

УДК 539.182/184

РАДИАЦИОННЫЕ ПОЛУ-ОЖЕ САТЕЛЛИТЫ В РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРАХ

М. Я. Амуся, А. Н. Колесникова, И. С. Ли

В рамках аппарата квантовой теории многих тел исследованы низкоэнергетические сателлиты в рентгеновских спектрах, появляющиеся в результате радиационных полу-Оже распадов внутренних вакансий, в которых в отличие от обычных радиационных распадов излучение фотона сопровождается еще и возбуждением одного из электронов атома на дискретный уровень. Получены выражения для вероятностей таких распадов. В базе хартри-фоковских волновых функций рассчитаны вероятности и относительные интенсивности некоторых низкоэнергетических сателлитов в атомах Ne и Ag. Выяснены основные механизмы радиационных полу-Оже распадов.

Рентгеновские спектры атомов состоят из довольно ограниченного числа характеристических (главных) линий, появляющихся в результате обычного радиационного распада глубоких вакансий. Однако в работе [1] со стороны низких энергий были обнаружены весьма обширные группы сателлитов, находящиеся на расстоянии нескольких электронвольт от главных линий. Появление таких линий было связано с процессом радиационного полу-Оже (РПО) распада внутренней вакансии, в котором переход электрона с внешней оболочки на незанятое (дырочное) состояние сопровождается в отличие от обычного радиационного распада еще и возбуждением одного из электронов атома на дискретный уровень. Дополнительные затраты энергии на возбуждение электрона и приводят к излучению фотона с несколько меньшей энергией.

Интенсивности наблюдаемых РПО сателлитов в общем довольно малы, порядка 1 % от интенсивности главной линии [1], но в некоторых атомах, например в Ag, K^+ , Cl^- [2], они значительно больше и достигают 10—12 %.

К настоящему времени проведены вычисления относительных интенсивностей РПО сателлитов в приближении конфигурационного взаимодействия (КВ) [3] и в модели «встряски» [2, 4]. Каждый из этих подходов учитывает лишь один из возможных механизмов РПО распада, пренебрегая другими, хотя в одних случаях важна «встряска», а в других КВ. Так, например, в Ag при распаде $2p$ вакансии в состоянии $3p^{-2}3d[2S]$ значение относительной интенсивности соответствующей линии, по оценкам модели «встряски» [2], составляет лишь 1 %, в то время как ее экспериментальное значение равно 10 %. Основную роль в данном переходе, как показано в [3], играет КВ. В случае распада этой же вакансии в состояние $3s^{-1}3p^{-1}4p$, наоборот, преобладает «встряска». Таким образом, использование какого-либо одного из рассматриваемых приближений не позволяет достаточно хорошо описывать процесс РПО распада произвольной вакансии.

В данной работе для изучения РПО процессов применяется аппарат многочастичной теории возмущений (ТВ) [5], позволяющий учесть не только «встряску» и КВ, но и другие механизмы.

В низшем, отличном от нуля, порядке ТВ по межэлектронному взаимодействию получены выражения для вероятности РПО распада произвольной вакансии, а также ряд приближенных формул, позволяющих оценивать вероятности РПО переходов. Проведены численные расчеты в атомах Ne и Ag. Показано, что в рассматриваемых случаях возникают три группы сателлитов, весьма

хорошо отделенных друг от друга по энергии. Проведено сравнение вычисленных нами относительных интенсивностей спутников с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными. Выяснена зависимость вероятности РПО переходов от терма иона-остатка и терма конечного состояния атома.

Общие формулы

В дипольном приближении вероятность излучения кванта при радиационном полу-Оже распаде дырки i определяется выражением

$$W_i^{RA} = \frac{\alpha^3 \omega^3}{(2L+1)(2S+1)} \sum_{\substack{M_L M_L' \\ M_S M_S'}} |\langle \Psi_f(L'S'M_L'M_{S'}) | (\mathbf{d}, \mathbf{e}) | \Psi_i(LSM_L M_S) \rangle|^2 \times \\ \times 13.6 \text{ эв}, \quad (1)$$

где α — постоянная тонкой структуры; ω — энергия в (Ry); \mathbf{e} — вектор поляризации излучаемого кванта; $\Psi_i(LSM_L M_S)$ и $\Psi_f(L'S'M_L'M_{S'})$ — волновые функции начального и конечного состояний атома с одной дыркой i и двумя ва-

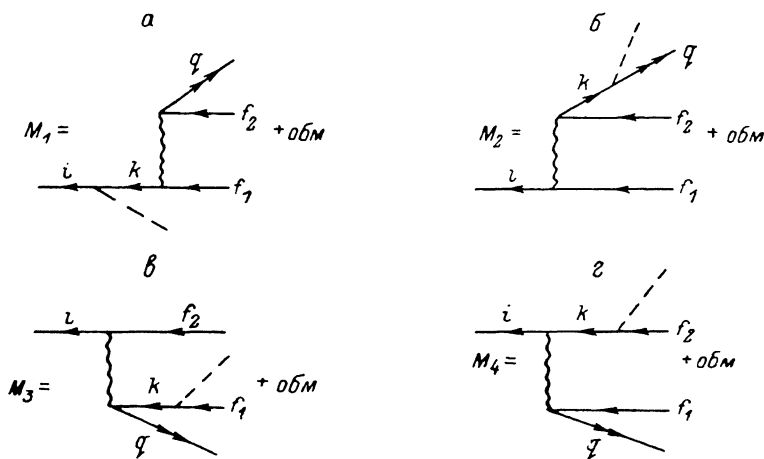


Рис. 1. Амплитуда радиационного полу-Оже распада.

