

ДИНАМИЧЕСКАЯ ИОНИЗАЦИЯ И ОЖЕ-ПЕРЕХОДЫ В КВАЗИМОЛЕКУЛЕ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ Ne^+-Ne

А. Н. Зинovieв , П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин*

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 17 июля 2020 г.,
после переработки 5 августа 2020 г.
Принята к публикации 7 августа 2020 г.

Показано, что экспоненциальная компонента спектра электронов при столкновениях $\text{Ne}-\text{Ne}$ связана с переходами электрона с автоионизационного терма в континуум. Определены характеристики этого терма. Экспоненциальная форма спектра объясняется отсутствием интерференции амплитуд перехода при сближении и разлете частиц, что связано с большой вероятностью перехода. Для оже-переходов в квази-молекуле определены зависимость средней энергии оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния, которая хорошо согласуется с результатами расчетов энергетических уровней для системы $\text{Ne}-\text{Ne}$, и зависимость средневзвешенной вероятности оже-перехода от наблюдаемой энергии электрона E_e . Показано, что с ростом E_e при уменьшении межъядерного расстояния вероятность переходов значительно уменьшается, что, по-видимому, связано с уменьшением интегралов перекрытия волновых функций взаимодействующих электронов. Проведенный анализ позволяет сформировать целостную картину ионизации в столкновениях ионов средних масс энергий порядка кэВ.

DOI: 10.31857/S0044451021010041

1. ВВЕДЕНИЕ

При медленных атомных столкновениях с большими сечениями происходит формирование автоионизационных состояний, распад которых после разлета частиц является основным каналом ионизации и приводит к возникновению характеристического линейчатого спектра электронов. В нашей работе [1] было показано, что механизм ионизации при столкновениях Ne^+-Ne аналогичен образованию L_{23} , вакансий при столкновениях Ar^+-Ar . При тесном сближении сталкивающихся атомов при достижении межъядерного расстояния $R_c = 1.3$ ат. ед., происходит выдвигание $4f\sigma$ -орбитали. Это приводит к появлению одного-двух электронов на уровне $4f$ -объединенного атома. Заброс электронов на слабо связанные уровни облегчает их переход в континуум вследствие возмущения, обусловленного изменением поля ядер при столкновениях (динамической ионизации). Спектры электронов при столкновениях Ne^+-Ne изучались в работе [2] для энергий

соударения 50–300 кэВ и в работе [3] для энергий 25–800 кэВ. В работе [3] была предложена эмпирическая формула, хорошо описывающая экспоненциально убывающий с ростом энергии спектр электронов, и высказано соображение, что данный спектр связан с переходами электронов в континуум с терма квази-молекулы, образующейся при сближении сталкивающихся атомов:

$$\sigma(E_e, \theta) = \frac{\sigma'_0}{E_e} \exp\left(\frac{-(E_e - \delta)a}{\hbar v}\right).$$

В данном выражении σ'_0 , δ , a — параметры, E_e — энергия вылетевшего электрона, v — скорость соударения.

За прошедшее время произошло значительное развитие теории таких переходов. Было показано, что они могут быть обусловлены скрытыми пересечениями термов в комплексной плоскости межъядерного расстояния [4, 5]. Подробный обзор теоретических работ по описанию данного механизма ионизации дан в [6]. Среди других исследований спектров электронов при атомных столкновениях следует упомянуть работы [7–12].

Другим механизмом ионизации, приводящим к появлению электронов с непрерывным спектром

* E-mail: zinoviev@inprof.ioffe.ru

энергий в виде широкой полосы, являются оже-переходы в квазимолекуле, обнаруженные в нашей работе [13]. В этом случае вакансии на орбитали заполняются во время соударения частиц, а энергия перехода меняется при изменении межъядерного расстояния. В работах [7, 14] было развито теоретическое описание таких переходов, из которого следовало, что в классически разрешенной области могут наблюдаться осцилляции, связанные с интерференцией амплитуд при сближении и разлете частиц, а в запрещенной области эмиссия электронов возможна вследствие так называемого столкновительного уширения.

В работах [15, 16] применялась регистрация электронов по совпадениям с рассеянными на заданный угол ионами и получены спектры электронов для конкретных траекторий частиц с заданными параметрами удара. Применение данной методики позволило решить задачу спектроскопии квазимолекулы. Для нескольких систем были определены зависимости хода орбитали от межъядерного расстояния, которые неплохо согласуются с теоретическими расчетами, и оценена вероятность оже-переходов в квазимолекуле.

Однако до сих пор детальное сопоставление с единых позиций существующих теоретических представлений и результатов измерений спектров электронов для столкновений типа $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ не проводилось. В задачи настоящей работы входили следующие: а) проверить теоретические предсказания для экспоненциальной части спектра, обусловленной переходами электрона в континуум вследствие динамической ионизации; б) рассмотреть влияние различных каналов на наблюдаемые спектры для оже-переходов в квазимолекуле и оценить из эксперимента зависимость вероятности оже-переходов в квазимолекуле.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

Результаты измерений сечений эмиссии электронов [17] при столкновениях в диапазоне энергий 3–50 кэВ представлены на рис. 1.

Представленные на рис. 1 спектры распадаются на две компоненты: экспоненциальную составляющую и широкую полосу, обусловленную оже-переходами в квазимолекуле. Измерения при сравнительно низких энергиях позволяют выделить эту составляющую более явно, тогда как при энергии 50 кэВ она выражена слабо.

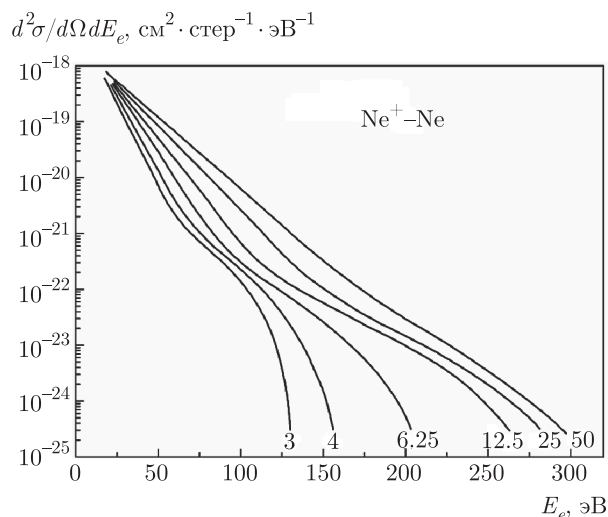


Рис. 1. Спектры электронов при столкновениях $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ для различных энергий соударения [17]. Цифры у кривых указывают энергию соударения в кэВ

Для сопоставления с теорией нам необходимо сечение, проинтегрированное по углам вылета электрона $\sigma(E_e, E_{col})$ (E_e — энергия вылетевшего электрона, E_{col} — энергия соударения):

$$\sigma(E_e, E_{col}) = \int \frac{d^2 \sigma}{d E_e d \Omega} \sin \Theta d \Theta d \varphi = 4\pi \frac{d^2 \sigma}{d E_e d \Omega} \beta,$$

где β — поправочный коэффициент, учитывающий анизотропию вылета электрона в зависимости от угла наблюдения. В случае [17] угол наблюдения составлял 128.5° относительно направления пучка и поправочный коэффициент $\beta = 1.18 \pm 0.07$. Результаты измерений зависят от эффекта Доплера и угла наблюдения вылетевших электронов. Коррекция на эффект Доплера проводилась согласно формулам

$$E_e^{Lab} = \left(1 + \frac{v_i \cos \Theta}{v_e}\right)^2 E_e^{CM},$$

$$\sigma(E_e)^{CM} = \sigma(E_e)^{Lab} \frac{d E_e^{Lab}}{d E_e^{CM}}.$$

Здесь E_e^{CM} и E_e^{Lab} , $\sigma(E_e)^{CM}$ и $\sigma(E_e)^{Lab}$ — энергия электрона и сечение в системе центра масс и в лабораторной системе соответственно, v_i — скорость излучателя (в случае квазимолекулы — скорость центра масс, т. е. $v_i = v/2$) и v_e — скорость электрона, Θ — угол наблюдения.

