ЖЭТФ, 2023, том 163, вып. 5, стр. 744–766 © 2023

# ОБРАЗОВАНИЕ И РАСПАД АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ — ОСНОВНОЙ МЕХАНИЗМ НЕУПРУГИХ ПОТЕРЬ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ АТОМОВ кэВ-ЭНЕРГИЙ

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

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

Поступила в редакцию 31 октября 2022 г.,
после переработки 20 декабря 2022 г.
Принята к публикации 20 декабря 2022 г.

Показано, что образование автоионизационных состояний вносит доминирующий вклад в формирование неупругих потерь энергии и ионизацию при столкновениях атомов в области кэВ-энергий, т. е. при скоростях, меньших скоростей атомных электронов. Предложены скейлинги для расчета сечений образования K- и L-вакансий во внутренних электронных оболочках сталкивающихся атомов. Предложена модель, устанавливающая связь процессов ионизации и величины наблюдаемой неупругой потери энергии. Представлены результаты исследований оже-переходов в квазимолекуле — короткоживущей системе, образующейся при сближении двух атомных частиц. Выяснена природа непрерывной составляющей в спектрах электронов, эмитируемых при соударениях. Показано, что возбуждение автоионизационных состояний определяет сечения торможения атомов кэВ-энергий в веществе.

**EDN:** BFPFEU

**DOI:** 10.31857/S0044451023050139

## СОДЕРЖАНИЕ

**1. Введение** ..... 744
**2. Образование вакансий в L-оболочках сталкивающихся атомов** ..... 745
2.1. Скейлинги для сечений образования L-вакансий ..... 745
2.2. Эмиссия характеристического излучения и оже-электронов при распаде L-вакансий .... 748
2.3. Взаимосвязь ионизации частиц и неупругих потерь энергии при соударениях атомов средних масс ..... 749
**3. Образование K-вакансий** ..... 751
3.1. Исследования образования и распада K-вакансий ..... 751
3.2. Скейлинги для расчета сечений образования K-вакансий ..... 752
**4. Возбуждение M-оболочек** ..... 754
**5. Оже-переходы в квазимолекуле** ..... 755
**6. Разделение вкладов оже-ионизации и динамической ионизации в эмиссию электронов** ..... 760
**7. Вклад образования автоионизационных состояний в тормозные потери** ... 762
**8. Заключение** ..... 763
**Литература** ..... 764

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Предлагаемая статья охватывает более чем полувековой период экспериментального и теоретического изучения формирования неупругих потерь энергии при столкновениях атомов кэВ-энергий, т. е. при сравнительно низких скоростях относительного движения частиц, меньших скоростей атомных электронов. Установлено, что картина и величины сече-

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

ний неупругих процессов определяются свойствами квазимолекулы, которая образуется при сближении двух атомных частиц и распадается при их разлете. Создание количественной модели квазимолекулы явилось важной задачей физики атомных столкновений, а также нашло применение в физике плазмы и для развития методов анализа вещества.

Развитие представлений о прохождении частиц в веществе является предметом неослабевающего интереса в связи с возрастающим числом приложений (использование ионных пучков для создания новых материалов и их диагностики, решение проблем первой стенки в токамаке-реакторе, в астрофизике). Безусловно, среди специалистов, работающих в области взаимодействия ионов кэВ-энергий с твердым телом, есть общее понимание, что в основе взаимодействия налетающего иона с ансамблем атомов твердого тела лежат последовательные парные столкновения иона с атомами мишени. Тем не менее, продолжают использоваться подходы, игнорирующие достижения физики атомных столкновений в газовой фазе.

Одной из задач обзора стало обобщение накопленных экспериментальных данных. К числу недавних достижений можно отнести разработанные авторами скейлинги для расчета сечений образования вакансий во внутренних электронных оболочках сталкивающихся атомов (разд. 2–4). Предложена модель, устанавливающая связь процессов ионизации с величиной неупругой потери энергии (разд. 2.3). Эти данные актуальны как для развития методов анализа состава вещества с использованием пучков ионов или атомов, так и для развития представлений о торможении частиц в веществе.

В обзоре показано, что возбуждение автоионизационных состояний в квазимолекуле должно обязательно учитываться при расчете торможения частиц кэВ-энергий в веществе. Установлен вклад этого механизма в тормозные способности, а также предсказана пороговая зависимость сечения тормозных потерь от энергии бомбардирующих ионов, что не может объяснить ни одна из существующих теоретических моделей (разд. 7).

Установлена важная роль механизма выдвижения электронов наружных оболочек в формировании неупругих потерь (по аналогии с выдвижением электронов внутренних оболочек), что долгое время оставалось непонятым. В итоге формируются высоковозбужденные автоионизационные состояния из слабосвязанных электронов. Эти состояния могут распадаться как путем автоионизации, так и путем переходов электрона в континуум вследствие динамики соударения (в нашем обзоре мы будем называть этот процесс динамической ионизаций).

Следует отметить, что динамическая ионизация связана с проявлением принципа неопределенности Гейзенберга, который говорит, что в случае зависимости энергии квазимолекулярного терма от межъядерного расстояния электрон может иметь любую энергию и в том числе оказаться в континууме. В этом отличие динамической ионизации от прямой ионизации, обусловленной кулоновским взаимодействием налетающей частицы на электронную подсистему. В разд. 5 обсуждаются оже-переходы в квазимолекуле. Показана применимость существующих квантово-механических моделей описания этого явления, учитывающих проявление динамики соударения. В разд. 6 мы приводим результаты экспериментального исследования проявления динамической ионизации и сопоставления вкладов автоионизации и динамической ионизации. Достигнуто количественное описание спектров электронов и сечений ионизации. Выяснена природа непрерывной составляющей в спектрах электронов, эмитируемых при соударениях.

Квазимолекулярная модель получила много убедительных подтверждений в последующих экспериментальных исследованиях, а также дальнейшее развитие в теоретических работах. К сожалению, из многочисленных публикаций периода становления квазимолекулярной модели (см. обзоры [1–4]) не сделан обобщающий вывод, вынесенный в заголовок данной статьи, о механизме неупругих потерь. Как правило, исследования сосредоточены на анализе какого-то одного из проявлений возбуждения автоионизационных состояний, например, формирования зарядовых состояний сталкивающихся частиц, выхода рентгеновского излучения или эмиссии электронов. В данной работе представлен вывод о возбуждении и распаде автоионизационных состояний как основном механизме неупругих потерь при столкновении атомов в кэВ-диапазоне энергий.

## 2. ОБРАЗОВАНИЕ ВАКАНСИЙ В L-ОБОЛОЧКАХ СТАЛКИВАЮЩИХСЯ АТОМОВ

### 2.1. Скейлинги для сечений образования L-вакансий

Явления во внутренних электронных оболочках сталкивающихся атомов — объект интенсивных исследований, начиная с зарождения физики атомных столкновений. Первым (на рубеже 60-х годов про-

шлого столетия) было достигнуто понимание механизмов ионизации внутренних оболочек бесструктурными частицами: протонами и альфа-частицами. Ионизация в этом случае обусловлена прямым кулоновским взаимодействием налетающей частицы с электроном атома. На рубеже 70-х годов исследования неупругих процессов получили существенный импульс для своего развития и сформировались в одно из наиболее значимых направлений в физике атомных столкновений. Основная причина — обнаружение в экспериментальных работах [5–10] необычно больших сечений ионизации уже при кэВ-энергиях соударения по сравнению с ионизацией фотонами, электронами или протонами. Основополагающий шаг в понимании обнаруженного явления был сделан в работе [11], где к таким столкновениям применили приближение квазимолекулы — короткоживущей системы из двух сталкивающихся атомов, энергетические уровни которой меняются при изменении межъядерного расстояния. Фано и Лихтен [11] предложили использовать приближение молекулярных орбиталей (МО), согласно которому электроны рассматриваются как независимые частицы, движущиеся в экранированном поле ядер (см. рис. 1).

В столкновениях атомов средних масс (в качестве примера рассматривался случай Ar–Ar) при сближении частиц до межъядерных расстояний, сравнимых с радиусами L-оболочек, молекулярная орбиталь $4f\sigma$, формирующаяся из $2p$-уровней сталкивающихся атомов Ar, резко выдвигается и пересекает несколько верхних вакантных уровней. При переходах электронов с рассматриваемой орбитали на свободные уровни при разлете частиц может образоваться одна или две вакансии во внутренней L-оболочке и возникает автоионизационное состояние. Большие сечения неупругих потерь были объяснены образованием внутренних вакансий вследствие электронных переходов при пересечении или сближении уровней квазимолекулы и их последующим распадом вследствие оже- или радиационных переходов. В итоге, неупругие потери энергии в отдельном акте соударения складываются из затрат кинетической энергии столкновения на ионизацию атомов-партнеров и энергию эмитированных электронов или квантов.

Результаты работ [5–7] были подтверждены экспериментами [10–13]. В частности, в соответствии с предсказанием модели Фано–Лихтена, что при столкновениях разных партнеров $4f\sigma$-орбиталь формируется из $2p$-оболочки партнера соударения с меньшим атомным номером, эксперимент подтвердил, что вакансии образуются в партнере с меньшим атомным номером.

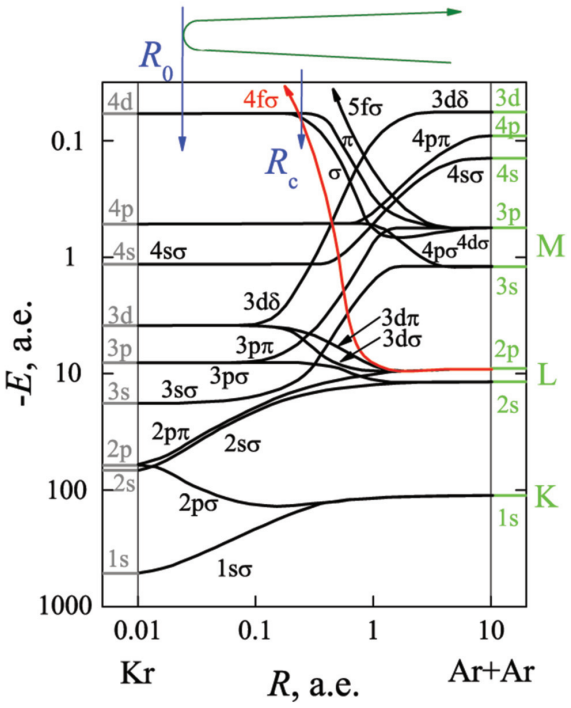


**Рис. 1.** Корреляционная диаграмма для системы Ar–Ar [11]. Стрелка демонстрирует изменение межъядерного расстояния при сближении и разлете частиц

В последующих работах [14] было существенно повышено энергетическое разрешение при измерении спектров потерь энергии путем применения методики совпадений, когда напрямую измерялись энергии обоих атомов — партнеров столкновения. Это позволило определить природную ширину линий, которая оказалась $65 \pm 15$ эВ для случая Ar–Ar [14]. Было показано, что оже-распад вакансии приводит к ионизации частиц, при этом в среднем удаляется $1.4 \pm 0.2$ электрона при заполнении одной вакансии.

Экспериментально установленные [5–7, 10, 13, 14] закономерности образования L-вакансий натолкнули на мысль о возможности определения сечений ионизации L-оболочки для различных комбинаций партнеров столкновения расчетным путем. Для этого рассмотрим более подробно вероятность образования L-вакансий вследствие выдвижения $4f\sigma$-орбитали. Было показано, что вероятности образования одной $W_1(R_0)$ и двух $W_2(R_0)$ вакансий зависят в основном от расстояния наибольшего сближения частиц $R_0$ и слабо зависят от скорости соударения. Введем вспомогательную функцию

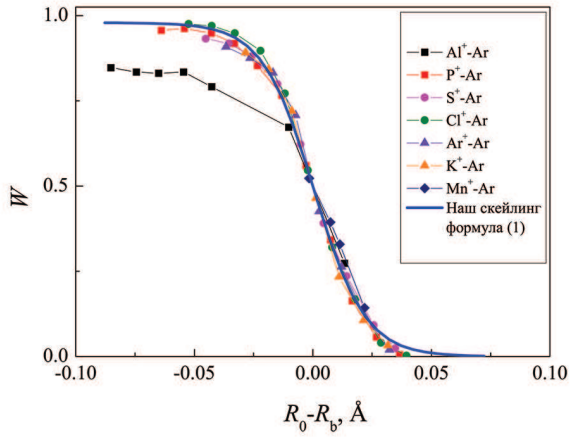


**Рис. 2.** Зависимость вероятности образования $L_{2,3}$-вакансии от достигнутого расстояния наибольшего сближения $R_0$ [15, 16]

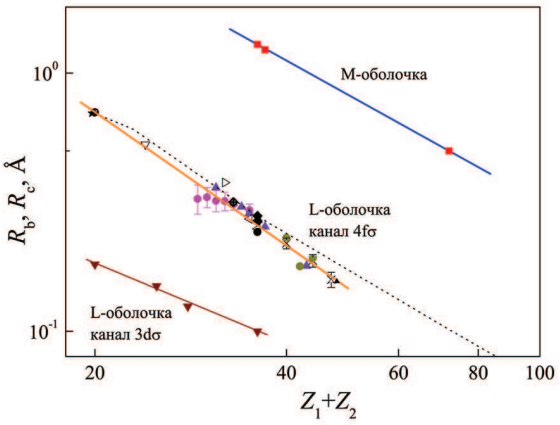


**Рис. 3.** Зависимость параметров $R_b$ (пустые символы) и $R_c$ (закрашенные символы) от суммы зарядов ядер сталкивающихся частиц $Z_1+Z_2$ при возбуждении L- и M-оболочек. Штрихи — результаты расчетов положения точки пересечения молекулярнах орбиталей для различных систем [18–20]

$W(R_0) = W_2(R_0) + 0.5W_1(R_0)$. На рис. 2 представлена зависимость вероятности образования вакансии для большого числа исследованных случаев от достигнутого расстояния наибольшего сближения $R_0$.

