

Влияние дополнительных монополярных выбросов электронов на зарядовые спектры конечных ионов при каскадном распаде электронных вакансий в атоме золота

© А.П. Чайников, А.Г. Кочур, А.И. Дуденко, В.А. Явна

Ростовский государственный университет путей сообщения,
344038 Ростов-на-Дону, Россия

e-mail: chaynikov.a.p@gmail.com

Поступила в редакцию 24.01.2023 г.

В окончательной редакции 18.02.2023 г.

Принята к публикации 10.03.2023 г.

Рассчитаны вероятности образования конечных ионов при каскадных распадах вакансий в K -, L -, M -, N - и O -оболочках атома золота. Моделирование каскадных распадов вакансий проведено путем прямого построения и анализа деревьев распада с использованием вероятностей ветвления и энергий переходов, рассчитанных в многодырочных электронных конфигурациях, образующихся в ходе каскадного распада, в приближении Паули–Фока. Учет дополнительных монополярных выбросов (shake-off) электронов, сопровождающих каскадные переходы, приводит к незначительному увеличению средних зарядов конечных ионов на 0.15–0.23 e . Наибольшее относительное увеличение рассчитанных средних зарядов конечных ионов (на 3.6–3.9%) наблюдается при каскадном распаде вакансий в $4p_{3/2}$ -, $4d_{3/2}$ - и $4d_{5/2}$ -подоболочках, наименьшее (на 0.8%) — при распаде $4f$ -вакансии. Несмотря на незначительные изменения средних зарядов ионов, структура зарядовых спектров при учете дополнительных выбросов электронов в ряде случаев достаточно заметно меняется. Ожидается, что при моделировании процессов каскадного переизлучения энергии при использовании тяжелых атомов в качестве радиосенсибилизаторов влияние учета процессов shake-off будет незначительным.

Ключевые слова: каскадный распад вакансий, зарядовые спектры каскадных ионов, монополярная кратная ионизация, shake-off, радиосенсибилизация.

DOI: 10.21883/OS.2023.04.55563.4560-22

Введение

Создание вакансии во внутренней электронной оболочке атома запускает процесс каскадного распада вакансии. Распад вакансии во внутренней электронной оболочке атома представляет собой, как правило, последовательность радиационных и безрадиационных переходов, каждый из которых сопровождается испусканием фотона (радиационные переходы) или электрона (безрадиационные переходы Оже, Костера–Кронига и супер-Костера–Кронига). В случае распада вакансии в глубокой оболочке тяжелого атома каскад может содержать значительное число безрадиационных переходов, что приводит к образованию конечных ионов больших зарядов.

В пионерских работах Краузе и Карлсона с сотрудниками [1–6] впервые измерены и рассчитаны вероятности образования конечных ионов (зарядовые спектры) при распаде вакансий в атомах инертных газов. Инертные газы продолжают оставаться предметом внимания исследователей при теоретическом описании каскадных распадов вакансий и вычислении зарядовых спектров конечных ионов [7–23]. Зарядовые спектры при распаде вакансий во внутренних оболочках атома железа рассчитаны в [24–27]. Авторы [28] рассчитали каскад-

ные распады в атоме магния и изоэлектронном ионе Fe^{14+} . В [29] рассчитан зарядовый спектр при распаде $1s$ -вакансии в атоме Mg. В работе [30] рассчитаны каскадные зарядовые спектры при распаде вакансий в атомах Ne, Mg, Si, S, Ar и их изонуклеарных ионах. Зарядовые спектры при распаде $4d$ -вакансий в атомах редкоземельных металлов Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu и Gd рассчитаны в работе [31]. Эль-Шеми и соавторы [32–35] провели систематические расчеты зарядовых спектров при распаде внутренних вакансий большого количества атомов вплоть до атома ртути.

При создании внутренней вакансии и во время каскадных переходов возможны дополнительные монополярные выбросы электронов вследствие внезапного изменения атомного потенциала. В англоязычной литературе такие процессы принято называть shake-off (SO) процессами [36–39]. Влияние SO-процессов на зарядовые спектры при каскадных распадах вакансий в глубоких электронных оболочках атомов учтено в расчетах, выполненных в работах [11–14, 16, 18, 22, 32, 33, 35]. Продемонстрировано, что во многих случаях, в особенности при распаде вакансий в легких атомах, влияние SO-процессов на зарядовые спектры конечных ионов может быть значительным: оно приводит к росту относительных вероятностей образования ионов с большими зарядами и

улучшает согласие рассчитанных зарядовых спектров с экспериментом.

