

# ОЖЕ-ПЕРЕХОДЫ В КВАЗИМОЛЕКУЛЕ ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ АТОМОВ НЕОНА В кэВ-ДИАПАЗОНЕ ЭНЕРГИЙ

*В. С. Михайлов, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, А. Н. Зиновьев\**

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук  
194021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 30 июня 2021 г.,  
после переработки 30 июня 2021 г.  
Принята к публикации 15 июля 2021 г.

Проведены расчеты вероятностей оже-распада вакансии на  $2p\pi$ -орбитали в квазимолекуле  $\text{Ne}^+-\text{Ne}$ , короткоживущей системе, образующейся при столкновении иона и атома неона и распадающейся при их разлете в диапазоне энергий соударения 3–50 кэВ. Достигнуто согласие с имеющимися экспериментальными данными о спектрах эмитируемых электронов. Определены доминирующие каналы оже-распада в зависимости от энергии соударения. Показано, что с ростом энергии соударения происходит существенная ионизация и возбуждение квазимолекулы, что приводит к сильному возрастанию вероятности оже-переходов в квазимолекуле. Предложен скейлинг для оценки вероятности оже-перехода при изменении степени ионизации частиц. Предложена процедура восстановления терма квазимолекулы в условиях сильной зависимости вероятности оже-перехода от межъядерного расстояния. Установлена зависимость суммарной (по всем возможным каналам) вероятности распада  $2p\pi$ -вакансии от условий соударения.

DOI: 10.31857/S004445102112004X

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Оже-переходы в квазимолекуле были обнаружены в 1976 г. при изучении столкновений  $\text{Kr}^+-\text{Kr}$  [1]. В спектре электронов наблюдалась широкая полоса, простирающаяся до сотен электронвольт, связанная с оже-переходами во время столкновения на вакантную орбиталь, формирующуюся из наружных уровней иона криптона и снижающуюся при уменьшении межъядерного расстояния.

Несмотря на короткое время акта соударения и соответственно время «жизни» квазимолекулы ( $10^{-15}$ – $10^{-16}$  с), возможен распад вакансии на снижающихся уровнях. Убедительным доказательством существования оже-переходов в квазимолекуле явились последовавшие вскоре эксперименты по совпадениям «электрон–рассеянный ион» [2], в которых экспериментально фиксировались энергия испущенного электрона и угол вылета рассеянного иона. Знание угла вылета иона позволяло из всего множества актов эмиссии выделить столкновения с заданным параметром удара (с

заданной траекторией) и, соответственно, с фиксированным расстоянием наибольшего сближения. Выделение траектории столкновения позволило применить квантовомеханическую модель эмиссии из квазимолекулы [3].

Обнаружение оже-переходов в квазимолекуле открыло возможность оже-спектроскопии квазимолекулы, т. е. определения поведения молекулярных уровней  $E(R)$  в зависимости от межъядерного расстояния  $R$  из экспериментальных спектров электронов. Ход экспериментальной орбитали  $E(R)$  восстанавливался по положению максимума в спектрах оже-электронов, измеренных при различных расстояниях наибольшего сближения  $R_0$ . Сравнение экспериментального уровня с расчетами для системы  $\text{Kr}-\text{Kr}$  [4–6] показали его близость к орбитальям  $4p\pi$  и  $4d\delta$  [6]. Результаты по оже-спектроскопии ряда других исследованных квазимолекул приведены в статьях [2, 7, 8].

Из абсолютных величин экспериментальных сечений были оценены ширины автоионизационных уровней  $\Gamma_A$ . Оказалось, что величины  $\Gamma_A$  достигают  $10^{16}$  с $^{-1}$  в случае  $\text{Kr}^+-\text{Kr}$  и  $10^{15}$  с $^{-1}$  в случае  $\text{Ar}^+-\text{Kr}$ , т. е. время жизни вакансий оказывается сравнимым со временем столкновения и, как следствие, вакансии с заметной вероятностью успева-

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

ют распасться в квазимолекуле. Возможными причинами столь большой ширины автоионизационных уровней были названы возрастание в квазимолекуле за счет выдвигания заполненных орбиталей числа электронов на верхних уровнях, способных участвовать в оже-переходах, а также увеличение перекрытия волновых функций состояний, между которыми осуществляется переход (аналогично переходам Костера–Кронига). Эффект увеличения  $\Gamma_A$  в квазимолекуле был продемонстрирован на модельных расчетах в работах [9, 10]. Сочетание высокой вероятности образования вакансий и большой ширины автоионизационного уровня приводит к значительным сечениям эмиссии электронов из квазимолекулы. Вероятность образования автоионизационных состояний в квазимолекуле оказывается близкой к единице как вследствие снижения вакантных молекулярных орбиталей (МО), так и за счет выдвигания заполненных МО под границу непрерывного спектра, что приводит к появлению над вакантными уровнями уровней, заселенных электронами. Согласно [2, 7] экспериментальные ширины  $2p\pi$ -уровней  $\Gamma_A$  в расчете на одну вакансию составили для квазимолекулы O–O  $10^{14} \text{ с}^{-1}$  (0.1 эВ) и для Ne–Ne  $10^{15} \text{ с}^{-1}$  (1 эВ). Обе величины близки к известным вероятностям оже-распада единственной  $2p$ -вакансии в объединенных атомах: S ( $Z = 16$ ) и Ca ( $Z = 20$ ) [11]). В случае  $3p\pi$ -уровня значение  $\Gamma_A = 2$  эВ значительно больше теоретического  $\Gamma_A$  для иона Ca с единственной  $3p$ -вакансией, что может быть объяснено [2] возрастанием в квазимолекуле числа электронов, способных участвовать в оже-переходе.

Теоретические расчеты оже-ширин квазимолекулярных уровней  $\Gamma_A(R)$  выполнены лишь для одной из самых простых квазимолекул  $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ . Для оже-переходов на  $1s\sigma$ -уровень в этом случае экспериментальная ширина, определенная в работе [8], удовлетворительно согласуется с рассчитанной в работе [12] как по величине, так и по характеру зависимости от межъядерного расстояния.

В работе [9] была сделана попытка рассчитать вероятности оже-переходов для рассматриваемого случая заполнения вакансии на  $2p\pi$ -орбитали при столкновениях  $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ . Однако поскольку в этой работе использовались весьма приближенные расчеты поведения молекулярных орбиталей от межъядерного расстояния, расчеты вероятностей перехода носят, скорее, лишь качественный характер. Сопоставления с экспериментальными данными не проводилось. Среди других исследований непрерывной составляющей спектров электронов при

атомных столкновениях следует упомянуть работы [13–17].

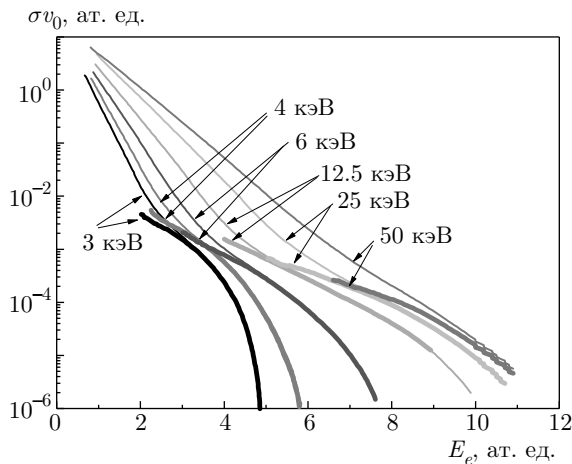
Настоящая статья является развитием наших исследований оже-распада  $2p\pi$ -вакансии в квазимолекуле, образующейся при столкновении атомов неона, опубликованных в [18]. В задачи настоящей работы входило изложение и обоснование процедуры расчета вероятностей оже-переходов, деталей расчета вероятностей оже-распада по разным каналам (с участием электронов различных наружных орбиталей), установление зависимости вероятности оже-перехода от степени ионизации частиц и сопоставление полученных данных с экспериментальными.