На рис. 2 представлены данные измерений при разных углах вылета электрона $\Theta = 128.5^\circ$ [17] и $\Theta = 90^\circ$ [2]. Как видно из рис. 2, данные, измеренные при разных углах вылета электрона, хорошо согласуются между собой при учете эффекта Доплера

Таблица. Потенциалы ионизации и вероятности ионизации различных состояний P_i в зависимости от энергии соударения E_{col} , вычисленные по формуле (1) [18]

Терм	I , эВ		E , кэВ					
			3	4	6.25	12.5	25	50
$4f$	0.85	P_1	0.844	0.864	0.889	0.920	0.943	0.959
$4f^2$	2.31	P_2	0.631	0.671	0.727	0.798	0.853	0.893
$3d4f^2$	13.6	P_3	0.00176	0.00412	0.0123	0.0447	0.156	0.216

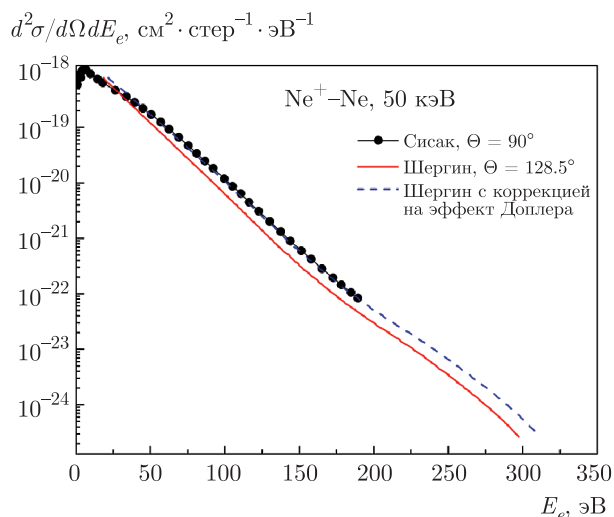


Рис. 2. Учет влияния эффекта Доплера на измеряемые спектры. Совпадение кривых, измеренных для разных углов наблюдения, при введении поправки на эффект Доплера доказывает, что испускание электрона происходит во время соударения

в предположении, что испускание электрона происходит в системе центра масс, т. е. во время соударения.

В дальнейшем мы будем обсуждать зависимости сечений от энергии вылетевшего электрона, скорректированные на эффект Доплера, и будут использоваться атомные единицы.

3. АНАЛИЗ ВКЛАДА ДИНАМИЧЕСКОЙ ИОНИЗАЦИИ

Оценим вероятность перехода электрона P в континуум, применив формулу из работы [18]:

$$P = \exp\left(-\frac{\pi I a}{v}\right), \quad (1)$$

где I — потенциал ионизации, a — характерный масштаб изменения волновой функции, v — скорость

соударения. Для случая выдвигания $4f\sigma$ -орбитали $a = 0.134$ ат. ед. [3], для $3d\sigma$ — 0.25 ат. ед.

Энергии ионизуемых уровней и вероятности ионизации приведены в таблице. При возбуждении одного электрона эффективный заряд остова атома был равен 1, при возбуждении двух электронов — 1.7, при возбуждении $3d$ -уровня — 3.

Как видно из таблицы, вероятность ионизации с уровня $4f$ весьма высока. Следует отметить, что ионизовать возбужденный уровень $3d$, заселяемый вследствие выдвигания $3d\sigma$ - и $3d\pi$ -орбиталей, значительно труднее (см. нижнюю строку в таблице). Следует отметить, что дополнительная ионизация вследствие выдвигания $3d\sigma$ - и $3d\pi$ -орбиталей наблюдается только при энергиях соударения более 10 кэВ [19]. Использование этих данных позволяет оценить вклад в сечение ионизации канала, связанного с выдвиганием $3d\sigma$ - и $3d\pi$ -орбиталей, как $3 \cdot 10^{-17}$ см², т. е. менее 10% от полного сечения ионизации. Выдвигание $4f\sigma$ -орбитали вследствие большого геометрического фактора ($R_c = 1.32$ ат. ед. [20]) вносит основной (90%) вклад в сечение ионизации.

Другим каналом ионизации, вносящим вклад в наблюдаемые спектры, являются оже-переходы в квазимолекуле на $2p\pi$ - и $3p\pi$ -орбитали, наблюдавшиеся в работе [15]. Согласно [17] вклад этих каналов в сечение ионизации не превышает 10^{-18} см².

Перезарядка и соответствующая интерференция каналов влияет на зарядовые распределения партнеров соударения после разлета, но не сказывается на степени ионизации системы в целом, а следовательно, на спектре электронов.

В работах [4,5] рассчитывалось поведение термов $E_i(R)$ для системы H^+-H в комплексной плоскости межъядерного расстояния R . Различные термы являются разными листами функции $E_i(R)$. При определенных точках R эти листы могут пересекаться, а вероятность перехода между различными термами может быть оценена вычислением интеграла по

обходу этих точек, как это сделано в известной модели Ландау – Зинера. Было обнаружено наличие особенностей типа «штопора», которые связывают множество листов и обуславливают возможность перехода электрона в континуум. Это объяснило возможность выдвигания адиабатического термина в континуум, несмотря на наличие кулоновского сгущения термов. Для вычисления вероятности перехода электрона в континуум P с термина $E_i(R)$ было предложено выражение [5]

$$P(E_e) = \frac{1}{2\pi v} \times \left| \frac{dR_i}{dE_e} C_i^2(E_e) \exp \left\{ \frac{2i}{v} \int_{E_i^\infty}^{E_e} R_i(E') dE' \right\} \right|,$$

где $R_i(E_e)$ – функция, обратная к $E_i(R)$. Нормирующий коэффициент для кулоновского поля иона с зарядом Z равен

$$C^2(E_e) = \frac{k^3}{Z} \left(1 - \exp \left\{ \frac{-2\pi Z}{k} \right\} \right),$$

где k – импульс вылетевшего электрона. Таким образом, предсказывается спектр вылетевших электронов экспоненциальной формы, определяемой в основном экспонентой $\exp \left(-\frac{2}{v} \int \text{Im} R_i(E') dE' \right)$, где $\text{Im} R_i(E_e)$ – мнимая часть функции $R_i(E_e)$.