При теоретическом описании каскадных распадов вакансий следует построить так называемое дерево распада. Точки ветвления дерева распада — это начальная конфигурация атома с глубокой вакансией и все последующие ионные конфигурации, которые могут появляться в процессе развития каскада. Ветвями дерева распада являются каскадные электронные переходы, соединяющие точки ветвления. Учет SO-процессов, вызванных изменением потенциала при каскадных переходах, существенно усложняет дерево распада, значительно увеличивая количество ветвей. Поэтому учет таких процессов является трудоемкой задачей. В работе [40] рассчитаны зарядовые спектры конечных ионов при каскадных распадах вакансий в K -, L -, M -, N - и O -оболочках атома золота без учета дополнительных SO-процессов. При этом высказано предположение, что в случае каскадов с глубокими начальными вакансиями влияние дополнительных монополюсных выбросов на зарядовые спектры конечных ионов не должно быть большим, поскольку подавляющее число каскадных переходов происходит в многократно ионизированных атомах, и относительные изменения потенциала, вызванные каскадными переходами, невелики. Целью настоящей работы является прямой расчет зарядовых спектров конечных ионов при распаде вакансий в глубоких электронных оболочках атома золота с учетом дополнительных SO-выбросов.

Среди теоретических подходов к описанию каскадных распадов вакансий наиболее распространенным является метод статистических испытаний Монте–Карло. В этом методе многократно проводится один и тот же численный эксперимент: моделируется распад исходной вакансии со случайным выбором очередной ветви распада в каждой последующей точке ветвления. При этом подсчитывается количество испытаний, закончившихся образованием конечных ионов каждого заряда, и вычисляется вероятность их образования в соответствии с частотным определением вероятности.

Альтернативный метод, основанный на прямом построении и анализе всего дерева распада, применялся ранее лишь для качественного анализа довольно простых каскадов, например, распада $1s$ -вакансии в атоме аргона [41]. В работах [13,14] метод прямого построения полного дерева каскадного распада был реализован численно, что позволило применить его к количественному описанию достаточно сложных каскадов, таких, как $1s$ -каскады в криптоне и ксеноне [13,14], железе [25] и золоте [40]. Расчеты настоящей работы проведены методом прямого построения и анализа деревьев распада.

Метод расчета

Метод расчета вероятностей образования каскадных ионов путем построения полного дерева распада вакансий подробно описан в работах [13,14]. В этом

разделе дано краткое описание метода и обсуждены особенности, важные при описании каскадных распадов вакансий в глубоких оболочках тяжелых атомов.

Пусть $C^{(0)} = \text{Au}[nl_j^{-1}]$ электронная конфигурация иона золота с исходной вакансией в глубокой внутренней подоболочке nl_j . Это первая точка ветвления в дереве распада. На первом шаге каскадного распада конфигурация $C^{(0)}$ посредством различных разрешенных по энергии радиационных и/или безрадиационных переходов может распасться в конфигурации из набора $\{C_i^{(1)}\}$, образующего первое поколение каскадных ионных конфигураций. Если какие-либо конфигурации из набора $\{C^{(1)}\}$ имеют внутренние вакансии, они распадаются далее, образуя следующее поколение ионных конфигураций $\{C_j^{(2)}\}$, и так далее. Этот процесс продолжается до тех пор, пока ни одна из конфигураций n -го поколения $\{C_k^{(n)}\}$ не сможет распадаться далее, имея вакансии только в самых внешних электронных подоболочках.

Ключевой характеристикой каждой точки ветвления $C_i^{(m)}$ в дереве распада являются относительные вероятности переходов в состояния следующего поколения $C_j^{(m+1)}$, также называемые вероятностями ветвления (branching ratios):

$$\chi \left(C_j^{(m)} \rightarrow C_j^{(m+1)} \right) = \frac{\Gamma \left(C_i^{(m)} \rightarrow C_j^{(m+1)} \right)}{\sum_k \left(C_i^{(m)} \rightarrow C_k^{(m+1)} \right)}. \quad (1)$$

Здесь Γ — парциальные ширины переходов, и суммирование выполняется по всем энергетически разрешенным радиационным и безрадиационным переходам.

