

ОЖЕ-ПЕРЕХОДЫ НА $2p\pi$ -ОРБИТАЛЬ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ЛЕГКИХ АТОМОВ

В.В.Афросимов, Г.Г.Месхи, Н.Н.Царев, А.П.Шергин

Методом оже-спектроскопии впервые экспериментально определены энергии $2p\pi$ -уровня в квазимолекуле. Показано, что вероятность оже-распада $2p\pi$ -вакансий близка к вероятности распада $2p$ -вакансий в объединенном атоме.

В квазимолекуле, образуемой двумя сталкивающимися атомами, возможно возникновение внутренних вакансий. Распад вакансий путем оже-переходов должен приводить к появлению электронов, энергетическое распределение которых отражает поведение энергии $E(R)$ и ширины $\Gamma_A(R)$ уровня с вакансиями при изменении межъядерного расстояния R . Поэтому анализ оже-спектров может быть использован, в принципе, для спектроскопии уровней квазимолекул. ¹

В столкновениях легких атомов с $Z \ll 10$ высока вероятность появления вакансий на $2p\pi$ молекулярной орбитали, поскольку эта орбиталь формируется из незаполненных уровней атомов и снижается при уменьшении межъядерного расстояния. Однако, изучение оже-переходов на $2p\pi$ -орбиталь является сложной задачей и требует измерения сечений $d^2\sigma / dE_e dp$ — дифференциальных по энергии электронов E_e и по параметру удара p . Сложность определяется тем, что в энергетических спектрах электронов, образующихся при столкновениях в кэВ диапазоне начальных энергий, присутствует интенсивная непрерывная составляющая, обусловленная прямой ионизацией наружных электронов [1]. Характерной областью для таких переходов являются межъядерные расстояния $R \approx 1 \text{ \AA}$. В то же время для исследования $2p\pi$ -орбитали требуется сблизить частицы до $R \approx 0,1 \text{ \AA}$. Отношение геометрических сечений (πR^2) для этих двух процессов составляет $\sim 10^2$. В результате непрерывная составляющая, связанная с прямой ионизацией, создает интенсивный фон, препятствующий выделению оже-переходов на $2p\pi$ -орбиталь.

В настоящей работе эту трудность удалось преодолеть благодаря использованию методики регистрации электронов по совпадениям с ионами, рассеянными на фиксированный угол, что позволяло выделять спектры электронов для столкновений при заданных параметрах удара p [2]. Это обеспечило уменьшение относительного вклада непрерывной составляющей в спектрах, измеренных при фиксированных $p \approx 0,1 \text{ \AA}$, примерно в 10^2 раз по сравнению со спектром, просуммированным по всем параметрам удара $\frac{d\sigma}{dE_e}(E_e)$.

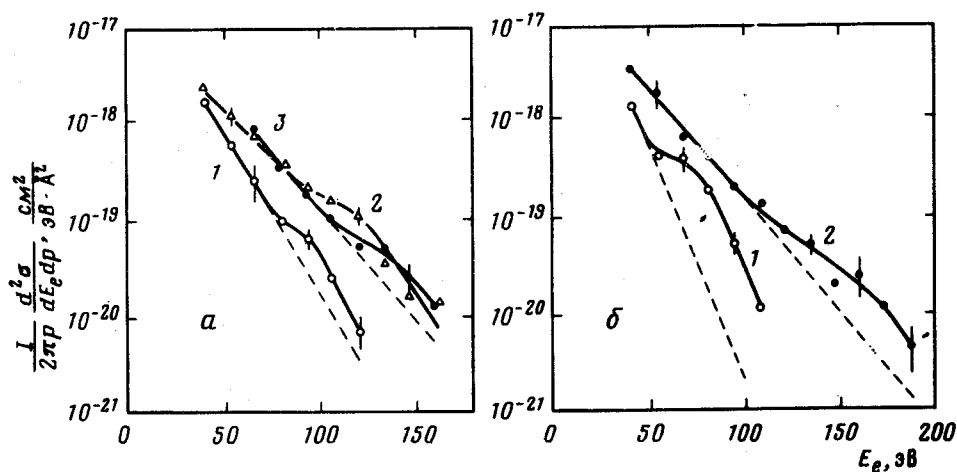


Рис.1. Энергетические спектры электронов, образующихся в столкновениях: а - $O^+ + O_2$ 1 - $E_0 = 25 \text{ кэВ}$, $\theta = 8^\circ$, $p = 0,18 \text{ \AA}$, 2 - $E_0 = 50 \text{ кэВ}$, $\theta = 4^\circ$, $p = 0,16 \text{ \AA}$, 3 - $E_0 = 50 \text{ кэВ}$, $\theta = 9^\circ$, $p = 0,09 \text{ \AA}$; б - $Ne^+ + Ne$ 1 - $E_0 = 15 \text{ кэВ}$, $\theta = 13,3^\circ$, $p = 0,19 \text{ \AA}$, 2 - $E_0 = 50 \text{ кэВ}$, $\theta = 12^\circ$, $p = 0,09 \text{ \AA}$