Как известно, частицы проходят область квазипересечения молекулярных уровней дважды, при сближении и разлете частиц. Если вероятность перехода $P$, то вероятность перехода при двукратном прохождении $W = 2P(1-P)$. При любых значениях $P$ значение $W$ не превышает 0.5, что противоречит эксперименту, где наблюдается $W = 0.95$. Данное противоречие было объяснено в работе [17] возможностью перемешивания высоковозбужденных состояний при движении частиц от расстояния $R_c$ до точки поворота $R_0$ и обратно.

Установленная нами для большого числа случаев зависимость вероятности образования вакансии от достигнутого расстояния наибольшего сближения $R_0$ позволила предложить процедуру определения сечения ионизации L-оболочки для различных неизученных комбинаций партнеров столкновения с помощью масштабирования [16].

Вероятность образования L-вакансии на межъядерном расстоянии $R_0$ может быть описана в этом случае выражением

$$W(R_0) = \frac{1}{\beta + \exp\left[\gamma\left(\frac{R_0}{R_b} - 1\right)\right]}, \qquad (1)$$

где $\beta = 1.02$, $\gamma = 22.8$, а параметр $R_b$ определяется из условия $W(R_b) = 0.5$ и близок к межъядерному расстоянию $R_c$, на котором $4f\sigma$-орбиталь пересекает незаполненные верхние уровни.

На рис 3. приведена зависимость параметров $R_c$ и $R_b$ для различных комбинаций сталкивающихся частиц. Эта зависимость для $R_c$ была получена в [15] путем обработки существующих экспериментальных данных о порогах возбуждения $L_{2,3}$-оболочки при столкновениях атомных частиц как в газовой, так и в твердой фазах. Полученная зависимость хорошо согласуется с расчетами положения точки пересечения молекулярных орбиталей для различных систем [18–20] и применима при $Z_1 + Z_2 \geq 20$. Зависимость для канала $3d\sigma$ получена в настоящей работе (см. ниже).

Сечение ионизации, связанное с возбуждением $L_{2,3}$-оболочки, может быть получено следующим образом: сначала определяется параметр $R_b$ по данным, показанным на рис. 3, а затем сечение ионизации рассчитывается путем интегрирования $W[R_0(b)]$ по всем параметрам удара:

$$\sigma(E_0) = 2\pi N \int_0^\infty W[R_0(b)]\, b db, \qquad (2)$$

где $N$ — число вакансий, образующихся при малых $R_0$. Связь параметра удара $b$ и расстояния наибольшего сближения $R_0$ определяется из уравнения $b = R_0(1 - U(R_0)/E_{cms})^{1/2}$, где $E_{cms} = M_2/(M_1 + M_2)E_0$ — энергия соударения в системе центра масс, $M_1$ и $M_2$ — массы сталкивающихся частиц. Зависимость $R_0$ от $b$ может быть рассчитана с использованием потенциала

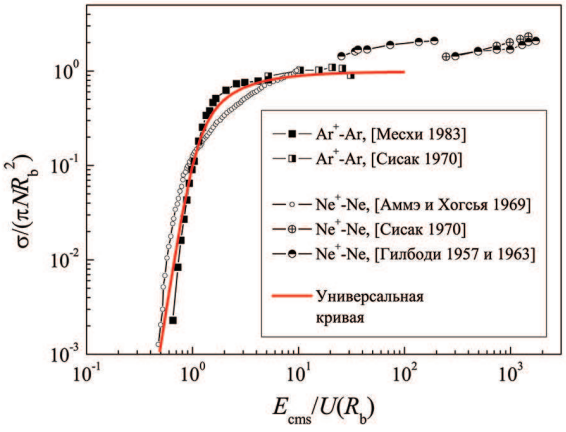


**Рис. 4.** Универсальная кривая для сечения возбуждения $L_{2,3}$-оболочки [16]. Точки — экспериментальные данные из работ [23–27]

взаимодействия, например, [21, 22]. Полученная зависимость приведена на рис. 4 в универсальных координатах — сечение нормировано на $\pi N R_c^2$, а энергия соударения в системе центра масс отнесена к значению потенциала при $R = R_c$.

Как видно на рис. 4, универсальная кривая хорошо описывает как случай образования $L_{2,3}$-вакансий при столкновениях Ar-Ar [23, 24], так и случай ионизации наружных L-оболочек в системе Ne–Ne [25–27]. С помощью предложенного скейлинга можно оценить сечение ионизации L-оболочки для неисследованных случаев.

При резко несимметричных столкновениях ионизация L-оболочки Ar вследствие выдвижения $3d\sigma$- и $3d\pi$-орбиталей наблюдалась впервые в работе [28] при столкновениях N–Ar и Ne–Ar. Из полученных зависимостей вероятности образования вакансий от межъядерного расстояния можно определить характерные расстояния $R_b$ для выдвижения $3d\sigma$-орбитали для этих систем. Аналогичные оценки $R_b$ можно получить также для случаев Ar–Ar, N–Ar, O–Ar, используя данные работ [3, 28–30]. Зависимость характерного расстояния для выдвижения $3d\sigma$- и $3d\pi$-орбиталей от суммы зарядов партнеров соударения также приведена на рис. 3, что позволяет построить скейлинг для определения сечения ионизации, обусловленного этим каналом.

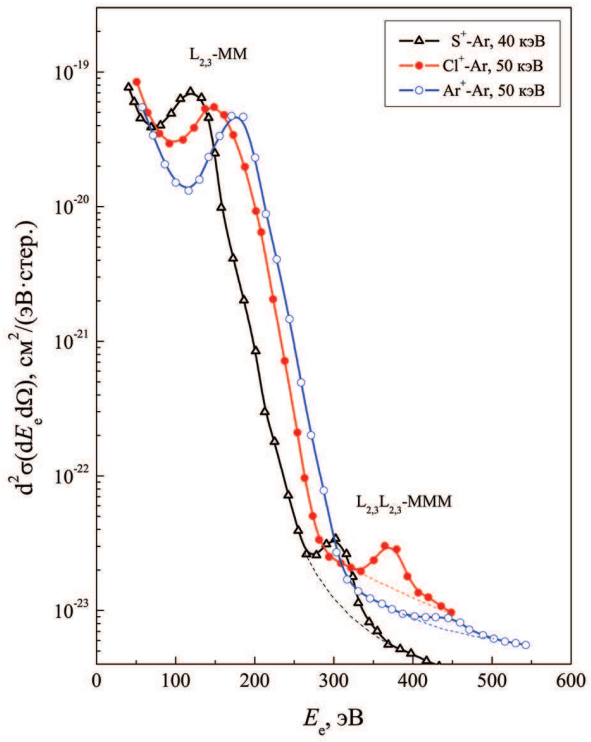


**Рис. 5.** Энергетические спектры электронов при столкновениях $Cl^+$, $Ar^+$–Ar при энергии 50 кэВ [33], $S^+$–Ar при энергии 40 кэВ [35]

### 2.2. Эмиссия характеристического излучения и оже-электронов при распаде L-вакансий

Распад образующихся внутренних вакансий приводит к эмиссии оже-электронов [3, 24, 31–33] и характеристического излучения [34]. На рис. 5 приведены спектры электронов для систем $S^+$, $Cl^+$, $Ar^+$–Ar.

В спектре электронов наблюдаются две основные компоненты: при низких энергиях электронов имеется вклад от распада автоионизационных состояний, связанных с возбуждением наружных оболочек, а при энергиях около 200 эВ наблюдается группа характеристических оже-электронов вследствие распада $2p$-вакансий в Ar. Высокая чувствительность, достигнутая в наших экспериментах, позволила обнаружить оже-переходы нового типа — трехэлектронные оже-переходоы (пики при 300–400 эВ на рис. 5), когда две вакансии заполняются с испусканием одного оже-электрона, уносящего всю энергию обоих переходов. Поскольку в случае Cl–Ar обе вакансии образуются в легком партнере соударения — Cl, вероятность трехэлектронного перехода оказывается выше, чем в случае столкновений Ar–

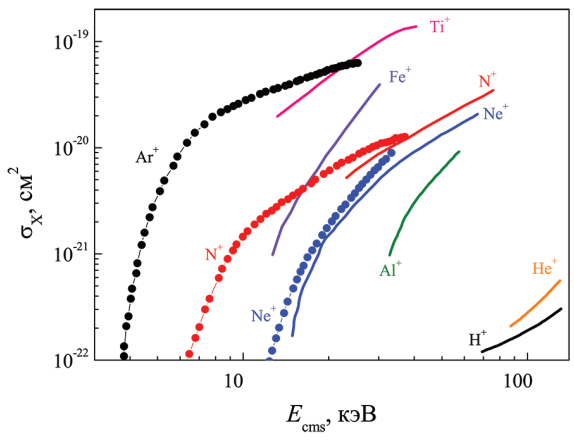


**Рис. 6.** Зависимость сечений эмиссии характеристического излучения при столкновении различных ионов с Ar. Линии с точками — наши данные. Сплошные линии — данные [34]

Ar, когда вакансии могут быть распределены между партнерами соударения. Обнаружение этого явления вызвало всплеск интереса к электронным корреляционным эффектам в атомной физике и развитие теоретических исследований. Подробное рассмотрение коррелированных переходов можно найти в [35–37].

На рис. 6 представлены зависимости сечений эмиссии характеристического излучения, измеренные в работах [34], и наши данные для систем N, Ne, Ar–Ar. Как видно на рис. 6, сечения эмиссии характеристического излучения в случае образования внутренних вакансий из-за выдвижения орбиталей на много порядков превышают такие же сечения при бомбардировке протонами и альфа-частицами. Измеренные сечения образования вакансий [14, 28] совпадают с сечениями эмиссии характеристических оже-электронов и на несколько порядков превышают сечения эмиссии характеристического излучения, поскольку выход флюоресценции мал. В то же время пороги образования вакансий, эмиссии характеристических оже-электронов и излучения совпадают. Например, выход флюоресценции при заполнении $L_{2,3}$-вакансии для случая Ar–Ar вблизи порога образования вакансий составляет $3 \cdot 10^{-4}$ и существенно увеличивается с ростом энергии соударения до $2 \cdot 10^{-3}$ при $E_0 = 50$ кэВ. Согласно [38], выход флюоресценции при заполнении $2p$-вакансии зависит от заряда иона. Для нашего рассмотрения важно, что на пороге образования вакансии выход флюоресценции близок к значению для нейтрального атома, т. е. произошел переход электрона на высоко расположенный квазимолекулярный уровень. При росте энергии соударения имеет место ионизация наружной оболочки и выход флюоресценции в рассматриваемом случае заметно возрастает.

### 2.3. Взаимосвязь ионизации частиц и неупругих потерь энергии при соударениях атомов средних масс

Более внимательного и детального обсуждения заслуживает взаимосвязь ионизации частиц при столкновениях и наблюдаемых неупругих потерь энергии. Величину неупругой потери энергии можно оценить из следующей модели: для образования очередного автоионизационного состояния требуется перевести в возбужденное состояние два электрона, для чего потребуется затрата энергии, равная сумме двух потенциалов возбуждения. Потенциал возбуждения $E_{ex.}(i)$ для ионов различной зарядности $i$ легко оценить следующим образом:

$$E_{ex.}(i) = I_i - 13.6\left(\frac{Z_{eff}}{n}\right)^2, \qquad (3)$$

где $I_i$ — потенциал ионизации атомной частицы с зарядом $i$, $Z_{eff}$ — эффективный заряд остова атома, $n$ — главное квантовое число возбужденного уровня. При возбуждении одного электрона мы полагали $Z_{eff} = 1$, при дальнейшем возбуждении $Z_{eff}$ увеличивается на $0.65(N-1)$, где $N$ — число возбужденных электронов. Поправка на экранирование учитывается по правилу Слетера [39].

Как видно на рис. 7, предложенная модель успешно описывает наблюдаемые значения неупругих потерь энергии. Важно отметить, что вклад ионизационных потерь составляет 40–60% от полной потери энергии. Это связано с тем фактом, что для образования автоионизационного состояния нужно возбуждение двух электронов, т. е. затрата двух потенциалов возбуждения, а для переходов в высоковозбужденные состояния потенциал возбуждения близок к потенциалу ионизации. В предложенной модели не учтена возможность многоэлектронных оже-переходов, которые могут повлиять на рассматриваемое отношение. В частности, при распаде L-вакансий в системе $Ar^+$–Ar наблюдалось удаление $1.4 \pm 0.2$ электрона при заполнении одной вакансий, что связано с явлением встряски атома при заполнении L-вакансии [14].