При учете процессов дополнительных монополюсных выбросов к основным ветвям дерева распада, соответствующим электронным переходам $T_{ij} = C_i \rightarrow C_j$ (здесь и далее индексы шагов распада опущены), добавляются дополнительные SO-ветви $T_{ij}^{\text{SO}}(nl) = C_i \rightarrow C_j^{\text{SO}}(nl^{-1})$, в конечных конфигурациях которых имеются дополнительные вакансии во внешних подоболочках nl . Каждая из дополнительных ветвей имеет вероятность ветвления

$$\chi^{\text{SO}}(C_i \rightarrow C_j) = \chi(C_i \rightarrow C_j)P(T_{ij}, nl), \quad (2)$$

где $P(T_{ij}, nl)$ — вероятность монополюсного выброса nl -электрона, вызванного изменением потенциала атомного остова вследствие T_{ij} -перехода, а вероятность ветвления определена соотношением (1). Соответственно вероятность ветвления для перехода без дополнительного выброса модифицируется:

$$\chi'(C_i \rightarrow C_j) = \chi(C_i \rightarrow C_j) \left[1 - \sum_{nl} P(T_{ij}, nl) \right]. \quad (3)$$

Пусть дерево распада полностью построено. Нераспадающиеся конечные ионные конфигурации соответствуют ионам Au^{q+} заряда q . Такие конфигурации $C(q)$ могут быть обнаружены на многих шагах распада, и

тогда вероятность $P(q)$ образования конечного иона Au^{q+} равна сумме вероятностей образования ионных конфигураций $C(q)$ для разных маршрутов распада, состоящих из последовательных ветвей, ведущих из $C^{(0)}$ в $C(q)$. В свою очередь, для каждого конкретного пути $C^{(0)} \rightarrow C_i^{(1)} \rightarrow \dots \rightarrow C(q)$ вероятность образования конечной конфигурации $C(q)$ равна произведению вероятностей ветвления всех ветвей (переходов) между $C^{(0)}$ и $C(q)$.

В атоме золота большинство nl -уровней с $l \neq 0$ сильно расщеплено спин-орбитальным взаимодействием, что открывает возможность интенсивных костер-крониговских переходов. В связи с этим исходная нейтральная конфигурация атома золота взята в виде $Au[0] = 1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^2 3p_{1/2}^2 3p_{3/2}^4 3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^6 4s^2 4p_{1/2}^2 4p_{3/2}^4 4d_{3/2}^4 4d_{5/2}^6 4f^{14} 5s^2 5p_{1/2}^2 5p_{3/2}^4 5d^{10} 6s^1$. В случае $4f$ - и $5d$ -подоболочек спин-орбитальное расщепление существенно меньше расщепления, связанного с электростатическим взаимодействием.

Радиальные части волновых функций ионов в разнообразных многодырочных каскадных конфигурациях вычислены в приближении Паули–Фока (ПФ) [42] без учета спин-орбитального расщепления, т.е. для спин-орбитально нерасщепленных, „сжатых“, конфигураций $\{nl_j^{N_{nl}}\}$ с числами заполнения $N_{nl} = N_{nl-1/2} + N_{nl+1/2}$. При этом энергии конфигураций $\{nl_j^{N_{nl}}\}$ с учетом спин-орбитальных расщеплений вычислялись с использованием полных энергий соответствующих сжатых ПФ-конфигураций $\{nl^{N_{nl}}\}$ и рассчитанных констант спин-орбитального взаимодействия. Общее количество различных ионных ПФ-конфигураций, которые понадобилось оптимизировать при описании каскадных распадов вакансий в атоме золота, составило 162307.

Парциальные ширины переходов в (1) существенным образом зависят от электронной конфигурации иона, из которой совершается переход. С целью учета этого влияния введены парциальные радиационные ширины на одну вакансию и один электрон (γ_{ij}) и парциальные безрадиационные ширины на одну вакансию и одну пару электронов (γ_{ijk}):

$$\gamma_{ij} = \frac{4}{3} \left(\frac{E_{ij}}{c} \right)^3 \frac{\max(l_i, l_j)}{2(2l_i + 1)(2l_j + 1)} R_{ij}^2, \quad (4)$$

$$\gamma_{ijk} = \frac{\Gamma_{i-jk}^0}{N_{jk}^{\max}}, \quad N_{jk}^{\max} = \begin{cases} N_j^{\max} N_k^{\max}, & j \neq k, \\ 0.5 N_j^{\max} (N_j^{\max} - 1), & j = k. \end{cases} \quad (5)$$

В (4) индексы i и j обозначают начальную и конечную вакансии радиационного $i - j$ перехода, E_{ij} — энергия испущенного фотона, c — скорость света в вакууме, $R_{ij} = \langle n_i l_i | r | n_j l_j \rangle$ — радиальная часть амплитуды вероятности дипольного перехода (все величины в атомной системе единиц). В (5) индексы i и j, k обозначают уровни с начальной и конечной вакансиями безрадиационного $i - jk$ перехода, Γ_{i-jk}^0 — ширина $i - jk$ перехода, рассчитанная в конфигурации с одной начальной

вакансией в подоболочке i и полностью заполненными подоболочками j и k . Число N_{jk}^{\max} равно количеству способов, которыми можно извлечь пару электронов из полностью заполненных подоболочек j и k , N_j^{\max} и N_k^{\max} — максимальные числа заполнения подоболочек. Для подоболочек $n_k l_k$ без спин-орбитального расщепления $N_k^{\max} = 4l_k + 2$, для спин-орбитально расщепленных подоболочек $n_k l_{kjk}$, $N_k^{\max} = 2j_k + 1$. Парциальные ширины радиационных Γ_{i-j}^0 и безрадиационных Γ_{i-jk}^0 переходов в атоме золота для случая одиночных начальных вакансий i^{-1} рассчитаны в приближении ПФ и приведены в [40].