кансиями f_1 и f_2 и электроном g на дискретном уровне соответственно; L, S и L', S' — орбитальные и спиновые моменты; M_L, M_S и M_L', M_S' — их проекции; $\hat{\mathbf{d}} = \sum_i \mathbf{r}_i$ — оператор дипольного момента атома. Здесь и далее используется

атомная система единиц: $m = e = \hbar = 1$.

При вычислении амплитуды $M = \langle \Psi_f | (\mathbf{d}, \mathbf{e}) | \Psi_i \rangle$ процесса будем использовать многочастичную ТВ по межэлектронному взаимодействию, применимость которой в атомных расчетах подробно обсуждена в [6].

В нулевом приближении, в качестве которого выбрано приближение «замороженного» Хартри—Фока (ХФ), амплитуда обращается в нуль, поскольку Ψ_i и Ψ_f отличаются более чем одним электронным состоянием. В первом порядке ТВ амплитуда определяется диаграммами рис. 1, где линии со стрелкой направо (налево) означают одноэлектронные (дырочные) состояния, линия с двумя стрелками направо — дискретное возбужденное состояние, штриховая линия — фотон, волнистая линия — кулоновское взаимодействие. Соответствующие аналитические выражения для вкладов в амплитуду имеют вид

$$M = \sum_{i=1}^4 M_i, \\ M_1 = \sum_{\Pi} B \sum_k \langle i | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | k \rangle \langle k g | U | f_1 f_2 \rangle E_{k g f_1 f_2}^{-1}$$

$$\begin{aligned}
M_2 &= \sum_{\Pi} B \sum_k \langle g | (r, e) | k \rangle \langle ki | U | f_2 \uparrow_1 \rangle E_{ki f_2 f_1}^{-1}, \\
M_3 &= \sum_{\Pi} B \sum_k \langle k | (r, e) | f_1 \rangle \langle ig | U | f_2 k \rangle E_{ig f_2 k}^{-1}, \\
M_4 &= \sum_{\Pi} B \sum_k \langle k | (r, e) | f_2 \rangle \langle ig | U | k f_1 \rangle E_{ig k f_1}^{-1}. \quad (2)
\end{aligned}$$

Здесь $\langle kl | U | mn \rangle = \langle kl | U | mn - nm \rangle$ — разность прямого и обменного кулоновских матричных элементов; $E_{klmn} = E_k + E_l - E_m - E_n$; E_i — одночастичные ХФ энергии. Сумма по проекциям m_{f_1} , m_{f_2} , m_g , M_{L_1} и μ_{f_1} , μ_{f_2} , μ_g , M_{S_1} , обозначенная через \sum_{Π} и множитель B , определяемый соотношением

$$\begin{aligned}
B &= N C_{l_f m_f l_{f_2} m_{f_2}}^{L_1 M_{L_1}} C_{L_1 M_{L_1} l_g m_g}^{L' M_{L'}} C_{1/2 \mu_{f_1} 1/2 \mu_{f_2}}^{S_1 M_{S_1}} C_{S_1 M_{S_1} 1/2 \mu_g}^{S' M_{S'}} (-1)^{l_i + l_{f_1} + l_{f_2} + s_{1/2} - m_i - \mu_i - m_{f_1} - \mu_{f_1}} \times \\
&\quad \times (-1)^{-m_{f_2} - \mu_{f_2}},
\end{aligned}$$

возникают вследствие связывания моментов одноэлектронных состояний дырок и частиц в определенный терм [7]. Здесь N — нормировочный множитель конечного состояния, равный $2^{-1/2}$, если вакансии f_1 и f_2 принадлежат одной подоболочке, и единице в противном случае; $C_{l_i m_i l_{f_2} m_{f_2}}^{L_1 M_{L_1}}$ — коэффициент Клеца—Гордана. Суммирование по k в (2) проводится как дырочным ($k \leq F$), так и по одноэлектронным ($k > F$) состояниям, включая и интегрирование по непрерывному спектру.