## 2. СПЕКТРЫ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ОЖЕ-ПЕРЕХОДАХ В КВАЗИМОЛЕКУЛЕ

На рис. 1 представлены спектры электронов, измеренные для случая  $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ . Как было показано в [18], часть спектра экспоненциальной формы связана с образованием автоионизационного состояния при выдвигании  $4f\sigma$ -орбитали и последующим переходом высоковозбужденных электронов в континуум вследствие динамики соударения. Широкая полоса при больших энергиях электронов связана с оже-переходами в квазимолекуле на снижающуюся при сближении частиц  $2p\pi$ -орбиталь. Как показано в [7], имеется согласие полученной из эксперимента зависимости энергии  $2p\pi$ -орбитали от достигнутого межъядерного расстояния с результатами расчетов [8].

Однако вопрос о вероятности оже-переходов в квазимолекуле  $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$  требует отдельного рассмотрения и дальнейшей проработки. Приведенные в работах [9, 18] оценки дают значения  $W(R) \approx \approx 10^{-2} - 10^{-3}$  ат.ед. и указывают на существенную зависимость вероятности распада вакансии от достигнутого межъядерного расстояния. В распад вакансии на  $2p\pi$ -орбитали может вносить вклад значительное число каналов. Представляет несомненный теоретический интерес выяснить их относительный вклад при различных условиях. Цель настоящей работы — рассчитать вероятности оже-переходов для различных каналов и уточнить интерпретацию экспериментальных спектров.

Как видно из рис. 1, в спектре электронов присутствует широкая полоса при энергиях электронов (более 60 эВ). Если вычесть экспоненциальную компоненту, связанную с переходами в континуум вследствие динамической ионизации, то можно выделить часть спектра, связанную с оже-переходами



**Рис. 1.** Спектры электронов при столкновениях  $Ne^+-Ne$  для различных энергий соударения. Числа у кривых указывают энергию соударения. Жирными кривыми показана часть спектра за вычетом экспоненциальной подложки (см. текст). Использованы данные из работы [18] с коррекцией на эффект Доплера

в квазимолекуле. В изучаемые сечения необходимо также внести поправку, связанную с эффектом Доплера. Экспериментальные спектры измерялись при угле наблюдения  $\Theta = 128.5^\circ$  относительно направления пучка. Пусть  $\mathbf{V}_{ls}$  и  $\mathbf{V}_{cms}$  — векторы скоростей электронов соответственно в лабораторной системе координат и в системе центра масс,  $\mathbf{V}$  — вектор движения центра масс. В приближении прямолинейного пролета этот вектор направлен вдоль пучка, а скорость движения центра масс равна в нашем случае  $v_0/2$ , где  $v_0$  — скорость соударения. Используя равенство  $\mathbf{V}_{cms} = \mathbf{V}_{ls} - \mathbf{V}$ , получаем

$$E_{cms} = E_{ls} - m_e \sqrt{2m_e E_{ls}} \frac{v_0}{2} \cos \Theta + \frac{m_e v_0^2}{8}. \quad (1)$$

Это позволяет пересчитать шкалу энергий электронов в систему центра масс для сопоставления с теоретическим расчетом. Величины сечений пересчитываются по формуле

$$\frac{d\sigma}{dE_{cms}} = \frac{d\sigma}{dE_{ls}} \frac{dE_{ls}}{dE_{cms}}. \quad (2)$$

При классическом рассмотрении сечение эмиссии электрона при распаде вакансии на квазимолекулярном уровне равно [18]

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dE} &= 2 \int_0^{b(R)} 2\pi b db f W(R) \frac{dR}{dE} \frac{dt}{dR} = \\ &= 4\pi f W(R) \frac{dR}{dE} R \frac{b(R)}{v_0}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $f$  — число вакансий на уровне,  $W(R)$  — вероятность оже-распада вакансии, множитель 2 учитывает тот факт, что расстояние  $R$  проходится дважды при сближении и разлете частиц. Как видно из приведенной формулы, при достижении расстояния наибольшего сближения при рассматриваемой энергии соударения сечение обращается в нуль.

В работе [3] получено квантовомеханическое выражение для вероятности перехода для терма, квадратично зависящего от времени,  $E_0 = \alpha t^2$ , учитывающее интерференцию амплитуд перехода при сближении и разлете частиц:

$$P(b, E) = B \alpha^{-2/3} A_i^2 \left\{ \alpha^{-1/3} (E_e - E_0) \right\}. \quad (4)$$

Здесь  $E_e$  — энергия вылетевшего электрона,  $E_0(R)$  — зависимость энергии оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния,  $A_i(x)$  — функция Эйри.

Параметр  $\alpha$  равен

$$\alpha = \frac{1}{4} \frac{dE}{dR} v^2 \left( -\frac{dU(R)}{dR} \frac{1}{E_{CM}} + 2 \frac{b^2}{R^3} \right), \quad (5)$$

т.е. значение  $\alpha$  зависит от производной терма  $dE/dR$ , растет с ростом скорости соударения  $v$  и зависит от параметра удара  $b$  и производной от потенциала взаимодействия  $U(R)$ .

При квантовомеханическом рассмотрении вблизи точки поворота траектории  $R_0$  возникает интерференция амплитуд перехода при сближении и разлете частиц. При достижении расстояния наибольшего сближения  $R_0$  сечение остается конечным, это соответствует нулю аргумента в функции Эйри. При  $E_e > E_0$  сечение убывает по экспоненциальному закону. Для получения сечения необходимо проинтегрировать выражение (4) по всем параметрам удара [18]:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dE} &= 2^{5/2} \pi^2 f W(R) \times \\ &\times \int_0^{b(R)} \alpha^{-2/3} A_i^2 \left\{ \alpha^{-1/3} [E(R) - E_0(b)] \right\} b db. \end{aligned} \quad (6)$$

В данном выражении использована нормировка сечения, предложенная в работе [18].

Как следует из классического выражения для сечения, величина

$$\frac{d\sigma}{dE} v = W(R) F,$$

где фактор

$$F = \frac{dR}{dE} R b(R)$$

и зависит только от производной терма, достигнутого межъядерного расстояния и параметра удара. Понятие фактора  $F$  удобно ввести и для рассмотрения процессов при квантовом описании. В этом случае

$$F = 2^{5/2} \pi^2 v_0 \times \int_0^{b(R)} \alpha^{-2/3} A_i^2 \left\{ \alpha^{-1/3} [E(R) - E_0(b)] \right\} b db. \quad (7)$$

### 3. ЭНЕРГИИ И ВЕРОЯТНОСТИ ОЖЕ-ПЕРЕХОДОВ В КВАЗИМОЛЕКУЛЕ

Диаграммы МО для систем Ne-Ne, Ne<sup>2+</sup>-Ne и Ne<sup>4+</sup>-Ne были рассчитаны в работе [19]. Диаграмма МО для других случаев может быть получена масштабированием результатов работы [19].

Как следует из диаграммы МО (рис. 2), заполнение вакансии на 2pπ-уровне может происходить с орбиталей 3pσ (на орбитали 2 электрона), 3dσ (2 электрона), 3dπ (4 электрона). Мы предполагаем, что орбитали 3sσ, 3pπ и 3dδ не содержат электронов, так как формируются из незаполненных при больших межъядерных расстояниях уровней. Орбиталь 4fσ опустошена переходами электронов в континуум. Таким образом, имеется, по крайней мере, шесть вариантов оже-переходов: 3pσ<sup>2</sup>-2pπε (ε обозначает улетающий электрон), 3dσ<sup>2</sup>-2pπε, 3dπ<sup>2</sup>-2pπε,

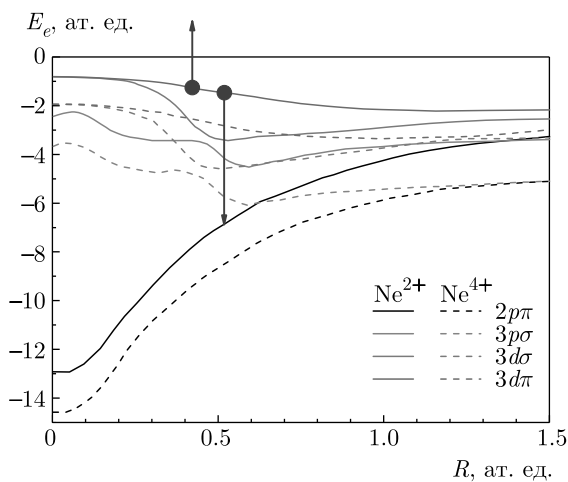


Рис. 2. Диаграмма МО для систем Ne<sup>2+</sup>-Ne (сплошные линии) и Ne<sup>4+</sup>-Ne (штриховые линии) [19]. Стрелками показана схема оже-перехода

3pσ3dσ-2pπε, 3pσ3dπ-2pπε и 3dσ3dπ-2pπε. В дальнейшем для обозначения канала мы будем использовать начальное состояние для оже-перехода.

