

**Санкт-Петербургский политехнический университет  
Петра Великого  
Институт физики, нанотехнологий и телекоммуникаций**

На правах рукописи

**Михайлов Владислав Сергеевич**

**ОЖЕ-ПЕРЕХОДЫ В КВАЗИМОЛЕКУЛЕ ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ АТО-  
МОВ НЕОНА**

Направление подготовки: 03.06.01 Физика и астрономия

---

*Код и наименование*

Направленность: 03.06.01\_06 Физика плазмы

---

*Код и наименование*

**НАУЧНЫЙ ДОКЛАД**

об основных результатах научно-квалификационной работы (диссертации)

Автор работы: Михайлов В.С.

Научный руководитель: проф., д-р физ.-  
мат. наук Смирнов А.С.

Научно-квалификационная работа выполнена в ВШ/на кафедре Института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Директор ВШ:

**Журихина Валентина  
Владимировна**  
доктор физико-математических  
наук, доцент

Научный руководитель:

**Смирнов Александр Сергеевич**  
доктор физико-математических  
наук, профессор

Рецензент:

**Кобелев Антон Андреевич**  
кандидат физико-математических  
наук, физик-исследователь в ООО  
"Коддан Текнолоджис"

С научным докладом можно ознакомиться в библиотеке ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» и на сайте Электронной библиотеки СПбПУ по адресу: <http://elib.spbstu.ru>

## Содержание

<b>Общая характеристика работы</b> .....	<b>4</b>
Актуальность работы .....	4
Цель и задачи исследования .....	5
Научная новизна .....	5
Теоретическая и практическая значимость.....	6
Апробация работы .....	6
Публикации .....	6
Представление научного доклада: основные положения.....	6
<b>Содержание работы</b> .....	<b>8</b>
Объекты, (предмет) и методы исследования .....	8
Объектом исследования .....	8
Процессом исследования .....	8
Результаты и их обсуждение .....	8
Энергии и вероятности оже-переходов в квазимолекуле.....	8
Скейлинг для вероятностей оже-переходов.....	12
Сопоставление расчетных значений сечений эмиссии электронов с экспериментальными данными .....	14
Вклад различных каналов в заполнение 2рл вакансии .....	16
Сравнение суммарной вероятности заполнения 2рл вакансии с экспериментом .....	18
Заключение .....	21
Список литературы .....	23

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность работы

В физике атомных столкновений широко используется понятие квазимолекулы. Квазимолекула представляет некоторое промежуточное состояние системы двух атомов, возникающее в процессе их соударения. Использование Квазимолекулярное описание обладает невероятно широким диапазоном применения (Краков Б Г 1989). Он включает в себя взаимодействие частиц в плазме, бомбардировку твердых тел ионами и атомами, широкий спектр явлений в астрофизики и многое другое. В области пылевой плазмы для изучения динамики заряженных макрочастиц было даже введено понятие дебаевской квазимолекулы (Яковленко 1999).

При столкновениях атомов происходит возбуждение внутренних и внешних электронов квазимолекулы. Распад подобных состояний сопровождается электронной эмиссией или излучением из квазимолекулы. Анализ электронных и радиационных спектров возможен при наличии информации об электронных термах, частотах оже-переходов в широком диапазоне межъядерных расстояний исходных составляющих квазимолекулы. Также необходимо учитывать различные заряды и различные возбужденные состояния сталкивающихся ядер.

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 Kr-Kr (В. Fricke 1981) показали его близость к орбиталям  $4p\pi$  и  $4d\delta$ .

## Цель и задачи исследования

В задачи настоящей работы входит: 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 экспериментом.

## Научная новизна

1. Впервые с помощью квантовомеханического подхода, учитывающего динамику соударения, удалось количественно описать наблюдаемые спектры электронов.

2. Сопоставление с экспериментом позволило установить, что с ростом энергии соударения, когда достигаются все меньшие расстояния наибольшего сближения частиц, степень ионизация системы (количество удаленных электронов) возрастает с 2 до 6. Данная зависимость должна учитываться и при анализе других столкновительных процессов, в частности при рассмотрении торможения атомных частиц в веществе.

3. Расчеты вероятности Оже распада вакансии на  $2p$  орбитали при различных степенях ионизации системы проведено впервые. Установлен доминирующий вклад перехода  $3d\pi-3d\pi-2p\pi$ , что явилось неожиданным - первоначально предполагался сопоставимый вклад 6 каналов. Это позволило уточнить вероятности Оже – переходов в квазимолекуле, извлекаемые из эксперимента.

---

## **Теоретическая и практическая значимость**

Проведённая работа позволила более детально изучить электронные переходы в квазимолекуле. Тонкое изучение каналов Оже-переходов в квазимолекуле наглядно продемонстрировало более сложную физику автоионизационных процессов. Расчитанные значения энергий и частот оже-переходов являются теоретической основой для интерпретации и анализа экспериментальных работ по оже-спектроскопии квазимолекул, взаимодействию ионных пучков с твёрдым телом, а также позволит внести некоторые уточнения в сечения перезарядки и остального широкого спектра ион-атомного столкновений.