После выделения угловых и спиновых множителей в матричных элементах и суммирования по проекциям моментов выражения для парциальных амплитуд принимают вид

$$\begin{aligned}
M_1 &= \langle Q [L']^{-1} \sum_{n_k \lambda l_k} \delta_{L' l_k} \begin{Bmatrix} L_1 & l_g & L' \\ \lambda & l_{f_1} & l_{f_2} \end{Bmatrix} [(-1)^{1+S_1} V_{kgf_2 f_1}^\lambda - W_{kgf_2 f_1}^\lambda] \langle i \| r \| k \rangle E_{kgf_2 f_1}^{-1}, \\
M_2 &= Q \sum_{n_k \lambda l_k} (-1)^{L_1} \begin{Bmatrix} l_i & L' & 1 \\ l_g & l_k & L_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_k & L_1 & l_g \\ l_{f_1} & \lambda & l_{f_2} \end{Bmatrix} [(-1)^{1+S_1} V_{kif_2 f_1}^\lambda - W_{kif_2 f_1}^\lambda] \langle g \| r \| k \rangle E_{kif_2 f_1}^{-1}, \\
M_3 &= Q \sum_{n_k \lambda l_k} (-1)^{l_i + L'} \begin{Bmatrix} l_g & \lambda & l_k \\ L_1 & l_{f_2} & l_{f_1} \\ L' & l_i & 1 \end{Bmatrix} [V_{igf_2 k}^\lambda + (-1)^{S_1} W_{igk f_2}^\lambda] \langle k \| r \| f_1 \rangle E_{igf_2 k}^{-1}, \\
M_4 &= Q \sum_{n_k \lambda l_k} (-1)^{\lambda + L_1 + 1} \begin{Bmatrix} l_i & L' & 1 \\ l_{f_2} & l_k & \lambda \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_{f_2} & \lambda & L' \\ l_g & L_1 & l_{f_1} \end{Bmatrix} [V_{igk f_1}^\lambda + (-1)^{S_1} W_{igf_1 k}^\lambda] \times \\
&\quad \times \langle k \| r \| f_2 \rangle E_{igk f_1}^{-1}, \quad (3)
\end{aligned}$$

где L_1 , S_1 — орбитальный и спиновый моменты иона-остатка; $\langle k \| r \| m \rangle$ — приведенный дипольный матричный элемент; V_{klmn}^λ и W_{klmn}^λ — соответственно прямой и обменный приведенные матричные элементы кулоновского взаимодействия,

определенные стандартным образом [8], $\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{Bmatrix}$ и $\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ p & q & r \end{Bmatrix}$ — $6j$ и $9j$ символы Вигнера,

$$Q = \sum_{\rho} e_{\rho} \begin{pmatrix} l_i & 1 & L' \\ m_i & \rho & -M_{L'} \end{pmatrix} (-1)^{M_{L'} - 2M_{S'}} N [L'] [L_1] [S_1] 2^{-1/2} \delta_{S S'} \delta_{M S M_{S'}}, \quad (4)$$

$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ — $3jm$ коэффициент Вигнера, e_{ρ} — сферическая компонента вектора поляризации e , $[\lambda] = (2\lambda + 1)^{1/2}$.

Входящие в выражения (3)–(4) $3jm$, $6j$ и $9j$ коэффициенты Вигнера и дельта-символы Кронеккера $\delta_{SS'}$, $\delta_{M_S M_S'}$ однозначно определяют возможные термы конечного состояния и орбитальный момент возбужденного электрона g . Правила отбора по L и S для РПО процесса совпадают с правилами отбора для обычного радиационного распада [9].

Основные механизмы РПО распадов

Покажем, что выражения (3) содержат как частный случай в низшем порядке теории возмущений по U все известные механизмы РПО распадов, включая методы КВ и «встряски», а также некоторые другие, которые раньше не принимались во внимание. Рассмотрим сначала метод КВ.

а) Пусть основной вклад в парциальную амплитуду M_1 дает дырочное состояние $k=k_1$, а M_1 в свою очередь превосходит по абсолютной величине M_2 , M_3 и M_4 . В этом случае полная амплитуда довольно хорошо аппроксимируется выражением

$$M \simeq \frac{\langle i | (r, e) | k_1 \rangle \langle k_1 g | U | f_1 f_2 \rangle}{E_{k_1 g f_1 f_2}} \quad (5)$$

а вероятность РПО процесса будет равна произведению величин $R = \langle k_1 g | U | f_1 f_2 \rangle \times |U| f_1 f_2 \rangle^2 / E_{k_1 g f_1 f_2}^2$ и $\delta = (\omega/\omega_i)^3$ на вероятность обычного радиационного распада $i^{-1} \rightarrow k_1^{-1} + \gamma$ дырки i с излучением фотона энергии ω ,

$$\Delta_1 W_i^{RA} = W_i R \delta. \quad (6)$$

Выражение (6) совпадает с формулой для вероятности РПО процесса, полученной в приближении КВ [10]. Это довольно легко понять, если заметить, что

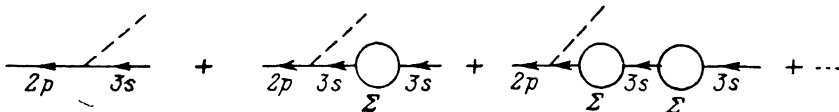


Рис. 2. Влияние «перестройки» $3s$ -вакансии на вероятности радиационного распада $2p^{-1}$ состояния.