Сечение эмиссии электронов получается интегрированием вероятности перехода по параметрам удара. В работе [21] для описания спектров электронов было предложено выражение

$$\sigma(E_e) = A(E_e) \exp \left(-\frac{\alpha(E_e)}{v} \right),$$

$$\alpha(E_e) = 2 \int_{E_p}^{E_e} \text{Im} R(E) dE,$$

$$A(E_e) = \frac{4\pi |R(E_e)|^2 \text{Im} R(E_e)}{\alpha(E_e)}.$$

Следуя методике, предложенной в [22], т.е. взяв отношение сечений для двух скоростей соударения, можно убрать влияние предэкспоненциального фактора и получить

$$\alpha(E_e) = -\ln \left\{ \frac{\sigma(E_e, E_1)}{\sigma(E_e, E_2)} \right\} \left[\frac{1}{v_1} - \frac{1}{v_2} \right]^{-1}, \quad (2)$$

таким образом можно определить из эксперимента значение $\alpha(E_e)$ (см. рис. 3), здесь v_1, v_2 – скорости соударения для двух рассматриваемых случаев.

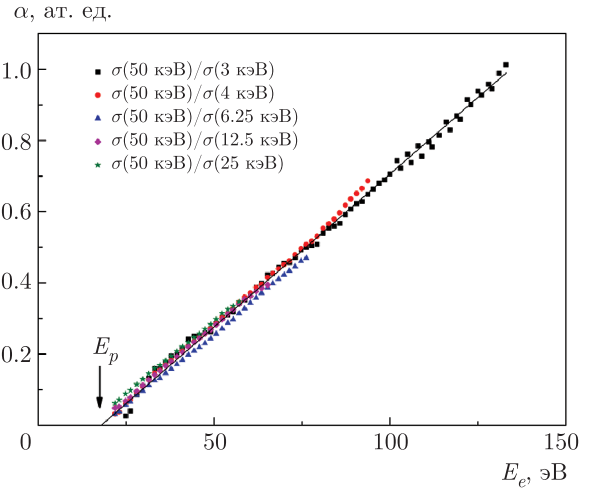


Рис. 3. (В цвете онлайн) Зависимости $\alpha(E_e)$, полученные по формуле (2) из отношения сечений, измеренных при разных энергиях. Стрелкой указано значение $E_p = 17.5$ эВ, когда терм переходит в сплошной спектр

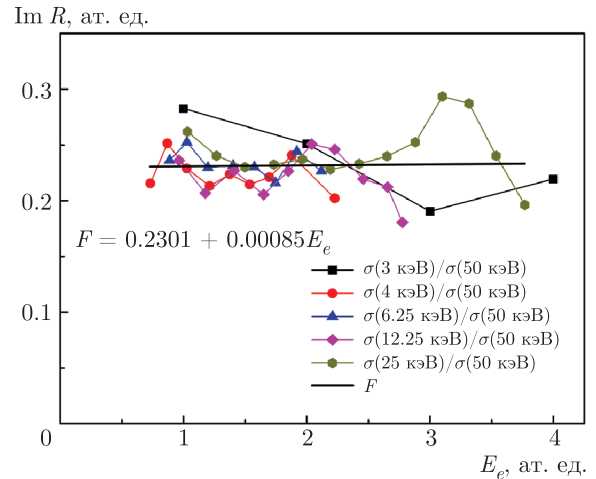


Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости $\text{Im} R(E_e)$, полученные из различных отношений сечений. Фитирующая кривая F – практически константа

Как видно из рис. 3, данные для различных пар скоростей укладываются на одну кривую, что указывает на отсутствие зависимости в предэкспоненциальном множителе от скорости соударения. Зависимости $\alpha(E_e)$ обращаются в нуль при энергии $E_p = 17.5 \pm 1.0$ эВ, что свидетельствует о том, что ионизация происходит с автоионизационного уровня, находящегося в континууме. Значение E_p слабо зависит от использованной пары сечений. Зависимость $\alpha(E_e)$ хорошо описывается линейной зависимостью, квадратичный член мал.

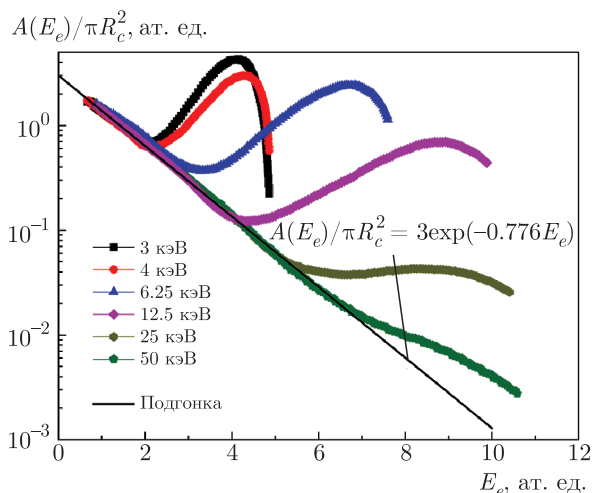


Рис. 5. (В цвете онлайн) Зависимости величины $A(E_e)$ от энергии электрона при различных энергиях соударения ($A(E_e) = (d\sigma/dE_e) \exp[\alpha(E_e)]$). Фитирующая кривая позволяет получить величину $A(E_e)$

Взяв производную от значения $\alpha(E_e)$ по энергии электрона, получим из эксперимента зависимость $\text{Im} R(E_e)$ (рис. 4). Фитируя эту зависимость полиномом, видим, что $\text{Im} R(E_e)$ практически константа и слабо зависит от E_e , что расходится с теоретическими предсказаниями [5] о том, что значение $\text{Im} R(E_e)$ должно уменьшаться с ростом E_e . Факт, что зависимость $\text{Im} R(E_e)$ является практически константой, связан с экспоненциальной формой спектра. Такая форма спектра предполагает отсутствие интерференции амплитуд перехода при сближении и разлете частиц. А это может происходить в том случае, если вероятность перехода в континуум высока, что имеет место в изучаемом случае.

Значение нормировочного предэкспоненциального множителя можно получить, построив соотношение $A(E_e) = (d\sigma/dE_e) \exp[\alpha(E_e)]$, см. рис. 5. Выражение, предложенное в [21], дает значение $A(E_e) = 4\pi |R(E_e)|^2 / (E_e - E_{col})$, что явно не согласуется с экспериментом. Результаты эксперимента можно фитировать выражением $A(E_e) = 3\pi R_c^2 \exp(-\gamma E_e)$, $\gamma = 0.776$. Подобная зависимость не имеет пока теоретического объяснения и, возможно, связана с влиянием кулоновского поля ядер на волновую функцию эмитированного электрона.

Прямая ионизация и столкновительное уширение линий (postcollision interaction) приводят к похожим формам спектров электронов. Влияние после столкновительного уширения наблюдалось вблизи порогов фотоионизации [23, 24], при возбуждении автоионизационных состояний при столкновениях с

электронами [25, 26] и ионами [27]. При ионном возбуждении это влияние характеризуется отношением времени жизни уровня к времени соударения. В нашем случае вероятность срыва электрона близка к 100%, время жизни автоионизационного состояния мало, что делает влияние послестолкновительного уширения маловероятным. В частности, эксперимент показывает отсутствие зависимости предэкспоненциального множителя от скорости соударения. На наш взгляд, требуется более подробное изучение влияния взаимодействия с ионным остовом на форму спектра электронов при динамической ионизации.

