

Воспользуемся данными работы [11], где были рассчитаны диаграммы молекулярных орбиталей для различных зарядовых состояний системы $Ne^{q+}-Ne$ ($q = 0, 2, 4$). Заполнение вакансии на $2p\pi$ -уровне может происходить с орбиталей $3p\sigma$ (на орбитали два электрона), $3d\sigma$ (два электрона), $3d\pi$ (четыре электрона). Мы предполагаем, что орбитали $3s\sigma$, $3p\pi$ и $3d\delta$ не содержат электронов, так как формируются при больших межъядерных расстояниях из незаполненных уровней. Орбиталь $4f\sigma$ опустошена переходами электронов в континуум. Таким образом, имеется шесть вариантов начальных состояний для оже-переходов: $3p\sigma^2-2p\pi\varepsilon$ (буквой ε обозначен улетающий электрон), $3d\sigma^2-2p\pi\varepsilon$, $3d\pi^2-2p\pi\varepsilon$, $3p\sigma 3d\sigma-2p\pi\varepsilon$, $3p\sigma 3d\pi-2p\pi\varepsilon$ и $3d\sigma 3d\pi-2p\pi\varepsilon$. В дальнейшем для обозначения канала оже-распада будем использовать начальные состояние. Энергии оже-переходов E_i рассчитывались как разность энергий соответствующих орбиталей $E_i(R) = E_1(R) - E_2(R) - E_3(R)$. Здесь $E_1(R)$ — энергия орбитали, на которую происходит переход электрона, $E_2(R)$ — энергия орбитали, с которой идет переход, $E_3(R)$ — энергия орбитали, с которой электрон вылетает в континуум.

Вероятность оже-перехода в единицу времени может быть получена как

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \iint \chi_f^* \phi_f^* \frac{e^2}{r_{1,2}} \chi_i \phi_i d\tau_1 d\tau_2 \right|^2,$$

где χ_i, ϕ_i — одноэлектронные волновые функции каждого из двух электронов в атоме, находящихся на возбужденных уровнях, χ_f — волновая функция электрона на $2p\pi$ -орбитали, ϕ_f — волновая функция оже-электрона, т.е. свободного электрона, покидающего атом. Оператор $\frac{e^2}{r_{1,2}}$ описывает кулоновское взаимодействие двух электронов. Для двух электронов с одинаковым направлением спина учитывались прямая и обратная амплитуды переходов и их интерференция. Далее проводилось суммирование вероятностей перехода из состояний с различным спином и проекцией момента. В качестве волновых функций стационарных состояний электрона использовались водородоподобные волновые функции, при этом эффективный заряд Z_i менялся при изменении межъядерного расстояния в соответствии с изменением энергии орбитали. Выбор водородоподобных волновых функций оправдан тем, что рассматриваемые переходы происходят вблизи предела объединенного атома, и электроны находятся в поле значительного эффективного заряда объединенного атома. Парциальное сечение эмиссии электронов с энергией E можно рассчитать [2,12]:

$$\frac{d\sigma}{dE} = 2^{5/2} \pi^2 f \int_0^{b(R)} \alpha^{-2/3} W(R) A_i^2 \left\{ \alpha^{-1/3} [E - E_0(R)] \right\} b db.$$

Здесь $E_0(R)$ — зависимость энергии оже-перехода от межъядерного расстояния, $W(R)$ — вероятность перехода, $f = 1/3$ — вероятность наличия вакансии на

$2p\pi$ -орбитали, $A_i(x)$ — функция Эйри, b — параметр удара. Параметр α равен

$$\alpha = \frac{1}{4} \frac{dE}{dR} v^2 \left(-\frac{dU(R)}{dR} \frac{1}{E_{cm}} + 2 \frac{b^2}{R^3} \right),$$

т.е. значение α зависит от производной терма dE/dR , увеличивается с ростом скорости соударения v и зависит от параметра удара b и производной от потенциала взаимодействия $U(R)$, E_{cm} — энергия соударения в системе центра масс. Сечение эмиссии удобно переписать в виде

$$\frac{d\sigma}{dE} = W(R) f G,$$

где фактор G зависит только от параметров терма, достигнутого межъядерного расстояния R и параметра удара b .

Как видно из рис. 2, при энергиях 3 keV имеется хорошее согласие расчета и эксперимента для сечений