величина R , равная квадрату отношения кулоновского матричного элемента $\langle k_1 g | U | f_1 f_2 \rangle$ к энергетическому знаменателю $\chi = E_{k_1} + E_g - E_{f_1} - E_{f_2}$, характеризует (за исключением случаев, когда $R \sim 1$) примесь «чистого» однодырочного состояния k_1^{-1} к сложному возбуждению $f_1^{-1} f_2^{-1} g$ [11]. Если же $R \sim 1$, то пользоваться формулой (6) нельзя, поскольку выражения (3) для амплитуды РПО процесса получены в предположении справедливости обычной ТВ, где отношение V/χ должно быть много меньше единицы. Поэтому случай $R \sim 1$ требует отдельного рассмотрения.

Относительно большое значение R возникает вследствие того, что «чистые» ХФ состояния $\varphi_1^{X\Phi} \equiv f_1^{-1} f_2^{-1} g$ (две дырки и одна частица) и $\varphi_2^{X\Phi} \equiv k_1^{-1}$ (одна дырка) близки по энергии и взаимодействие между ними, определяемое кулоновским матричным элементом, довольно велико. Но при этих условиях состояния $\varphi_1^{X\Phi}$ и $\varphi_2^{X\Phi}$ должны сильно смешиваться и правильные волновые функции конечных состояний в обычном радиационном распаде $i^{-1} \rightarrow k_1^{-1} + \gamma$ и РПО переходе $i^{-1} \rightarrow f_1^{-1} f_2^{-1} g + \gamma$ должны представлять собой функции вида $\psi = c_1 \varphi_1^{X\Phi} + c_2 \varphi_2^{X\Phi}$. В общем случае состояние $\varphi_2^{X\Phi}$ может смешиваться с большим количеством возбуждений, которые также необходимо включить в разложение волновой функции атома с вакансией k_1 .

При вычислении вероятности распада, однако, удобнее находить не волновые функции начальных и конечных состояний и затем амплитуду перехода, а непосредственно саму амплитуду. Будем предполагать для простоты, что в начальном состоянии примесь других конфигураций мала. Тогда амплитуда

радиационного распада дырки i с учетом смешивания конфигураций в конечном состоянии может быть представлена графиками рис. 2, где

$$\Sigma_{k_1}(\varepsilon) = \sum_p \langle k_1 p | V | f_1 f_2 \rangle^2 / (\varepsilon + E_p - E_{f_1} - E_{f_2})$$

— диагональный матричный элемент собственно-энергетической части однодырочной функции Грина $G_{k_1}(\varepsilon)$. Суммируя графики рис. 2, получаем

$$M = \langle k_1 | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | i \rangle \{ 1 + \Sigma_{k_1}(\varepsilon) / (\varepsilon - E_{k_1} - i\delta) + (\Sigma_{k_1}(\varepsilon)) / (\varepsilon - E_{k_1} - i\delta)^2 + \dots \} = \\ = \langle k_1 | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | i \rangle \left(1 - \frac{\Sigma_{k_1}(\varepsilon)}{\varepsilon - E_{k_1} - i\delta} \right)^{-1},$$

где $\varepsilon = E_i + \omega$; ω — энергия испускаемого кванта. Дифференциальная по ω вероятность распада вакансии i будет соответственно определяться выражением

$$dW_i/d\omega \sim |\langle k_1 | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | i \rangle|^2 \left| \left(1 - \frac{\Sigma_{k_1}(\varepsilon)}{\varepsilon - E_{k_1} - i\delta} \right)^{-1} \right|^2 \delta(\varepsilon - E_{k_1}).$$

Пользуясь определением δ -функции

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\alpha}{x^2 + \alpha^2},$$

можно показать, что

$$\left| \left(1 - \frac{\Sigma_{k_1}(\varepsilon)}{\varepsilon - E_{k_1} - i\delta} \right)^{-1} \right|^2 \delta(\varepsilon - E_{k_1}) = \begin{cases} 0, & \text{Im } \Sigma_{k_1}(\varepsilon) \neq 0, \\ \delta(\varepsilon - E_{k_1} - \Sigma_{k_1}(\varepsilon)), & \text{Im } \Sigma_{k_1}(\varepsilon) = 0. \end{cases}$$

Тогда

$$\frac{d}{d\omega} W_i = W_i^{\text{X}\Phi} \delta(\varepsilon - E_{k_1} - \Sigma_{k_1}(\varepsilon)) = W_i^{\text{X}\Phi} \sum_{p=0}^{\infty} F_p \delta(\varepsilon - \varepsilon_p), \quad (7)$$

где

$$F_p = \left(1 - \frac{\partial \Sigma_{k_1}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon = \varepsilon_p} \right)^{-1}$$

представляет собой спектроскопический фактор (СФ) [11, 12]. Здесь мы использовали свойство δ -функции от сложного аргумента

$$\delta(f(x)) = \sum_p \delta(x - x_p) / |f'(x_p)|, \quad (f(x_p) = 0, f'(x_p) \neq 0),$$

через $W_i^{\text{X}\Phi}$ обозначена вероятность обычного радиационного распада дырки i в приближении ХФ. Значения ε_p находятся из решения уравнения $\varepsilon - E_{k_1} - \Sigma_{k_1}(\varepsilon) = 0$. Наименьшее значение ε_0 соответствует энергии иона с вакансией k_1 , другие значения отвечают за энергии более сложных возбуждений. Спектроскопические факторы характеризуют «долю» чистого однодырочного возбуждения в состояниях с энергией ε_p .