Рассмотрим ионизацию частиц при соударениях $Ne^+$–Ne. На рис. 8 *a* представлена зависимость числа удаленных электронов от достигнутого расстояния

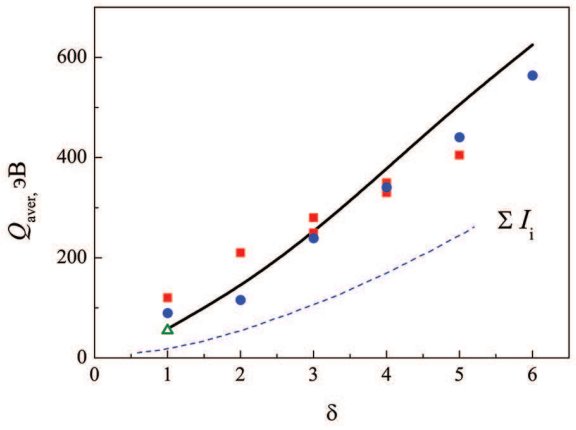


**Рис. 7.** Сравнение значений средней неупругой потери энергии в зависимости от числа удаленных электронов при столкновениях $Ne^+$–Ne. Кружки — данные работы [12], треугольник — [40], значения получены усреднением по наблюдаемым зарядовым состояниям. Квадратики — данные из работы [41] для конкретного процесса $10\,mn$. Сплошная линия — предложенная модель. Штриховая кривая — вклад ионизационных потерь

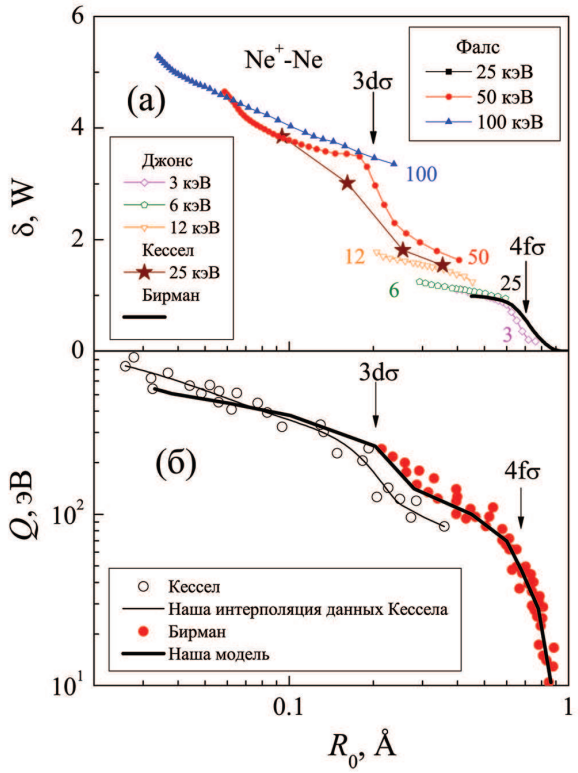


**Рис. 8.** Зависимость среднего числа удаленных электронов $\delta = m + n - 1$ (*а*) и неупругой потери энергии (*б*) от достигнутого рассояния наибольшего сближения при столкновениях $Ne^+$-Ne. Стрелками указаны пороги выдвижения $4f\sigma$- и $3d\sigma$-орбиталей. На рис. 8*а* цифры у кривых обозначают энергии соударения в кэВ; звездочки — измерения методом совпадений [12]; линии с заполненными и открытыми кружками — данные из работ [42,43] соответственно; сплошная линия — зависимость вероятности образования автоионизационного состояния $W$ от достигнутого межъядерного расстояния [40]. На рис. 8*б* открытые кружки — эксперимент [12], заполненные кружки — эксперимент [40]. Жирная сплошная линия — наша модель

наибольшего сближения. Рассматривается схема изменения зарядовых состояний частиц в результате столкновения: $Ne^+ + Ne - Ne^{m+} + Ne^{n+}$. При измерениях методом совпадений [12] фиксируются заряды обоих партнеров соударения $m$ и $n$, и число удаленных электронов $\delta = m + n - 1$. В экспериментах [42, 43] фиксировался только заряд налетающей частицы, величина $\delta$ вычислялась как $\delta = 2m - 1$, т. е. предполагалось равенство $m = n$. При энергиях менее 25 кэВ на измерения $m$ и $n$ влияет процесс перезарядки. На рис. 8*а* для зависимостей из работы [43] эти колебания усреднены.

При $R = 0.7$ Å наблюдается порог в энергетической зависимости сечения ионизации [25]. На рис. 8*а* сплошной черной линией приведена измеренная в работе [40] зависимость вероятности возбуждения автоионизационного состояния от $R_0$. Видно, что величина $\delta$ возрастает вблизи порога на 1, а затем при уменьшении расстояния растет и при энергии 25 кэВ достигает 2. На наш взгляд это означает, что с ростом энергии соударения происходит срыв электрона в континуум и разрушение автоионизационного состояния. Как показали наши оценки [44], вероятность перехода двух электронов в континуум весьма высока. Порог при $R = 0.7$ Å связан с выдвижением $4f\sigma$-орбитали (в случае Ne $2p$-оболочка является наружной). При $R = 0.2$ Å наблюдается рост степени ионизации частиц вследствие выдвижения $3d\sigma$- и $3d\pi$-орбиталей, переходы с которых, обусловленные вращательной связью с $3d\delta$-состоянием, могут приводить к возбуждению до 6 электронов, и величина $\delta$ в очередной раз возрастает.

На рис. 8*б* представлена сводка данных о неупругих потерях энергии для столкновений $Ne^+$–Ne, полученных различными авторами [12, 40]. Отмечены пороги образования автоионизационных состояний вследствие выдвижения $4f\sigma$- и $3d\sigma$-орбиталей соответственно. Согласно работе [40], величина неупругой потери вблизи порога составляет 55 эВ. Жирной сплошной линией показаны значения неупругой потери энергии, рассчитан-

ные по предложенной модели, для различных энергий соударения. Видно неплохое согласие с экспериментом.

На рис. 9 представлены результаты измерений методом совпадений, когда фиксируются заряды обоих партнеров соударения [10]. В экспериментах [42] фиксировался только заряд налетающей частицы, величина $\delta$ вычислялась как $\delta = 2m - 1$, т. е. предполагалось равенство $m = n$. Порог выдвижения $5f\sigma$ определен по данным работ [40, 47]. Резкое увеличение числа удаленных электронов происходит при достижении $R_0 = 0.28$ Å, что обусловлено выдвижением $4f\sigma$-орбитали и образованием двух вакансий в $L_{2,3}$-оболочке. Как видно на рис. 9, отчетливо проявляются пороги, связанные с выдвижением различных орбиталей. Можно констатировать, что модель двукратного возбуждения с добавлением поправок на энергии образования L-вакансий успешно описывает данные эксперимента. Энергии образования вакансий в ионах аргона различной зарядности были рассчитаны в [48]. Было показано, что энергия перехода на $2p$-вакансию практически не меняется с изменением зарядности иона и хорошо согласуется с измерениями [10, 14]. При расстоянии менее 0.1 Å происходит дальнейший рост неупругой потери энергии. Как показал анализ, проведенный в работе [1], большие неупругие потери энергии при достижении расстояний, меньших 0.1 Å можно объяснить только образованием как минимум 4–6 внутренних вакансий, что согласуется с нашими представлениями о выдвижении при этих расстояниях $3d\sigma$- и $3d\pi$-орбиталей.

В рамках вышеописанной модели удается объяснить также наблюдаемые природные ширины линий в спектре потерь при образовании $L_{2,3}$-вакансий. Как следует из эксперимента [14], распределение по заряду описывается кривой с полушириной $\Delta n \approx 1$. Соответственно и ширина линии примерно равна разности энергий возбуждения для этих состояний.

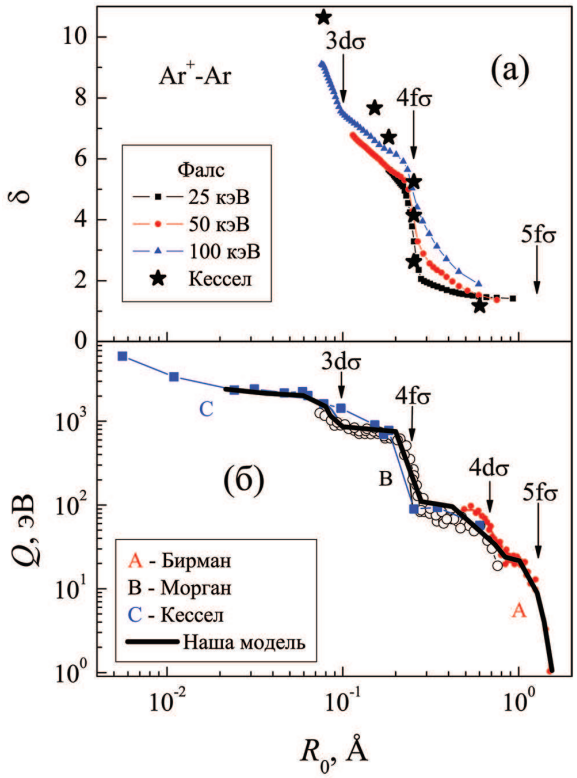


**Рис. 9.** Число удаленных электронов $\delta$ и неупругой потери энергии для системы $Ar^+$–Ar в зависимости от достигнутого расстояния наибольшего сближения. Стрелками указаны пороги выдвижения различных орбиталей. На рис. 9*а* звездочки — измерения методом совпадений [10]. Кривые с точками — данные работы [42]. На рис. 9*б* приведены данные из работ [10, 40, 45, 46]. Жирная сплошная линия — наша модель

## 3. ОБРАЗОВАНИЕ K-ВАКАНСИЙ

### 3.1. Исследования образования и распада K-вакансий

Образование вакансий в K-оболочках при атомных столкновениях было обнаружено при исследовании спектров неупругих потерь энергии [12, 49, 50]. Распад образовавшихся вакансий приводит к появлению характеристического оже-пика в спектрах электронов и характеристического излучения. Эти процессы изучались в работах [34, 51] и в наших работах. На рис. 10 представлены данные о сечениях эмиссии характеристических оже-электронов и излучения.

Полученные нами данные хорошо согласуются с данными экспериментов [24, 51, 52]. Для случая N–$N_2$ приведены также данные о сечениях образования K-вакансий, полученные нами путем обработки данных [49] зависимости вероятности образования K-вакансий $P(b)$ от параметра удара $b$ с помощью формулы (2). Как видно на рис. 10, сечения образования K-вакансий совпадают с измерениями сечений выхода характеристических оже-электронов. Как и в случае заполнения L-вакансий, оже-переход является основным каналом распада K-вакансий. В рассматриваемых столкновениях выход флюоресценции мал, составляет $10^{-3}$–$10^{-2}$ и может зависеть

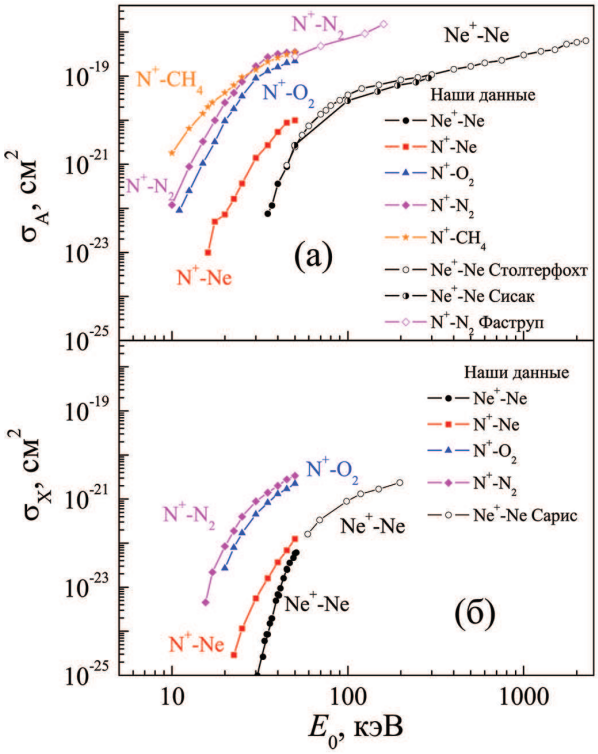


**Рис. 10.** Сечения эмиссии оже-электронов (*а*) и характеристического излучения (*б*) при заполнении K-вакансий. Приведены данные наших измерений, а также данные работ [24, 51, 52] для $Ne^+$–Ne. На рис. 10*а* показаны сечения образования K-вакансий при столкновениях $N^+$–$N_2$ (открытые кружки). Использованы данные из работы [49]

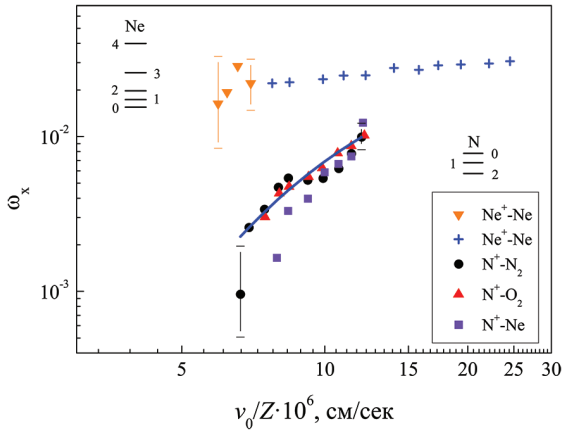


**Рис. 11.** Зависимость выхода флюоресценции от скорости соударения частиц для столкновений $N^+$–$N_2$ и $Ne^+$–Ne [53]. Короткими линиями приведены теоретические значения выхода флюоресценции в ионах различной зарядности [54,55]. Сплошная линия — учет перемешивания состояний с различными спинами согласно [56]

от энергии соударения (см. рис. 11).

Как видно на рис. 11, выход флюоресценции в случае $Ne^+$–Ne меняется незначительно и соответствует теоретическим предсказаниям. В случае $N^+$–$N_2$ он резко падает при уменьшении скорости соударения. На наш взгляд, это означает, что при малых энергиях происходит образование выстроенных по спину состояний, при этом спин вакансии противоположен спину наружных электронов. Как известно, согласно правилу Хунда состояние с максимальным полным спином имеет наименьшую энергию. Именно такое состояние и возникает вблизи порога образования вакансий. Радиационный распад вакансии в этом случае запрещен. С ростом скорости соударения происходит перемешивание состояний с различными значениями спина и выход флюоресценции стремится к теоретической оценке. В работе [56] эта зависимость была объяснена количественно. Интерес к изучению образования K-вакансий сохраняется до сих пор. В недавних работах [57–62] основное внимание уделяется коррелированным переходам и каскадам при распаде K-вакансий, а также образованию K-вакансий в релятивистском случае.

