

СИЛЬНОЕ НАРУШЕНИЕ АДИАБАТИЧНОСТИ ПРИ МЕДЛЕННЫХ АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

В.В.Афросимов, Ю.С.Гордеев, А.Н.Зиновьев
Д.Х.Расулов, А.П.Шергин

Наблюдались переходы между непересекающимися термами системы сталкивающихся частиц, расстояние между которыми составляет ~ 200 эв. Вероятности переходов значительно превышают вероятности, оцененные на основе существующих теоретических моделей.

Столкновения многоэлектронных атомов и ионов при скоростях, меньших орбитальных скоростей электронов, успешно описываются на основе адиабатического приближения. Взаимодействие атомных частиц является адиабатическим при малых значениях параметра неадиабатичности $\xi = \hbar v/a \Delta E(R) \ll 1$, где $\Delta E(R)$ – энергия перехода между термами квазимолекулы при межъядерном расстоянии R , v – скорость ядер и a – характерная длина столкновения. Переходы между термами происходят при $\xi \gtrsim 1$, что обычно соответствует пересечению или сближению термов. В настоящей работе обнаружены переходы, происходящие с заметной вероятностью при весьма малых значениях параметра неадиабатичности $\xi \approx 0,1 \div 0,01$.

Изучались столкновения с участием атомов и ионов азота, кислорода и аргона в интервале энергий $E_0 = 10 \div 50$ кэв, т. е. при относительных скоростях $v_0 = 4 \div 8 \cdot 10^7$ см/сек. Исследовались энергетические спектры вторичных электронов $d^2\sigma/d\Omega dE_e$, образующихся при столкновениях. Угол вылета электронов составлял 125° относительно направления первичного пучка. Энергетическое разрешение анализатора было 4%. Для калибровки сечений использовались абсолютные данные работы [1] для столкновений $\text{Ar}^+ - \text{Ar}$, 50 кэв.

Часть полученных спектров приведена на рис. 1. Интенсивный пик при $E_e = 180$ эв отвечает оже-электронам, возникающим при заполнении $2p$ -вакансии в Ar . Пик при $E_e = 340$ эв связан с переходами на $1s$ -уровень в N . При столкновениях с участием атомов и молекул кислорода картина качественно такая же, как и в случае азота.

Интерпретация переходов внутренних электронов в настоящее время основывается, главным образом, на анализе корреляционных диаграмм молекулярных орбиталей (МО). Корреляционная диаграмма для пары $\text{N} - \text{Ar}$ приведена на рис. 2. Образование $2p$ -вакансии в Ar при столкновениях $\text{N}^+ - \text{Ar}$ и $\text{Ar}^+ - \text{N}_2$ объясняется выдвиганием $3d\sigma$ орбитали и взаимодействием ее с верхними незаполненными МО. Образование $1s$ -вакансии в столкновениях $\text{N}^+ - \text{N}_2$, согласно корреляционной диаграмме для симметричных систем, объясняется переходом между $2p\sigma$ и незаполненной $2p\pi$ орбиталями, сближающимися при $R \rightarrow 0$. Однако диаграмма на рис. 2 не позволяет объяснить образование $1s$ -вакансии в N при столкновениях $\text{N}^+ - \text{Ar}$. В соответствии с диаграммой,

1s-вакансия могла бы образоваться вследствие $2p\sigma - 2p\pi$ или $2p\sigma - 2s\sigma$ -переходов, но орбитали $2p\pi$ и $2s\sigma$ заполнены, и указанные переходы невозможны.