Выражение (7), таким образом, позволяет находить как вероятности главных, так и сателлитных переходов, причем появление сателлитных или «теневых» линий [11] в радиационных спектрах излучения при условии малости вклада остальных диаграмм ($M_2 - M_4$), определяющих амплитуду прямого перехода в $f_1^{-1} f_2^{-1} g$ состояния, объясняется в соответствии с выражениями (6) и (7) «размыванием» вакансии k_1 по более сложным возбуждениям типа две дырки и одна частица.

В случае сильного смешивания конфигураций в начальном состоянии в выражении (7) появятся дополнительно СФ начальной вакансии.

б) Покажем далее, что выражения (3) содержат и модель «встряски». Положим M равной сумме двух парциальных амплитуд M_1 и M_4 , считая что по

каким-либо причинам вклады диаграмм M_2 и M_3 малы по сравнению с M_1 и M_4 либо взаимно сокращаются.

В парциальные амплитуды M_i , как правило, значительный вклад вносят те промежуточные состояния, при которых кулоновские матричные элементы диагональны по одному из своих одноэлектронных состояний. В этом случае кулоновские матричные элементы относительно велики, а энергетические знаменатели, напротив, могут быть малы. Поэтому при суммировании по промежуточным состояниям в M_1 и M_4 ограничимся соответственно членами $k=f_1$ и $k=i$. Тогда

$$M \simeq M_1 + M_4 = \langle i | (r, e) | f_1 \rangle \frac{\langle gf_1 | U | f_2 f_1 \rangle - \langle gi | U | f_2 i \rangle}{E_g - E_{f_2}} =$$

$$= \langle i | (r, e) | f_1 \rangle \langle \bar{g} | \bar{f}_2 \rangle,$$

$$\langle \bar{g} | \bar{f}_2 \rangle = \frac{\langle gf_1 | U | f_2 f_1 \rangle - \langle gi | U | f_2 i \rangle}{E_g - E_{f_2}} = \frac{\langle g | F^{(f_1)} - F^{(i)} | f_2 \rangle}{E_g - E_{f_2}}$$

есть интеграл перекрытия между одноэлектронными функциями \bar{g} и \bar{f}_2 , найденными в поле атома с дыркой i или f_1 соответственно. В этом приближении вероятность РПО процесса определяется формулой

$$\Delta_2 W_i^{RA} = W_{i \rightarrow f_1} \langle \bar{g} | \bar{f}_2 \rangle^2 (\omega/\omega^*)^3 \quad (8)$$

(ω^* — энергия кванта, испускаемого в переходе $i^{-1} \rightarrow f_1^{-1} + \gamma$), которая описывает вклад «встрясочного» механизма в РПО эффект. Сама «встряска» или резкое изменение поля, в котором движутся электроны, возникает в данном случае в результате радиационного распада $i^{-1} \rightarrow f_1^{-1} + \gamma$.

Помимо рассмотренных механизмов РПО распада внутренней вакансии i , существуют, конечно, и другие, которые определяются иными членами в полной амплитуде и при необходимости всегда могут быть выделены.

Т а б л и ц а 1
Энергии и вероятности РПО переходов в Ne.
Распад $1s$ вакансии

Переход	Энергия фотона, в Ry	Вероятность (10^{-3} эБ)
$1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2s^{-2} [^1S] 3p [^3P]$	55.1	0.03
$1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2s^{-1} 2p^{-1} [^1P] 3s [^2P]$	57.6	1.28
$1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2s^{-1} 2p^{-1} [^3P] 3s [^3P]$	58.4	3.13
$1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2s^{-1} 2p^{-1} [^1P] 3d [^2P]$	57.0	0.10
$1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2s^{-1} 2p^{-1} [^3P] 3d [^2P]$	57.8	0.06
$1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2p^{-2} [^1S] 3p [^2P]$	59.5	4.12
$1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2p^{-2} [^1S] 4p [^2P]$	59.1	0.52
$1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2p^{-2} [^3P] 3p [^2P]$	60.0	39.29
$1s^{-1} [^3S] \rightarrow 2p^{-2} [^3P] 4p [^2P]$	59.6	5.38
$1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2p^{-2} [^1D] 3p [^2P]$	59.9	30.07
$1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2p^{-2} [^1D] 4p [^2P]$	59.5	4.25

Результаты расчетов

Нами были вычислены вероятности РПО распадов $1s$ вакансии в Ne и $2p$ в Ar. Результаты представлены в табл. 1, 2.

Рассмотрим сначала распад $1s$ вакансии в Ne. Здесь правилами отбора разрешены три группы переходов, отличающиеся друг от друга электронной конфигурацией конечного состояния

- $1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2s^{-2} [^1S] np [^2P]$,
- $1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2s^{-1} 2p^{-1} [^1, ^3P] ns (nd) [^2p]$,
- $1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2p^{-2} [^1S, ^3P, ^1D] np (nf) [^2P]$.