Оценки [18] показывают, что в изучаемом случае оже-распад 2pπ-вакансии происходит при расстояниях менее 0.7 ат.ед. При достижении межъядерного расстояния 1.3 ат.ед. происходит выдвигание 4fσ-орбитали с последующим переходом одного-двух электронов в континуум. При энергиях 3-4 кэВ среднее число удаленных электронов равно 1, т.е. при этих энергиях соударения нужно рассматривать энергии оже-переходов для системы Ne<sup>2+</sup>-Ne, а при больших энергиях следует перейти к диаграмме для Ne<sup>4+</sup>-Ne и Ne<sup>6+</sup>-Ne.

Вероятность оже-перехода в единицу времени определяется формулой

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \iint \Psi_f^* \frac{e^2}{r_{1,2}} \Psi_i d\tau_1 d\tau_2 \right|^2, \quad (8)$$

где  $\Psi_i$  — волновая функции системы из двух электронов в атоме, находящихся на возбужденных уровнях,  $\Psi_f$  — волновая функция системы из электрона на 2pπ-орбитали и оже-электрона, т.е. свободного электрона, покидающего атом. Оператор  $e^2/r_{1,2}$  описывает кулоновское взаимодействие двух электронов.

Волновую функцию системы из двух электронов можно выразить через одноэлектронные волновые функции. В таком случае волновая функция начального состояния системы представляет собой комбинацию двух волновых функций стационарных состояний электронов и имеет вид

$$\Psi_i = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_i(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_i(r_2, \theta_2, \varphi_2) \pm \chi_i(r_2, \theta_2, \varphi_2) \psi_i(r_1, \theta_1, \varphi_1)). \quad (9)$$

Волновая функция конечного состояния системы, в свою очередь, может быть представлена комбинацией волновой функции стационарного состояния и волновой функцией свободного электрона:

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_f(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_f(r_2, \theta_2, \varphi_2) \pm \chi_f(r_2, \theta_2, \varphi_2) \psi_f(r_1, \theta_1, \varphi_1)). \quad (10)$$

Здесь множитель  $1/\sqrt{2}$  выступает в качестве нормировочного коэффициента. Знак «±» определяется симметрией волновой функции. В случае одинаково направленных спинов электронов произведения волновых функций вычитаются (знак «-»), в случае разнонаправленных спинов — складываются (знак «+»).

В качестве волновых функций стационарных состояний электрона нами используются водородоподобные волновые функции:

$$\chi_{n,l,m} = \frac{2}{(n^{l+2} (2l+1)!)} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} \times \sqrt{z^3} (2zr)^l \exp\left(-\frac{zr}{n}\right) \times H\left[-n+l+1, 2l+2, \frac{2zr}{n}\right] Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (11)$$

Здесь  $Y_{lm}$  — сферическая функция,  $H$  — вырожденная гипергеометрическая функция,  $n$  — главное квантовое число,  $l$  — орбитальный момент,  $m$  — проекция орбитального момента на ось. При этом эффективный заряд  $Z_i$  можно взять из выражения для энергии электрона в стационарном состоянии:

$$E_i = \frac{Z_i^2}{2n^2}, \quad (12)$$

т. е.  $Z_i$  меняется при изменении межъядерного расстояния. Выбор водородоподобных волновых функций связан с тем, что рассматриваемые переходы происходят вблизи предела объединенного атома и электроны находятся в поле значительного эффективного заряда объединенного атома.

Волновая функция свободного электрона имеет вид [20]

$$\chi_{\varepsilon,l,m} = \sqrt{\frac{2k}{\pi}} \frac{(2kr)^l}{(2l+1)!} \exp\left(\frac{\pi z}{2k}\right) \times \left| \Gamma\left(l+1 - \frac{iz}{k}\right) \right| \exp(-ikr) \times H\left[\frac{iz}{k} + l + 1, 2l + 2, 2ikr\right] Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (13)$$

Здесь  $\Gamma$  — гамма-функция,  $\varepsilon$  — энергия свободного электрона,  $k = \sqrt{2\varepsilon}$ . Все величины представлены в атомной системе единиц. В случае свободного электрона невозможно определить  $z$  через главные квантовые числа, и используется некоторое значение  $z_{eff}$ . Таким образом, для волновой функции свободного электрона существует некоторая неопределенность, ведь  $z_{eff}$  можно брать в пределе от значения  $Z_{2p\pi}$  (заряд конечного состояния электрона в уровне  $2p\pi$ ) до значения  $Z_{initial}$  (заряд одной из начальных волновых функций электронов). В обзоре [21] демонстрируется хорошее согласие результатов расчетов и экспериментов при выборе параметра  $z_{eff}$  как среднегеометрического от значений эффективного заряда начального состояния внутреннего (глубоко связанного) электрона и внешнего (для возбужденного состояния) электрона, т. е.  $z_{eff} = \sqrt{Z_{2p\pi} Z_{exp}}$ .

Таблица 1. Квантовые числа стационарных состояний

	$3d\pi$	$3p\sigma$	$2p\pi$
$n$	3	3	2
$l$	2	1	1
$m$	$\pm 1$	0	$\pm 1$

Волновые функции электронов можно разделить на угловую и радиальную составляющие. При расчете интегралов можно воспользоваться разложением оператора  $1/|r_1 - r_2|$  по сферическим функциям:

$$\frac{1}{|r_1 - r_2|} = \sum_{l, m} \frac{r_{min}^l}{r_{max}^{l+1}} Y_{lm}^*(\Omega') Y_{lm}(\Omega) \frac{4\pi}{2l+1}, \quad (14)$$

где  $r_{min}$  и  $r_{max}$  обозначают меньшую и большую величину из  $r_1$  и  $r_2$ . Здесь суммирование идет по всем целым числам  $l \geq 0$ , а также по всем целым  $-l \leq m \leq l$ .

Интегрирование по угловым координатам приводит к тому, что в сумме по  $l$  остается небольшое число членов и вычисление сводится к расчету нескольких двукратных интегралов по координатам  $r_1$  и  $r_2$  для различных  $l$ . Эти интегралы легко вычислить путем разделения интеграла на два предела для корректного учета множителя  $r_{min}^l/r_{max}^{l+1}$ :

$$\int_0^\infty \frac{4\pi}{2l+1} \left[ \int_0^{r_2} \frac{r_1^l}{r_2^{l+1}} R_f(r_1) R_i(r_1) r_1^2 dr_1 + \int_{r_2}^\infty \frac{r_2^l}{r_1^{l+1}} R_f(r_1) R_i(r_1) r_1^2 dr_1 \right] \times R_f(r_2) R_i(r_2) r_2^2 dr_2. \quad (15)$$

Рассмотрим в качестве примера расчет перехода  $3d\pi \ 3p\sigma \rightarrow 2p\pi \ \varepsilon$ . Квантовые числа стационарных состояний приведены в табл. 1. Волновые функции для  $3d\pi$ ,  $3p\sigma$  и  $2p\pi$  равны

$$\chi_{3d\pi} = \mp \frac{\exp\left(-\frac{rz}{3} \pm i\phi\right) r^2 z^2 \sqrt{z^3} \cos\theta \sin\theta}{81\sqrt{\pi}}, \quad (16)$$

$$\chi_{3p\sigma} = -\frac{1}{81} \exp\left(-\frac{rz}{3}\right) \times \sqrt{\frac{2}{\pi}} r z \sqrt{z^3} (-6 + rz) \cos\theta, \quad (17)$$

$$\chi_{2p\pi} = \mp \frac{\exp\left(-\frac{rz}{2} \pm i\phi\right) rz \sqrt{z^3} \sin \theta}{8\sqrt{\pi}}. \quad (18)$$

Для определения возможных квантовых чисел свободной частицы проинтегрируем радиальные части волновых функций и оператора  $1/|r_1 - r_2|$ .