---

## **Апробация работы**

Результаты работы были представлены на международной конференции “The XXV International Conference on Ion-Surface Interactions (ISI-2021)”

---

## **Публикации**

Результаты работы приняты к публикации в журнале ЖЭТФ.  
Также часть результатов отправлена в ПЖТФ.

---

## **Представление научного доклада: основные положения**

Проведены расчеты вероятностей Оже-распада вакансии на  $2p$ -орбитали в квазимолекуле  $Ne^+-Ne$ , 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  $2p$ -вакансии от условий соударения.

---

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

### Объекты, (предмет) и методы исследования

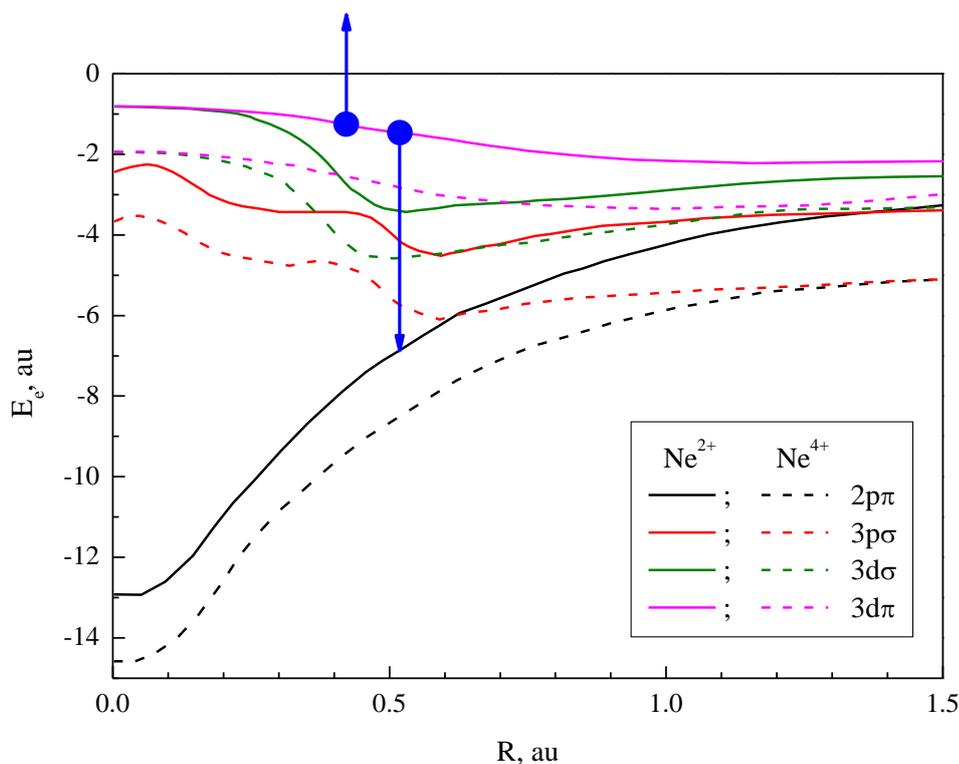
**Объектом исследования** является квазимолекула  $\text{Ne}^+-\text{Ne}$ , короткоживущая системе, образующаяся при столкновении иона и атома неона.

**Процессом исследования** является Оже-распад вакансии на  $2p\pi$ -орбитали в квазимолекуле  $\text{Ne}^+-\text{Ne}$ .

### Результаты и их обсуждение

#### Энергии и вероятности оже-переходов в квазимолекуле

Исходя из диаграммы молекулярных орбиталей (МО) рис.1 были рассчитаны энергии и оже-переходов квазимолекулы  $\text{Ne}-\text{Ne}$ .



**Рисунок 1.** Диаграмма МО для систем  $\text{Ne}^{2+}-\text{Ne}$  (сплошные линии) и  $\text{Ne}^{4+}-\text{Ne}$  (штриховые линии)

Диаграммы МО для систем  $\text{Ne}-\text{Ne}$ ,  $\text{Ne}^{2+}-\text{Ne}$  и  $\text{Ne}^{4+}-\text{Ne}$  были рассчитаны в работе (J. Eichler, 1975). Диаграмма МО для других случаев может быть получена масштабированием результатов работы (J. Eichler, 1975).

Как следует из диаграммы МО (Рис. 1), заполнение вакансии на  $2p\pi$ -уровне 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, т.к. формируются из незаполненных при больших межъядерных расстояниях уровней. Орбиталь  $4f\sigma$  опустошена переходами электронов в континуум. Таким образом, имеется, по крайней мере 6 вариантов Оже переходов:  $3p\sigma^2-2r\pi\epsilon$  (под значком  $\epsilon$  понимается улетающий электрон),  $3d\sigma^2-2r\pi\epsilon$ ,  $3d\pi^2-2r\pi\epsilon$ ,  $3p\sigma 3d\sigma-2r\pi\epsilon$ ,  $3p\sigma 3d\pi-2r\pi\epsilon$  и  $3d\sigma 3d\pi-2r\pi\epsilon$ . В дальнейшем для обозначения канала используется начальное состояние для Оже-перехода.