### 3.2. Скейлинги для расчета сечений образования K-вакансий

Разработка скейлинга для расчета сечений образования K-вакансий, так же, как и в случае образования L-вакансий, представляет интерес для анализа состава вещества при ионном облучении и для расчетов торможения частиц в веществе. Имеются два принципиально разных случая. При наличии вакансий на $2p\pi$-орбитали образование K-вакансий было объяснено в работе [63] вращательными переходами с $2p\pi$- на $2p\sigma$-орбиталь (см. рис. 1). При больших межъядерных расстояниях $2p\pi$-орбиталь формируется из $2p$-оболочки более тяжелого партнера столкновения. На этой орбитали может быть некоторое количество вакансий, которое удобно характеризовать фактором $f$, равным отношению числа вакантных мест к полному числу электронов $2p$-оболочки. Вследствие вращательных переходов в пределе объединенного атома при тесном сближении частиц эти вакансии могут перейти на $2p\sigma$-орбиталь, а при разлете частиц оказываются в K-оболочке более легкого партнера соударения.

Сечение пропорционально фактору $f$, отражающему вероятность наличия вакансии на

$2p\pi$-орбитали, которая формируется из 2p-оболочки партнера соударения с бóльшим $Z$. В статическом случае фактор $f_s$ равен 2/3 числа вакансий на $2p$-уровне партнера с бóльшим $Z$, а для случая одинаковых атомов 1/3 от суммы числа $2p$-вакансий в партнерах соударения. Зависимость вероятности образования K-вакансии от фактора $f$ была проверена экспериментально [50]. При столкновениях Ne–Ne $2p\pi$-орбиталь полностью заполнена, а при столкновениях $Ne^+$–Ne и $Ne_2^+$–Ne на орбитали имеется соответственно одна и две вакансии. Как было показано экспериментально [49], вероятность образования K-вакансии при одинаковых условиях соударения соотносится как 0.06 : 1 : 2. Это означает, что помимо статической вероятности $f_s$ иметь вакансию на $2p\pi$-орбитали может происходить дополнительное образование вакансий вследствие связи $2p\pi$-орбитали с верхними незаполненными уровнями, описываемое фактором $f_d$. Таким образом, значение фактора $f = f_s + f_d$ складывается из статической вероятности иметь вакансию на $2p\pi$-орбитали $f_s$ и динамической поправки $f_d$, которая описывается формулой $f_d = A\exp(-c/v)$. Значения параметров $A$ и $c$ для исследованных случаев приведены в нашей работе [64].

На основе модели [63] можно предложить скейлинг для сечения образования K-вакансий:

$$\sigma_{vac}\left(E_{cms}\right) = f\pi R_{2p}^2 F\left(\frac{E_{cms}}{\left(Z_1+Z_2-\delta\right)^2}\right), \qquad (4)$$

где $E_{cms}$ — энергия соударения в системе центра масс, $R_{2p}$ — радиус $2p$-оболочки объединенного атома, $R_{2p} \sim (Z_1 + Z_2 - \delta)^{-1}$, $Z_1$ и $Z_2$ — заряды ядер сталкивающихся атомов, $\delta = 4$ — поправка на экранировку $2p$-оболочки электронами $1s$- и $2s$-оболочки объединенного атома. Логарифм функции $F$ дается выражением

$$\lg(F) = -15.767 - 4.493\exp\Big(-\frac{x}{0.069}\Big) -$$

$$-1.128\exp\Big(-\frac{x}{1.564}\Big) - 8.522\exp\Big(-\frac{x}{0.026}\Big),$$

где

$$x = \frac{E_{cms}}{(Z_1+Z_2-\delta)^2}.$$

Как видно на рис. 12*a*, предложенный скейлинг позволяет описать имеющиеся экспериментальные данные единой универсальной кривой. Это позволит оценивать сечения ионизации K-оболочек для неисследованных экспериментально комбинаций сталкивающихся атомов.

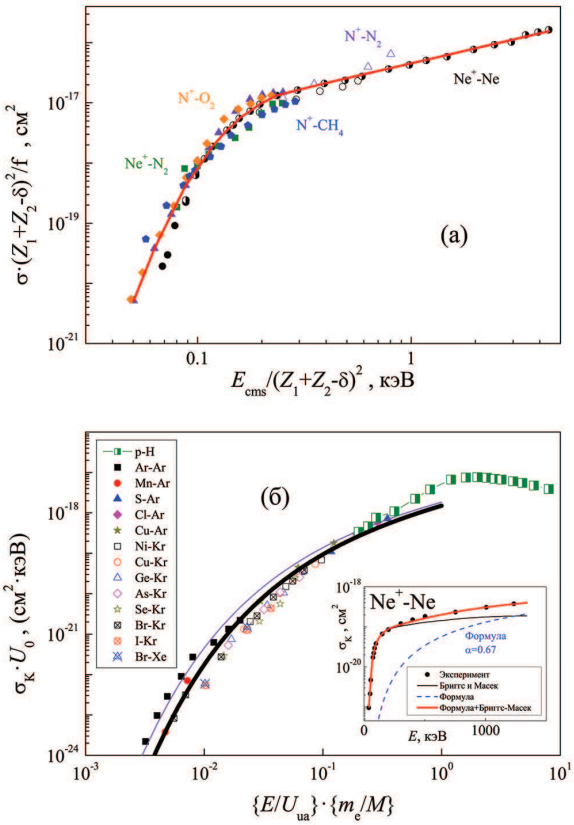


**Рис. 12.** *а*) Скейлинг для сечений образования K-вакансий при соударении легких атомов с $Z \leq 10$ при наличии вакансии на $2p\pi$-орбитали. Точками на рисунке показаны экспериментальные данные из работ [23, 51, 72]. Жирная линия — предложенная нами универсальная кривая. *б*) Скейлинг для сечений образования K-вакансий при соударении атомов с $Z > 10$, когда $2p$-оболочка полностью заполнена и образование вакансии обусловлено ионизацией $2p\sigma$ вследствие динамики соударения. Приведены экспериментальные данные для различных комбинаций сталкивающихся атомов из работы [66], а также для столкновений p-H из [72]. Из-за различия в начальной заселенности $2p\sigma$-уровня сечение ионизации в случае p-H умножено на 4. Тонкой сплошной линией приведена кривая для случая $\alpha(0) = 0.67$. Жирной сплошной линией приведена кривая для $\alpha(0) = 0.75$, которая наилучшим образом описывает эксперимент. На вставке к рисунку приведен вклад рассматриваемых механизмов в образование K-вакансий при столкновениях $Ne^+$–Ne. Как видно, суммарная кривая хорошо согласуется с экспериментом [51]

Следует также иметь в виду, что K-вакансия, образовавшаяся в легком партнере соударения, может перейти на K-оболочку более тяжелого партнера вследствие динамической связи $2p\sigma$- и $1s\sigma$-состояний, так называемый механизм распределе-

ния вакансий (vacancy sharing mechanism). Вероятность этого процесса может быть оценена по формулам, предложенным в работе [65].

При столкновениях атомов и ионов с $Z > 10$ $2p\pi$-орбиталь заполнена и переходы с $2p\sigma$- на $2p\pi$-орбиталь невозможны. Делались неоднократные попытки [66–68] предложить эмпирические скейлинги для образования K-вакансий для этого случая. Однако сами авторы указывали на отсутствие теоретического объяснения данного явления. Решение было найдено в нашей работе [69].

В работе [70] исследовалось поведение термов квазимолекулы в комплексной плоскости межъядерных расстояний. Было обнаружено существование точек ветвления, связывающих различные термы. В рамках этой теории вероятность перехода электрона в континуум рассчитывается как интеграл по обходу точек ветвления. В рамках данного подхода в нашей работе [64] было получено выражение для сечения ионизации

$$\sigma_i = \pi P \frac{v}{\alpha\left(Z_{eff}\right) U_0} \exp\left(-\frac{\alpha\left(Z_{eff}\right)}{v}\right). \qquad (5)$$

Здесь $P$ — число электронов на уровне $2p\sigma$, $U_0$ — значение энергии $2p$-уровня в пределе объединенного атома. Для системы p-H нужно учитывать, что орбиталь $2p\sigma$ заполнена с вероятностью $P = 50\%$. В случае столкновений сложных атомов на орбитали $2p\sigma$ находятся два электрона ($P = 2$). Величина

$$\alpha(Z_{eff}) \approx \alpha(0)(2U_0)^{0.5}.$$

Параметр

$$\alpha(0) = 2/3U_0 Im R_0,$$

где $\mathrm{Im}R_0$ — положение точки ветвления для системы p-H. Положение точки квазипересечения терма $2p\sigma$ с континуумом для системы p-H было вычислено в работе [71], при этом $\mathrm{Im}R_0 = 1.01$ и $U_0 = 0.5$. Таким образом, для системы p–H $\alpha \approx 0.67$. Для сравнения с экспериментом удобно ввести переменную $x$:

$$x = \frac{m_e}{M}\frac{E}{U_0}, \qquad (6)$$

где $m_e/M$ — отношение массы электрона к массе налетающей частицы, $E$ — энергия соударения, и формулу для сечения переписать в виде

$$\sigma_i\left[\text{см}^2\right] U_0\,[\text{кэВ}] = K\frac{\sqrt{x}}{\alpha(0)} \exp\left(-\frac{\alpha(0)}{\sqrt{x}}\right), \qquad (7)$$

где константа $K = 1.196 \cdot 10^{-18}$.

На рис. 12*б* показана зависимость приведенного сечения от приведенной энергии для различных экспериментально исследованных комбинаций сталкивающихся частиц. Видно, что в этих координатах экспериментальные точки для большинства случаев ложатся на общую кривую. На этом же рисунке изображено сечение ионизации для столкновений p-H, умноженное на 4. Видно, что эта зависимость также очень хорошо согласуется с первой группой экспериментальных данных и формулой (7). Видно также, что область применимости предложенной формулы ограничена диапазоном $x < 1$. Величина $x^{0.5}$ есть отношение скорости соударения к скорости электронов на $2p$-уровне объединенного атома.

Интересно сопоставить два возможных механизма образования K-вакансий. Как видно на вставке к рис. 12*б*, расчет сечения образования K-вакансий в системе $Ne^+$–Ne, выполненный в работе [63], при энергиях свыше 200 кэВ дает значения сечений ниже эксперимента [51]. Учет поправки на ионизацию $2p\sigma$-орбитали вследствие переходов в континуум с использованием формулы (7) приводит к практически полному совпадению с экспериментом. Таким образом, при оценке сечения образования K-вакансий необходимо учитывать оба механизма.

При небольших энергиях соударения в образовании K-вакансий доминирует механизм, связанный с переходами между орбиталями, с ростом энергии возрастает роль образования вакансий вследствие динамической ионизации $2p\sigma$-уровня, и при больших энергиях необходимо учитывать оба механизма. Следует принимать во внимание специфику столкновений атомов в газовой и твердой фазах. При столкновениях в твердой фазе имеет место каскад соударений и может происходить дополнительное образование вакансий во внешних оболочках, которые могут дожить до следующего соударения и привести к большим сечениям образования K-вакансий вследствие разрешенной возможности $2p\sigma$–$2p\pi$-переходов.

## 4. ВОЗБУЖДЕНИЕ M-ОБОЛОЧЕК

При возбуждении M-оболочек сталкивающихся атомов в спектрах потерь энергии появляются дискретные линии с разными порогами возбуждения. В случае возбуждения M-оболочек выдвигаются несколько орбиталей ($5f\sigma$, $5g\sigma$, $6h\sigma$ и т. д.), что приводит к образованию автоионизационных состояний.

Как видно на рис. 13, при достижении межъядерного расстояния 0.6 Å, соответствующего возбуждению $3d$-оболочки, происходит резкое измене-

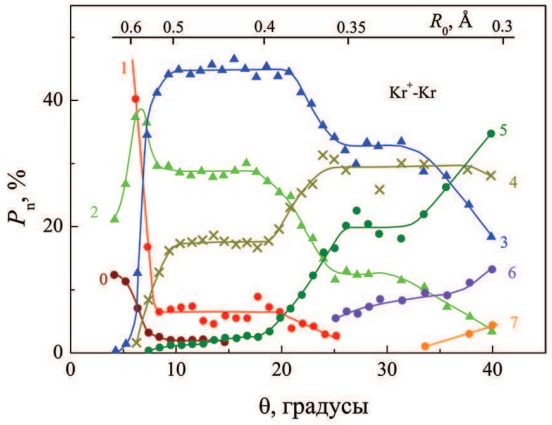


**Рис. 13.** Зависимость вероятности вылета частицы в различном зарядовом состоянии от угла рассеяния [41]

ние зарядовых состояний налетающей частицы, связанное с образованием и распадом двух $3d$-вакансий. При более тесном сближении частиц происходит дальнейшее возбуждение частиц, связанное с перестройкой молекулярных оболочек. Вероятность образования вакансий в зависимости от достигнутого межъядерного расстояния ведет себя аналогично случаю возбуждения двух $2p$-вакансий и может быть описана формулой (1) с изменением параметров $R_b$ и $\gamma$.

Как показано в работе [73], в спектрах электронов при столкновениях Kr–Kr наблюдаются дискретные линии, связанные с образованием $3d$-вакансий и их распадом в атомах Kr после столкновения. Сечения эмиссии этих электронов согласуются с сечениями образования $3d$-вакансий, определенных по данным о неупругих потерях энергии [74]. Пики при энергиях электронов от 60 до 80 эВ связаны с образованием $3p$-вакансий [73].

При больших энергиях электронов в спектрах наблюдается широкая полоса, которая связана с заполнением вакансий во время столкновения. Это явление будет обсуждаться ниже.

Для оценки сечения ионизации в случае возбуждения M-оболочек может быть использован подход, аналогичный рассмотренному ранее для выдвижения $4f\sigma$-орбитали. Сечения ионизации в данном случае известны только для столкновений $Ar^+$–Ar и $Kr^+$–Kr. Для столкновений $Ar^+$–Ar наблюдались автоионизационные состояния с энергиями 14, 28 и 50 эВ [40].