В таком случае

$$\Psi_i = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{3d\pi}(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_{3p\sigma}(r_2, \theta_2, \varphi_2) \pm \chi_{3d\pi}(r_2, \theta_2, \varphi_2) \psi_{3p\sigma}(r_1, \theta_1, \varphi_1)), \quad (19)$$

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{2p\pi}(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_{\varepsilon,l,m}(r_2, \theta_2, \varphi_2) \pm \chi_{2p\pi}(r_2, \theta_2, \varphi_2) \psi_{\varepsilon,l,m}(r_1, \theta_1, \varphi_1)). \quad (20)$$

В случае триплетного состояния системы (полный спин равен единице, спины сонаправлены)

$$\begin{aligned} \Psi_i \Psi_f = & \chi_{3d\pi}(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_{3p\sigma}(r_2, \theta_2, \varphi_2) \times \\ & \times \chi_{2p\pi}(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_{\varepsilon,l,m}(r_2, \theta_2, \varphi_2) - \\ & - \chi_{3d\pi}(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_{3p\sigma}(r_2, \theta_2, \varphi_2) \times \\ & \times \chi_{2p\pi}(r_2, \theta_2, \varphi_2) \psi_{\varepsilon,l,m}(r_1, \theta_1, \varphi_1). \quad (21) \end{aligned}$$

В случае синглетного состояния (полный спин равен нулю) возможны два варианта. Первый случай, когда спины сонаправлены у  $3d\pi$  и  $2p\pi$ , второй — у  $3p\sigma$  и  $2p\pi$ :

$$\begin{aligned} \Psi_i \Psi_f = & \chi_{3d\pi}(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_{3p\sigma}(r_2, \theta_2, \varphi_2) \times \\ & \times \chi_{2p\pi}(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_{\varepsilon,l,m}(r_2, \theta_2, \varphi_2), \quad (22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_i \Psi_f = & \chi_{3d\pi}(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_{3p\sigma}(r_2, \theta_2, \varphi_2) \times \\ & \times \chi_{2p\pi}(r_2, \theta_2, \varphi_2) \psi_{\varepsilon,l,m}(r_1, \theta_1, \varphi_1). \quad (23) \end{aligned}$$

В качестве примера разберем случай триплетного состояния.

Рассмотрим интеграл от угловой составляющей выражения

$$\Psi_f^* \frac{e^2}{r_{1,2}} \Psi_i.$$

Сразу разобьем интеграл на переменные  $\theta_1, \varphi_1$  и  $\theta_2, \varphi_2$ :

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (Y_{p\pi}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{d\pi}(\theta_1, \varphi_1) - \\ & - Y_{l'm'}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{d\pi}(\theta_1, \varphi_1)) \times \\ & \times \sin \theta_1 d\theta_1 d\varphi_1 \times \\ & \times \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (Y_{l'm'}^*(\theta_2, \varphi_2) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2) Y_{p\sigma}(\theta_2, \varphi_2) - \\ & - Y_{p\pi}^*(\theta_2, \varphi_2) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2) Y_{p\sigma}(\theta_2, \varphi_2)) \times \\ & \times \sin \theta_2 d\theta_2 d\varphi_2. \quad (24) \end{aligned}$$

Здесь  $Y_{l'm'}^*$  обозначает угловую составляющую волновой функции свободной частицы.

Ненулевыми интегралы получаются при комбинациях квантовых чисел, которые представлены в табл. 2. Здесь мы зафиксировали ориентацию проекции момента импульса стационарного электрона в состоянии  $2p\pi$  как +1.

Как видно из таблицы, в переходе  $3d\pi 3p\sigma \rightarrow 2p\pi$  свободный электрон может оказаться в состоянии с числом  $l = 0, 2, 4$ . Также в некоторых случаях число  $m$  может принимать значения 0 и  $-2$ .

Рассмотрим случай со значением квантовых чисел из первой строки табл. 2. Для наглядности разделим переход на два случая, когда происходит «прямой» переход ( $3d\pi$  переходит в  $2p\pi$ , а  $3p\sigma$  переходит в свободное состояние) и «обратный» ( $3p\sigma$  переходит в  $2p\pi$ , а  $3d\pi$  переходит в свободное состояние).

Вычислим интеграл типа

$$\begin{aligned} & \iint \chi_{2p\pi}^*(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_{\varepsilon,l,m}^*(r_2, \theta_2, \varphi_2) \times \\ & \times \frac{e^2}{r_{1,2}} \chi_{3d\pi}(r_1, \theta_1, \varphi_1) \psi_{3p\sigma}(r_2, \theta_2, \varphi_2) d\tau_1 d\tau_2. \quad (25) \end{aligned}$$

Возьмем значения  $Z$ , характерные для молекулярных орбиталей атома  $\text{Ne}^{4+}$ :

$$Z_{3d\pi} = 7, \quad Z_{3p\sigma} = 10, \quad Z_{2p\pi} = 8.$$

Для случая свободного электрона возьмем  $Z_\varepsilon$  как среднее геометрическое между  $Z_{3p\sigma}$  и  $Z_{2p\pi}$ :

$$Z_\varepsilon = \sqrt{Z_{3p\sigma} Z_{2p\pi}} \approx 9. \quad (26)$$

Интеграл от угловых частей уже был рассчитан нами ранее, его значение равно  $\sqrt{0.6}/4\pi$ . Если воспользоваться формулой (15) и взять интеграл только по

Таблица 2. Комбинации квантовых чисел, при которых интегралы не равны нулю

3dπ		3pσ		2pπ		ε		$\frac{e^2}{r_{1,2}}$	Значение интеграла
l	m	l	m	l	m	l	m	l	
3	1	2	0	2	1	0	0	1	$\sqrt{0.6}/4\pi$
3	1	2	0	2	1	0	0	2	$\sqrt{0.6}/4\pi$
3	1	2	0	2	1	2	0	1	$\sqrt{3}/10\pi$
3	1	2	0	2	1	2	0	2	$\sqrt{3}/28\pi$
3	1	2	0	2	1	2	0	3	$-9\sqrt{3}/140\pi$
3	-1	2	0	2	1	2	-2	2	$-3/14\sqrt{2}\pi$
3	-1	2	0	2	1	2	-2	3	$-3/14\sqrt{2}\pi$
3	1	2	0	2	1	4	0	2	$-\sqrt{0.6}/7\pi$
3	1	2	0	2	1	4	0	3	$-\sqrt{0.6}/7\pi$
3	-1	2	0	2	1	4	-2	2	$-\sqrt{1.5}/7\pi$
3	-1	2	0	2	1	4	-2	3	$-\sqrt{1.5}/7\pi$

Таблица 3. Квантовые состояния, для которых вычисляем общую вероятность перехода  $3d\pi\ 3p\sigma \rightarrow 2p\pi\ \epsilon$

3dπ		3pσ		2pπ		ε	
l	m	l	m	l	m	l	m
3	1	2	0	2	1	0	0

$r_1$ , то мы получим некоторое значение, зависящее только от  $r_2$ :

$$I(r_2) = \frac{175616}{24134536953 r_2^2} \sqrt{\frac{14}{5}} \exp\left(-\frac{19r_2}{3}\right) \pi \times$$

$$\times \left( -58320 + 58320 \exp\left(\frac{19r_2}{3}\right) - 369360 r_2 - \right.$$

$$\left. - 1169640 r_2^2 - 2345778 r_2^3 - 3127704 r_2^4 - \right.$$

$$\left. - 2476099 r_2^5 \right). \quad (27)$$

Интеграл по  $r_2$  даст нам значение амплитуды вероятности перехода:

$$W = \int_0^\infty I(r_2) R_\epsilon^* R_{2p} r_2^2 dr_2. \quad (28)$$

Данный интеграл вычислялся нами численно.