Как видно из (4), в настоящей работе учтены только электрические дипольные радиационные переходы. Учет недипольных переходов имел бы смысл лишь для распада наиболее глубоких вакансий в K - и L -оболочках, где радиационные каналы распада преобладают или сопоставимы по вероятности с безрадиационными. Для них, однако, недипольные переходы дают лишь малый вклад в выход флуоресценции [43]: 0.4% для оболочки K , 3.2% для L_1 , 0.2% для L_2 и L_3 . Таким образом, учет возможных недипольных переходов не привел бы к заметному изменению динамики распада.

В случае, если радиационный переход $i - j$ происходит в произвольной многодырочной конфигурации C , и хотя бы одна из подоболочек, вовлеченных в переход, не расщеплена спин-орбитальным взаимодействием, ширина перехода вычисляется по формуле

$$\Gamma_{i-j}(C) = N_i^v N_j \gamma_{ij}, \quad (6)$$

где N_i^v — число вакансий в подоболочке i , а N_j — число электронов в подоболочке j до перехода. Если обе подоболочки, участвующие в переходе, являются компонентами спин-дублетов, то выражение для ширины перехода имеет вид

$$\begin{aligned} \Gamma \left(n_1 l_1 j_1^{N_1} n_2 l_2 j_2^{N_2} \rightarrow n_1 l_1 j_1^{N_1+1} n_2 l_2 j_2^{N_2-1} \right) \\ = 2(2j_1 + 1 - N_1) N_2 (2l_1 + 1)(2l_2 + 1) \\ \times \begin{Bmatrix} l_2 & j_2 & 1/2 \\ j_1 & l_1 & 1 \end{Bmatrix}^2 \gamma_{n_1 l_1 n_2 l_2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Ширины безрадиационных переходов $i - jk$ в произвольной конфигурации иона C рассчитываются как

$$\Gamma_{i-jk}(C) = N_i^v N_{jk} \gamma_{ijk}. \quad (8)$$

Здесь N_i^v имеет тот же смысл, что и в (6), а N_{jk} — это число пар электронов, которые могут быть выброшены из подоболочек j и k , выражающееся через числа заполнения подоболочек так же, как в (5). Использование (6)–(8) дает возможность легко учитывать влияние электронной конфигурации иона на ширины переходов и вероятности ветвления (1)–(3).

Отметим, что строгий учет ширины безрадиационных переходов в произвольных ионных конфигурациях представляет собой сложную задачу [44–46] и немалым

при моделировании сложных каскадов из-за огромного числа различных многодырочных ионных конфигураций, порождаемых каскадами. В то же время, приближение (5), (8), использованное в настоящей работе и опирающееся на ширины переходов с участием полностью заполненных электронных подболочек, вполне адекватно передает изменение парциальных ширин переходов при изменении электронной конфигурации распадающегося иона. Оно неоднократно применялось ранее [13,14,47] и приводило к результатам, хорошо согласующимся с экспериментом.

Мирахмедов и Парилис [9] указали на то, что при каскадном распаде вакансий некоторые безрадиационные переходы могут оказаться энергетически запрещенными в многодырочных промежуточных ионных конфигурациях, порождаемых каскадом. Учет запрета таких переходов особенно важен при описании каскадных распадов глубоких вакансий в тяжелых атомах, при которых образуется большое число промежуточных многодырочных ионных состояний. При этом, как отмечено в [40], запрет перехода между ионными конфигурациями C_1 и C_2 нельзя рассматривать как внезапное исчезновение перехода, как только средняя полная энергия E_{02} конечной конфигурации C_2 превысит энергию E_{01} начальной конфигурации C_1 .

Действительно, и C_1 , и C_2 — это сложные мультиплеты, которые могут перекрываться по энергии. Тогда даже при условии $E_{02} > E_{01}$ некоторые компоненты мультиплета C_1 могут все еще лежать выше по энергии некоторых компонент мультиплета C_2 , и переходы между такими компонентами возможны. Тогда переход $C_1 \rightarrow C_2$ запрещен лишь частично. С другой стороны, если переход $C_1 \rightarrow C_2$ формально разрешен, т.е. если выполняется условие $E_{02} < E_{01}$, при близких E_{02} и E_{01} некоторые компоненты мультиплета C_1 могут оказаться ниже по энергии некоторых компонент мультиплета C_2 , и переходы между такими состояниями окажутся невозможными. Другими словами, переход $C_1 \rightarrow C_2$ разрешен лишь частично.