Таким образом, показано, что появление экспоненциальной компоненты в спектре электронов согласуется с представлением о выдвигании автоионизационного терма в континуум. Высокая вероятность срыва электрона приводит к отсутствию интерференции амплитуд перехода при сближении и разлете частиц и, как следствие, к экспоненциальной форме спектра. Определены параметры автоионизационного терма: $E_p = 17.5$ эВ, зависимость $\text{Im} R(E_e)$, а также значение предэкспоненциального множителя $A(E_e)$. Полученные зависимости $\text{Im} R(E_e)$ и $A(E_e)$ расходятся с предсказаниями теории.

Получим полное сечение ионизации, проинтегрировав $\sigma(E_e)$ по энергии электрона,

$$\sigma_i = 3\pi R_c^2 \times \left\{ \frac{\exp(-\gamma E_p)}{\frac{\text{Im} R(E_e)}{v} + \gamma} + [1 - \exp(-\gamma E_p)] \gamma E_p \right\}. \quad (3)$$

Значения, полученные по формуле (3) (см. рис. 6, звездочки), находятся в хорошем согласии с независимыми экспериментальными данными [28, 29].

4. ОЖЕ-ПЕРЕХОДЫ В КВАЗИМОЛЕКУЛЕ

Как видно из рис. 1, в спектре присутствует широкая полоса при больших энергиях электронов (более 60 эВ), которая связана с оже-переходами в квазимолекуле. Особенно ярко вклад этой компоненты виден на рис. 5. Оже-переходы в квазимолекуле, образующейся при столкновениях Ne-Ne, изучались в работе [15] с использованием техники совпадений электрон-рассеянный ион. Применение техники совпадений позволяет уменьшить вклад в спектр переходов, связанных с выдвиганием $4f\sigma$ -орбитали, так как убирается интегрирование по прицельным параметрам. В изучаемом случае Ne^+-Ne имеется

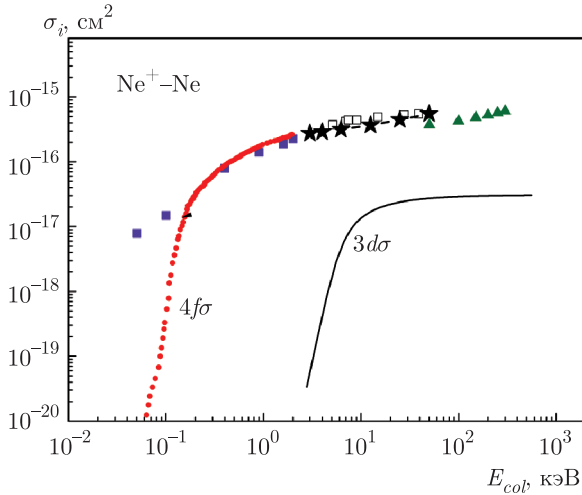


Рис. 6. Зависимости полного сечения ионизации при столкновениях Ne^+-Ne от энергии соударения. Звездочками показаны результаты расчета сечения ионизации с помощью формулы (3)

конечная вероятность оказаться одной вакансией на снижающейся при сближении частиц $2p\pi$ -орбитали и стопроцентная вероятность наличия четырех вакансий на $3p\pi$ -орбитали. Это делает переходы на $3p\pi$ -орбиталь на порядок более вероятными, чем на $2p\pi$ -орбиталь, в согласии с экспериментом [15]. Энергии переходов, связанные с заполнением вакансий на $3p\pi$ -орбитали, лежат в области $E_e < 1$ ат. ед., скрыты вкладом экспоненциальной компоненты и в настоящей работе не изучались.

4.1. Классическое и квантовомеханическое описания спектров электронов при оже-переходах в квазимолекуле

При классическом рассмотрении вероятность вылета электрона при распаде вакансий на квазимолекулярном уровне равна

$$P(E_e) = 2fW(R) \frac{dR}{dE_e} \frac{1}{v(R)}.$$

Здесь f — число вакансий на рассматриваемом уровне, $W(R)$ — вероятность оже-распада вакансий, коэффициент 2 учитывает тот факт, что расстояние R проходится дважды: при сближении и разлете частиц, dR/dE_e определяется зависимостью терма от межъядерного расстояния, $v(R)$ — радиальная компонента скорости. В точке поворота траектории $v(R) = 0$, и при классическом рассмотрении в спектре электронов имеется расходимость. Сечение эмиссии электронов получается интегрированием вероятности перехода по параметрам удара b , когда достигается межъядерное расстояние R :

$$\begin{aligned} \sigma(E_e) &= 2 \int_0^{b(R)} 2\pi b db fW(R) \frac{dR}{dE_e} \frac{dt}{dR} = \\ &= 4\pi fW(R) \frac{dR}{dE_e} R \frac{b(R)}{v_0}. \end{aligned}$$

Здесь v_0 — скорость налетающей частицы, $b(R) = R[1 - U(R)]^{0.5}$ — максимальное значение параметра удара, когда достигается расстояние R , $U(R)$ — потенциал взаимодействия.

При квантовомеханическом рассмотрении вблизи точки поворота траектории R возникает интерференция амплитуд перехода при сближении и разлете частиц. В работе [14] получено выражение для вероятности перехода для терма, квадратично зависящего от времени, $E_i = \xi t^2$, учитывающее интерференцию амплитуд перехода при сближении и разлете частиц:

$$P(E_e) = B\xi^{-2/3} A_i^2 \left\{ \xi^{-1/3} (E_e - E_i) \right\}.$$

Здесь E_e — энергия вылетевшего электрона, $E_i(R)$ — зависимость энергии оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния, $A_i(x)$ — функция Эйри, B — нормирующая константа. Если энергия оже-перехода возрастает при уменьшении межъядерного расстояния, то при $E_e > E_i(R)$ спектр экспоненциально убывает пропорционально асимптотике функции $A_i^2(x)$ [30]:

$$A_i^2(x) = \frac{1}{4\pi} x^{-0.5} \exp\left(-\frac{4}{3} x^{3/2}\right),$$

т. е. имеют место туннельные переходы в запрещенной области. В разрешенной области решение имеет асимптотику [30]

$$A_i^2(x) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{x^{0.5}} \sin^2\left(x^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right),$$

т. е. могут наблюдаться осцилляции в спектре электронов. Параметр α равен

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{1}{2} \frac{d^2 E_i}{dt^2} = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 E_i}{dR^2} \left(\frac{dR}{dt} \right)^2 + \frac{dE_i}{dR} \frac{d^2 R}{dt^2} \right) \Bigg|_{R=R(E_0)}. \end{aligned}$$

Радиальная скорость при приближении к точке поворота стремится к нулю, поэтому первый член исчезает и получаем выражение, приведенное в работе [15]:

$$\xi = \frac{1}{2} \frac{dE_i}{dR} \frac{d^2 R}{dt^2} \Bigg|_{R=R(E_0)}.$$

Замечая, что

$$\frac{d^2 R}{dt^2} = \frac{dR}{dt} \frac{d(dR/dt)}{dR} = \frac{1}{2} \frac{d(dR/dt)^2}{dR} = \frac{1}{2} v_0^2 \left(-\frac{dU(R)}{dR} \frac{1}{E_{CM}} + 2 \frac{b^2}{R^3} \right),$$

получаем

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

т.е. значение α зависит от производной терма dE_i/dR , возрастает с ростом скорости соударения и зависит от параметра удара, производной от потенциала взаимодействия $U(R)$. В данной работе использовалась зависимость $U(R)$, полученная в [31] из экспериментальных данных о рассеянии при столкновениях Ne^+-Ne .