Для столкновений $K^+$–Ar соответствующие энергии состояний составляют 26, 28.5 и 30.5 эВ [75]. Энергия состояния в случае образования вакансий в $3d$-оболочке при столкновениях $Kr^+$–Kr составляет 130 эВ [74]. Известны также пороги возбуждения M-оболочки (приведены на рис. 3). Поскольку характер зависимости $W(R_0)$ в случае образования $3d$-вакансий аналогичен рассмотренному выше случаю образования $L_{2,3}$-вакансий, формулы (1), (2) могут быть использованы для оценки сечения ионизации и в случае возбуждения M-оболочки с коррекцией значений $R_c$ и $\gamma$.

Заключая раздел, можно констатировать, что формирование неупругих потерь в столкновениях многоэлектронных атомов кэВ-энергий вследствие образования внутренних K-, L- и M-вакансий убедительно подтверждается всей совокупностью экспериментальных и теоретический данных, а доминирующим механизмом потерь является образование автоионизационных состояний вследствие выдвижения МО. Стоит сталкивающимся атомам сблизиться до расстояний, отвечающих перекрытию их электронных оболочек, как с высокой вероятностью (для L- и M-оболочек — близкой к 1) происходит возбуждение автоионизационных состояний.

## 5. ОЖЕ-ПЕРЕХОДЫ В КВАЗИМОЛЕКУЛЕ

Квазимолекулярная модель объяснила высокие вероятности образования внутренних вакансий за счет выдвигающихся заполненных орбиталей. Однако, если группа заполненных электронами внутренних орбиталей выдвигается вверх, к границе непрерывного спектра, то другая группа вакантных орбиталей, формирующихся из незаполненных наружных электронных оболочек атомов, снижается при сближении частиц. Несмотря на короткое время акта соударения и соответственно время «жизни» квазимолекулы ($10^{-15}$–$10^{-16}$ с), возможен распад вакансий на снижающихся уровнях.

В 1972 г. [76] была обнаружена широкая полоса в спектре рентгеновского излучения $E_x$ =0.5–1.5 кэВ, возбуждаемого при бомбардировке ионами Ar твердых мишеней из C, Al, Si, Fe, которая не могла быть объяснена характеристическими переходами в атомах, участвовавших в столкновении. Полоса была интерпретирована как результат радиационных переходов в квазимолекуле. Образовавшиеся в ионе Ar в первом столкновении $2p$-вакансии во втором столкновении переходят на квазимолекулярную $2p\pi$-орбиталь и распадаются в процессе столкновения.

Аналогичные полосы вскоре были обнаружены различными исследовательскими группами [77–83]. После обнаружения квазимолекулярного излучения практически сразу были высказаны предложения использовать результаты измерений спектров для определения энергий уровней квазимолекулы. Интерес к таким исследованиям особенно подогревался перспективой изучать электронную структуру сверхтяжелых атомов.

Оже-переходы в квазимолекуле были обнаружены в нашей работе 1976 г. при изучении столкновений Kr–Kr [84]. На вставке к рис. 14 показаны энергетические спектры электронов, образующихся в столкновениях $Kr^+$–Kr. Широкая полоса в спектре электронов, простирающаяся до сотен эВ, связана с распадом вакансий в квазимолекуле, т. е. во время соударения. Её происхождение обусловлено оже-переходами на вакантную орбиталь, формирующуюся из наружного $4p$-уровня иона криптона и снижающуюся при уменьшении межъядерного расстояния. Несмотря на "доминирующий"(в логарифмическом масштабе) вклад квазимолекулярных электронов в формирование электронного спектра, реальный вклад в сечение ионизации составляет около 10%. Отметим, что сам факт обнаружения и исследования таких электронов явился следствием применения рекордной по своей чувствительности методики измерений. В последующих работах были исследованы разные комбинации сталкивающихся частиц при нескольких начальных энергиях. В пользу квазимолекулярной природы обнаруженных электронов свидетельствовали:

1) непрерывный характер спектра в широком (сотни эВ) диапазоне энергий электронов,

2) смещение высокоэнергетического склона полосы в сторону больших энергий электронов с уменьшением достижимого расстояния (с увеличением $E_0$),

3) смещение полосы в сторону меньших энергий $E_e$ с уменьшением суммарного заряда ядер сталкивающихся частиц (в столкновениях ионов $Kr^+$, $Ar^+$, $N^+$ с атомами Kr).

Самым убедительным доказательством квазимолекулярного происхождения широкой полосы явились последовавшие вскоре эксперименты по совпадениям „электрон — рассеянный ион“, в которых экспериментально фиксировались энергия испущенного электрона и угол вылета рассеянного иона. Задание угла вылета иона позволяло из всего множества актов эмиссии выделить столкновения с заданным параметром удара (с заданной траекторией) и

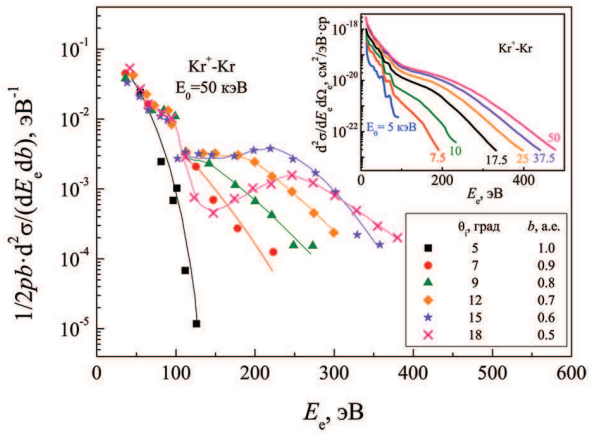


**Рис. 14.** Спектры электронов, измеренные методом совпадений с рассеянной частицей при различных параметрах удара для системы $Kr^+$-Kr [85]. На вставке в верхнем углу приведены спектры, измеренные без применения метода совпадений [84]. Цифры у кривых — энергии соударения в кэВ

соответственно с фиксированным расстоянием наибольшего сближения.

Выделение траектории столкновения позволило применить квантово-механическую модель эмиссии из квазимолекулы [86]. В этой модели при параболической зависимости энергии терма от времени в окрестности точки поворота $R_0$ спектр оже-электронов выражается через функцию Эйри $A_i(x)$:

$$\frac{d^2\sigma}{dE_e\,db} = 4\pi^2 b\Gamma_A n\alpha^{-\frac{2}{3}}\times \\ \times A_i^2\left\{\alpha^{-\frac{1}{3}}\left[E_e - E_e\left(R_0\right) + \frac{i}{2}\Gamma_A\right]\right\}, \quad (8)$$

где

$$\alpha = \frac{1}{2}\frac{dE}{dR}\frac{d^2R}{dt^2}, \qquad R = R_0,$$

$n$ — число вакансий на орбитали. Приближение (8) получило название простого приближения Эйри. Согласно (8), при энергиях электронов, отвечающих переходам в точке $R_0$, в спектре должен существовать главный максимум. Аргумент функции Эйри обращается в нуль при $E_e = E_e(R_0)$, поскольку вкладом мнимой части, как правило, можно пренебречь. При энергиях $E_e > E_e(R_0)$ спектр экспоненциально убывает. Наличие электронов в классически запрещенной области энергий связано с принципом неопределенности и получило название "столкновительного уширения". В разрешенной области $E_e < E_e(R_0)$ могут проявляться осцилляции из-за

интерференции амплитуд переходов на двух ветвях траектории — при сближении и при разлете частиц.

В экспериментах с применением метода совпадений (см. рис. 14), в отличие от широкой полосы, в спектре наблюдался главный максимум Эйри, который смещался при изменении угла рассеяния иона (параметра удара) [85].

Обнаружение оже-переходов в квазимолекуле открыло возможность определения поведения молекулярных уровней $E(R)$ в зависимости от межъядерного расстояния $R$ из экспериментальных спектров электронов. Максимальная энергия электронов в полосе при фиксированной начальной энергии $E_0$ отвечает переходам при минимальных межъядерных расстояниях, достижимых в таких столкновениях. По такой процедуре были восстановлены автоионизационные уровни квазимолекул, образуемых в столкновениях $Kr^+$–Kr и $Ar^+$–Kr.

Существенное повышение точности определения энергий квазимолекулярных уровней было достигнуто благодаря применению упомянутого выше метода регистрации электронов по совпадениям с рассеянными ионами. Ход экспериментальной орбитали в зависимости от межъядерного расстояния $E(R)$ восстанавливался по положению максимума в спектрах оже-электронов $d^2\sigma/dE_e db$, измеренных при различных расстояниях наибольшего сближения $R_0$. Выполнен ряд расчетов МО для системы Kr–Kr [18,87,88]). Экспериментальные уровни близки к расчетным МО [88], переходящим в $4p$-уровень объединенного атома Hf. Определенные из спектров $d^2\sigma/dE_e db$ и $d^2\sigma/dE_e$ уровни квазимолекулы Kr–Kr удовлетворительно согласуются между собой. Следует учитывать, что при определении уровня квазимолекулы без применения метода совпадений вклады переходов на различные вакантные орбитали суммируются (в рассматриваемом случае суммируются переходы при заполнении вакансий на $4p\pi$- и $4d\delta$-орбиталях).

Из абсолютных величин сечений были оценены ширины автоионизационных уровней $\Gamma_A$. Сечения оже-ионизации в квазимолекулах Kr–Kr и Ar–Kr лежат в диапазоне $10^{-16} - 10^{-17}$ см$^2$. Переход от измеряемых сечений $d^2\sigma/dE_e d\Omega_e$ к сечениям $d\sigma/dE_e$ осуществлялся в предположении об изотропном в системе центра масс угловом распределении квазимолекулярных электронов. Оказалось, что величины $\Gamma_A$ достигают порядка $10^{16}$ с$^{-1}$ в случае $Kr^+$–Kr и порядка $10^{15}$ с$^{-1}$ в случае $Ar^+$–Kr, т. е. время жизни вакансий оказывается сравнимым с временем столкновения, и, как следствие, вакансии с заметной вероятностью успевают распасться в квазимолекуле. Причинами столь большой ширины автоионизационных уровней могут быть возрастание в квазимолекуле числа электронов на верхних уровнях за счет выдвижения заполненных орбиталей, способных участвовать в оже-переходах, а также увеличение перекрывания волновых функций состояний, между которыми осуществляется переход (аналогично переходам Костера–Кронига). Эффект увеличения $\Gamma_A$ в квазимолекуле был продемонстрирован на модельных расчетах [89, 90]. 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 МО, так и за счет выдвижения заполненных МО под границу непрерывного спектра, что приводит к появлению над вакантными уровнями уровней, заселенных электронами.

Для квазимолекулы Kr–Kr и Ar–Kr было исследовано столкновительное уширение квазимолекулярных оже-спектров в зависимости от скорости столкновения в диапазоне начальных энергий $E_0 = 10-500$ кэВ. Столкновительное уширение принято характеризовать величиной $\Gamma_{cb}$, равной энергетическому интервалу, на котором сечение уменьшается в 2 раза по сравнению со значением в точке $E_e(R_0)$. Столкновительное уширение было впервые исследовано для радиационных переходов в квазимолекуле. Однако эксперименты не смогли отчетливо выделить одну из зависимостей $\Gamma_{cb} \sim v_0^{1/2}$, $v_0^{2/3}$ или $v_0^1$, предсказываемых различными моделями. Этот вопрос удалось выяснить в случае оже-эмиссии [91], было показано, что экспериментальная $\Gamma_{cb}$ подчиняется соотношению $\Gamma_{cb} \sim v_0^{2/3}$, которое следует из модели, предложенной в работе [86].

Существенным шагом вперед явилась оже-спектроскопия легких квазимолекул, образующихся в столкновениях $Ne^+$–Ne и $O^+$–$O_2$ при энергиях $E_0 = 5$–$50$ кэВ в диапазоне параметров удара $b = 0.2$–$1.4$ а. е. Наличие точных расчетов молекулярных орбиталей для небольшого числа легких квазимолекул предоставляло возможность непосредственного сравнения результатов теории и эксперимента.

На рис. 15 представлены спектры электронов, измеренные для случая Ne–Ne. Как было показано в нашей работе [44], часть спектра экспоненциальной формы связана с образованием автоионизационного состоянии при выдвижении $4f\sigma$-орбитали и после-

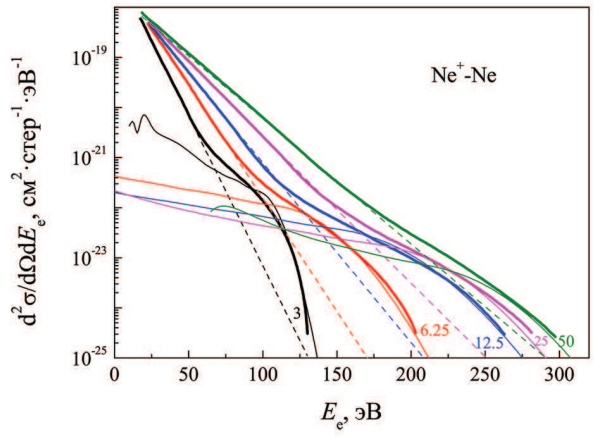


**Рис. 15.** Спектры электронов при столкновениях $Ne^+$–Ne [44] Штриховые линии — вклад экспоненциальной составляющей, тонкая сплошная кривая — расчет вклада оже-переходов в квазимолекуле с использованием формулы (8)

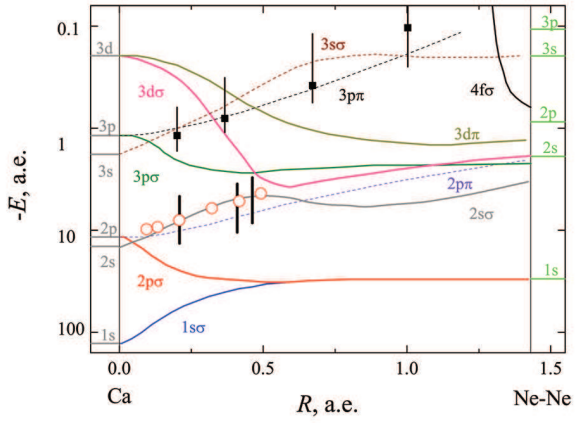


**Рис. 16.** Положение эффективного терма (точки), полученного из эксперимента [85], и диаграмма МО для системы $Ne^{2+}$–Ne [18]. Видно, что экспериментальные уровни согласуются с поведением в одном случае $2p\pi$-, а в другом — $3p\pi$- и $3s\sigma$-орбиталей. Экспериментальные энергии $E_{2p\pi}$ показаны вертикальными линиями, высота которых соответствует неопределенности энергий связи наружных электронов, участвующих в оже-переходе. Открытые точки — данные работы [44] для канала $3d\pi^2 - 2p\pi\varepsilon$, вносящего основной вклад в сечение. Рисунок взят из работы [44]

дующим переходом высоковозбужденных электронов в континуум вследствие динамики соударения (см. следующий раздел). Широкая полоса при больших энергиях электронов связана с оже-переходами в квазимолекуле на снижающуюся при сближении частиц $2p\pi$-орбиталь.