Строгий расчет структуры всех мультиплетов начальных и конечных состояний всех каскадных переходов не представляется технически возможным, так как число ионных конфигураций, порождаемых каскадами, очень велико. Для описания энергетической структуры мультиплетов многодырочных ионных конфигураций использован метод глобальных характеристик спектров [48,49]. Мультиплет ионной конфигурации C представляет собой набор состояний, характеризующихся энергиями E_i и статистическими весами g_i . При использовании глобальных характеристик спектров совокупность дискретных компонент мультиплета $\{E_i, g_i\}$ аппроксимируется нормальным распределением плотности вероятности:

$$p(E, E_0, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma^2} \exp\left(-\frac{(E - E_0)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (9)$$

Центр распределения определяется соотношением

$$E_0 = \frac{\sum_i g_i E_i}{\sum_i g_i}, \quad g_i = 2J_i + 1. \quad (10)$$

Здесь J_i — квантовое число полного момента импульса. Дисперсия распределения равна

$$\sigma^2 = \frac{\sum_i g_i (E_i - E_0)^2}{\sum_i g_i}. \quad (11)$$

Центры распределений E_0 — это средние энергии конфигураций, вычисляемые в настоящей работе непосредственно для каждой ионной конфигурации, образующейся в ходе каскадного распада вакансии. Дисперсии распределений рассчитаны для всех ионных конфигураций по известным заселенностям электронных подболочек и интегралам электростатического взаимодействия методами работ [48,49].

Рассмотрим переход между мультиплетами ионных конфигураций C_1 и C_2 , представленными распределениями $p_1(E, E_{01}, \sigma_1)$ и $p_2(E, E_{02}, \sigma_2)$. Средняя энергия перехода равна

$$\begin{aligned} \langle E(C_1 \rightarrow C_2) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} p_1(E_1, E_{01}, \sigma_1) dE_1 \int_{-\infty}^{E_1} (E_1 - E_2) p_2(E_2, E_{02}, \sigma_2) dE_2 \\ &= \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}}{\sqrt{\pi}} \exp\left(\frac{-(E_{01} - E_{02})^2}{2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}\right) \\ &\quad + \frac{E_{01} - E_{02}}{2} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{E_{01} - E_{02}}{\sqrt{2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}}\right) \right]. \end{aligned} \quad (12)$$

В случае неперекрывающихся мультиплетов при $E_{01} > E_{02}$ средняя энергия перехода $\langle E(C_1 \rightarrow C_2) \rangle = E_{01} - E_{02}$. Если перекрывание мультиплетов значительно, т.е. разность $|E_{01} - E_{02}|$ сопоставима с $\sqrt{2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}$, то (12) учитывает только разрешенные по энергии переходы между компонентами мультиплетов C_1 и C_2 .

Если мультиплеты C_1 и C_2 перекрываются, то парциальная ширина перехода $C_1 \rightarrow C_2$ также должна быть скорректирована:

$$G^{corr}(C_1 \rightarrow C_2) = \alpha(E_{01}, \sigma_1, E_{02}, \sigma_2) \Gamma(C_1 \rightarrow C_2). \quad (13)$$

Здесь корректирующий коэффициент

$$\alpha(E_{01}, \sigma_1, E_{02}, \sigma_2) = \int_{-\infty}^{\infty} p_1(E_1, E_{01}, \sigma_1) dE_1 \times \int_{-\infty}^{E_1} p_2(E_2, E_{02}, \sigma_2) dE_2 = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{E_{01} - E_{02}}{\sqrt{2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}} \right) \right] \quad (14)$$

равен доле состояний мультиплета C_1 , для которых переход в состояния мультиплета C_2 разрешен по энергии.

В работе [40] продемонстрировано, что точный расчет средних энергий ионных конфигураций и учет перекрывания мультиплетов критически важны при расчете вероятностей образования каскадных ионов. Так, расчет [40] среднего заряда конечных ионов при распаде $2s$ -вакансии в атоме золота ($Z = 79$) дал значение 9.81, в то время как средний заряд конечных ионов при распаде $2s$ -вакансии в соседнем атоме ртути ($Z = 80$), рассчитанный в [32] без учета этих эффектов, составил 13.83. При этом намеренно упрощенный расчет, проведенный в [40] без учета запрета безрадиационных переходов в многократно ионизированных конфигурациях и без учета перекрывания мультиплетов, дал близкое значение среднего заряда конечных ионов, равное 13.92.