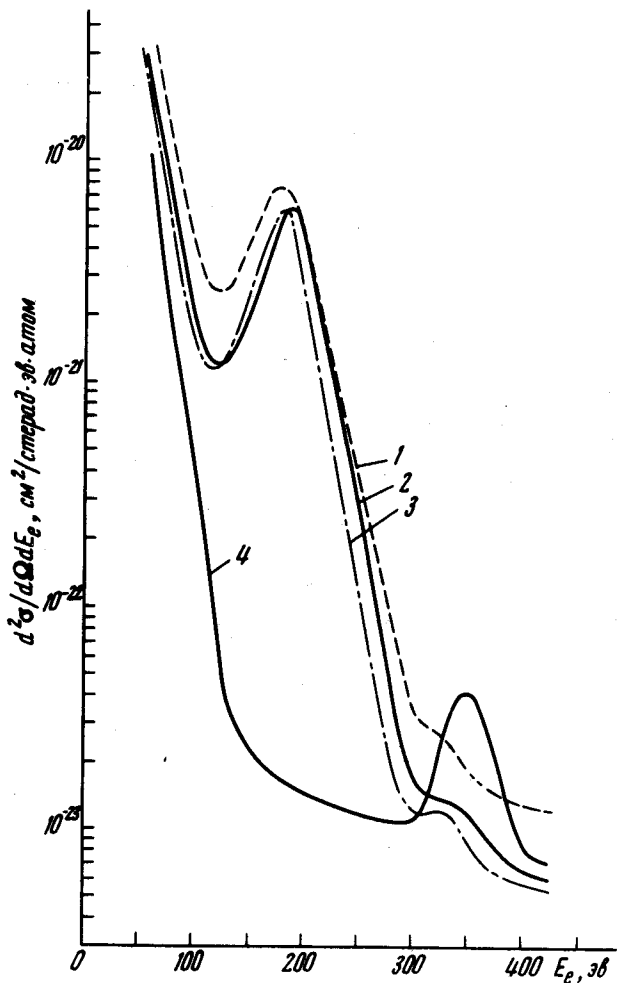


Рис. 1. Энергетические спектры выбитых электронов: 1 — $N^+ - Ar$, 50 кэв; 2 — $N_2^+ - Ar$, 50 кэв; 3 — $N^+ - Ar$, 17,3 кэв; 4 — $N^+ - N_2$, 17,3 кэв

Наблюдаемый переход не удается объяснить и прямым выбиванием 1s-электрона N атомов Ar. Сечение σ_i такого процесса можно оценить, используя универсальную зависимость сечений ионизации K-оболочек атомов [2]: $\sigma_i \approx Z^2 \cdot f\left(\frac{v^2}{U_k}\right)$, где U_k — энергия связи K-электрона,

Z — эффективный заряд ионизирующей частицы. Обычно при малых скоростях такая оценка дает завышенную величину сечения. Для случая $N^+ - Ar$, 17,3 кэв, даже считая $Z_{Ar} = 16$, получаем $\sigma_i \approx 2,2 \cdot 10^{-23} \text{ см}^2$. Эксперимент же дает существенно большую величину $\sigma(1s) \approx 1,0 \cdot 10^{-21} \text{ см}^2$,

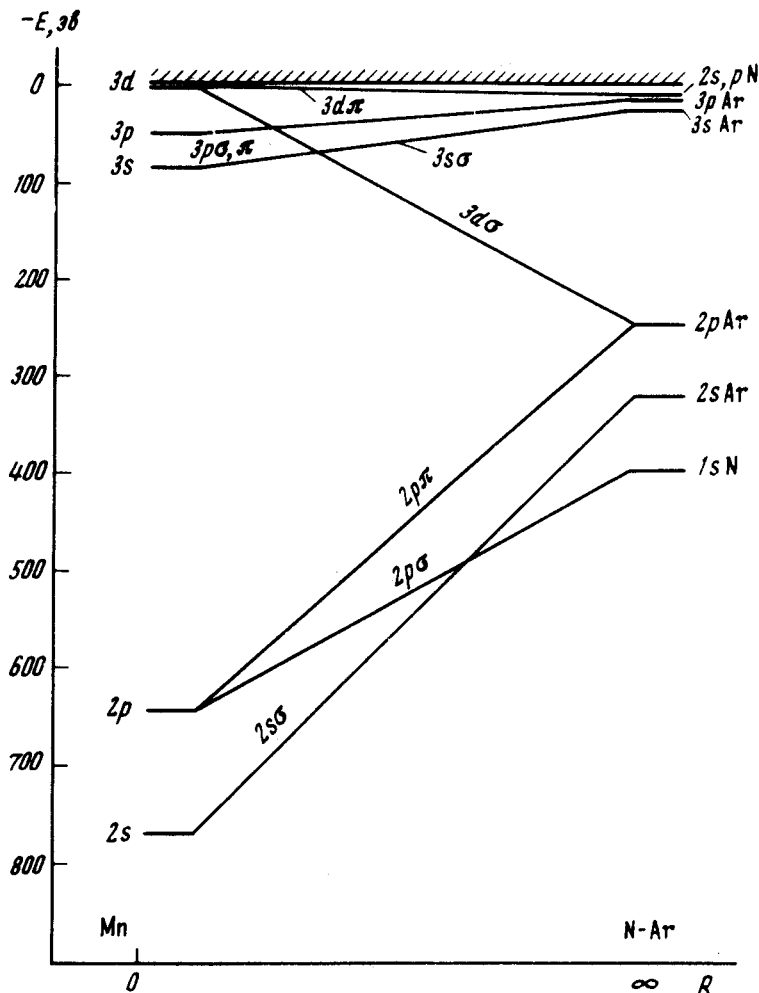


Рис. 2. Корреляционная диаграмма МО системы N – Ar

кроме того, при изменении энергии от 17,3 до 50 кэВ сечение $\sigma(1s)$ возрастает примерно в 2,5 раза, тогда как сечение прямой ионизации σ_i в исследуемой области энергий пропорционально E_0^4 [2].