Как видно на рис. 15, этот канал доминирует при энергиях электронов свыше 2 а. е. Как показано в работах [44, 84, 85], анализ формы спектра и ее изменения с ростом энергии соударения позволяет из эксперимента получить зависимость энергии оже-перехода от достигнутого межъядерного расстояния. Данные работ [44, 85] находятся в хорошем согласии с данными расчетов энергий молекулярных орбиталей [18] (см. рис. 16). Хорошо согласуются также экспериментальная и расчетная $2p\pi$-орбитали в случае квазимолекулы O–O [85].

На орбитали $2p\pi$ имеется вакансия. Орбиталь $2s\sigma$ заполнена, так как формируется из заполненных $2s$-уровней сталкивающихся атомов.

В работе [18] были рассчитаны диаграммы МО для различных зарядовых состояний системы $Ne^{q+}$–Ne ($q = 0, 2, 4$). Заполнение $2p\pi$-вакансии 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 при больших межъядерных расстояниях из незаполненных уровней. Орбиталь $4f\sigma$ опустошена переходами электронов в континуум. Таким образом, имеются 6 вариантов начальных состояний для оже-переходов: $3p\sigma^2 - 2p\pi\varepsilon$ (под значком $\varepsilon$ понимается улетающий электрон), $3d\sigma^2 - 2p\pi\varepsilon$, $3d\pi^2 - 2p\pi\varepsilon$, $3p\sigma 3d\sigma - 2p\pi\varepsilon$, $3p\sigma 3d\pi - 2p\pi\varepsilon$ и $3d\sigma 3d\pi - 2p\pi\varepsilon$. В дальнейшем мы будем обозначать только начальное состояние. Энергии оже-переходов рассчитывались как разность энергий соответствующих орбиталей $E_i(R) = E_1(R) - E_2(R) - E_3(R)$.

Вероятность оже-перехода в единицу времени может быть получена как

$$W = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\iint \chi_f^*\varphi_f^*\frac{e^2}{r_{1,2}}\chi_i\varphi_i d\tau_1 d\tau_2\right|^2, \qquad (9)$$

где $\chi_i$, $\phi_i$ — одноэлектронные волновые функции двух электронов в атоме, находящихся на возбужденных уровнях, $\chi_f$ — волновая функция электрона на $2p\pi$-орбитали, $\varphi_f$ — волновая функция оже-электрона, т. е. свободного электрона, покидающего атом. Оператор $e^2/r_{1,2}$ описывает кулоновское взаимодействие двух электронов. Для двух электронов с одинаковым направлением спина учитывалась прямая и обратная амплитуды переходов и их интерференция. Далее проводилось суммирование вероятностей перехода из состояний с различным спином и проекцией момента. В качестве волновых функций стационарных состояний электрона использовались водородоподобные волновые функции, при этом эф-

фективный заряд $Z_i$ менялся при изменении межъядерного расстояния в соответствии с изменением энергии орбитали. Выбор водородоподобных волновых функций оправдан тем, что рассматриваемые переходы происходят вблизи предела объединенного атома, и электроны находятся в поле значительного по величине эффективного заряда объединенного атома.

Сечение эмиссии электронов с энергией $E_e$ можно рассчитать интегрированием выражения (8) по всем параметрам удара.

Как показано в работе [69, 92], при энергиях 3 кэВ имеется хорошее согласие расчета и эксперимента для сечений эмиссии оже-электрона при использовании вероятностей оже-переходов и энергий оже-электронов, рассчитанных для системы $Ne^{2+}$–Ne. При энергии 6.25 кэВ для электронов с энергиями 3–4 а. е. также имеется согласие при использовании параметров системы $Ne^{2+}$–Ne, а для электронов с энергиями 5–6 а. е. согласие достигается в большей степени при использовании вероятностей оже-переходов в системе $Ne^{4+}$–Ne. При энергиях 12.5–50 кэВ согласие с экспериментом достигается только при повышении степени ионизации квазимолекулы до $m = 6$. При этом под величиной $m$ понимается суммарное число удаленных электронов из системы.

Таким образом, сопоставление эксперимента с расчетом позволяет сделать вывод, что распад $2p\pi$-вакансии происходит в сильно возбужденной (ионизованной) системе, причем имеет место значительный рост ионизации частиц с увеличением энергии соударения.

Основной вклад при малых энергиях соударения дает переход $3d\pi^2$–$2p\pi\varepsilon$. С ростом энергии соударения подключается канал $3d\pi 3d\sigma$ и происходит сдвиг спектра электронов в сторону больших энергий. Однако вклад канала $3d\pi^2$ доминирует при всех изученных энергиях — вплоть до 50 кэВ. Вклад этого канала превышает 80%. Это позволяет определить вероятность указанного оже-перехода непосредственно из эксперимента (см. рис. 17).

Следует отметить, что с ростом ионизации партнеров соударения происходит сближение по шкале энергий положения возбужденных уровней $3p\sigma$, $3d\sigma$ и $3d\pi$ с уровнем $2p\pi$. Как показывает расчет, связанное с этим увеличение интегралов перекрытия волновых функций приводит к значительному росту вероятностей перехода.

Установленная закономерность — сильный рост степени ионизации системы при увеличении энергии соударения и соответственно уменьшении достигаемых межъядерных расстояний, должна учитываться при моделировании торможения частиц в веществе, при анализе ионизации частиц при соударениях, эмиссии оже-электронов и характеристического излучения и других столкновительных процессов.

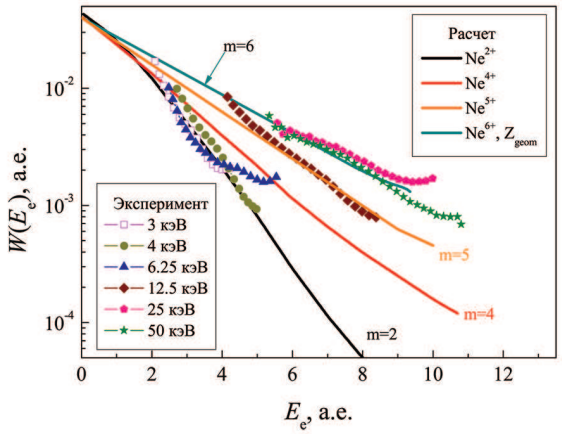


**Рис. 17.** Сопоставление расчетных значений вероятности оже-перехода для доминирующего канала $3d\pi^2 - 2p\pi\varepsilon$ при различных степенях ионизации системы $m$ со значениями, полученными из эксперимента при различных энергиях соударения. Использованы данные работ [69, 92]

Теоретические расчеты оже-ширин квазимолекулярных уровней $\Gamma_A(R)$ помимо рассмотренного выше случая $Ne^+$–Ne выполнены лишь для небольшого числа самых простых квазимолекул. Для оже-переходов на $1s\sigma$-уровень в квазимолекуле $He^+$–He экспериментальная ширина удовлетворительно согласуется с рассчитанной в работе [93] как по величине, так и по характеру зависимости от межъядерного расстояния. Для проверки модели оже-эмиссии измерены энергетические спектры электронов из квазимолекулы $He^+$–He с использованием методики совпадений, которые гораздо чувствительнее к выводам модели, чем спектры, проинтегрированные по всем возможным параметрам удара. В этом случае сравнение показало, что главный квазимолекулярный максимум с хорошей точностью описывается выражением (8): ширина максимума и экспоненциально убывающий высокоэнергетический участок спектра, вызванный столкновительным уширением, изменяются с увеличением скорости столкновения в полном соответствии с теорией.

Таким образом, квантово-механическая модель эмиссии оже-электронов из квазимолекулы, основанная на приближении Эйри, хорошо описывает оже-переходы в квазимолекулах $He^+$–He, O–O и Ne–Ne. Модель нуждается в дальнейшем развитии для описания оже-переходов в тяжелых квазимолекулах

с большим числом электронов и сложной структурой уровней. Однако такое развитие может базироваться на установленной применимости модели для простых и легких квазимолекул.

Можно сделать вывод, что изучение автоионизационных переходов (оже-переходов) в квазимолекуле позволило оценить их вклад (хотя и достаточно скромный, менее 10%) в неупругие потери, а также оказалось чрезвычайно плодотворным для развития экспериментальной спектроскопии уровней и квантово-механической модели эмиссии из квазимолекулы.

## 6. РАЗДЕЛЕНИЕ ВКЛАДОВ ОЖЕ-ИОНИЗАЦИИ И ДИНАМИЧЕСКОЙ ИОНИЗАЦИИ В ЭМИССИЮ ЭЛЕКТРОНОВ

В случае оже-распада $2p\pi$-вакансий в квазимолекулах Ne–Ne и O–O было установлено, что модель, предложенная в работе [86], достаточно хорошо воспроизводит поведение спектра $d^2\sigma/dE_e db$ в зависимости от $E_e$. В то же время спектр квазимолекулы Kr–Kr заметно уширен по сравнению со спектром, предсказываемым моделью. Таким образом, вопрос о применимости модели потребовал дополнительных исследований. Кроме того, в эксперименте Вурли и др. [94] было установлено, что полное сечение эмиссии электронов с непрерывным распределением неуклонно растет с увеличением скорости столкновения (вплоть до $E_0 = 800$ кэВ), что не согласуется с выводами квазимолекулярной модели: с ростом скорости уменьшается время существования квазимолекулы и, как следствие, должен уменьшаться выход оже-электронов.

Спектры квазимолекулы Kr–Kr в столкновениях с $E_0 = 150, 450$ и 750 кэВ были исследованы при фиксированных параметрах удара [95]. Эксперимент показал, что увеличение с ростом $E_0$ сечения образования электронов с непрерывным энергетическим распределением связано с быстро возрастающим вкладом ионизации вследствие прямых переходов атомных электронов в непрерывный спектр.

В общем случае соотношение автоионизации и динамической ионизации зависит от параметров рассматриваемых термов квазимолекулы и скорости соударения. Разделение двух механизмов ионизации в квазимолекуле было основано на том, что сечения оже-ионизации и прямой ионизации должны по-разному зависеть от скорости столкновения. Для исследования была выбрана простая квазимолекула $He^+$–He, в которой с высокой вероятностью

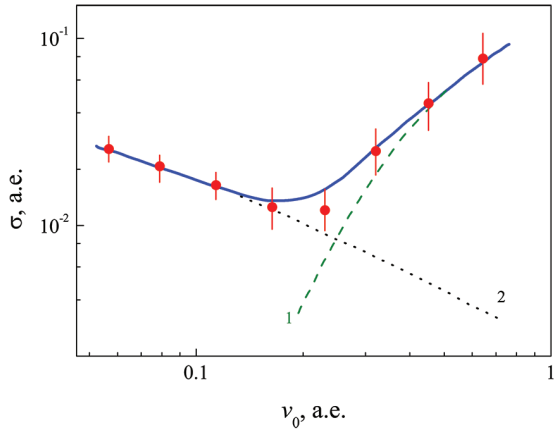


**Рис. 18.** Сечение эмиссии электронов с энергиями $E_e \geq 20$ эВ из квазимолекулы $He^+$–He в зависимости от скорости столкновения: 1 и 2 — расчет прямой и оже-ионизации соответственно. Использованы данные работы [96]

образуется $1s\sigma$-вакансия. Спектры электронов были измерены в широком диапазоне энергий соударения $E_0 = 0.3$–40 кэВ [96]. На рис. 18 приведена экспериментальная зависимость сечения эмиссии квазимолекулярных электронов от скорости $v_0$ вместе с расчетными зависимостями для прямой и оже-ионизации. Видно, что оже-переходы доминируют при скоростях $v_0 \leq 0.25$ а. е., т. е. в области, где хорошо выполняется условие применимости квазимолекулярного приближения. При больших скоростях быстро увеличивается вклад прямых переходов электронов в континуум.

Природа непрерывной компоненты в спектрах электронов до сих пор является привлекательным объектом исследований, так как открывает возможности изучения влияния динамики соударения на наблюдаемые спектры. В работах [71, 97] рассчитывалось поведение термов $E_i(R)$ для системы $H^+$–H в комплексной плоскости межъядерного расстояния $R$. Как уже упоминалось, различные термы являются разными листами функции $E(R)$. 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 выдвижение диабатического терма в континуум, несмотря на наличие кулоновского сгущения термов. За прошедшее время произошло значительное разви-

тие теории таких переходов. Было показано, что они могут быть обусловлены скрытыми пересечениями термов в комплексной плоскости межъядерного расстояния [71,97]. Подробный обзор теоретических работ о данном механизме ионизации дан в работе [98]. Среди других исследований спектров электронов, выполненных недавно, следует упомянуть работы [99–104].