Вероятности дополнительных выбросов электрона из nl -подоболочек $P(T_{ij}, nl)$, обусловленных изменением потенциала атомного остова в результате электронного перехода $T_{ij} = C_i \rightarrow C_j$, вычислены в приближении внезапных возмущений [36–39] по формуле

$$P(T_{ij}, nl) = kN_{nl} [1 - \langle nl(C_i) | nl(C_j) \rangle^2], \quad (15)$$

где $nl(C_i)$ и $nl(C_j)$ в интеграле перекрывания — это радиальные части волновых функций внешней подоболочки nl , оптимизированные в начальной C_i и конечной C_j конфигурациях перехода, N_{nl} — число заполнения подоболочки nl в начальной конфигурации, k — корректирующий множитель. При использовании в (15) радиальных частей самосогласованных волновых функций $k = 1$.

В настоящей работе, как ранее в работах [13,14], интегралы перекрывания в (15) вычислены приближенно с использованием аналитических радиальных частей атомных орбиталей (АО) вида

$$P_{nl}(r) = A_{nl} r^{l+1} \exp(-\beta_{nl} r), \quad (16)$$

где коэффициенты A_{nl} и β_{nl} определены условием нормировки и требованием, чтобы средний радиус АО, вычисленный с помощью (16):

$$\bar{r}_{nl} = \int_0^{\infty} r P_{nl}^2(r) dr, \quad (17)$$

совпадал со средним радиусом, вычисленным с использованием радиальной части самосогласованной АО.

При использовании радиальных частей АО (16) интегралы перекрывания в (15) выражаются аналитически через средние радиусы АО $nl(C_i)$ и $nl(C_j)$, рассчитанные с использованием самосогласованных функций:

$$\langle nl(C_i) | nl(C_j) \rangle = \left[\frac{2(\bar{r}_{nl}(C_i) \cdot \bar{r}_{nl}(C_j))^{1/2}}{\bar{r}_{nl}(C_i) + \bar{r}_{nl}(C_j)} \right]^{2l+3}. \quad (18)$$

Приближение (18) для вычисления вероятностей SO-процессов (15) было подробно проанализировано в работе [47] на примере расчета вероятностей SO-процессов, обусловленных $L_3M_{45}M_{45}$ оже- и радиационным L_1-M_{45} переходами в атоме ксенона. Показано, что использование (18) в (15) дает хорошие результаты при $k = 2$. Характерные погрешности приближения (15)–(18) при $k = 2$ составили около 10% для наиболее значительных выбросов и полной вероятности SO-процессов.

Как сказано выше, зарядовый спектр конечных ионов $P(q)$, порожденных каскадным распадом внутренней вакансии, представляет собой набор вероятностей образования ионов всех возможных зарядов. Все зарядовые спектры должны удовлетворять условию нормировки

$$P_{tot} = \sum_q P(q) = 1. \quad (19)$$

Поскольку в расчетах приходится пренебрегать некоторыми маловероятными ветвями дерева распада, для рассчитанных зарядовых спектров $P^{calc}(q)$, в особенности порожденных сложными каскадами распада глубоких вакансий, соотношение (19) выполняется лишь приближенно. В настоящей работе при построении деревьев распада мы пренебрегали всеми ветвями, выходящими из точек ветвления, вероятность образования которых была меньше 10^{-8} . Отклонение P_{tot}^{calc} от единицы может служить критерием точности построения дерева распада. Рассчитанные зарядовые спектры перенормированы с целью обеспечения выполнения условия (19):

$$P(q) = P^{calc}(q) / P_{tot}^{calc}. \quad (20)$$

Средние заряды образовавшихся каскадных ионов вычислены по формуле

$$\langle q \rangle = \sum_q q P(q). \quad (21)$$

Результаты и обсуждение

Расчет зарядовых спектров конечных ионов с учетом SO-процессов потребовал больших объемов вычислений. На рис. 1 приведены количества различающихся ионных конфигураций, возникающих на последовательных шагах каскадных распадов вакансий в $2s$ -, $3d_{3/2}$ - и $4d_{3/2}$ -подоболочках атома золота. Приведены данные для деревьев распада, построенных без учета SO-процессов