Оценки (А.Н. Зиновьев, 2021) показывают, что в изучаемом случае Оже-распад  $2p\pi$ -вакансии происходит при расстояниях менее 0.7 а.е. При достижении межъядерного расстояния 1.3 а.е. происходит выдвигание  $4f\sigma$  с последующем переходом одного-двух электронов в континуум. При энергиях 3-4 кэВ среднее число удаленных электронов 1, т.е. при этих энергиях соударения нужно рассматривать энергии Оже-переходов для системы  $Ne^{2+}-Ne$ , а при больших энергиях следует перейти к диаграмме для  $Ne^{4+}-Ne$  и  $Ne^{6+}-Ne$ .

Вероятность Оже-перехода в единицу времени определяется формулой

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \iint \psi_f^* \frac{e^2}{r_{1,2}} \psi_i d\tau_1 d\tau_2 \right|^2$$

где  $\psi_i$  – волновая функции системы из двух электронов в атоме, находящихся на возбужденных уровнях,  $\psi_f$  – волновая функция системы из электрона на  $2p\pi$ -орбитали, и Оже-электрона, т. е. свободного электрона, покидающего атом. Оператор  $\frac{e^2}{r_{1,2}}$  – описывает кулоновское взаимодействие двух электронов.

Волновую функцию системы из двух электронов можно выразить через одно-электронные волновые функции. В таком случае волновая функция начального состояния системы будет представлять собой комбинацию двух волновых функций стационарных состояний электронов и имеет вид:

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

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

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

Здесь  $1/\sqrt{2}$  выступает в качестве нормировочного коэффициента. Знак  $\pm$  определяется симметрией волновой функции. В случае однонаправленных 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:

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

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:

$$E_i = \frac{Z_i^2}{2n^2}$$

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 (Л.Д. Ландау, 1989)

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

Здесь  $\Gamma$  – гамма функция,  $\varepsilon$  – энергия свободного электрона, а  $k = \sqrt{2\varepsilon}$ . Все величины представлены в атомной системе единиц. В случае свободного электрона определить  $z$  через главные квантовые числа невозможно, и используется некоторое

$z_{eff}$  значение. Таким образом, для волновой функции свободного электрона существует некоторая неопределённость, 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 (W. Vambynek, 1972) демонстрируется хорошее согласие расчетов с экспериментом 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.  $z_{eff} = \sqrt{Z_{2p\pi} \cdot Z_{exp}}$

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

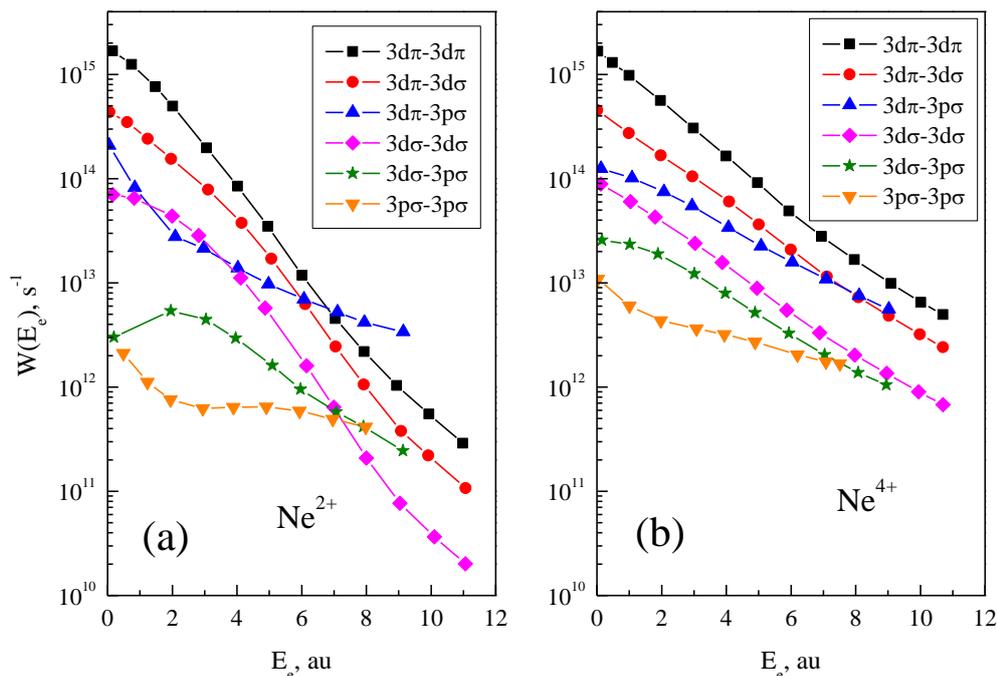
$$\frac{1}{|r_1 - r_2|} = \sum_{l,m} \frac{r_{min}^l}{r_{max}^{l+1}} Y_{lm}^*(\Omega') Y_{lm}(\Omega) \frac{4\pi}{2l + 1}$$

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 двухкратных 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  $\frac{r_{min}^l}{r_{max}^{l+1}}$

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

Результаты расчетов представлены на рис. 2.



