SHORE, B. W.: **Scattering theory of absorption-line profiles and refractivity**, Rev. Mod. Phys. 39 (1967), 439.