Энергии и вероятности РПО переходов в Ar.
Распад $2p$ вакансии

Переход	Энергия фотона, в Ry	Вероятность (10^{-7} эВ)
$2p^{-1} \left[{}^2P \right] \rightarrow 3s^{-2} \left[{}^1S \right] 4s \left[{}^2S \right]$	13.6	1.64
$2p^{-1} \left[{}^2P \right] \rightarrow 3s^{-1} 3p^{-1} \left[{}^1P \right] 4p \left[{}^2S \right]$	15.3	0.26
$2p^{-1} \left[{}^2P \right] \rightarrow 3s^{-1} 3p^{-1} \left[{}^1P \right] 5p \left[{}^2S \right]$	13.0	0.21
$2p^{-1} \left[{}^2P \right] \rightarrow 3s^{-1} 3p^{-1} \left[{}^3P \right] 4p \left[{}^2S \right]$	14.7	3.93
$2p^{-1} \left[{}^2P \right] \rightarrow 3s^{-1} 3p^{-1} \left[{}^3P \right] 5p \left[{}^2S \right]$	14.4	0.17
$2p^{-1} \left[{}^2P \right] \rightarrow 3p^{-2} \left[{}^1S \right] 4s \left[{}^2S \right]$	15.5	0.10
$2p^{-1} \left[{}^2P \right] \rightarrow 3p^{-2} \left[{}^1S \right] 3d \left[{}^2D \right]$	15.4	10.21
$2p^{-1} \left[{}^2P \right] \rightarrow 3p^{-2} \left[{}^3P \right] 3d \left[{}^2P \right]$	15.8	0.19
$2p^{-1} \left[{}^2P \right] \rightarrow 3p^{-2} \left[{}^3P \right] 3d \left[{}^2D \right]$	15.8	24.16
$2p^{-1} \left[{}^2P \right] \rightarrow 3p^{-2} \left[{}^1D \right] 3d \left[{}^2S \right]$	15.7	64.50
$2p^{-1} \left[{}^2P \right] \rightarrow 3p^{-2} \left[{}^1D \right] 4d \left[{}^2S \right]$	15.2	27.62
$2p^{-1} \left[{}^2P \right] \rightarrow 3p^{-2} \left[{}^1D \right] 3d \left[{}^2P \right]$	15.7	0.28
$2p^{-1} \left[{}^2P \right] \rightarrow 3p^{-2} \left[{}^1D \right] 3d \left[{}^2D \right]$	15.7	12.55

Соответственно возникают три группы спутников, расположенных со стороны низких энергий от K_{α} -линии. Среднее расстояние между группами составляет примерно 2 ридберга.

Вероятности РПО распадов, во-первых, зависят от электронной конфигурации конечного состояния. Например, наиболее интенсивная линия первой группы переходов характеризуется вероятностью $2.54 \cdot 10^{-7}$ эВ, в то время как максимальные значения вероятностей второй и третьей групп равны $3.30 \cdot 10^{-5}$ и $41.57 \cdot 10^{-5}$ эВ соответственно.

Во-вторых, внутри каждой группы спутников наблюдается зависимость от термина иона-остатка, которая определяется величиной Q^2 (см. (4)), а также угловыми и спиновыми множителями в парциальных амплитудах. Величина Q^2 пропорциональна $(2L'+1)(2S_1+1)(2L_1+1)$; поэтому можно было ожидать, что вероятности РПО спутников, имеющие один и тот же конечный терм ${}^2L'$, будут соотноситься между собой как статистические веса термов иона-остатка. Однако в действительности наблюдается более сложная картина. Рассмотрим, к примеру, переходы третьей группы. Наличие $L=l$, L' и L_1 в $6j$ и $9j$ символах, входящих в угловые множители, приводит к тому, что при выбранной электронной конфигурации конечного состояния в одну и ту же парциальную амплитуду в зависимости от термина иона-остатка дают вклад различные промежуточные состояния. Так, в диаграмме M_2 правилами отбора разрешены следующие промежуточные состояния:

- а) $2p^{-2} \left[{}^1S \right] — S$ функции,
- б) $2p^{-2} \left[{}^1D \right] — d$ функции.

В случае 3P термина разрешенных промежуточных состояний нет, поэтому вклад диаграммы M_2 обращается в нуль. Таким образом, парциальная амплитуда M_2 в зависимости от термина иона-остатка определяется совершенно различными промежуточными состояниями. Это и вызывает отклонение отношений вероятностей РПО переходов от первоначально ожидаемой статистической зависимости. В частности, вероятности излучения для рассматриваемой группы спутников соотносятся следующим образом:

$$W({}^1S) : W({}^3P) : W({}^1D) = 1 : 9.5 : 7$$

вместо

$$W({}^1S) : W({}^3P) : W({}^1D) = 1 : 9 : 5.$$

Наиболее интенсивная линия принадлежит третьей группе спутников. Она появляется в результате $1s^{-1} \left[{}^2S \right] \rightarrow 2p^{-2} \left[{}^3P \right] 3p$ перехода. Вычисленное смещение этой линии от пика главного перехода ($1s^{-1} \rightarrow 2p^{-1} + \gamma$) составляет 34 эВ, что довольно хорошо совпадает с экспериментальным значением 33 эВ [¹³].