Для нахождения нормирующей константы B воспользуемся тем, что в классически разрешенной области квантовомеханическое решение должно совпадать с классическим. Заменяя квадрат синуса в асимптотике средним значением 0.5 и проводя интегрирование по параметру удара, получаем

$$\begin{aligned} \sigma(E_e) &= \int_0^{b(R)} P(b) \cdot 2\pi b db = \\ &= B \int_0^{b(R)} \xi^{-0.5} [E_e - E_i(R)]^{-0.5} b db. \end{aligned}$$

При больших параметрах удара

$$\begin{aligned} b \approx R, E_e - E_i(R) &\approx \frac{dE_i}{dR} (R - R_0), \\ \xi^{-0.5} &= 2^{0.5} \left(\frac{dR}{dE_i} \right)^{-0.5} v^{-1} R^{1.5} b^{-1}. \end{aligned}$$

Интегрируя по параметрам удара, имеем

$$\sigma(E_e) \approx \frac{1}{v} B \cdot 2^{0.5} \frac{dR}{dE_i} R b(R).$$

Приравнявая квантовое выражение к классическому выражению, находим

$$B = 2^{3/2} \pi f W(R),$$

а для сечения получаем

$$\begin{aligned} \sigma(E_e) &= 2^{5/2} \pi^2 f W(R) \times \\ &\times \int_0^{b(R)} \xi^{-2/3} A_i^2 \left\{ \alpha^{-1/3} [E_e - E_i(R)] \right\} b db. \end{aligned}$$

4.2. Анализ спектров в одноканальном приближении

На рис. 7 приведены рассчитанные спектры электронов в классическом и квантовомеханическом приближении, которые сопоставляются с результатами экспериментов. Имеется ошибка, связанная с различными способами вычитания вклада экспоненциальной компоненты. Указана область достоверности, когда различие в способах вычитания не приводит к ошибке, превышающей 30%. Приведена расчетная кривая при параметре удара $b = 0.01 \text{ \AA}$, что практически соответствует лобовому соударению. При этом достигается расстояние наибольшего сближения R_0 , определяемое из соотношения $U(R) = E_{CM}$. Нуль функции Эйри при этом соответствует энергии оже-перехода при таком расстоянии. Как видно из рисунка, при квантовом рассмотрении имеет место экспоненциальное убывание при больших энергиях, описываемое асимптотикой функции Эйри при больших x , а при классическом рассмотрении в этой точке сечение принимает нулевое значение. Сопоставление формы расчетных и экспериментальных кривых позволяет судить о правильности использованного при расчете значения параметра α .

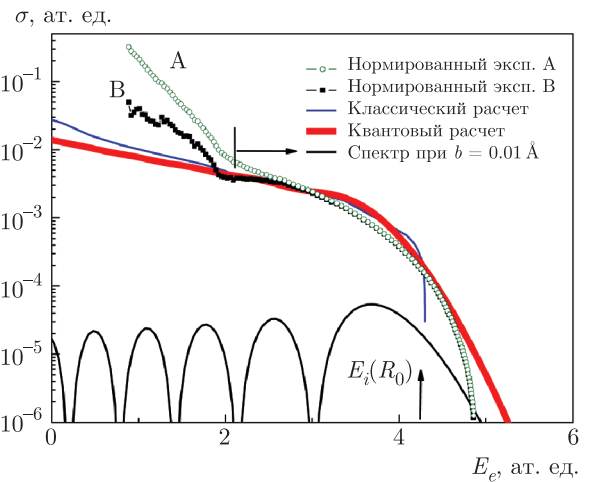


Рис. 7. Методика определения $E_i(R_0)$. Расчетный спектр и экспериментальная кривая нормируются по абсолютной величине, и варьированием параметров расчета достигается хорошее описание правого края спектра. Приведен случай $E_{col} = 3 \text{ кэВ}$. Кривые А, В — различные способы вычитания вклада экспоненциальной компоненты (стрелкой указана область достоверности результатов из-за двух способов вычитания экспоненциальной компоненты). Значение $E_i(R_0)$ соответствует пределу классического расчета и положению нуля функции Эйри при квантовом расчете для нулевого параметра удара

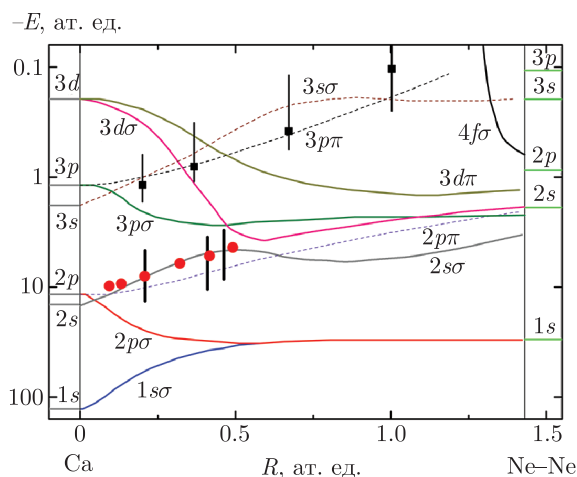


Рис. 8. Положение эффективного терма (точки), полученного из эксперимента, и диаграмма МО для системы Ne–Ne [32]. Точки с усаями — результаты работы [15]

Проведенный анализ при всех энергиях позволяет построить зависимость средней энергии оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния. Поведение термов для систем Ne–Ne и Ne⁺–Ne подобно, что позволяет использовать расчет термов для системы Ne–Ne для анализа оже-переходов в системе Ne⁺–Ne. Величина потенциала ионизации Ne составляет примерно 0.7 ат. е. д., в то время как энергия изучаемых оже-переходов в нашем случае составляет 4–9 ат. е. д., т. е. различие небольшое. Ниже, в разд. 4.3, мы обсудим сдвиги, связанные с различием систем Ne–Ne и Ne⁺–Ne. Как видно из рис. 8, имеется хорошее согласие экспериментальных данных с результатами расчетов поведения молекулярных орбиталей (МО) для системы Ne–Ne [32]. Этот факт является главным аргументом правильности нашей интерпретации экспериментальных данных. Второй аргумент связан с тем, что если учесть предсказанную теорией зависимость сечения от скорости соударения и построить зависимость $\sigma(E_e)v$, то широкие полосы в спектре, измеренные при разных энергиях соударения, ложатся на единую кривую.

4.3. Анализ спектров в многоканальном приближении

Как следует из диаграммы МО [32] (рис. 8), заполнение вакансии на $2p\pi$ может происходить с орбиталей $3p\sigma$ (на орбитали 2 электрона), $3d\sigma$ (2 электрона), $3d\pi$ (4 электрона).