**Рисунок 2. Зависимости вероятностей Оже-переходов для различных каналов от энергии вылетевшего электрона для случаев  $Ne^{2+}-Ne$  (a) и  $Ne^{4+}-Ne$  (b).**

Как видно из рис. 2, ионизация квазимолекулы приводит к заметному росту вероятности оже-переходов. 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.

### 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 значение интегралов, т.к. сводится к простой замене переменных. Следовательно, 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 электрона  $E_2$ . Величина энергии вылетевшего электрона будет равна  $E_1 - 2 \cdot E_2 = E_2 (E_1 / E_2 - 2)$ , т.е. тоже масштабируется.

Как известно, вылетевший электрон частично находится 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 (W. Bambynek, 1972) 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. 3 приведена зависимость вероятности оже-переходов для систем с различной степенью ионизации и предположения о величине эффективного заряда для вылетающего электрона.

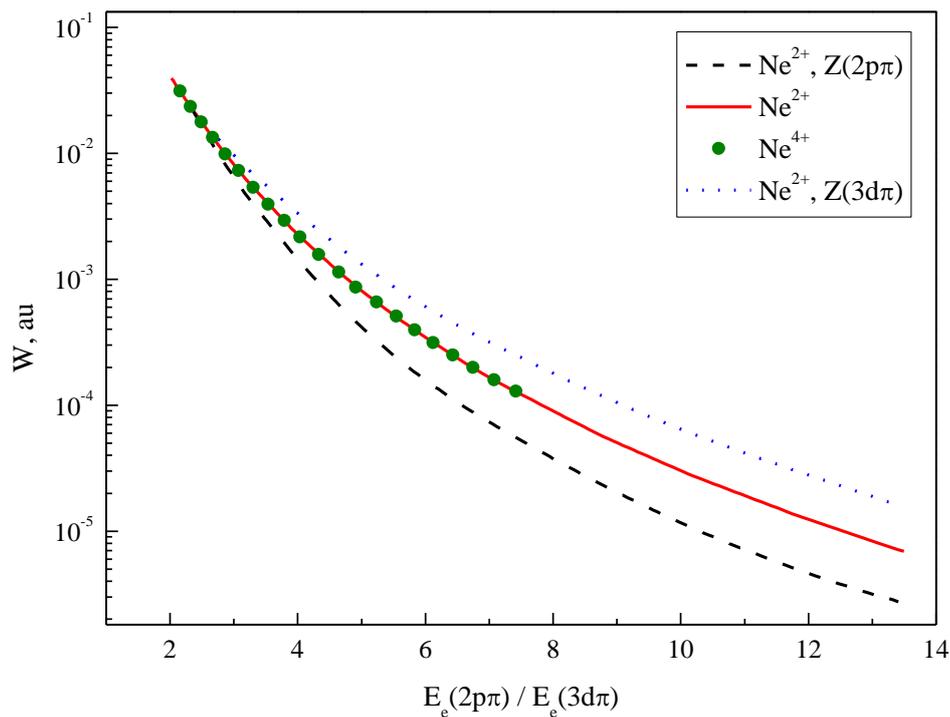


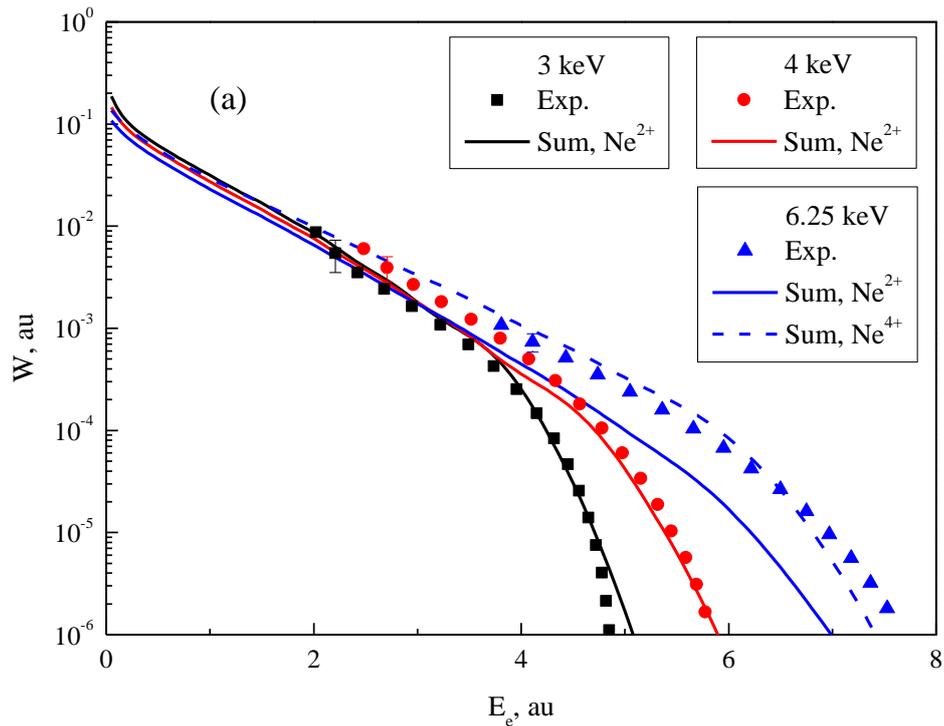
Рисунок 3. Зависимость вероятности Оже-перехода  $3d\pi 3d\pi-2p\pi$   $\varepsilon$  от отношения энергий для рассматриваемых состояний. Пунктирная кривая соответствует минимальному значению эффективного заряда ( $Z_{eff} = Z_{3d\pi}$ ), штриховая кривая - эффективному заряду внутреннего электрона (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