Относительная интенсивность $J_{\text{отн}} = J^{RA}/J_{1s}$ данного спутника равна 6%. Экспериментальные данные по относительной интенсивности в неоне отсутствуют.

Интересно отметить, что в зависимости от электронной конфигурации конечного состояния различные механизмы вносят основной вклад в амплитуды РПО распадов. Так, в третьей группе основным является механизм «встряски», в то время как в двух других группах преобладает КВ.

Перейдем к распаду $2p$ вакансии в аргоне. Если в случае распада вакансий s -типа правилами отбора разрешается одно значение орбитального момента конечного состояния $L' = 1$, то при распаде p -дырок L' может равняться 0, 1 и 2. Вследствие этого спутнический спектр в Ar имеет более сложную структуру и характеризуется гораздо большим количеством линий.

Как и в неоне, здесь также можно выделить три группы спутников. К первой можно отнести линии $2p^{-1} \rightarrow 3s^{-2}ns[{}^2S]$ или $nd[{}^2D]$ переходов. Вторая

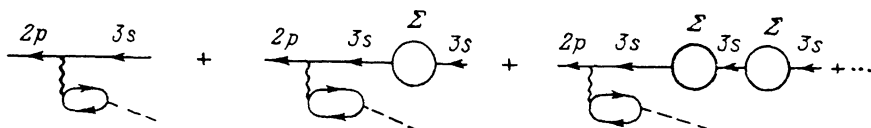


Рис. 3. Учет процессов виртуального возбуждения при распаде $2p$ -вакансии.

группа состоит из $2p^{-1} \rightarrow 3s^{-1}3p^{-1}[{}^1, {}^3P]np[{}^2S, {}^2P, {}^2D]$ или $nf[{}^2D]$ линий, а третья включает спутники

$$\begin{array}{l}
 2p^{-1} \rightarrow 3p^{-2}[{}^1S, {}^3P, {}^1D]ns[{}^2S, {}^2P, {}^2D] \\
 2p^{-1} \rightarrow 3p^{-2}[{}^1S, {}^3P, {}^1D]nd[{}^2S, {}^2P, {}^2D] \\
 2p^{-1} \rightarrow 3p^{-2}[{}^1S, {}^3P, {}^1D]ng[{}^2S, {}^2P, {}^2D]
 \end{array}$$

Расстояние между группами составляет примерно 1–2 Ry.

Наиболее изученной, с экспериментальной и теоретической точек зрения, является третья группа. В работе [2], где впервые сообщалось о наблюдении соответствующих спутников, максимум, находящийся на расстоянии ~ 10 эВ от линии главного $2p^{-1} \rightarrow 3s^{-1}$ перехода и имеющий относительную интенсивность порядка 10%, был идентифицирован как распад $2p^{-1}[{}^2P] \rightarrow 3p^{-2}[{}^1D] \times 3d[{}^2S]$. В более поздних работах [14, 15], в которых исследовался $L_{2,3}$ спектр аргона, эта интерпретация была подтверждена.

Относительная интенсивность данного спутника была рассчитана в работах [3, 16], авторы которых пользовались методом КВ. В первой работе было получено значение, равное 19.6%, во второй — 14.7%. Разница между этими расчетами, использующими один и тот же метод, обусловлена различным выбором (по составу и количеству) конфигураций, используемых при определении волновых функций.

Нами также рассчитывалась интенсивность этого спутника. Вероятности главного и спутнических переходов вычислялись по формуле (7), поскольку отношение кулоновского матричного элемента $\langle 3s3d | V | 3p3p \rangle$ к энергетическому знаменателю $\chi = E_{3s} + E_{3d} - 2E_{3p}$ в диаграмме M_1 порядка единицы. Помимо диаграмм рис. 2, были учтены также графики (рис. 3), которые позволяют учесть вклад процессов виртуального возбуждения при излучении фотонов. Это приводит к замене $W_{\text{в}}^{\text{X}\Phi}$ на $W_{\text{сорт}}$ в (7).

Согласно выражению (7), относительная интенсивность спутника равна частному спектроскопических факторов состояний $3p^{-2}[{}^1D]3d[{}^2S]$ и $3s^{-1}$, умноженному на $(\omega/\omega_{2p-3s})^3$. Значения СФ были взяты из работы [17]. Определенное таким образом значение относительной интенсивности составило 17.0%, что довольно хорошо согласуется с результатом наилучшего конфигурационного расчета [3]. Механизм прямого перехода из $2p^{-1}$ состояния в $3p^{-2}[{}^1D]3d[{}^2S]$, определяемый парциальными амплитудами $M_2 - M_4$, вносит несущественный вклад по сравнению с КВ и им можно пренебречь.

Следует заметить, что наши данные, а также результаты наилучшего расчета по методу КВ [3] по относительной интенсивности $2p^{-1}[^2P] \rightarrow 3p^{-2}[^1D][3d[^2S]]$ спутеллита, довольно хорошо согласующиеся между собой, почти в два раза превосходят значение, приведенное в экспериментальной работе [2]. Поэтому было желательно провести новые измерения относительной интенсивности данного спутеллита.