Мы предполагаем, что орбитали $3s\sigma$, $3p\pi$ и $3d\delta$ не содержат электронов, так как формируются из незаполненных при больших межъядерных расстояни-

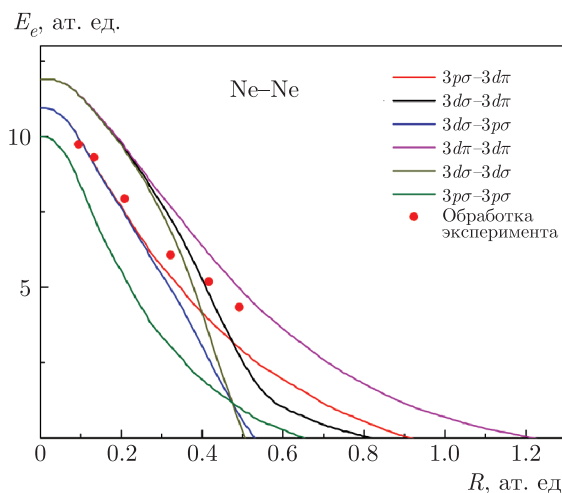


Рис. 9. (В цвете онлайн) Энергии оже-переходов из различных начальных состояний на $2p\pi$ -вакансию, вычисленные нами из данных о положении МО [32]. Для сопоставления приведена средняя энергия оже-переходов (эффективный терм), определенная из эксперимента в одноканальном приближении

ях уровней. Орбиталь $4f\sigma$ опустошена переходами электронов в континуум. Таким образом, имеется по крайней мере 6 вариантов оже-переходов: $3p\sigma^2-2p\pi\epsilon$ (под значком ϵ понимается улетающий электрон), $3d\sigma^2-2p\pi\epsilon$, $3d\pi^2-2p\pi\epsilon$, $3p\sigma 3d\sigma-2p\pi\epsilon$, $3p\sigma 3d\pi-2p\pi\epsilon$ и $3d\sigma 3d\pi-2p\pi\epsilon$.

На рис. 9 энергии оже-переходов для этих каналов, рассчитанные из диаграммы МО, сравниваются со средней энергией оже-перехода, полученной нами из эксперимента. Имеется хорошее согласие средней энергии оже-перехода, полученной из анализа эксперимента, с расчетными значениями. Следует заметить, что при энергиях соударения 3 и 4 кэВ вклад в спектр электронов вносят всего два канала. При больших энергиях столкновения все шесть каналов могут вносить вклад. В работе [33] были рассчитаны вероятности переходов из интересующих нас состояний в водородоподобном ионе с двумя возбужденными электронами, которые оказались сравнимыми по величине. В нашем случае энергии уровней $3p$ и $3d$ значительно различаются, поэтому наш расчет носит модельный характер: мы предполагаем вероятности оже-переходов равными. Введем понятие фактора перехода:

$$G_i = 2^{5/2} \frac{\pi^2}{v} \int_0^{b(R)} \xi^{-2/3} A_i^2 \left\{ \xi^{-1/3} [E_e - E_i(R)] \right\} b db.$$

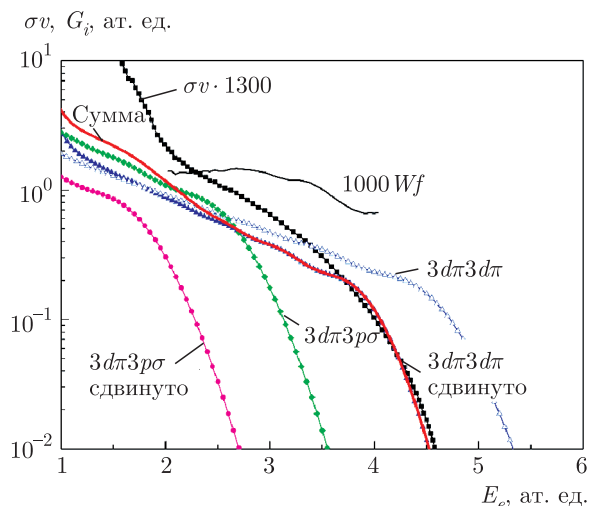


Рис. 10. Сравнение расчетных факторов оже-переходов с данными измерений сечений σv для $E_{col} = 3$ кэВ. Для удобства сравнения результатов расчета и эксперимента измеренное сечение умножено на 1300. Кривая «Сумма» — сумма факторов G_i . Приведено также значение Wf , умноженное на 1000, полученное по формуле (4)

В классическом пределе $G_i = 4\pi(dE_i/dR)^{-1}Rb(R)$, где $E_i(R)$ — зависимость энергии рассматриваемого оже-перехода от межъядерного расстояния. Произведение сечения на скорость соударения равно

$$\sigma v = \sum_i G_i W_i f,$$

где W_i — вероятность оже-перехода, f — вероятность иметь вакансию на $2p\pi$ -орбитали. Если взять отношение σv к сумме факторов перехода, получаем средневзвешенную вероятность оже-перехода:

$$W = \frac{1}{f} \frac{\sigma v}{\sum_i G_i} = \frac{\sum_i G_i W_i}{\sum_i G_i}, \quad (4)$$

т. е. каждый переход учитывается с весовым фактором G_i .

На рис. 10–15 представлены зависимости расчетных факторов от энергии электронов в сопоставлении с измеренными значениями σv . Соотношение этих величин позволяет оценить средневзвешенную вероятность оже-перехода. Как видно из рис. 10, вычисленное положение правого края спектра определяется каналом $3d\pi 3d\pi-2p\pi\epsilon$ и отличается от полученного экспериментально на сдвиг, равный 0.81 ± 0.03 ат. ед. Причина сдвига — различие в поведении орбиталей для систем Ne–Ne и Ne^+-Ne , о чем говорилось выше, а также погрешности теоретического расчета. Вклад канала $3p\sigma 3d\pi-2p\pi\epsilon$ сдвинут на ту же величину в сторону меньших энергий,

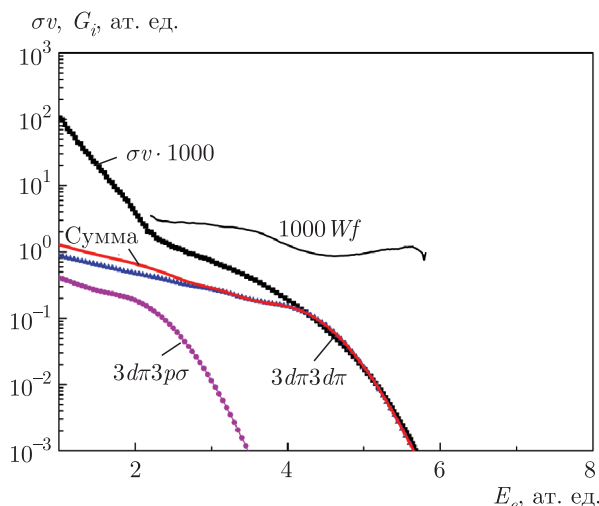


Рис. 11. Представлены данные для $E_{col} = 4$ кэВ. Значение σv умножено на 1000. Вклады каналов приведены с учетом сдвига