Как видно из рис. 3, 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 (W. Vambynek, 1972), 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.

### **Сопоставление расчетных значений сечений эмиссии электронов с экспериментальными данными**

Для сопоставления удобно выбрать произведение сечения на скорость соударения, т.к. устраняется зависимость от продолжительности соударения для разных энергий соударения. Начальная вероятность  $f$  наличия вакансии на  $2p$  принималась равной  $1/3$ , что соответствует статистическому характеру распределения одной первоначальной вакансии между молекулярными орбиталями, формирующимся из  $2p$ -уровня  $Ne$  при больших межъядерных расстояниях. Для удобства сравнения с расчетом использовалась величина  $\sigma \cdot v_0/f$ .

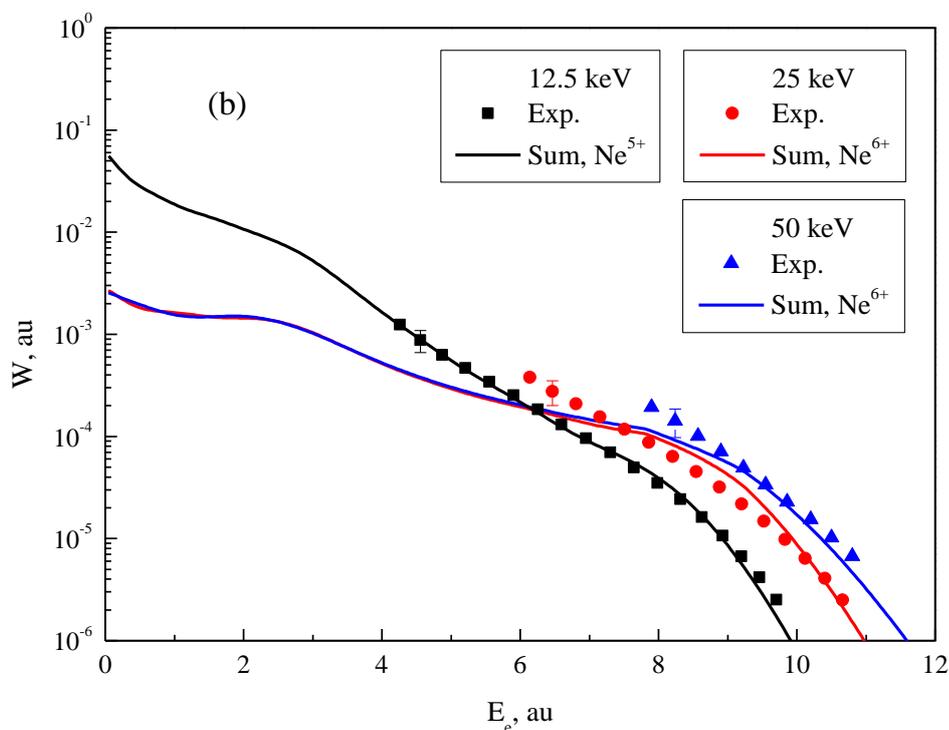


**Рисунок 4 (а).** Сопоставление расчетного спектра с экспериментом для энергий соударения 3, 4 и 6.25 кэВ.

Для расчета вероятностей переходов использовалась диаграмма МО для системы  $\text{Ne}^{2+}\text{-Ne}$ . При малых энергиях указана ошибка, связанная с вычитанием экспоненциальной подложки. Для случая 6.25 кэВ приведены также расчеты с использованием вероятностей Оже-переходов для системы  $\text{Ne}^{4+}\text{-Ne}$  и соответствующей диаграммы МО для расчета масштабного фактора. Пунктиром показан результат, полученный при коррекции терма на 15%.

Как видно из рис. 4а, для энергий 3 и 4 кэВ имеется практически полное совпадение расчета и эксперимента при использовании диаграммы МО для системы  $\text{Ne}^{2+}\text{-Ne}$ . Для 6.25 кэВ при малых энергиях вылетевшего электрона также имеется согласие для системы  $\text{Ne}^{2+}\text{-Ne}$ , а затем расчетное сечение резко падает, что связано с резким падением 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  $\text{Ne}^{4+}\text{-Ne}$  позволяет достичь согласия с экспериментом.