Детальное исследование вклада динамической ионизации при столкновениях $Ne^+$–Ne выполнено в нашей работе [44]. Как видно на рис. 15, при энергиях электронов менее 2 а. е. в спектрах доминирует непрерывная компонента экспоненциальной формы. Мы связали появление этой компоненты с ионизацией автоионизационного состояния, образующего при выдвижении терма $4f\sigma^2$, на котором находятся два электрона, в континуум.

В работе [105] для описания спектров электронов было предложено выражение

$$\sigma\left(E_e\right) = A\left(E_e\right)\exp\left(-\frac{\alpha\left(E_e\right)}{v}\right), \tag{10}$$

$$\alpha\left(E_e\right) = 2\int\limits_{E_p}^{E_e} \operatorname{Im} R\left(E\right) dE, \tag{11}$$

$$A\left(E_e\right) = \frac{4\pi\left|R\left(E_e\right)\right|^2 \operatorname{Im} R(E_e)}{\alpha(E_e)}. \tag{12}$$

Здесь $R(E_e)$ — обратная функция для зависимости энергии рассматриваемого состояния от межъядерного расстояния $E_e(R)$, $\operatorname{Im} R(E_e)$ — мнимая часть этой функции, $v$ — скорость соударения (используются атомные единицы).

Следуя методике, предложенной в работе [106], т. е. взяв отношение измеренных сечений для двух скоростей соударения, можно исключить влияние предэкспоненциального фактора и из экспериментальных данных получить функцию $\alpha(E_e)$:

$$\alpha\left(E_e\right) = -\ln\left\{\frac{\sigma\left(E_e, E_1\right)}{\sigma\left(E_e, E_2\right)}\right\}\left[\frac{1}{v_1} - \frac{1}{v_2}\right]^{-1} \tag{13}$$

Здесь $v_1$, $v_2$ — скорости соударения для двух рассматриваемых случаев.

Как видно на рис. 19, данные для различных пар скоростей хорошо укладываются на одну кривую. 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. Полученное значение соответствует автоионизационному состоянию, образующемуся вследствие выдвижения

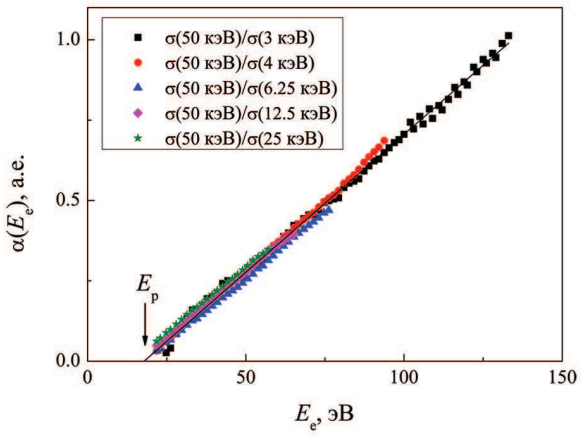


**Рис. 19.** Зависимость $\alpha(E_e)$, из отношения сечений, измеренных при разных энергиях соударения. Стрелкой указано значение $E_p = 17.5$ эВ, когда терм выходит в сплошной спектр. Рисунок взят из статьи [44]

терма $4f\sigma^2$ при достижении межъядерного расстояния $R_c = 1.3$ а. е.

Взяв производную от значения $\alpha(E_e)$ по энергии электрона, получим из эксперимента зависимость (в атомных единицах) $2\operatorname{Im} R(E_e) = 0.2301 \pm 0.0025E_e$. Таким образом, $\operatorname{Im} R(E_e)$ практически константа и слабо зависит от $E_e$, что расходится с теоретическими предсказаниями [70], согласно которым значение $\operatorname{Im} R(E_e)$ должно уменьшаться с ростом $E_e$. Факт, что $\operatorname{Im} R(E_e)$ практически константа приводит к экспоненциальной форме спектра. Такая форма спектра предполагает отсутствие интерференции амплитуд перехода при сближении и разлете частиц. А это может происходить, если вероятность перехода в континуум высока, что имеет место в изучаемом случае.

Нами [44] для предэкспоненциального фактора было получено выражение

$$A(E_e) = 3\pi R_c^2 \exp(-\gamma E_e), \qquad \gamma = 0.776.$$

Подобная зависимость не имеет пока теоретического объяснения и возможно связана с влиянием кулоновского поля ядер на волновую функцию эмитированного электрона.

Таким образом, показано, что появление экспоненциальной компоненты в спектре электронов согласуется с представлением о выдвижении 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 авто-

ионизационного терма: $E_p = 17.5$ эВ, соотношение $\mathrm{Im}\, R(E_e) = 0.23$ а.е. и $R_c = 1.3$ а.е., подтверждает наличие круто выдвигающегося $4f\sigma^2$-терма.

Полное сечение ионизации получим, проинтегрировав $\sigma(E_e)$ по энергии электрона:

$$\sigma_i = 3\pi R_c^2 \left\{ \frac{\exp\left(-\gamma E_p\right)}{(\mathrm{Im}\, R/E_e)v + \gamma} + \left[1 - \exp\left(-\gamma E_p\right)\right] E_p \right\}. \tag{14}$$

Значения, рассчитанные по формуле (14), находятся в хорошем согласии с измеренными сечениями ионизации [25, 27].

Спектры электронов, возникающие при динамической ионизации, и столкновительное уширение автоионизационной линии описываются весьма похожими выражениями, отражающими динамику соударения. Для вывода о вкладе автоионизации или динамической ионизации требуется привлечь дополнительную информацию.

Как видно на рис.8*a*, при достижении межъядерного расстояния $R_c$, соответствующего выдвижению $4f\sigma$-орбитали, число удаляемых электронов $\delta$ при энергиях соударения 3–6 кэВ близко к 1, что соответствует распаду автоионизационного состояния. При энергии 50 кэВ число эмитируемых электронов $\delta$ увеличивается до 2. Это означает, что с ростом энергии соударения динамическая ионизация увеличивает вероятность перехода электрона в континуум, т. е. мы имеем картину, похожую на случай ионизации для более простой системы $He^+$–He.

Таким образом, формирование автоионизационного терма, резко выдвигающегося при сближении частиц, что приводит к возможности переходов электронов в континуум вследствие динамики соударения, является основным каналом ионизации в рассматриваемом случае столкновений $Ne^+$–Ne. Как видно на рис. 15, динамическая ионизация и оже-переходы в квазимолекуле позволяют количественно описать спектры электронов и сечение ионизации при столкновениях атомов средних масс.

## 7. ВКЛАД ОБРАЗОВАНИЯ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ТОРМОЗНЫЕ ПОТЕРИ

В наших недавних работах [107–109] выявлена еще одна область атомной физики, где учет автоионизационных процессов может привести к кардинальному прогрессу в понимании явления, а именно, торможения атомов в твердом теле.

Обзор современного состояния работ по теории торможения частиц дан в [110, 111]. Как правило, теория удовлетворительно описывает потери при больших энергиях частиц и вблизи максимума сечения торможения. В работе [112] был предложен подход для описания тормозных потерь при медленных столкновениях. Однако имеются значительные расхождения теории с экспериментом. На наш взгляд, это связано с тем, что при медленных столкновениях игнорируется ионизация вследствие образования и распада автоионизационных состояний.

Электронная тормозная способность и неупругие потери энергии при столкновениях связаны как

$$\frac{dE}{dx} = \frac{2\pi}{V_0} \int \left[Q_0 + Q_1\right] W\left(b\right) b\, db. \tag{15}$$

Здесь $V_0$ — объем одного атома в твердой мишени, $b$ — параметр удара, член $Q_0$ обусловлен возбуждением плазмонов и другими возбуждениями при прохождении частицы через мишень, а член $Q_1$ отражает вклад от ионизации частиц, $W(b)$ является вероятностью неупругого перехода. Как показано в нашей работе [107], формирование автоионизационных состояний вносит доминирующий вклад в тормозные способности при бомбардировке ионами твердых тел.

Значения электронных тормозных способностей $dE/dx$ можно оценить, используя связь между сечением возбуждения автоионизационного состояния и сечением ионизации. Соотношение между сечением образования автоионизационного состояния $\sigma_v$ и сечением ионизации $\sigma_i$ имеет вид $\sigma_v = 1/N\sigma^{ion}$, где $N$ — число электронов, образующихся при распаде автоионизационного состояния. Наконец, уравнение (15) можно переписать в виде

$$\frac{dE}{dx} = \frac{1}{NV_0} \sum_{nlj} Q_{1nlj}\, \sigma_{nlj}^{ion}. \tag{16}$$

Поэтому для оценки вклада автоионизационных процессов в $dE/dx$ необходимо знать значения $Q_{1nlj}$ и сечений ионизации $\sigma_{nlj}^{ion}$.

На рис. 20 дано сравнение электронных тормозных способности $dE/dx$ для случая столкновений ионов Ar с твердым Ar, рассчитанных по формуле (16), с значениями из базы данных SRIM [113].

Сечения ионизации для случая $Ar^+$–Ar-столкновений взяты из работы [26, 27, 47]. В случае M-оболочки наблюдалось образование состояний с энергиями 14, 28 и 55 эВ [40]. Вклад образования вакансий в $L_{2,3}$-оболочке также учитывался. Сечение образования $L_{2,3}$-вакансий было получено из измерений сечения образования оже-электронов при распаде вакансии [23]. Энергия

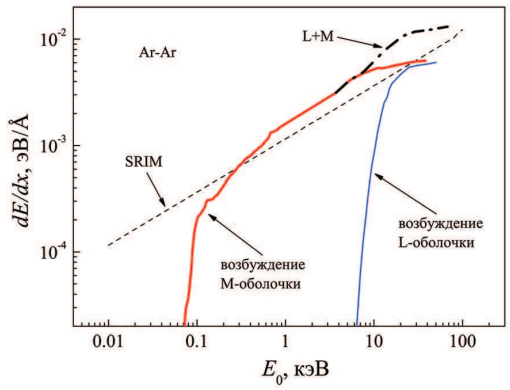


**Рис. 20.** Сравнение электронных тормозных потерь, представленных в базе данных SRIM, и наша оценка, основанная на сечении ионизации для случая Ar–Ar. Оценка возбуждения M-оболочки получена на основе сечений ионизации, взятых из [26, 27, 47]. Показан также вклад образования $L_{2,3}$-вакансий [23]. Штрихпунктирная линия — сумма возбуждений L- и M-оболочек. Рисунок взят из работы [107]

образования L-вакансии была принята равной 340 эВ [28]. Штрихпунктирная линия на рис. 20 представляет собой сумму вкладов в электронную тормозную способность $dE/dx$ от возбуждения L- и M-оболочек. Как видно, возбуждение L-оболочки увеличивает значение $dE/dx$ в два раза. Этот рисунок также демонстрирует пороговое поведение электронной тормозной способности $dE/dx$. Как и в других рассмотренных случаях, предлагаемая модель предсказывает доминирующий вклад процессов формирования автоионизационных состояний и последующей ионизации в электронные тормозные способности $dE/dx$ в рассматриваемом диапазоне энергий соударения, а также предсказывает пороговую зависимость $dE/dx$ от энергии бомбардирующих ионов.

Для случаев, когда отсутствуют данные о сечениях ионизации, для их оценки можно использовать разработанные нами скейлинги. С помощью этого метода были сделаны оценки вклада ионизации L-оболочек для систем O–Al и Ne–Si [109]. Возбуждение L-оболочки в легком партнере соударения связано с выдвижением $4f\sigma$-орбитали, а в более тяжелом партнере — с выдвижением $3d\sigma$-орбитали. Величина неупругой потери энергии в канале, связанном с выдвижением $4f\sigma$, составляла величину 35 эВ и 45 эВ для систем O–Al и Ne–Si соответственно. Величина $Q$ для $3d\sigma$-орбитали зависит от рассматриваемой энергии и оценивалась нами из экспериментально измеренной зависимости $Q$ от межъядерного расстояния [114].

В случае O-Al наш расчет вклада от выдвижения $3d\sigma$ и $4f\sigma$-орбиталей хорошо согласуется с данными эксперимента [115] и расчетом [116] при использовании бинарной теории при описании взаимодействия частиц. Используя формулу из работы [117] для потери энергии при взаимодействии иона с газом свободных электронов в твердом теле, мы оценили вклад в потерю энергии при торможении ионов Ne на внешней оболочке Si. При $E = 10$ кэВ это значение составило всего 13% от полной величины сечения тормозных потерь.

Таким образом, перестройка уровней квазимолекулы и формирование автоионизационных состояний должны обязательно учитываться при расчете торможения частиц кэВ-энергий в веществе. Предложенный подход предсказывает пороговую зависимость сечения тормозных потерь от энергии бомбардирующих ионов, что не может объяснить ни одна из существующих теоретических моделей.

## 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Рассмотрены имеющиеся экспериментальные и теоретические данные о формировании неупругих потерь энергии, о процессах ионизации, эмиссии электронов и квантов при столкновениях атомов в кэВ-диапазоне энергий. Предложена модель, описывающая связь процессов ионизации, образования вакансий во внутренних оболочках и наблюдаемых неупругих потерь. Сделан вывод, что возбуждение автоионизационных состояний является доминирующим механизмом неупругих потерь при столкновениях атомов кэВ-энергий.

2. Приведены результаты недавно опубликованных исследований по теме обзора: о механизме срыва электрона в континуум с выдвигающегося автоионизационного терма, о каналах оже-распада вакансий в квазимолекуле, позволившие добиться количественного описания сечений ионизации и спектров электронов, эмитируемых при столкновениях атомов кэВ-энергий.

3. Рассмотрена возможность определения сечений образования вакансий во внутренних оболочках для различных комбинаций атомов-партнеров столкновения расчетным путем. Разработаны скейлинги, позволяющие рассчитать сечения ионизации K-, L- и M-оболочек для произвольных комбинаций сталкивающихся атомов.