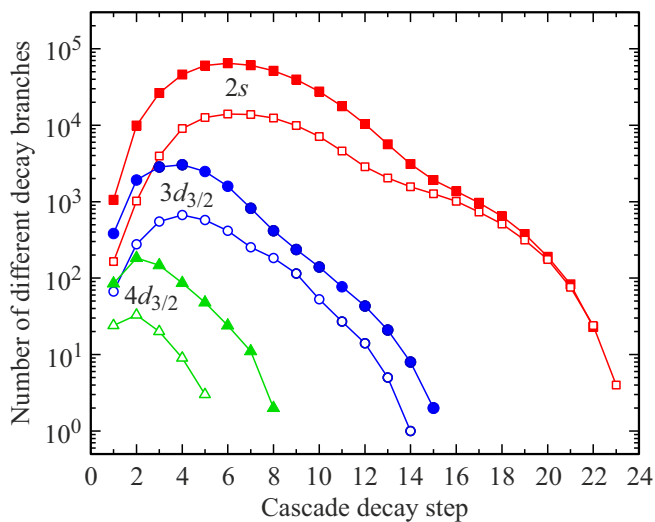


Рис. 1. Количество различающихся ветвей деревьев распада, возникающих на последовательных шагах распада для каскадов с начальными вакансиями в $2s$ -, $3d_{3/2}$ - и $4d_{3/2}$ -подоболочках атома золота. Пустые символы — расчет без учета SO-процессов, сплошные символы — расчет с учетом SO-процессов.

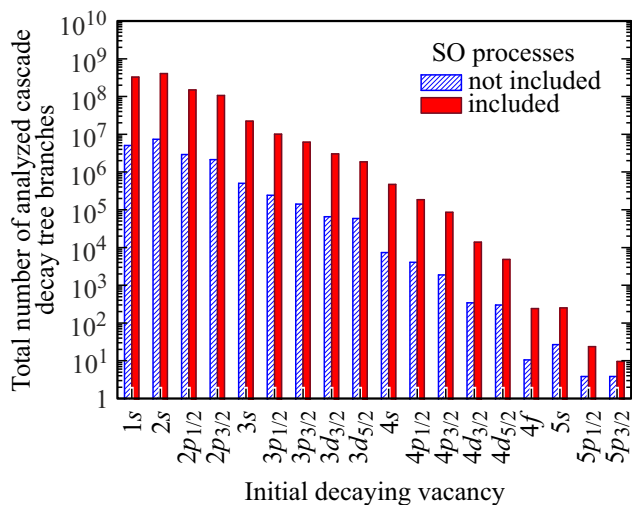


Рис. 2. Общее количество проанализированных ветвей деревьев каскадного распада при расчетах без учета (заштрихованные столбики) и с учетом (сплошные столбики) SO-процессов.

(пустые символы) и с учетом SO-процессов (сплошные символы). На рис. 2 приведены общие количества проанализированных ветвей в деревьях распада для каскадов с начальными вакансиями во всех электронных оболочках, начиная от $1s$ и заканчивая $5p_{3/2}$. Заштрихованные столбики показывают общее число ветвей в деревьях, построенных без учета SO-процессов, а сплошные столбики — число ветвей в деревьях, построенных с учетом SO-процессов. Из рис. 1, 2 видно, что учет дополнительных монополюсных выбросов существенно усложняет деревья распада, увеличивая число

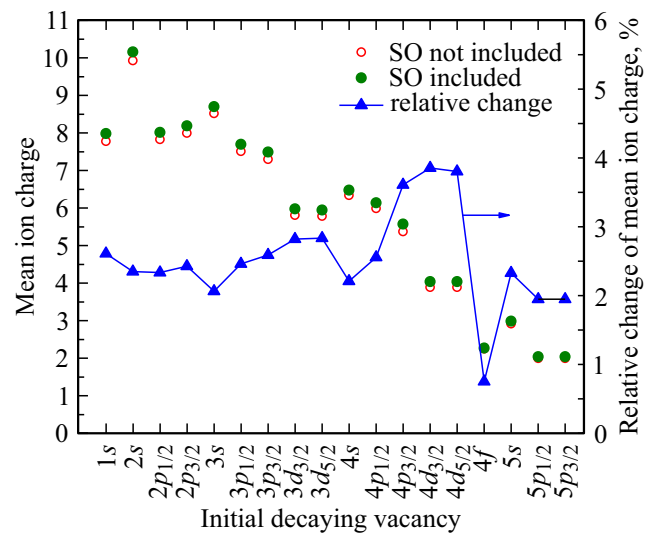


Рис. 3. Средние заряды каскадных ионов, рассчитанные без учета SO (пустые кружки) и с учетом SO (сплошные кружки) и относительные изменения средних зарядов ионов при учете SO-процессов (треугольники).

их ветвей в 50–64 раза для начальных вакансий в K - и L -оболочках, в 32–47 раз для начальных вакансий в M -оболочке, в 16–63 раза для вакансий в N -оболочке и в 3–9 раз для начальных вакансий в O -оболочке.