Сопоставление с экспериментом 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%) удастся добиться полного согласия с экспериментом.



**Рисунок 4 (б).** Сопоставление расчетного спектра с экспериментом для энергий соударения 12.5, 25 и 50 кэВ. Для расчета вероятностей переходов при энергии 12.5 кэВ использовалась диаграмма МО для системы  $\text{Ne}^{5+}\text{-Ne}$ , в остальных случаях для системы  $\text{Ne}^{6+}\text{-Ne}$ .

Как видно из рис. 4б, с ростом энергии соударения необходимо учитывать дальнейший рост степени ионизации сталкивающихся частиц, только в этом случае достигается согласие с экспериментом

### **Вклад различных каналов в заполнение 2рл вакансии**

При энергии соударения 3 кэВ основной вклад дает переход  $3d\sigma^2\text{-}2рл\ \epsilon$ . При энергии электронов 2.5 а.е. подключается канал  $3d\pi 3d\sigma$  (для сокращения записи в дальнейшем будем записывать только начальное состояние). С ростом энергии со-

ударения пороги для всех каналов сдвигаются в сторону больших энергий электронов, однако вклад канала  $3d\sigma^2-2p\pi$  остается доминирующим (более 80%).

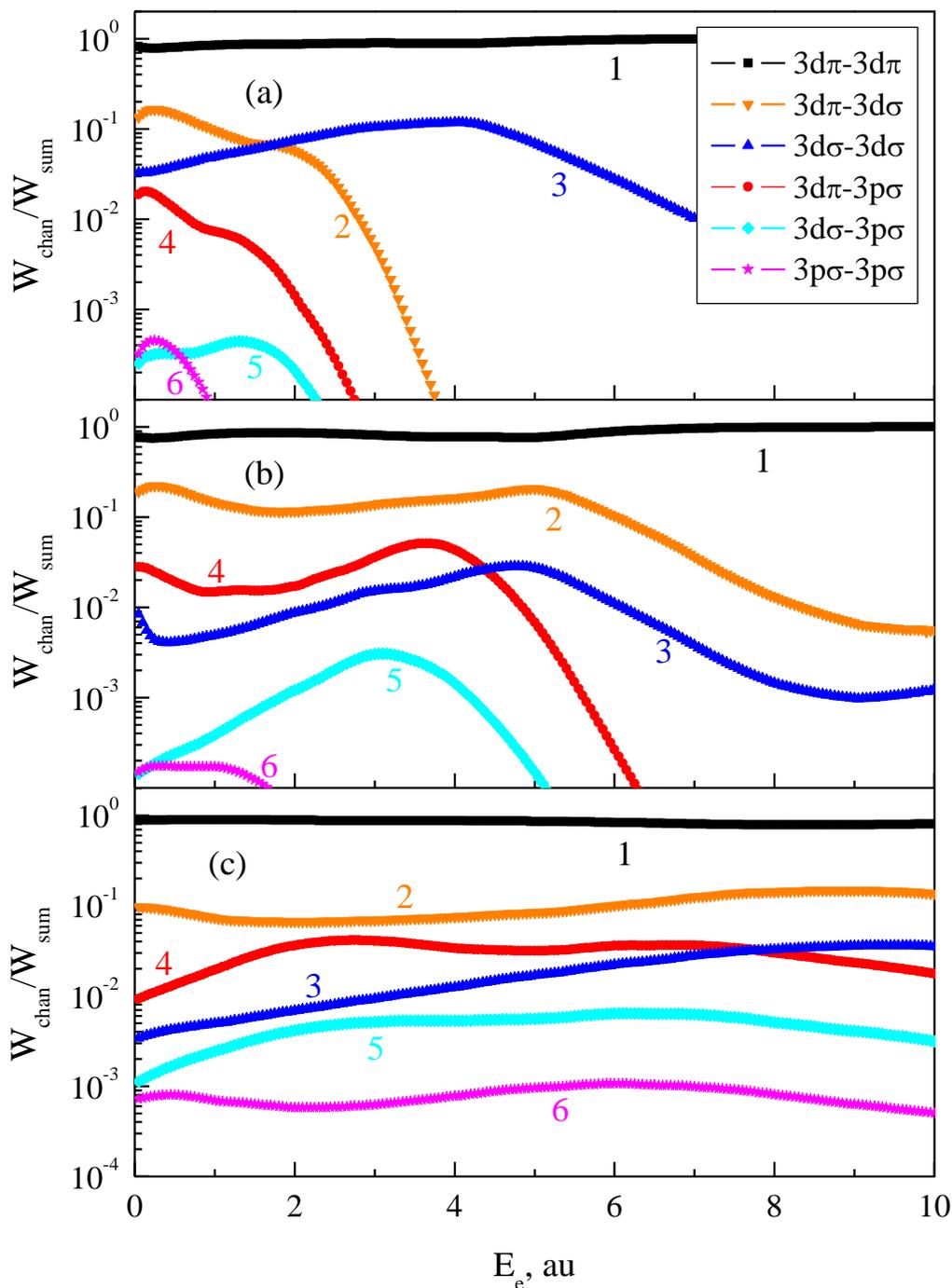


Рисунок 5. Относительный вклад различных каналов Оже-распада  $2p\pi$ -вакансии при различных энергиях соударения (а – 3 кэВ, б – 6.25 кэВ, с – 50 кэВ). Отношение вероятности Оже-распада для каждого канала  $W_{chan}$  к суммарной вероятности  $W_{sum}$ . Обозначения каналов: 1 –  $3d$