Следующим шагом необходимо также рассчитать обратный переход, после чего вычислить амплитуду вероятности для  $l = 2$ . Возведя в квадрат

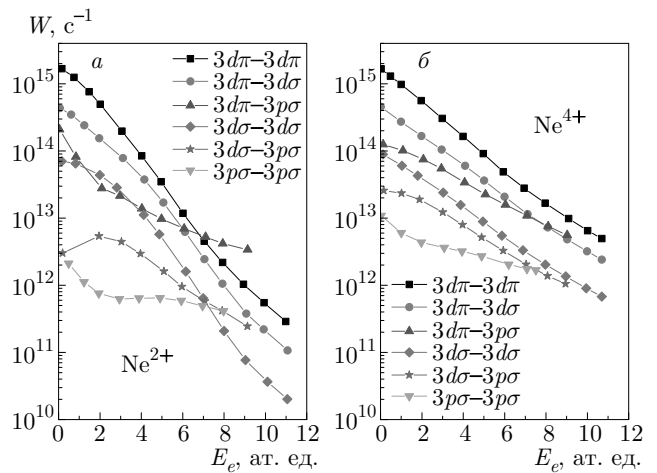


Рис. 3. Зависимости вероятностей оже-переходов для различных каналов от энергии вылетевшего электрона для случаев  $Ne^{2+}-Ne$  (а) и  $Ne^{4+}-Ne$  (б)

сумму амплитуд вероятностей и умножив полученное значение на коэффициент  $2\pi/\hbar$ , получим общую вероятность перехода  $3d\pi\ 3p\sigma \rightarrow 2p\pi\ \epsilon$  для квантовых состояний из табл. 3.

Амплитуды вероятностей с одинаковыми квантовыми числами системы интерферируют между собой. Вероятности переходов для различного набора квантовых чисел начальных и конечных электронов следует считать отдельно и затем суммировать.

Результаты расчетов представлены на рис. 3.

Как видно из рис. 3, ионизация квазимолекулы приводит к заметному росту вероятности оже-пере-

ходов. Это можно объяснить тем, что с ростом степени ионизации происходит увеличение энергии связи как внутреннего электрона, так и внешнего, при этом параметры эффективного заряда с ростом степени ионизации сближаются, что приводит к увеличению перекрывания волновых функций наружного и внутреннего электронов и росту вероятности оже-перехода.

#### 4. СКЕЙЛИНГ ДЛЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ОЖЕ-ПЕРЕХОДОВ

Анализ приведенных выше формул показывает, что если мы зафиксируем набор квантовых чисел для начального и конечного состояний, то конечный результат зависит только от значений эффективного заряда внутреннего и наружного электронов. Умножение обоих зарядов на константу не меняет значения интегралов, так как сводится к простой замене переменных. Следует ожидать, что вероятность оже-перехода будет зависеть только от отношения значений эффективного заряда для наружного и внутреннего электронов. Как известно, это отношение выражается через отношение энергий связи внутреннего  $E_1$  и наружного  $E_2$  электронов. Величина энергии вылетевшего электрона будет равна  $E_1 - 2E_2 = E_2(E_1/E_2 - 2)$ , т. е. тоже масштабирована.

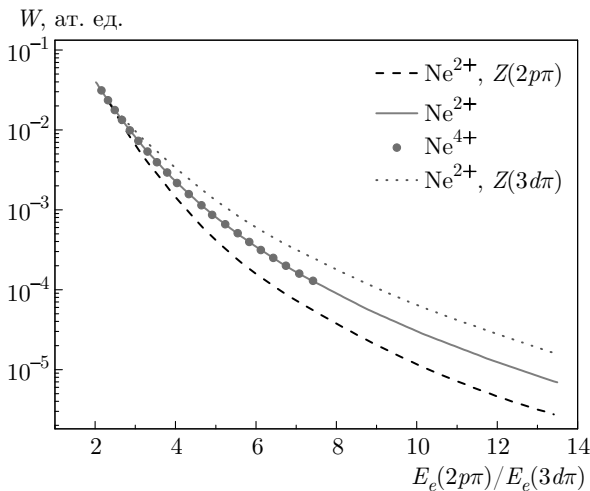


Рис. 4. Зависимости вероятности оже-перехода  $3d\pi 3d\pi - 2p\pi\epsilon$  от отношения энергий для рассматриваемых состояний. Пунктирная кривая соответствует минимальному значению эффективного заряда ( $Z_{eff} = Z_{3d\pi}$ ), штриховая кривая — эффективному заряду внутреннего электрона ( $Z_{eff} = Z_{2p\pi}$ ). Кривые для случаев  $Ne^{2+}-Ne$  (сплошная кривая) и  $Ne^{4+}-Ne$  (точки), полученные при использовании в качестве эффективного заряда среднегеометрического значения, совпадают

Как известно, вылетевший электрон находится частично в области атома с эффективным зарядом, близким к заряду внутреннего электрона, а частично в области атома с эффективным зарядом, равным заряду наружного электрона. В обзоре [21] при расчетах вероятности оже-переходов рекомендуется использовать значение эффективного заряда как среднегеометрическое значение эффективных зарядов для обоих электронов. Это значение также выражается через отношение энергий связи наружного и внутреннего электронов. Для проверки высказывания, что вероятность оже-перехода зависит только от отношения энергий наружного и внутреннего электронов, на рис. 4 приведены зависимости вероятности оже-переходов для систем с различной степенью ионизации и разными предположениями о величине эффективного заряда для вылетающего электрона.

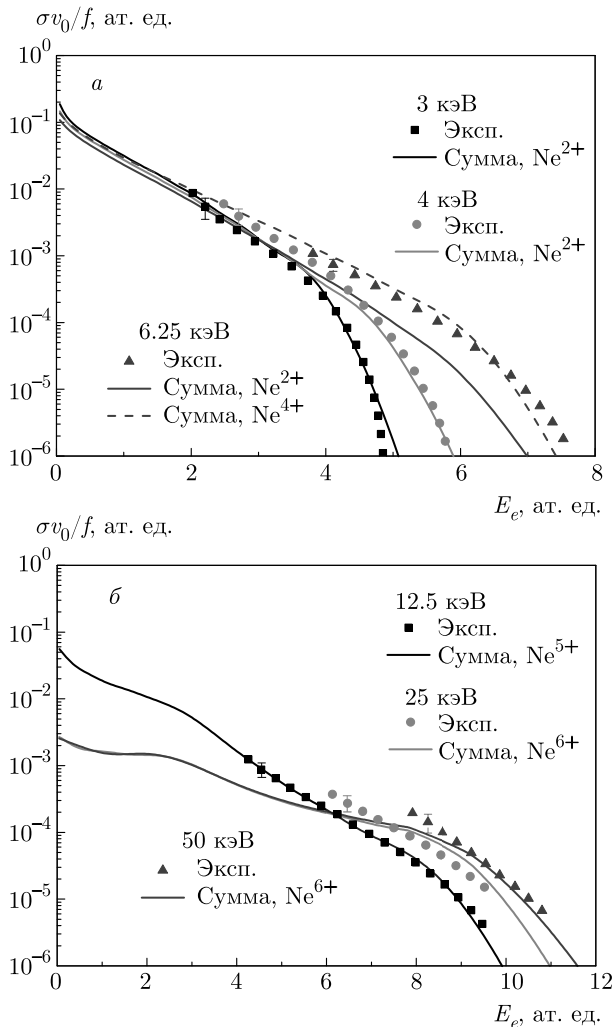
Как видно из рис. 4, верхняя кривая соответствует минимальному значению эффективного заряда, а нижняя кривая — максимальному значению. Различие этих кривых характеризует диапазон значений, получаемый при различных предположениях о величине эффективного заряда. Средняя кривая (сплошная линия) соответствует среднегеометрическому значению эффективного заряда, что учитывает тот факт, что убегающий электрон часть времени находится вблизи глубоко связанного электрона, а часть времени — вблизи слабосвязанного электрона. Как уже упоминалось, согласно обзору [21] использование среднегеометрического значения для эффективного заряда позволяет достичь наилучшего согласия с экспериментом.