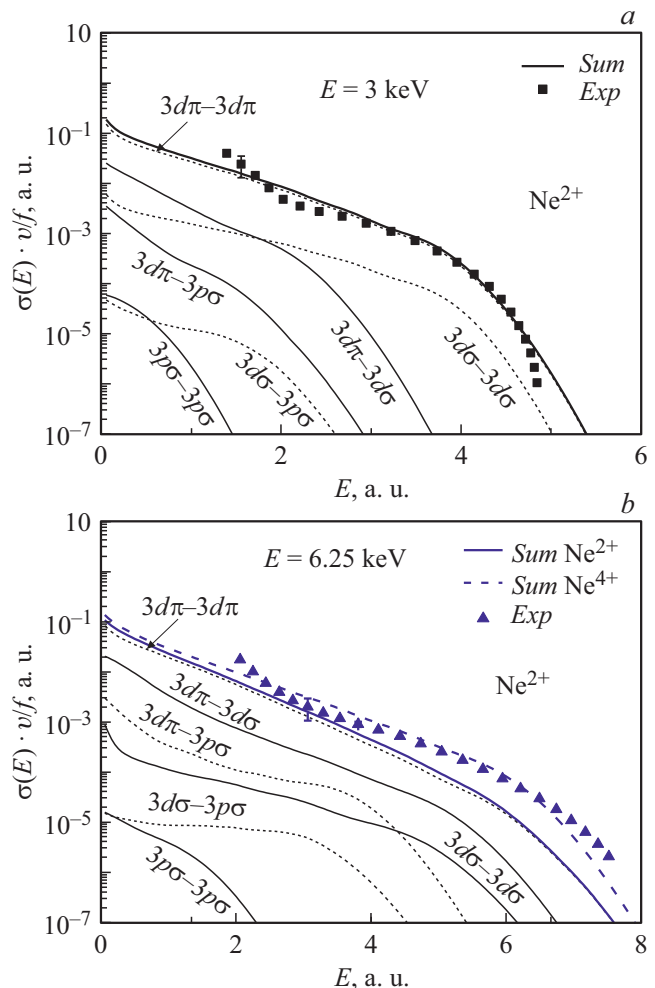


Рис. 2. Сопоставление экспериментально измеренных спектров с нашими расчетами для энергий 3 (а) и 6.25 keV (б). Тонкими сплошными и штриховыми линиями показан вклад различных каналов заполнения $2p\pi$ -вакансии. Жирные кривые — суммарный вклад всех каналов. Для энергии 6.25 keV приведен расчет для систем $Ne^{4+}-Ne$ и $Ne^{2+}-Ne$.

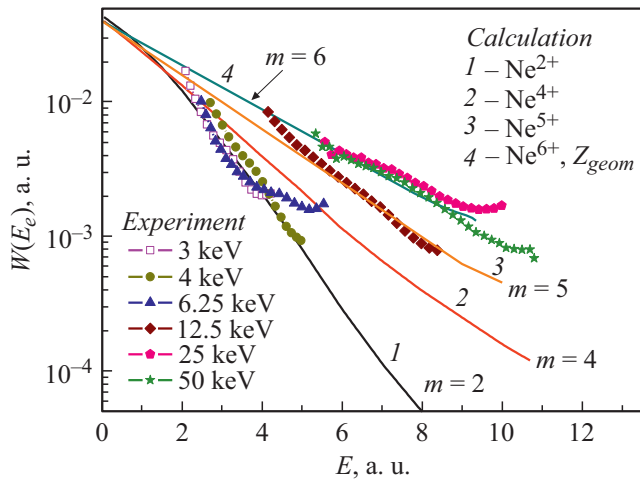


Рис. 3. Сопоставление расчетных значений вероятности оже-перехода для доминирующего канала $3d\pi^2-2p\pi\epsilon$ при различных степенях ионизации системы m со значениями, полученными из эксперимента при различных энергиях соударения.

эмиссии оже-электрона при использовании вероятностей оже-переходов и энергий оже-электронов, рассчитанных для системы $\text{Ne}^{2+}-\text{Ne}$, при 6.25 keV при энергиях электронов 3–4 а.е. также имеется согласие при использовании параметров для системы $\text{Ne}^{2+}-\text{Ne}$, а при энергиях электронов 5–6 а.е. согласие достигается в большей степени при использовании вероятностей оже-переходов в системе $\text{Ne}^{4+}-\text{Ne}$. При энергиях 12.5–50 keV согласие с экспериментом достигается только при повышении степени ионизации квазимолекулы до $m = 6$. При этом под величиной m понимается суммарное число электронов, удаленных из системы.

Таким образом, наблюдение эмиссии электронов в квазимолекуле и сопоставление эксперимента с расчетом позволяют установить, что распад вакансии на $2p\pi$ -орбитали происходит в сильно ионизированной и возбужденной системе, причем имеет место значительный рост ионизации частиц с увеличением энергии соударения.

Основной вклад при малых энергиях соударения дает переход $3d\pi^2-2p\pi\epsilon$. С ростом энергии соударения подключается канал $3d\pi^2-3d\sigma$ и происходит сдвиг спектра электронов в сторону больших энергий. Однако вклад канала $3d\pi^2$ доминирует при всех изученных энергиях (вплоть до 50 keV). Вклад этого канала превышает 80%. Это позволяет определить вероятность указанного оже-перехода непосредственно из эксперимента с помощью соотношения

$$W(R) = \left(\frac{d\sigma}{dE} \right) \frac{1}{fG}.$$

Точность такой оценки лучше 20%, причем погрешность, связанная с учетом других каналов, носит систематический характер.