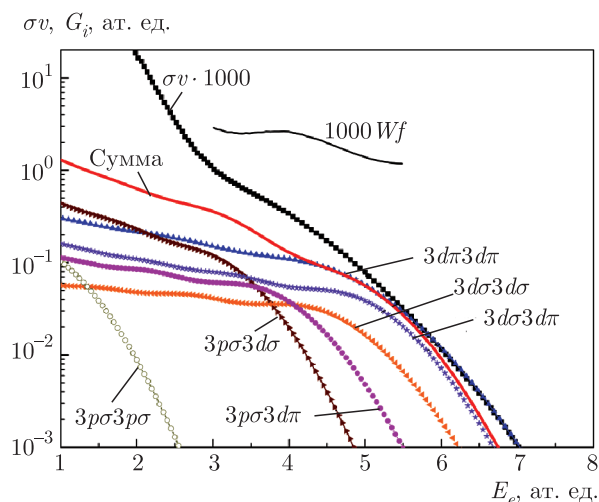


Рис. 12. Представлены данные для $E_{col} = 6.25$ кэВ

поскольку энергия обоих переходов определяется в основном энергией $2p\pi$ -орбитали, и можно предположить, что упомянутые сдвиги равны. С учетом сдвига канал $3p\sigma 3d\pi-2p\pi$ начинает вносить вклад при $E_e = 2.2$ ат. ед. Имеется корреляция с областью роста экспериментального сечения. В то же время этот рост проявляется вблизи края области достоверности значения сечения, связанного с вычитанием вклада экспоненциальной компоненты. Из соотношения (4) определена величина $fW(R)$ (сплошная линия на рис. 10), которую в данном случае можно трактовать как вероятность оже-перехода в атомных единицах для перехода $3d\pi 3d\pi-2p\pi\epsilon$, вносящего основной вклад в сечение.

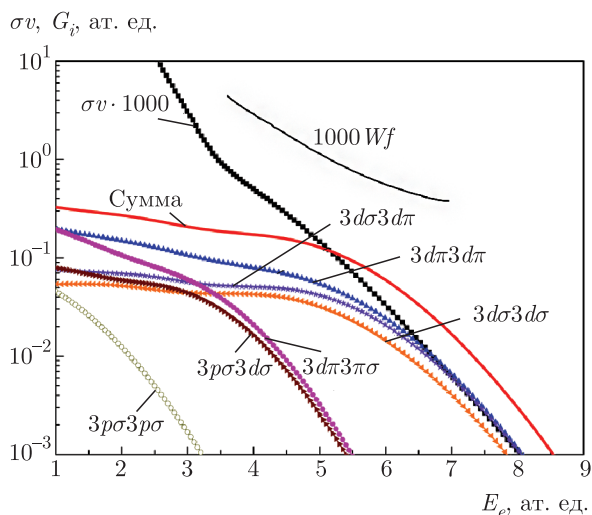


Рис. 13. Представлены данные для $E_{col} = 12.5$ кэВ

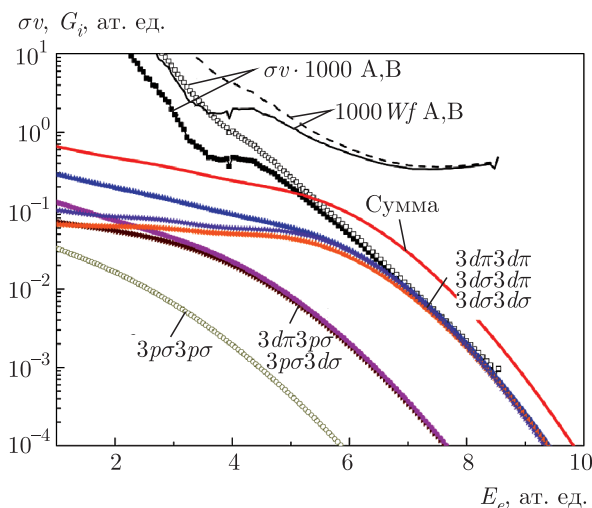


Рис. 14. Представлены данные для $E_{col} = 25$ кэВ. Символами А и В показаны экспериментальные кривые, полученные при разном способе вычитания экспоненциальной подложки

При энергии соударения $E_{col} = 4$ кэВ по-прежнему доминирует вклад канала $3d\pi 3d\pi-2p\pi\epsilon$, сдвиг составляет 0.95 ± 0.05 ат. ед. Вблизи порога достоверности имеется вклад канала $3p\sigma 3d\pi-2p\pi\epsilon$. Остальные каналы вносят вклад при $E_e < 2$ ат. ед.

При $E_{col} = 6.25$ кэВ край при больших энергиях электронов определяется каналом $3d\pi 3d\pi-2p\pi\epsilon$, сдвиг составляет 1.10 ± 0.05 ат. ед. Затем подключаются каналы с начальными состояниями $3d\sigma 3d\pi$ и $3d\sigma 4d\sigma$, а при энергиях менее 5 ат. ед. вносит вклад канал $3p\sigma 3d\pi-2p\pi\epsilon$.

При больших энергиях 12.5–50 кэВ (рис. 13–15) практически одинаковую зависимость от энергии электрона дают три канала с начальными состо-

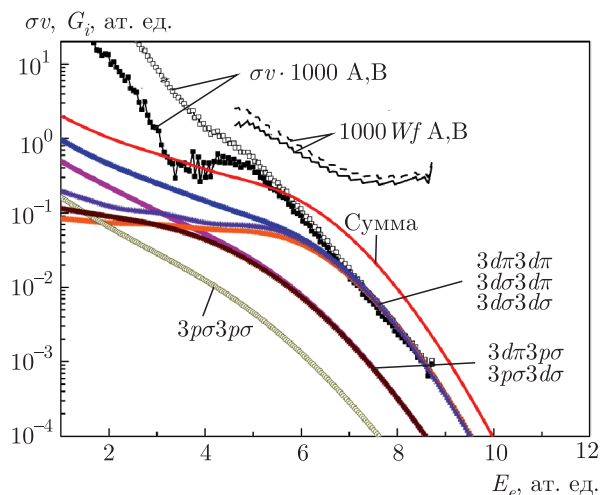


Рис. 15. Представлены данные для $E_{col} = 50$ кэВ. Обозначения те же

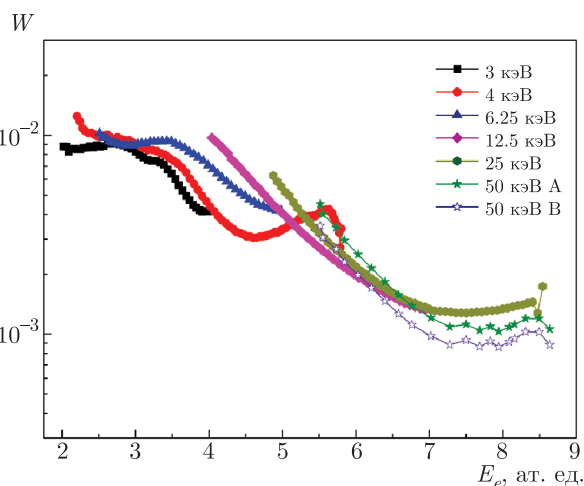


Рис. 16. (В цвете онлайн) Зависимость средней вероятности оже-переходов от наблюдаемой энергии электрона. Кривые А и В показывают ошибки, связанные с вычитанием экспоненциальной подложки

яниями $3d\pi 3d\pi$, $3d\sigma 3d\pi$ и $3d\sigma 3d\sigma$, также группируется вклад от каналов с начальными состояниями $3p\sigma 3d\pi$ и $3p\sigma 3d\sigma$. Сдвиги для энергий 12.5, 25 и 50 кэВ составляют соответственно 1.56, 1.59 и 1.79 ат. ед. Сплошной линией показано значение фактора $fW(R)$. Кривые, отмеченные символами А и В, получены при разных способах вычитания экспоненциальной подложки и позволяют оценить ошибку, связанную с ее вычитанием.