Кривые для случаев  $Ne^{2+}-Ne$  и  $Ne^{4+}-Ne$  при использовании в качестве эффективного заряда среднегеометрического значения (средние кривые) совпадают. Таким образом, нет необходимости рассчитывать вероятности оже-переходов при росте степени ионизации — достаточно построить зависимости энергий рассматриваемых уровней от межъядерного расстояния и затем пересчитать вероятности оже-переходов, используя предложенный скейлинг.

#### 5. СОПОСТАВЛЕНИЕ РАСЧЕТНЫХ ЗНАЧЕНИЙ СЕЧЕНИЙ ЭМИССИИ ЭЛЕКТРОНОВ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

Для сопоставления удобно выбрать произведение сечения и скорости соударения, так как устраняется зависимость от продолжительности соударения для разных энергий соударения. Начальная вероят-





**Рис. 5.** а) Сопоставление расчетного спектра с экспериментальными данными для энергий соударения 3, 4 и 6.25 кэВ. б) Сопоставление расчетного спектра с экспериментальными данными для энергий соударения 12.5, 25 и 50 кэВ. Для расчета вероятностей переходов при энергии 12.5 кэВ использовалась диаграмма МО для системы  $Ne^{5+}-Ne$ , в остальных случаях для системы  $Ne^{6+}-Ne$

ность  $f$  наличия вакансии на  $2p\pi$  принималась равной  $1/3$ , что соответствует статистическому характеру распределения одной первоначальной вакансии между молекулярными орбиталями, формирующимися из  $2p$ -уровня  $Ne$  при больших межъядерных расстояниях. Для удобства сравнения с расчетом использовалась величина  $\sigma v_0/f$  (см. рис. 5).

Для расчета вероятностей переходов использовалась диаграмма МО для системы  $Ne^{2+}-Ne$ . При малых энергиях указана ошибка, связанная с вычитанием экспоненциальной подложки. Для случая 6.25 кэВ приведены также расчеты с исполь-

зованием вероятностей оже-переходов для системы  $Ne^{4+}-Ne$  и соответствующей диаграммы МО для расчета масштабного фактора.

Как видно из рис. 5а, для энергий 3 и 4 кэВ имеется практически полное совпадение результатов расчета и эксперимента при использовании диаграммы МО для системы  $Ne^{2+}-Ne$ . Для случая 6.25 кэВ при малых энергиях вылетевшего электрона также имеется согласие для системы  $Ne^{2+}-Ne$ , а затем расчетное сечение резко убывает, что связано с резким уменьшением вероятностей оже-процесса при уменьшении межъядерного расстояния, что соответствует увеличению энергии вылетевшего электрона. Учет дальнейшей ионизации системы и переход к использованию диаграммы МО для системы  $Ne^{4+}-Ne$  позволяет достичь согласия с экспериментом.

Сопоставление с данными эксперимента позволяет заключить, что при малых межъядерных расстояниях заметно возрастает возбуждение и степень ионизации системы сталкивающихся частиц. При небольшой коррекции диаграммы МО (увеличении энергии оже-перехода на 15%) удается добиться полного согласия с экспериментом.

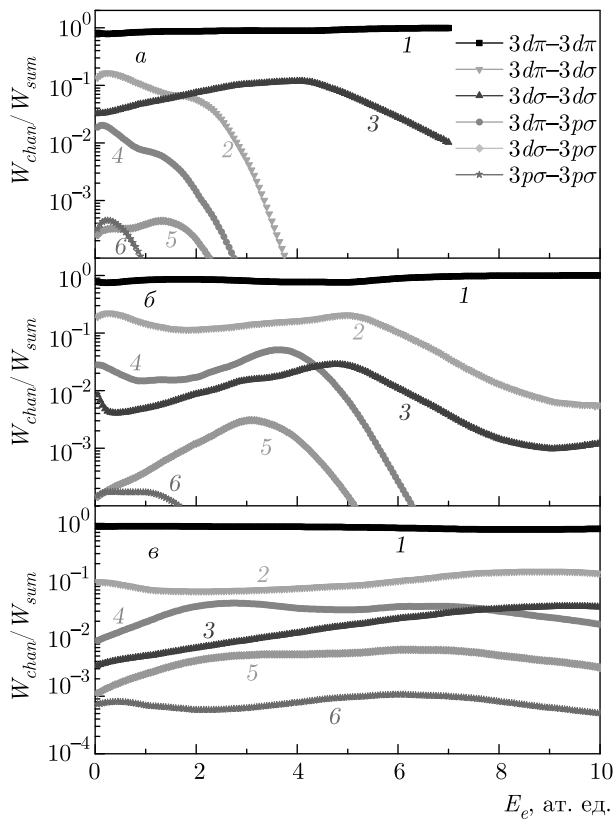
Как видно из рис. 5б, с ростом энергии соударения необходимо учитывать дальнейший рост степени ионизации сталкивающихся частиц, только в этом случае достигается согласие с экспериментом.

### 6. ВКЛАД РАЗЛИЧНЫХ КАНАЛОВ В ЗАПОЛНЕНИЕ $2p\pi$ -ВАКАНСИИ

При энергии соударения 3 кэВ основной вклад дает переход  $3d\pi^2-2p\pi\epsilon$ . При энергии электронов 2.5 ат. ед. подключается канал  $3d\pi-3d\sigma$  (для сокращения записи в дальнейшем будем записывать только начальное состояние). С ростом энергии соударения пороги для всех каналов сдвигаются в сторону больших энергий электронов (см. рис. 6), однако вклад канала  $3d\pi^2-2p\pi\epsilon$  остается доминирующим (более 80%).

### 7. СРАВНЕНИЕ СУММАРНОЙ ВЕРОЯТНОСТИ ЗАПОЛНЕНИЯ $2p\pi$ -ВАКАНСИИ С ПОЛУЧЕННОЙ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО

Как было показано в предыдущем разделе, канал  $3d\pi^2-2p\pi\epsilon$  вносит доминирующий вклад в спектры электронов. Пользуясь формулами (6) и (7), мож-



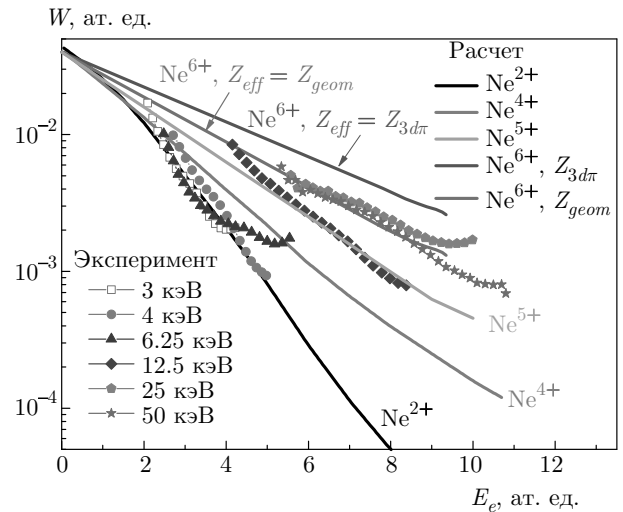
**Рис. 6.** Относительный вклад различных каналов оже-распада  $2p\pi$ -вакансии при различных энергиях соударения (*a* — 3 кэВ, *б* — 6.25 кэВ, *в* — 50 кэВ). Отношение вероятности оже-распада для каждого канала  $W_{chan}$  к суммарной вероятности  $W_{sum}$ . Обозначения каналов: 1 —  $3d\pi-3d\pi$ , 2 —  $3d\pi-3d\sigma$ , 3 —  $3d\sigma-3d\sigma$ , 4 —  $3d\pi-3p\sigma$ , 5 —  $3d\sigma-3p\sigma$ , 6 —  $3p\sigma-3p\sigma$

но получить суммарную вероятность оже-переходов непосредственно из эксперимента:

$$W(R) = \frac{\sigma v_0}{fF}, \quad (29)$$

где  $F$  — масштабный фактор доминирующего оже-канала (формула (7)).