На рис. 3 показано сопоставление расчетных данных со значениями, полученными из эксперимента. Как вид-

но из рис. 3, полученные из эксперимента значения вероятностей заполнения $2p\pi$ -вакансии показывают, что при малых энергиях соударения (3–4 keV) оже-переходы происходят в системе $\text{Ne}^{2+}-\text{Ne}$, а при больших энергиях соударения происходит существенный (до $m = 6$) рост степени ионизации частиц (числа удаленных электронов). С ростом ионизации партнеров соударения происходит сближение по шкале энергий положения возбужденных уровней $3p\sigma$, $3d\sigma$ и $3d\pi$ с уровнем $2p\pi$. Как показывает расчет, связанное с этим увеличение интегралов перекрытия волновых функций приводит к значительному росту вероятностей перехода.

Вывод, что система из двух сталкивающихся атомов в момент их наибольшего сближения оказывается в высоковозбужденном (сильно „перегретом“) состоянии, является довольно естественным. Другое дело, что информацию об этом мы можем получить только, изучая спектр электронов, испущенных в короткий момент существования квазимолекулы, поскольку какие-то возбужденные состояния, возникающие при тесном сближении сталкивающихся атомов за счет их кинетической энергии, при разлете атомов могут адиабатически распасться, не оставив следа. Только когда распад состояния сопровождается эмиссией электрона (или кванта), который уносит энергию из системы, столкновение необратимо становится неупругим.

Таким образом, впервые для многоэлектронной квазимолекулы $\text{Ne}-\text{Ne}$ выполнен расчет вероятностей оже-распада вакансий во время столкновения $W(R)$ для различной степени ионизации квазимолекулы и проведено сопоставление с экспериментом.

Из всего многообразия возможных каналов оже-распада установлен доминирующий вклад перехода из начального состояния $3d\pi-3d\pi$ на $2p\pi$ -орбиталь, что позволило уточнить вероятности оже-переходов в квазимолекуле, оцениваемые из эксперимента, и провести непосредственное сопоставление расчетных и экспериментальных значений вероятностей оже-перехода в квазимолекуле.

Установленная закономерность — сильный рост степени ионизации системы при увеличении энергии соударения, что соответствует уменьшению достигаемых расстояний наибольшего сближения, — должна учитываться при моделировании торможения частиц в веществе, при анализе ионизации частиц при соударениях, эмиссии оже-электронов и характеристического излучения, а также для других столкновительных процессов.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ для Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] В.В. Афросимов, Ю.С. Гордеев, А.Н. Зиновьев, Д.Х. Расулов, А.П. Шергин, Письма в ЖЭТФ, **24** (1), 33 (1976). [V.V. Afrosimov, Yu.S. Gordeev, A.N. Zinoviev, D.Kh. Rasulov, A.P. Shergin, JETP Lett., **24** (1), 28 (1976)].
- [2] А.Н. Зиновьев, П.Ю. Бабенко, А.П. Шергин, ЖЭТФ, **159** (1), 56 (2021). DOI: 10.31857/S0044451021010041 [A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko, A.P. Shergin, JETP, **132** (1), 45 (2021). DOI: 10.1134/S1063776121010076].
- [3] В.В. Афросимов, Г.Г. Месхи, Н.Н. Царев, А.П. Шергин, ЖЭТФ, **84** (2), 454 (1983). [V.V. Afrosimov, G.G. Meskhi, N.N. Tsarev, A.P. Shergin, JETP, **57** (2), 263 (1983)].
- [4] В.Р. Асатрян, А.П. Шергин, Письма в ЖЭТФ, **44** (10), 454 (1986). [V.R. Asatryan, A.P. Shergin, JETP Lett., **44** (10), 584 (1986)].
- [5] Е.А. Соловьев, *Новые подходы в квантовой физике* (Физматлит, М., 2019).
- [6] G.N. Ogurtsov, V.M. Mikoushkin, S.Yu. Ovchinnikov, J.H. Macek, Phys. Rev. A, **74** (4), 042720 (2006). DOI: 10.1103/PhysRevA.74.042720
- [7] G.N. Ogurtsov, S.Yu. Ovchinnikov, J.H. Macek, V.M. Mikoushkin, Phys. Rev. A, **84** (3), 032706 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevA.84.032706
- [8] J.H. Macek, J.B. Sternberg, S.Yu. Ovchinnikov, J.S. Briggs, Phys. Rev. Lett., **104** (3), 033201 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.033201
- [9] L.Ph.H. Schmidt, C. Goihl, D. Metz, H. Schmidt-Böcking, R. Dörner, S.Yu. Ovchinnikov, J.H. Macek, D.R. Schultz, Phys. Rev. Lett., **112** (8), 083201 (2014). DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.083201
- [10] Л.М. Кишиневский, Б.Г. Краков, Э.С. Парилис, ЖТФ, **59** (3), 33 (1989).
- [11] J. Eichler, U. Wille, B. Fastrup, K. Taulbjerg, Phys. Rev. A, **14** (2), 707 (1976). DOI: 10.1103/PhysRevA.14.707
- [12] А.З. Девдариани, В.Н. Островский, Ю.Н. Себякин, ЖЭТФ **73** (2), 412 (1977). [A.Z. Devdariani, V.N. Ostrovskii, Y.N. Sebyakin, JETP, **46** (2), 215 (1977)].