Для изучения $2p\pi$ -орбитали в квазимолекулах $O - O$ и $Ne - Ne$ измерены спектры электронов, образующихся в столкновениях $O^+ - O_2$ и $Ne^+ - Ne$ при энергиях налетающих ионов $E_0 = 10 - 50 \text{ кэВ}$. Экспериментальные спектры приведены на рис.1. В то время как в спектрах $d\sigma/dE_e$ [1] присутствует лишь непрерывная составляющая, спадающая с ростом E_e по экспоненциальному закону, в спектрах $d^2\sigma/dE_e dp$ на экспоненты накладываются максимумы в области $E_e \approx 80 - 160 \text{ эВ}$. Наиболее существенным аргументом, подтверждающим квазимолекулярную природу наблюдаемых максимумов, является смещение их в сторону больших E_e при уменьшении параметра удара. Такое поведение характерно для оже-переходов на снижающуюся при уменьшении R орбиталь. Кроме того, энергии электронов в максимумах сильно отличаются от энергий оже-электронов, образующихся при заполнении K -вакансий в изолированных атомах O ($\sim 470 \text{ эВ}$) и Ne ($\sim 750 \text{ эВ}$) и, напротив, соответствуют энергиям оже-электронов вследствие распа-

да $2p\pi$ -вакансий, которые можно ожидать исходя из корреляционных диаграмм для Ne - Ne [3].

Ход $2p\pi$ -орбитали в зависимости от межъядерного расстояния может быть с точностью до энергий связи наружных электронов восстановлен по энергиям оже-электронов, образовавшихся в точке наибольшего сближения R_0 . При энергиях электронов, отвечающих переходам в окрестности R_0 , в спектре $\frac{d^2\sigma}{dE_e dp}(E_e)$ должен существовать пик, описываемый функцией Эйри - $Ai(x)$ [4]:

$$\frac{d^2\sigma}{dE_e dp} = 4\pi p f \Gamma_A \alpha^{-2/3} Ai^2 \left\{ \alpha^{-1/3} [E_e - E_e(R_0)] + \frac{i}{2} \Gamma_A \right\}, \quad (1)$$

где f - число вакансий на орбитали, α - произведение dE/dR на ускорение d^2R/dt^2 . Как будет видно, в исследованных случаях $\Gamma_A < 1$ эВ, т.е. время жизни вакансий много больше времени столкновения ($\sim 10^{-16}$ сек), поэтому уменьшением числа вакансий за счет распада (вкладом мнимой части в аргументе) можно пренебречь. Известно, что значение $Ai^2(0)$ - т.е. в точке $E_e = E_e(R_0)$ - составляет 0,44 от значения функции Эйри в максимуме. Найденные таким образом величины $E_e(R_0)$ приведены в таблице. Связь между углом рассеяния θ и p и R_0 рассчитана для межъядерного потенциала из [5].

Столкновение	$O^+ - O_2$			$Ne^+ - Ne$	
	E_0 , кэВ	25	50	15	50
p , Å	0,18	0,16	0,09	0,19	0,09
R_0 , Å	0,20	0,17	0,10	0,23	0,10
$E_e(R_0)$, эВ	105 ± 10	130 ± 10	155 ± 10	85 ± 10	170 ± 10

На рис. 2 приведены корреляционные диаграммы молекулярных орбиталей для квазимолекул O - O и Ne - Ne. Диаграмма для случая Ne - Ne рассчитана в [3], для O - O - построена нами путем масштабного преобразования ($E \sim Z^2 \text{эфф}$, $R \sim \frac{1}{Z_{\text{эфф}}}$) расчетных корреляцион-

ных диаграмм Ne - Ne и N - N [3]. Вертикальными линиями на рис. 2 показаны энергии $E_{2p\pi}$, полученные из экспериментальных энергий электронов $E_e(R_0)$. Высота вертикальных линий соответствует неопределенности энергий связи наружных электронов, участвующих в оже-переходе. Максимальная (по абсолютной величине) энергия $E_{2p\pi}$ получится, если считать, что $2p\pi$ -вакансии распадаются путем переходов $(2p\pi)^{-1} \rightarrow (3p\sigma)^{-2}$, минимальная - путем переходов с участием электронов с нулевой энергией связи. Как видно из рис. 2, между экспериментальной и расчетной энергиями $E_{2p\pi}$ имеется хорошее согласие.