## Сравнение суммарной вероятности заполнения 2рл вакансии с экспериментом

Как было показано канал  $3d\sigma^2$ -2рл  $\epsilon$  вносит доминирующий вклад в спектры электронов. Можно получить суммарную вероятность Оже переходов непосредственно из эксперимента.

$$W(R) = \frac{\sigma \cdot v_0}{f \cdot F}$$

где F- масштабный фактор доминирующего Оже-канала

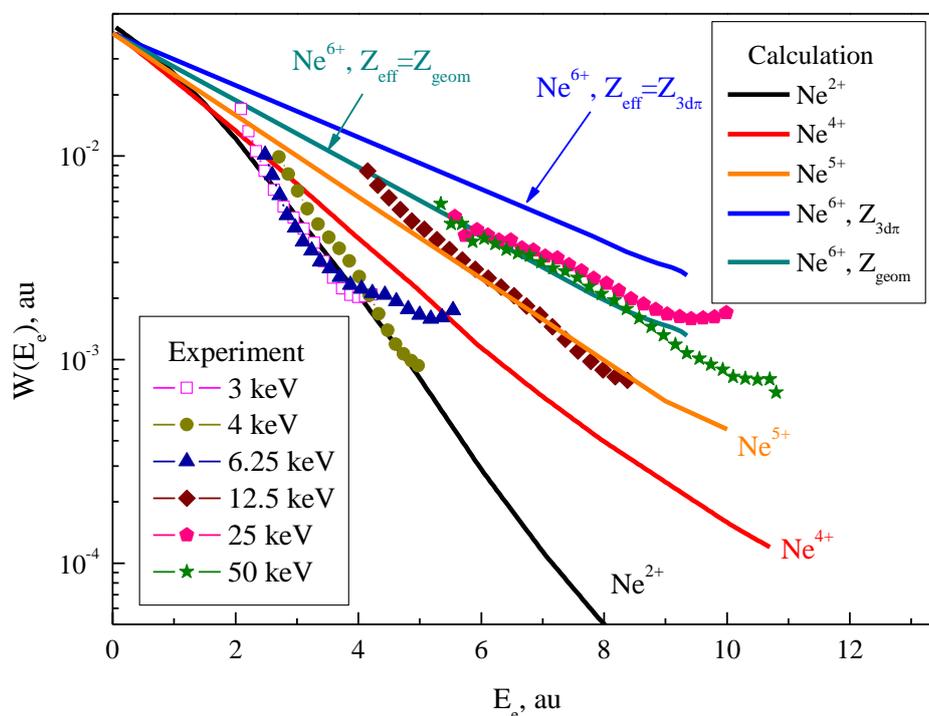


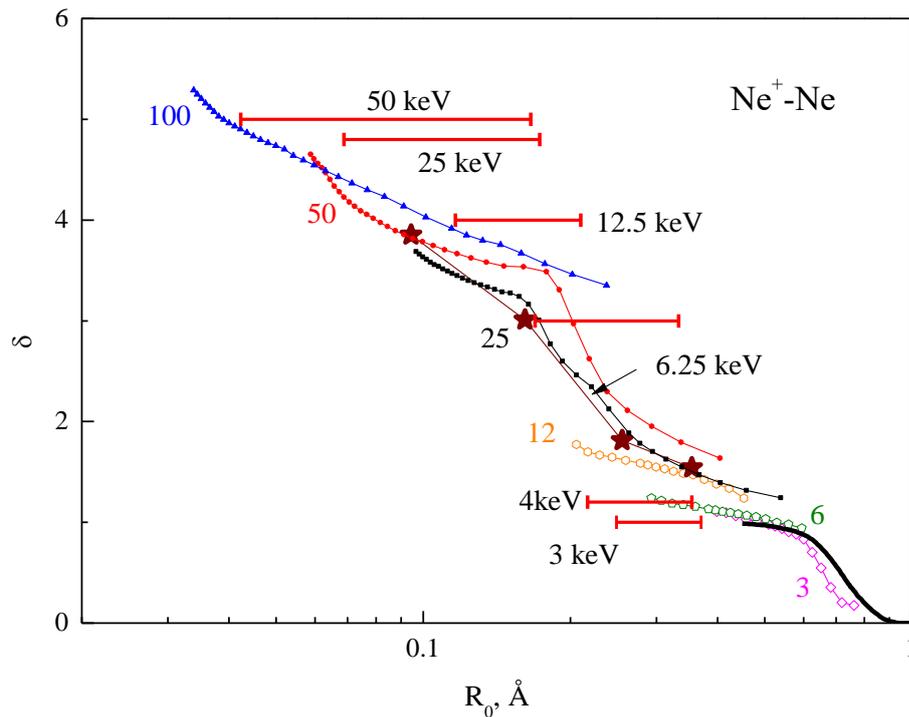
Рисунок 6. Зависимость рассчитанной вероятности Оже-перехода в квазимолекуле при столкновении  $Ne^+-Ne$  от энергии вылетевшего электрона и степени ионизации частиц при использовании среднегеометрического значения эффективного заряда для убегающего электрона. Для случая  $Ne^{6+}-Ne$  приведено также значение вероятности Оже-перехода при использовании минимального значения эффективного заряда. Точки-экспериментальные данные для различных энергий соударения.