Вероятности оже-переходов в квазимолекуле в зависимости от наблюдаемой энергии электрона представлены на рис. 16. Как видно из рис. 16, данные, полученные из обработки сечений, измеренных при разных энергиях соударения, согласо-

ются. Ошибки, связанные с вычитанием экспоненциальной компоненты, не превышают 30%. Абсолютные ошибки связаны, главным образом, с абсолютными измерениями сечений и составляют также 30%. Различия в зависимостях вероятности эмиссии от энергии электрона при разных начальных энергиях связаны с погрешностями определения сдвига края спектра между экспериментом и расчетом. При определении $W(E_e)$ использовалось значение $f = 1/3$, что соответствует статистике распределения вакансий между молекулярными уровнями, формирующимися из $2p$ -оболочки Ne при больших R . Как видно из рис. 16, с ростом E_e , что соответствует уменьшению межъядерного расстояния, вероятность переходов значительно уменьшается, и это, по-видимому, связано с уменьшением интегралов перекрытия волновых функций электронов, участвующих в оже-переходе.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показано, что экспоненциальная компонента спектра электронов при столкновениях Ne^+-Ne связана с переходами электрона с автоионизационного терма в континуум. Определены характеристики этого терма. Отсутствие интерференции амплитуд перехода при разлете и сближении частиц связано с большой вероятностью перехода, что объясняет практически экспоненциальную форму спектра.

Для оже-переходов в квазимолекуле определена зависимость средней энергии оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния, которая хорошо согласуется с расчетами МО для системы Ne-Ne, и определена зависимость средневзвешенной вероятности оже-перехода от наблюдаемой энергии электрона. Показано, что с ростом E_e , при уменьшении межъядерного расстояния вероятность переходов значительно уменьшается, что, по-видимому, связано с уменьшением интегралов перекрытия волновых функций взаимодействующих электронов.

Анализ с современных позиций результатов экспериментальных и теоретических исследований прошлых лет позволил в настоящей работе оценить роль конкурирующих механизмов, приводящих к эмиссии электронов, установить основные характеристики уровней, с которых осуществляются электронные переходы в континуум и оже-переходы в квазимолекуле, и сформировать целостную картину ионизации в столкновениях ионов средних масс энергий порядка кэВ.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Yu. Babenko, A. N. Zinoviev, and A. P. Shergin, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **354**, 142 (2015).
2. R. K. Cacak and T. Jorgensen, Phys. Rev. A **2**, 1322 (1970).
3. P. H. Woerlee, Yu. S. Gordeev, H. de Waard et al., J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. **14**, 527 (1981).
4. E. A. Solov'ev, Sov. Phys. JETP **54**, 893 (1981).
5. S. Yu. Ovchinnikov and E. A. Solov'ev, Sov. Phys. JETP **64**, 280 (1986); S. Yu. Ovchinnikov and E. A. Solov'ev, Sov. Phys. JETP **63**, 538 (1986).
6. S. Yu. Ovchinnikov, G. N. Ogurtsov, J. H. Macek, and Yu. S. Gordeev, Phys. Rep. **389**, 169 (2004).
7. Е. А. Соловьев, *Новые подходы в квантовой физике*, Физматлит, Москва (2019).
8. G. N. Ogurtsov, V. M. Mikoushkin, S. Yu. Ovchinnikov, and J. H. Macek, Phys. Rev. A **74**, 032706 (2006).
9. S. Yu. Ovchinnikov, J. H. Macek, and V. M. Mikoushkin, Phys. Rev. A **84**, 032706 (2016).
10. S. Yu. Ovchinnikov and J. H. Macek, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **241**, 78 (2005).
11. J. H. Macek and S. Yu. Ovchinnikov, Phys. Rev. Lett. **104**, 033201 (2010).
12. L. Ph. H. Schmidt, C. Goil, D. Metz et al., Phys. Rev. Lett. **162**, 083201 (2014).
13. V. V. Afrosimov, Yu. S. Gordeev, A. N. Zinov'ev et al., JETP Lett. **24**, 28 (1976).
14. A. Z. Devdariani, V. N. Ostrovskii, and Y. N. Sebyakin, Sov. Phys. JETP. **46**, 215 (1977).
15. V. V. Afrosimov, G. G. Meskhi, N. N. Tsarev, and A. P. Shergin, Sov. Phys. JETP **57**, 263 (1983).
16. В. Р. Асагрян, А. П. Шергин, Письма в ЖЭТФ **44**, 454 (1986).
17. А. П. Шергин, Дисс. ... докт. физ.-матем. наук, ФТИ им. А. Ф. Иоффе АН СССР, Ленинград (1987).
18. Yu. N. Demkov, Sov. Phys. JETP **18**, 138 (1964).
19. E. N. Fuls, P. R. Jones, F. P. Ziemba, and E. Everhart, Phys. Rev. **107**, 704 (1957).
20. P. Yu. Babenko, A. N. Zinoviev, and A. P. Shergin, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **354**, 142 (2015).

21. G. N. Ogurtsov, A. G. Kroupyshev, M. G. Sargsyan, and Yu. S. Gordeev, Phys. Rev. A **53**, 2391 (1996).
22. A. N. Zinoviev, S. Yu. Ovchinnikov, and Yu. S. Gordeev, Abstr. XII ICPEAC, Gatlinburg (1981), p. 900.
23. M. Ya. Amusia, M. Yu. Kuchiev, S. A. Sheinerman, and S. I. Sheftel, J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. **10**, L535 (1977).
24. R. Guillemin, L. Gerchikov, and S. Sheinerman, Phys. Rev. A **99**, 063409 (2019).
25. A. A. Borovik and G. N. Ogurtsov, J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. **42**, 105202 (2009).
26. A. A. Borovik and G. N. Ogurtsov, J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. **43**, 165203 (2010).
27. R. B. Barker and H. W. Berry, Phys. Rev. **151**, 19 (1966).
28. R. C. Amme and P. O. Haugsjaa, Phys. Rev. **177**, 230 (1969).
29. H. B. Gilbody and J. B. Hasted, Proc. Roy. Soc. A **240**, 382 (1957); H. B. Gilbody, J. B. Hasted, J. V. Ireland et al., Proc. Roy. Soc. A **274**, 40 (1963).
30. В. М. Галицкий, Е. Е. Никитин, Б. М. Смирнов, *Теория столкновений атомных частиц*, Наука, Москва (1981).
31. А. Н. Зиновьев, ЖТФ **78**, 15(2008).
32. J. Eichler, U. Wille, B. Fastrup, and K. Taulbjerg, Phys. Rev. A **14**, 707 (1976).
33. A. N. Zinoviev, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **269**, 943 (2016).