Величины Γ_A были оценены на основе выражения (1). Экспериментальные значения $f\Gamma_A$ для случаев $O^+ - O_2$ и $Ne^+ - Ne$ равны, соответственно $1 \cdot 10^{14}$ и $5 \cdot 10^{14}$ сек $^{-1}$. Число вакансий f было оценено из статистических соображений. Вероятность наличия m вакансий на $2p\pi$ -орбитали определяется числом комбинаций распределения $2p$ -вакансий, существовавших в атомах до столкновения, среди орбиталей, формирующихся из $2p$ -уровней. Среднее число вакансий :

$$f = \sum_m m \frac{C_{n_{\text{вак}}}^m C_{n_{\text{эл}}}^{4-m}}{C_n^4}, \text{ где } n_{\text{эл}} \text{ и } n_{\text{вак}} - \text{число электронов и вакансий}$$

на $2p$ -уровнях до столкновения, $n = n_{\text{вак}} + n_{\text{эл}}$. В исследованных случаях $O^+ - O_2$ и $Ne^+ - Ne$ среднее число вакансий составляет, соответственно, 1,67 и 0,33.

Согласно оценке, для квазимолекулы $O - O$ $\Gamma_A \sim 10^{14}$ сек $^{-1}$ ($\sim 0,1$ эВ) и для $Ne - Ne$ $\Gamma_A \sim 10^{15}$ сек $^{-1}$ (~ 1 эВ). Обе величины оказываются близки к вероятностям оже-распада $2p$ -вакансий в объединенных атомах: S ($Z = 16$) и Ca ($Z = 20$). Рассчитанные в [6] Γ_A для атомов S и Ca равны, соответственно $1,9 \cdot 10^{14}$ и $3,3 \cdot 10^{14}$ сек $^{-1}$.

Необходимо отметить различие Γ_A для исследованных случаев и в квазимолекуле Kr - Kr [7]. Вероятность оже-переходов на орбиталь идентифицированную как $4p\pi$, в случае $Kr^+ - Kr$ оказалась $\sim 10^{16}$ сек $^{-1}$ что более чем на порядок выше вероятности переходов, характерной для изолированных атомов. Причинами увеличения Γ_A могут быть возрастание в квазимолекуле по сравнению с изолированным атомом числа электронов на верхних уровнях, способных участвовать в оже-переходах, а также перекрывания волновых функций состояний, между которыми осуществляется переход.

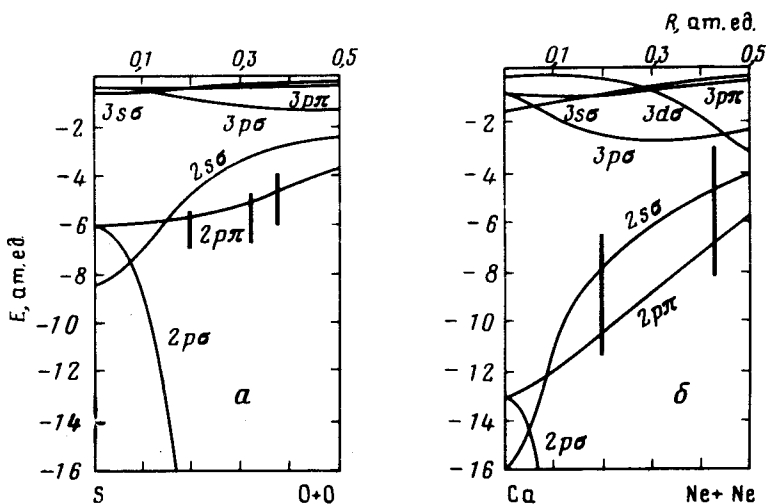


Рис.2. Корреляционные диаграммы квазимолекул: а - O - O, б - Ne - Ne

Одной из задач настоящего исследования было выяснить, насколько общим является возрастание Γ_A в квазимолекуле. Результаты работы

показывают, что условия, приводящие к увеличению Γ_A , существуют не в каждой квазимолекуле, т.е. увеличение Γ_A по сравнению с изолированными атомами не является обязательным.

Авторы признательны Ю.С.Гордееву и В.К.Никулину за полезные обсуждения.

Физико-технический институт
им. А.Ф.Иоффе
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
15 апреля 1980 г.

Литература

- [1] P.H.Woerlee, Yu.S.Gordeev, H. de. Waard, F.W.Saris. Abstr. XI ICPEAC, Kyoto, 1979, p.748.
 - [2] В.В.Афросимов, Г.Г.Месхи, Н.Н.Царев, А.П.Шергин. Письма в ЖТФ, 5, 897, 1979.
 - [3] F.P.Larkins. J. Phys. B., 5, 571, 1972; J.Eichler, U.Wille. Phys. Rev., A11, 6, 1975.
 - [4] А.З.Девдариани, В.Н.Островский, Ю.Н.Себякин. ЖЭТФ, 73, 412, 1977.
 - [5] В.К.Никулин. ЖТФ, 41, 41, 1971.
 - [6] E.J. McGuire. Phys. Rev., A3, 587, 1971.
 - [7] В.В.Афросимов, Ю.С.Гордеев, А.Н.Зиновьев, Д.Х.Расулов, А.П.Шергин. Письма в ЖЭТФ, 24, 33, 1976.
-