При возбуждении на $4d$ уровень относительная интенсивность РПО спутеллита из третьей группы оказывается равной 7.1 %, что также хорошо согласуется с [3], где было получено значение $J_{отн} = 8.9$ %.

При распаде $2p$ дырки, помимо рассмотренных $2p^{-1} \rightarrow 3p^{-2}[^1D][3d, 4d[^2S]]$ спутеллитов, возникают также линии, связанные с переходами в $3p^{-2}[^1S, ^3P] \times nd[^2P, ^2D]$ состояния, которые отличаются от первых только термами промежуточной ($3p^{-2}$) и конечной конфигураций. Вероятности этих переходов рассчитывались по общим формулам (3), поскольку $3s$ дырка не может смешиваться с $3p^{-2}[^1S, ^3P]nd[^2P, ^2D]$ состояниями. Вычисления показывают, что наиболее интенсивным из них является $2p^{-1} \rightarrow 3p^{-2}[^3P][3d[^2D]]$ переход. Его вероятность всего в 2.6 раза меньше вероятности основного $2p^{-1} \rightarrow 3p^{-2}[^1D][3d[^2S]]$ спутеллита. Основной вклад в амплитуду здесь вносит следующий механизм: сначала происходит одновременное возбуждение двух $3p$ электронов — одного на дискретный $3d$ уровень и второго в непрерывный спектр (ϵd); затем электрон, возбудившийся в ϵd состоянии, опускается на свободный $2p$ уровень, излучая при этом фотон.

Были рассчитаны также вероятности второй и первой групп. Наиболее вероятным среди них является $2p^{-1} \rightarrow 3s^{-1}3p^{-1}[^3P][4p[^2P]]$ переход. Относительная интенсивность соответствующего спутеллита составляет 1.9 %, что также неплохо согласуется с расчетом [3], где $J_{отн} = 3.5$ %. Разница связана с тем, что в данном случае основной вклад вносит «встряска», а не КВ.

Заключение

Процессы радиационных полу-Оже распадов внутренних вакансий, в которых излучение фотона сопровождается возбуждением одного из электронов атома на дискретный уровень, как мы видим, вызывают появление ряда новых линий в рентгеновских спектрах атомов. Аппарат квантовой теории многих тел, используемый в данной работе, позволяет успешно определять основные характеристики этих линий, например, такие, как вероятность перехода, относительная интенсивность линии и т. д. Получаемая точность данных, как показывают расчеты, достаточно высока, причем при необходимости результаты могут быть улучшены путем учета эффектов более высокого порядка по межэлектронному взаимодействию.

В заключение авторы выражают благодарность А. С. Хейфецу за обсуждение некоторых вопросов и Л. В. Чернышевой за возможность использования программ.

Литература

- [1] Aberg T., Utrianen J. Phys. Rev. Lett., 1969, v. 22, N 25, p. 1346—1348.
- [2] Cooper J. W., La Villa R. E. Phys. Rev. Lett., 1970, v. 25, N 26, p. 1745—1747.
- [3] Duall K. G., Larkins F. P. J. Phys. B., 1982, v. 15, N 12, p. 1735—1739.
- [4] Aberg T. Phys. Rev., 1971, v. 4A, N 12, p. 1735—1739.
- [5] Марч Н., Янг У., Сампантхар С. Проблема многих тел в квантовой механике. М.: Мир, 1969. 495 с.
- [6] Kelly H. P. Adv. Chem. Phys., 1969, v. 14, p. 129—190.
- [7] Джадд Б. Вторичное квантование и атомная спектроскопия. М.: Мир, 1970. 136 с.
- [8] Atusia M. Ya., Cherepkov N. A. Case Studies in Atomic Physics, 1975, v. 6, N 1, p. 47—175.
- [9] Сабельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977. 319 с.
- [10] Каразия Р. И., Кучас С. А. Лит. физ. сб., 1979, т. 19, № 4, с. 495—503.
- [11] Амуся М. Я. Изв. АН СССР. Сер. физ., 1984, т. 48, с. 642—650.
- [12] Амуся М. Я., Хейфец А. С. ЖЭТФ, 1984, т. 86, № 8, с. 1217—1226.
- [13] La Villa R. E. Phys. Rev. A., 1971, v. 4, N 2, p. 476—480.

- [14] *Верховцева Э. Т., Погребняк П. С., Фогель Я. М.* Письма в ЖЭТФ, 1976, т. 24, № 8, с. 464—467.
- [15] *Nordgren J., Agren H., Nordling C., Siegbahn K.* Adv. Chem. Phys., 1979, v. 19, N 1, p. 5—10.
- [16] *Martin R. L., Kowalczyk S. P., Sherley D. A.* J. Chem. Phys., 1978, v. 68, N 8, p. 3829—3836.
- [17] *Amusia M. Ya., Kheifets A. S.* J. Phys. B, 1985, v. 18, p. L679—L684.

Томский политехнический институт
им. С. М. Кирова

Поступило в Редакцию
3 сентября 1986 г.
В окончательной редакции
20 октября 1987 г.