Приходится предположить, что причиной образования $1s$ -вакансии является сильная неадиабатическая связь $2p\sigma$ орбитали с верхними свободными уровнями или даже с континуумом. Возможным путем образования $1s$ -вакансии является двухступенчатый процесс. Известно [3], что при сближении атомов до малых межъядерных расстояний вследствие выдвигания $3d\sigma$ орбитали на ней с высокой вероятностью образуются одна или две вакансии. При разлете частиц эти вакансии могут перейти с $3d\sigma$ на $2p\sigma$ орбиталь, если связь между орбиталями достаточно сильна.

Основные результаты измерений приведены в таблице. Если предлагаемое объяснение справедливо, то отношения сечения образования $1s$ -вакансии в N к сечению образования $2p$ -вакансии в Ar $\sigma(1s)/\sigma(2p)$ непосредственно характеризуют вероятности $2p\sigma - 3d\sigma$ -переходов.

| Пара | $N^+ - Ar$ | | | $N_2^+ - Ar$ | | $Ar^+ - N_2$ | $O^+ - Ar$ | | $O_2^+ - Ar$ |
|-------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| | | | | | | | | | |
| $E_o, \text{кэВ}$ | 17,3 | 25 | 50 | 34,6 | 50 | 50 | 25 | 50 | 50 |
| $\sigma(1s)$ | $3,4 \pm 1,3$ | $5,0 \pm 0,6$ | $5,3 \pm 0,6$ | $4,7 \pm 0,6$ | $4,2 \pm 0,5$ | $4,9 \pm 0,5$ | $1,6 \pm 0,6$ | $2,7 \pm 0,8$ | $1,7 \pm 0,6$ |
| $\sigma(2p)$ | | | | | | | | | |

Хотя рассматриваемый переход $2p\sigma - 3d\sigma$ является энергетически наиболее выгодным из всех возможных, энергия этого перехода при изменении R от ∞ до 0 изменяется от 280 до 720 эВ в случае $O - Ar$ и от 150 до 650 эВ в случае $N - Ar$. В то же время величина неадиабатического возмущения $\hbar v/a$ в исследованных условиях составляет ~ 10 эВ. Оценки максимальной вероятности переходов, сделанные в соответствии с [4], дают значения на несколько порядков ниже экспериментальных значений и приводят к экспоненциальной зависимости вероятности от скорости, чего также не наблюдается. Сильное расхождение эксперимента оценками показывает, что в исследованных нами случаях взаимодействие между термами существенно отличается от обычно принимаемого для описания переходов между пересекающимися термами.

При столкновениях Ar с молекулами N_2 и O_2 образование $1s$ -вакансий возможно также в результате эффекта "карамболя" [5], т. е. вследствие двух последовательных столкновений атома Ar с атомами N или O . Если в первом столкновении в результате выдвигания $3d\sigma$ орбитали образуется $2p$ -вакансия в Ar , то во втором столкновении эта вакансия может перейти на $1s$ -уровень N или O вследствие $2p\sigma - 2p\pi$ -перехода. Однако, как видно из таблицы, измеренные при равных скоростях отношения $\sigma(1s)/\sigma(2p)$ для атомов и молекул практически совпадают. Это означает, что в исследованных случаях вклад эффекта "карамболя" не превышает ошибок измерений, и обнаруженный в настоящей работе механизм образования $1s$ -вакансий является доминирующим.

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

Поступила в редакцию
2 ноября 1974 г.

Литература

- [1] R.K.Cacak, T.Jorgensen, Jr., M.E.Rudd. D.Thesis. Lincoln, Nebraska, 1969.
- [2] J.D.Garcia, R.J.Fortner, T.M.Kavanagh. Rev. Mod. Phys., **45**, 111, 1973.
- [3] В.В.Афросимов, Ю.С.Гордеев, А.М.Полянский, А.П.Шергин. ЖЭТФ, **63**, 799, 1972.
- [4] D.S.F.Crothers. J.Phys. B, **6**, 1418, 1973.
- [5] C.Foster, F.W.Saris. Abstr. VIII Intern. Conf. Phys. of Electronic and Atomic Collisions, Beograd, 1973, p. 716.