На рис. 7 приведены рассчитанные вероятности оже-распада для случаев  $Ne^{2+}-Ne$  и  $Ne^{4+}-Ne$ , а также оцененные с помощью скейлинга вероятности оже-распада для случаев  $Ne^{5+}-Ne$  и  $Ne^{6+}-Ne$  при использовании в качестве  $Z_{eff}$  среднегеометрического значения эффективных зарядов  $2p\pi$ - и  $3d\pi$ -электронов. Для случая  $Ne^{6+}-Ne$  приведена также кривая минимального значения эффективного заряда для вылетевшего электрона (в этом случае вероятность перехода максимальна, так как достигается максимальное перекрывание волновых функций вы-

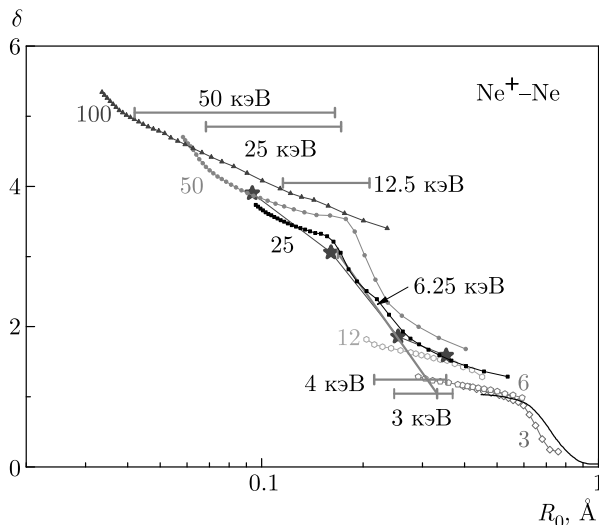


**Рис. 7.** (В цвете онлайн) Зависимости рассчитанной вероятности оже-перехода в квазимолекуле при столкновении  $Ne^+-Ne$  от энергии вылетевшего электрона и степени ионизации частиц при использовании среднегеометрического значения эффективного заряда для убегающего электрона. Для случая  $Ne^{6+}-Ne$  приведено также значение вероятности оже-перехода при использовании минимального значения эффективного заряда. Точки — экспериментальные данные для различных энергий соударения

летевшего электрона и  $3d\pi$ -электрона). Экспериментальные значения определены из отношения измененного сечения к рассчитанному геометрическому фактору.

При энергиях 3 и 4 кэВ наблюдается согласие с расчетом для  $Ne^{2+}$ , а при энергии 6.25 кэВ при увеличении энергии оже-электрона, что соответствует более глубокому сближению частиц, происходит переход к случаю  $Ne^{4+}$ . При энергии 12.5 кэВ кривая лежит между кривыми для случаев  $Ne^{4+}$  и  $Ne^{6+}$ . Кривые 25 кэВ и 50 кэВ неплохо согласуются между собой и явно ближе к расчетной кривой вероятности перехода для случая  $Ne^{6+}$  при использовании геометрического среднего для эффективного заряда, что находится в соответствии с рекомендацией, высказанной в обзоре [21].

На рис. 8 приведена зависимость среднего числа удаленных электронов  $\delta = m + n - 1$  от достигнутого расстояния наибольшего сближения. Величина  $\delta$  отличается от рассматриваемой нами степени ионизации сталкивающихся частиц на 1. Используя данные, приведенные на рис. 7, сопоставим диапазоны межъядерных расстояний, где наблюдается эмиссия оже-электронов при определенной степени ионизации сталкивающихся частиц, с данными независимых измерений величины  $\delta$ .



**Рис. 8.** Зависимость среднего числа удаленных электронов  $\delta = m + n - 1$  от достигнутого расстояния наибольшего сближения. Звездочками представлены измерения методом совпадений, когда фиксируются заряды обоих партнеров соударения [22]. В экспериментах [23, 24], где фиксировался только заряд налетающей частицы, величина  $\delta$  вычислялась как  $\delta = 2m - 1$ , т.е. предполагалось равенство  $m = n$ . Сплошной тонкой черной кривой представлена вероятность образования автоионизационного состояния [25]. Числа у кривых указывают энергии в кэВ, при которых проводились измерения. Отрезками прямых показаны интервалы межъядерных расстояний, где наблюдалась эмиссия оже-электронов из квазимолекулы. Рядом с отрезками указана энергия соударения. При энергии 6.25 кэВ  $\delta$  меняется с 2 до 4

Как видно из рис. 8, при энергиях 3 и 4 кэВ степень ионизации  $m + n = 2$  хорошо согласуется с результатами измерений числа удаленных электронов  $\delta$ . При энергии 6.25 кэВ происходит увеличение степени ионизации с 2 до 4, что удивительно хорошо совпадает с зависимостью  $\delta(R)$ . При энергиях 12.5–50 кэВ также имеется явная корреляция с величиной  $\delta$ , хотя полного совпадения нет. В анализируемых нами экспериментах под степенью ионизации мы понимаем влияние ионизованных и возбужденных электронов на экранировку волновых функций в пределе объединенного атома. Возраставшие числа возбужденных электронов может завершиться автоионизацией, а может и нет. Измерение величины  $\delta$  проводилось после разлета частиц, когда процессы релаксации возбуждения уже закончились. Таким образом, наблюдение эмиссии оже-электронов позволяет изучать процессы во время соударения (т.е. по аналогии в момент извержения вулкана, а не тогда, когда извержение закончилось, скажем, по потокам застывшей лавы).

### 8. СПЕКТРОСКОПИЯ КВАЗИМОЛЕКУЛЫ С УЧЕТОМ ЗАВИСИМОСТИ ВЕРОЯТНОСТИ ОЖЕ-ПЕРЕХОДОВ ОТ МЕЖЪЯДЕРНОГО РАССТОЯНИЯ

В нашей работе [18] для определения зависимости энергии эмитированного оже-электрона от достигнутого межъядерного расстояния было использовано два обстоятельства.

1. Для каждой энергии соударения, используя потенциал взаимодействия частиц (см., например, [26, 27]), можно рассчитать расстояние наибольшего сближения  $R_0$ , соответствующее соударению при нулевом параметре удара. Точность расчета определяется точностью наших знаний о потенциалах взаимодействия и для случая Ne–Ne составляет 4%.

2. Нормируя правое крыло расчетного спектра на экспериментальные данные, можно определить значение энергии электрона, соответствующее нулю функции Эйри при расчете спектра при нулевом параметре удара.

В условиях, когда вероятность оже-перехода сильно меняется при изменении межъядерного расстояния, в данную процедуру следует внести следующие коррективы.

1. Учесть, что вероятность перехода не меняется в туннельной области при  $R < R_0$ , что несколько меняет процедуру расчета интеграла по параметрам удара (6) при моделировании спектра электронов.

2. Сравнивать расчетный масштабный фактор  $F$  с экспериментальным:

$$F_{exp} = \frac{\sigma v_0}{fW(R)}, \tag{30}$$

что позволяет учесть влияние зависимости  $W(R)$  на производную правого крыла спектра. Полученные таким образом значения  $E_e(R)$  приведены на рис. 10. Существует также возможность получения информации о производной терма из анализа поведения правого крыла спектра в туннельной области. Описывая правое крыло с помощью функции Эйри (6) и варьируя параметр  $\alpha$ , можно добиться совпадения наклона расчетного спектра с полученным экспериментально. Из значения параметра  $\alpha$  можно определить производную терма, используя формулу (5) при  $b = 0$ :

$$\frac{dE_e}{dR} = \frac{4\alpha E_{cms}}{v_0^2 \frac{dU}{dR}}. \tag{31}$$

Как видно из рис. 9, значения производной терма, полученные разными методами, хорошо согласуются, что лишний раз подтверждает внутреннюю