4. Показано, что теоретические модели, описывающие торможение ионов кэВ-энергий в веществе, должны обязательно принимать во внимание возбуждение автоионизационных состояний. Предсказана пороговая зависимость сечений тормозных потерь от энергии соударения.

## ЛИТЕРАТУРА


**1**. J. D. Garcia, R. J. Fortner, and T. M. Kavanagh, Rev. Mod. Phys. **45**, 111 (1973).

**2**. Q. C. Kessel and B. Fastrup, Case Studies in Atomic Physics **3**, 137 (1973).

**3**. G. N. Ogurtsov, Rev. Mod. Phys. **44**, 1 (1972).

**4**. J. S. Briggs, *in Fundamental processes in energetic atomic collisions*, Plenum Press, New York (1983).

**5**. В. В. Афросимов и др., ЖТФ **34**, 1613 (1964).

**6**. В. В. Афросимов и др., ЖТФ **34**, 1624 (1964).

**7**. В. В. Афросимов и др., ЖТФ **34**, 1637 (1964).

**8**. E. Everhart and Q. C. Kessel, Phys. Rev. Lett. **14**, 247 (1965).

**9**. Q. C. Kessel, A. Russek, and E. Everhart, Phys. Rev. Lett. **14**, 484 (1965).

**10**. Q. C. Kessel and E. Everhart, Phys. Rev. **146**, 16 (1966).

**11**. U. Fano and W. Lichten, Phys. Rev. Lett. **14**, 627 (1965).

**12**. Q. C. Kessel, M. P. McCaughey, and E. Everhart, Phys. Rev. **153**, 57 (1967).

**13**. B. Fastrup, G. Hermann, and K. J. Smith, Phys. Rev. A **3**, 1591 (1971).

**14**. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. М. Полянский, А. П. Шергин, ЖЭТФ **57**, 806 (1969).

**15**. П. Ю. Бабенко, А. Н. Зиновьев, А. П. Шергин, Письма в ЖТФ **39**, 80 (2013).

**16**. P. Yu. Babenko, A. N. Zinoviev, and A. P. Shergin, NIMB **354**, 142 (2015).

**17**. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. Н. Зиновьев, ЖЭТФ **66**, 1933 (1974).

**18**. J. Eichler, U. Wille, B. Fastrup, and K. Taulbjerg, Phys. Rev. A **14**, 707 (1976).

**19**. D. Schneider, G. Notle, U. Wille, and N. Stolterfoht, Phys. Rev. A **28**, 161 (1983).

**20**. J. Mace, M. J. Gordon, and K. P. Giapis, Phys. Rev. Lett. **9**, 257603 (2006).

**21**. A. N. Zinoviev, NIMB **269**, 829 (2011).

**22**. А. Н. Зиновьев, Поверхность **5**, 38 (2008).

**23**. Г. Г. Месхи, Дисс. ... канд-та физ.-матем. наук, ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, Ленинград (1983).

**24**. R. K. Cacak, Q. C. Kessel, and M. E. Rudd, Phys. Rev. A **2**, 1327 (1970).

**25**. R. C. Amme and P. O. Haugsjaa, Phys. Rev. **177**, 230 (1969).

**26**. H. B. Gilbody and J. B. Hasted, Proc. Roy. Soc. A **238**, 334 (1957).

**27**. H. B. Gilbody and J. B. Hasted, Proc. Roy. Soc. A **240**, 382 (1957).

**28**. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. М. Полянский, А. П. Шергин, ЖЭТФ **63**, 799 (1972).

**29**. F. W. Bingham, Phys. Rev. **182**, 180 (1969).

**30**. E. J. Knystautas, Q. C. Kessel, R. Del Boca, and H. C. Hayden, Phys. Rev. A **1**, 825 (1970).

**31**. R. K. Cacak and T. Jorgensen, Phys. Rev. A **2**, 1322 (1970).

**32**. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. Н. Зиновьев, Письма ЖЭТФ **21**, 26 (1975).

**33**. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. Н. Зиновьев и др., Письма ЖЭТФ **21**, 535 (1975).

**34**. F. W. Saris, Physica **52**, 1327 (1971).

**35**. A. P. Shergin and Yu. S. Gordeev, *Proc. X Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions, Invited Lectures and Progress Reports*, Paris (1977).

**36**. V. V. Afrosimov and A. P. Shergin, *Proc. VI Int. Conf. on Atomic Physics. Invited Lectures and Progress Reports*, Riga (1978).

**37**. A. P. Shergin, *Proc. VI Int. School. on Physics of Ionized Gases-SPIG-78. Invited Lectures and Progress Reports*, Dubrovnik (1978).

**38**. M. H. Chen and B. Craseman, Phys. Rev. A **10**, 2232 (1974).

**39**. J. C. Slater, Phys. Rev. **36**, 57 (1930).

**40**. D. J. Bierman and W. C. Turkenburg, Physica **67**, 533 (1973).

**41**. В. В. Афросимов и др., ЖТФ **36**, 123 (1966).

**42**. E. N. Fuls, P. R. Jones, F. P. Ziemba, and E. Everhart, Phys. Rev. **107**, 704 (1957).

**43**. P. R. Jones, P. Costigan, and G. Van Dyk, Phys. Rev. **129**, 211 (1963).

**44**. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, ЖЭТФ **159**, 56 (2021).

**45**. G. H. Morgan and E. Everhart, Phys. Rev. **128**, 667 (1962).

**46**. Q. C. Kessel, P. H. Rose, and L. Grodzins, Phys. Rev. Lett. **22**, 1031 (1969).

**47**. P. O. Haugslaa and R. C. Amme, J. Chem. Phys. **52**, 4874 (1970).

**48**. F. P. Larkins, J. Phys. B **4**, 1 (1973).

**49**. B. Fastrup, Phys. Rev. A **9**, 2518 (1974).

**50**. B. Fastrup, J. Phys. B **7**, L206 (1974).

**51**. N. Stolterfoht, D. Schneider, D. Burch et al., Phys. Rev. A **12**, 1313 (1975).

**52**. F. W. Saris and D. Onderdelinden, Physica **49**, 441 (1970).

**53**. V. V. Afrosimov et al. *Proc. X Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions, Invited Lectures and Progress Reports*, Paris (1977).

**54**. C. P. Bhalla, J. Phys. B **8**, 2792 (1975).

**55**. M. H. Chen and B. Crasemann, *Proc. IX Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions, Invited Lectures and Progress Reports*, Seattle (1975).

**56**. M. Ya. Amusia, V. K. Ivanov, and V. A. Kharchenko, J. Phys. B **18**, L563 (1985).

**57**. S. Kucas, A. Momkauskaite, and R. Karazija, Astroph. J. **810**, 26 (2015).

**58**. A. Kucukonder and M. Erguven, AIP Conf. Proc. **2043**, 020021 (2018).

**59**. S. Santra, A. C. Mandal, D. Mitra et al., Radiat. Phys. Chem. **74**, 282 (2005).

**60**. I. I. Tupitsyn, Y. S. Kozhedub, V. M. Shabaev et al., Phys. Rev. A **85**, 032712 (2012).

**61**. P. Verma, P. H. Mokler, A. Bräuning-Demian et al., Phys. Scr. T **144**, 014032 (2011).

**62**. G. Lapicki, *ICPEAC Abstracts. WE-124*, Queensland (2017).

**63**. J. S. Briggs and J. Macek, J. Phys. B **5**, 579 (1972).

**64**. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, Письма ЖЭТФ **114**, 13 (2021).

**65**. W. E. Meyerhof and K. Taulbjerg, Ann. Rev. Nucl. Sci. **27**, 279 (1977).

**66**. W. N. Lennard and I. V. Mitchell, J. S. Forster, Phys. Rev. A **18**, 1949 (1978).

**67**. C. Foster, T. P. Hoogkamer, P. Woerlee, and F. W. Saris, J. Phys. B **9**, 1943 (1976).

**68**. А. Н. Зиновьев, С. Ю. Овчинников, Ю. С. Гордеев, Письма ЖТФ **7**, 139 (1981).

**69**. В. С. Михайлов, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, А. Н. Зиновьев, Письма ЖТФ **48**, 30 (2022).

**70**. С. Ю. Овчинников, Е. А. Соловьев, Письма ЖЭТФ **91**, 477 (1986).

**71**. M. Pieksma and S. Yu. Ovchinnikov, J. Phys. B **24**, 2699 (1991).

**72**. С. В. Авакян, Р. Н. Ильин, В. М. Лавров, Г. Н. Огурцов, *Сечения процессов ионизации и возбуждения*, ГОИ, СПб. (2000).

**73**. V. V. Afrosimov et al., *XI Int. Conf. on Phys. of Electronic and Atomic Collisions*, Kyoto (1979).

**74**. В. В. Афросимов и др., ЖТФ **41**, 134 (1972).

**75**. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, В. М. Лавров, ЖЭТФ **68**, 1715 (1975).

**76**. F. W. Saris, W. F. van der Weg, H. Tawara, and R. Laubert, Phys. Rev. Lett. **28**, 717 (1972).

**77**. P. H. Mokler, H. J. Stein, and P. Armbruster, Phys. Rev. Lett. **29**, 827 (1972).

**78**. J. R. MacDonald, M. D. Brown, and T. Chiao, Phys. Rev. Lett. **30**, 471 (1973).

**79**. G. Bissinger, and L. C. Feldman, Phys. Rev. Lett. **33**, 1 (1974).

**80**. B. Knaf and G. Presser, Phys. Lett. A **49**, 89 (1974).

**81**. F. W. Saris, J. Phys. B **17**, 1494 (1974).

**82**. W. E. Meyerhof, T. K. Saylor, and R. Anholt, Phys. Rev. A **12**, 2641 (1975).

**83**. V. M. Mikoushkin, G. N. Ogurtsov, and I. P. Flaks, J. Phys. B **16**, L405 (1983).

**84**. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, А. Н. Зиновьев и др., Письма ЖЭТФ **24**, 33 (1976).

**85**. В. В. Афросимов, Г. Г. Месхи, Н. Н. Царев, А. П. Шергин, ЖЭТФ **84**, 454 (1983).

**86**. А. З. Девдариани, В. Н. Островский, Ю. Н. Себякин, ЖЭТФ **73**, 412 (1977).

**87**. V. K. Nikulin and N. A. Guschina, J. Phys. B **11**, 3553 (1978).

**88**. B. Fricke and W.-D. Sepp, J. Phys. B **14**, L549 (1981).

**89**. Л. М. Кишиневский, Е. С. Парилис, ЖЭТФ **55**, 1932 (1968).

**90**. L. M. Kishinevsky and B. G. Krakov, E. S. Parilis, Phys. Lett. A **85**, 141 (1981).

**91**. A. P. Shergin, R. Mann, and H. F. Beyer, Z. Phys. A **302**, 191 (1981).

**92**. В. С. Михайлов, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, А. Н. Зиновьев, ЖЭТФ **160**, 794 (2021).

**93**. W. Sidis, J. Phys. B **6**, 1188 (1973).

**94**. P. H. Woerlee, Yu. S. Gordeev, H. de Waard, and F. W. Saris, J. Phys. B **14**, 527 (1981).

**95**. A. P. Shergin, R. Stotzel, Z. Roller et al., Phys. Rev. A **34**, 4490 (1986).

**96**. В. Р. Асатрян, А. П. Шергин, Письма ЖЭТФ **44**, 454 (1986).

**97**. E. A. Solov'ev, Sov. Phys. JETP **54**, 893 (1981).

**98**. S. Yu. Ovchinnikov, G. N. Ogurtsov, J. H. Macek, and Yu. S. Gordeev, Phys. Rep. **389**, 169 (2004).

**99**. Е. А. Соловьев, *Новые подходы в квантовой физике*, Физматлит, М. (2019).

**100**. G. N. Ogurtsov, V. M. Mikoushkin, S. Yu. Ovchinnikov, and J. H. Macek, Phys. Rev. A **74**, 042720 (2006).

**101**. S. Yu. Ovchinnikov, J. H. Macek, and V. M. Mikoushkin, Phys. Rev. A **84**, 032706 (2011).

**102**. S. Yu. Ovchinnikov and J. H. Macek, NIMB **241**, 78 (2005).

**103**. J. H. Macek and S. Yu. Ovchinnikov, Phys. Rev. Lett. **104**, 033201 (2010).

**104**. L. Ph. H. Schmidt, C. Goihl, D. Metz et al., Phys. Rev. Lett. **112**, 083201 (2014).

**105**. G. N. Ogurtsov, A. G. Kroupyshev, M. G. Sargsyan et al., Phys. Rev. A **53**, 2391 (1996).

**106**. A. N. Zinoviev, S. Yu. Ovchinnikov, and Yu. S. Gordeev, *Abstr. XII ICPEAC*, Gatlinburg (1981).

**107**. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, Д. С. Мелузова, А. П. Шергин, Письма ЖЭТФ **108**, 666 (2018).

**108**. A. N. Zinoviev, P. Yu. Babenko, D. S. Meluzova, and A. P. Shergin, NIMB **467**, 140 (2020).

**109**. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, Поверхность **12**, 64 (2020).

**110**. P. Sigmund, NIMB **406**, 391 (2017).

**111**. C. C. Montanari and J. E. Miraglia, Phys. Rev. A **96**, 012707 (2017).

**112**. О. Б. Фирсов, ЖЭТФ **36**, 1517 (1959).

**113**. J. F. Ziegler and J. P. Biersack, SRIM. http://www.srim.org.

**114**. F. Xu, G. Manico, F. Ascione et al., Phys. Rev. A **57**, 1096 (1998).

**115**. H. Paul, Stopping Power for Light Ions. http://www.exphys. uni-linz.ac.at/stopping.

**116**. P. Sigmund and A. Schinner, NIMB **195**, 64 (2002).

**117**. P. M. Echenique, F. Flores, and R. H. Ritchie, Sol. Stat. Phys. **43**, 229 (1990).