На рис.6 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 значение эффективных зарядов 2рл и 3дл 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 перекрытие волновых функций вылетевшего электрона и  $3d\pi$  электрона). Экспериментальные значения определены из отношения измеренного 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 случаями  $Ne^{4+}$  и  $Ne^{6+}$ . Кривые 25 кэВ и 50 кэВ неплохо согласуются между собой и явно ближе к расчету вероятности перехода для случая  $Ne^{6+}$  при использовании геометрического среднего для эффективного заряда, что находится в соответствии с рекомендацией, высказанной в обзоре (W. Vambynek, 1972).

На рис. 7 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 на рис. 6, сопоставим диапазоны межъядерных расстояний, где наблюдается эмиссия Оже-электронов при определенной степени ионизации сталкивающихся частиц с данными независимых измерений.



**Рисунок 7. 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 (Q.C. Kessel, 1967). В экспериментах (P.R. Jones, 1963), где фиксировался только заряд налетающей частицы, величина  $\delta$  вычислялась как  $\delta=2m-1$ , т.е. предполагалось равенство  $m=n$ . Сплошной линией представлена вероятность образования автоионизационного состояния (D.J. Vierman, 1973). Сплошными жирными линиями показаны интервалы межъядерных расстояний, где наблюдалась эмиссия Оже-электронов из квазимолекулы.

Как видно из рис. 7, при энергиях 3 и 4 кэВ степень ионизации  $m+n=2$  хорошо согласуется с измерениями числа удаленных электронов  $\delta$ . При энергии 6.25 кэВ происходит увеличение степени ионизации с 2 до 4, что удивительно хорошо совпало 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 функции в пределе объединенного атома. Возрастание числа возбужденных электронов может завершиться автоионизацией, а может и нет. Измерение величины  $\delta$  производилось после разлета частиц, когда процессы релаксации возбуждения уже закончились. Таким образом, наблюдение эмиссии Оже-электронов позволяет изучать процессы во время соударения.

### **Заключение**

В целом, несмотря на приближенный характер использованных волновых функций удастся добиться хорошего согласия рассчитанных вероятностей Оже-переходов с экспериментом. 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.

Установлена относительная роль различных каналов Оже-распада.

Предложен скейлинг для оценки вероятности оже-перехода при различной степени 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 электрона 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 экспериментом проведено впервые. Ранее анализ проводился только для относительно простой квазимолекулы  $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$ .

Из сравнения расчетов с экспериментом однозначно следует вывод о значительном увеличении степени ионизации и возбуждения квазимолекулы в момент наибольшего сближения сталкивающихся атомов с ростом энергии соударения. Вы-

вод, 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 сталкивающихся 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 в  $\sim 25\%$  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.

## Список литературы

- B. Fricke, W-D. Sepp., 1981.** *J. Phys.* 1981 г.  
**D.J. Bierman, W.C. Turkenburg. 1973.** *Physica.* 1973 г., 67, 533.  
**J. Eichler, U. Wille. 1975.** *Phys. Rev.* 1975 г.  
**P.R. Jones, P. Costigan, G. Van Dyk. 1963.** *Phys. Rev.* 1963 г., 129, 211.  
**Q.C. Kessel, M.P. McCaughey, E. Everhart. 1967.** *Phys. Rev.* . 1967 г., 153, 57.  
**W. Vambynek, B. Crasemann, R. W. Fink., 1972.** *Rev. Mod. Phys.* . 1972 г., 44, 716.  
**А.Н. Зиновьев, П.Ю. Бабенко, А.П. Шергин. 2021.** *ЖЭТФ.* 2021 г., 56, стр. 159.  
**Краков Б Г, Парилис Э С. 1989.** Квасимолекулы. *УФН.* 1989 г., стр. 477–512.  
**Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц., 1989.** *Квантовая механика.* Москва : Наука, 1989.  
**Яковленко, С.И. 1999.** О взаимодействии заряженных пылинок. Дебаевская квазимолекула. 1999 г., стр. 83-89.

## Список работ, опубликованных по теме научно-квалификационной работы (диссертации)

### Публикации в изданиях, рецензируемых ВАК

Результаты работы приняты к публикации в журнале ЖЭТФ. Ожидается публикация в ближайшее время.

Также часть результатов отправлена в ПЖТФ.

Аспирант \_\_\_\_\_ ФИО