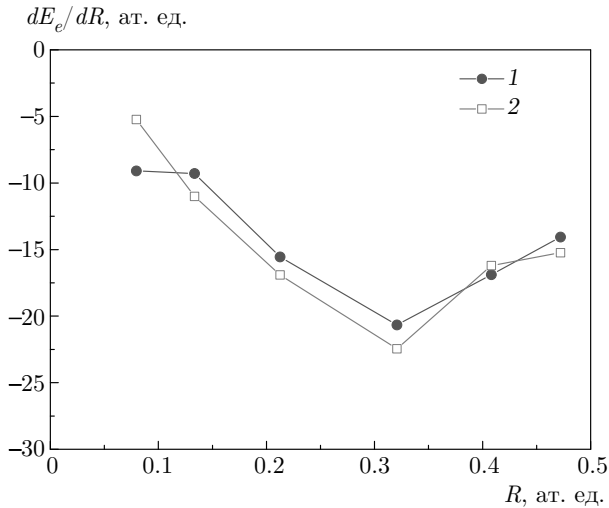


Рис. 9. Зависимость производной  $dE_e/dR$  от межъядерного расстояния  $R$ . Темные точки (1) — математическая производная терма, полученного описанным в начале раздела способом, светлые точки (2) — значения производной, полученные из анализа спада правого крыла спектра (величин  $\alpha$ )

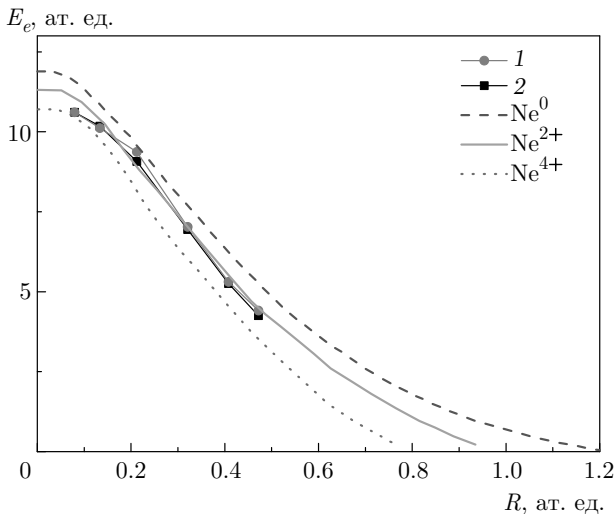


Рис. 10. Полученная из эксперимента зависимость энергии перехода  $3d\pi 3d\pi-2p\pi\epsilon$  от межъядерного расстояния  $R$  — кривая 1. Кривая 2 получена интегрированием производной, определенной из значений параметра  $\alpha$ . Для сопоставления представлены энергии для данного перехода, полученные из корреляционных диаграмм МО [19] для системы  $Ne^{q+}-Ne$  для  $q = 0, 2, 4$

согласованность развиваемого в данном исследовании подхода.

Как видно из рис. 10, полученные из эксперимента энергии перехода  $3d\pi 3d\pi-2p\pi\epsilon$  при больших  $R$ , что соответствует малым энергиям соударения,

хорошо согласуются с теоретическим расчетом для  $q = 2$ , а затем имеется тенденция к увеличению степени ионизации.

## 9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В целом, несмотря на приближенный характер использованных волновых функций, удается добиться хорошего согласия рассчитанных вероятностей оже-переходов с полученными экспериментально. Это неудивительно, так как основной вклад дают оже-переходы при межъядерных расстояниях вблизи предела объединенного атома.

Имеется отчетливая корреляция наблюдаемой степени ионизации частиц с данными независимых измерений числа удаленных электронов.

Установлена относительная роль различных каналов оже-распада.

Предложен скейлинг для оценки вероятности оже-перехода при различных степенях ионизации.

Сравнение полученных из эксперимента данных о вероятностях оже-переходов при энергиях 25 и 50 кэВ подтверждают правильность гипотезы, что выбор эффективного заряда для эмитированного электрона как среднегеометрического значения эффективных зарядов для внутреннего и внешнего электронов позволяет добиться наилучшего согласия с экспериментом.

Уточнена процедура спектроскопии терма квазимолекулы в условиях сильной зависимости вероятности оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния. Полученные значения терма хорошо согласуются с теоретическими расчетами.

Сопоставление вероятностей оже-переходов для многоэлектронной системы  $Ne-Ne$  с полученными экспериментально проведено впервые. Ранее анализ проводился только для относительно простой квазимолекулы  $Ne^+-Ne$ .

Из сравнения рассчитанных и экспериментальных данных однозначно следует вывод о значительном увеличении степени ионизации и возбуждения квазимолекулы в момент наибольшего сближения сталкивающихся атомов с ростом энергии соударения. Вывод, что система из двух сталкивающихся атомов в момент их наибольшего сближения оказывается в высоко возбужденном (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 сталки-

вающихся атомов за счет их кинетической энергии, при разлете атомов могут адиабатически вернуться в исходное состояние (распасться), не оставив следа. Наши оценки показывают, что вероятность автоионизационному состоянию распасться за время столкновения сильно меняется в зависимости от скорости сближения и разлета частиц от нескольких процентов в столкновениях в диапазоне 10–50 кэВ до весьма значительной величины около 25% для столкновений при 3 кэВ. Все же в большинстве своем вакансии доживают до разлета сталкивающихся атомов. Очевидно, что только тогда, когда распад состояния сопровождается эмиссией электрона (или кванта), который уносит энергию из системы, столкновение необратимо становится неупругим. Таким образом, исследования оже-электронов из квазимолекулы позволяют получать информацию о процессах возбуждения и ионизации непосредственно во время соударения.

## ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. Н. Зиновьев и др., Письма в ЖЭТФ **24**, 33 (1976).
2. В. В. Афросимов, Г. Г. Месхи, Н. Н. Царев, А. П. Шергин, ЖЭТФ **84**, 454 (1983).
3. А. З. Девдариани, В. Н. Островский, Ю. Н. Себякин, ЖЭТФ **73**, 412 (1977).
4. J. Eichler, U. Wille, B. Fastrup et al., Phys. Rev. A **14**, 707 (1976).
5. V. K. Nikulin and N. A. Guschina, J. Phys. B **11**, 3553 (1978).
6. B. Fricke and W.-D. Sepp, J. Phys. B **14**, L549 (1981).
7. В. В. Афросимов, Г. Г. Месхи, Н. Н. Царев, А. П. Шергин, Письма в ЖЭТФ **31**, 729 (1980).
8. В. Р. Асатрян, А. П. Шергин, Письма в ЖЭТФ **44**, 454 (1986).
9. Л. М. Кишиневский, Е. С. Парилис, ЖЭТФ **55**, 1932 (1968).
10. L. M. Kishinevsky, B. G. Krakov, and E. S. Parilis, Phys. Lett. A **85**, 141 (1981).
11. E. J. McGuire, Phys. Rev. A **3**, 587 (1971).
12. V. Sidis, J. Phys. B **6**, 1188 (1973).
13. Е. А. Соловьев, *Новые подходы в квантовой физике*, Физматлит, Москва (2019).
14. G. N. Ogurtsov, V. M. Mikoushkin, S. Yu. Ovchinnikov et al., Phys. Rev. A **74**, 042720 (2006).
15. S. Yu. Ovchinnikov, J. H. Macek, and V. M. Mikoushkin, Phys. Rev. A **84**, 032706 (2011).
16. J. H. Macek and S. Yu. Ovchinnikov, Phys. Rev. Lett. **104**, 033201 (2010).
17. L. Ph. H. Schmidt, C. Goil, D. Metz et al., Phys. Rev. Lett. **112**, 083201 (2014).
18. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, ЖЭТФ **159**, 56 (2021).
19. J. Eichler and U. Wille, Phys. Rev. A **11**, 1973 (1975).
20. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
21. W. Bambynek, B. Crasemann, and R. W. Fink, Rev. Mod. Phys. **44**, 716 (1972).
22. Q. C. Kessel, M. P. McCaughey, and E. Everhart, Phys. Rev. **153**, 57 (1967).
23. E. N. Fuls, P. R. Jones, F. P. Ziemba et al., Phys. Rev. **107**, 704 (1957).
24. P. R. Jones, P. Costigan, and G. Van Dyk, Phys. Rev. **129**, 211 (1963).
25. D. J. Bierman and W. C. Turkenburg, Physica **67**, 533 (1973).
26. А. Н. Зиновьев, ЖТФ **78**, 15 (2008).
27. A. N. Zinoviev and K. Nordlund, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **406**, 511 (2017).