Наиболее сложным является дерево распада $2s$ -вакансии. Число его ветвей составляет $7.7 \cdot 10^6$ без учета SO-процессов и $4.3 \cdot 10^8$, если SO-процессы учтены. Причина этого заключается в следующем. Выход флуоресценции при распаде более глубокой $1s$ -вакансии составляет 98%, причем 78% приходится на радиационные переходы в состояния $2p_{1/2}^{-1}$ и $2p_{3/2}^{-1}$. Таким образом, на первом шаге распада состояния $1s^{-1}$ вакансии радиационно перемещается преимущественно в $2p$ -подоболочки, и зарядовый спектр при распаде $1s$ -вакансии подобен спектрам распада вакансий в $2p$ -подоболочках [40].

Вероятности образования конечных ионов при каскадном распаде вакансий в K -, L -, M -, N - и O -оболочках атома золота, рассчитанные без учета и с учетом SO-процессов, приведены в табл. 1–3. Там же приведены рассчитанные полные вероятности (19). Отклонение от единицы максимально в случае моделирования наиболее сложного распада $2s$ -вакансии с учетом SO-процессов и составляет 0.04. В остальных случаях отклонения меньше или пренебрежимо малы, что говорит о достаточной точности построения деревьев распада.

На рис. 3 показаны средние заряды ионов, рассчитанные без учета и с учетом SO-процессов, а также относительные изменения средних зарядов ионов при учете SO-процессов для каскадов с начальными вакансиями в различных электронных оболочках атома золота. Из рисунка видно, что для большинства исходных вакансий учет SO приводит к довольно незначительному относительному увеличению среднего заряда конечных

Таблица 1. Рассчитанные вероятности образования конечных ионов Au^{q+} при каскадном распаде вакансий в 1s-, 2s-, 2p_{1/2}-, 2p_{3/2}-, 3s- и 3p_{1/2}-подоболочках атома золота и полные вероятности образования ионов P_{tot}^{calc}, рассчитанные без учета (a) и с учетом (b) SO-процессов

q	Начальная вакансия											
	1s		2s		2p _{1/2}		2p _{3/2}		3s		3p _{1/2}	
	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b
1	0.0039	0.0033	4.E-5	3.E-5	0.0053	0.0044	0.0047	0.0039			0.0005	0.0004
2	0.0105	0.0097	0.0029	0.0025	0.0079	0.0079	0.0062	0.0062	0.0003	0.0003	0.0005	0.0001
3	0.0171	0.0162	0.0013	0.0012	0.0222	0.0208	0.0190	0.0177	0.0010	0.0009	0.0026	0.0024
4	0.0992	0.0839	0.0070	0.0062	0.1212	0.1027	0.1054	0.0891	0.0060	0.0051	0.0373	0.0308
5	0.0544	0.0606	0.0118	0.0104	0.0580	0.0682	0.0484	0.0575	0.0094	0.0086	0.0274	0.0281
6	0.1041	0.0873	0.0391	0.0313	0.0768	0.0683	0.0693	0.0606	0.0476	0.0365	0.1886	0.1443
7	0.0949	0.0987	0.0429	0.0421	0.0840	0.0846	0.0773	0.0770	0.0723	0.0658	0.1605	0.1693
8	0.1998	0.1914	0.1344	0.1217	0.1769	0.1687	0.1858	0.1730	0.3473	0.3092	0.3459	0.3380
9	0.1703	0.1679	0.1604	0.1506	0.1652	0.1601	0.1895	0.1808	0.3196	0.3199	0.1828	0.2065
10	0.1412	0.1488	0.2038	0.1952	0.1543	0.1590	0.1750	0.1817	0.1669	0.2020	0.0507	0.0718
11	0.0718	0.0851	0.1851	0.1830	0.0856	0.0972	0.0875	0.1035	0.0279	0.0466	0.0037	0.0081
12	0.0223	0.0311	0.1082	0.1191	0.0289	0.0380	0.0241	0.0350	0.0017	0.0048	6.E-5	0.0003
13	0.0075	0.0115	0.0601	0.0741	0.0103	0.0149	0.0067	0.0113	7.E-5	0.0003		4.E-6
14	0.0023	0.0036	0.0305	0.0422	0.0030	0.0046	0.0013	0.0025		3.E-6		
15	0.0006	0.0008	0.0108	0.0169	0.0005	0.0008	9.E-5	0.0002				
16	0.0001	0.0001	0.0017	0.0031	1.E-5	2.E-5						
17	1.E-5	4.E-6	0.0001	0.0003								
18			5.E-8	9.E-7								
P _{tot} ^{calc}	0.9888	0.9771	0.9860	0.9577	0.9944	0.9829	0.9960	0.9865	0.9992	0.9959	0.9996	0.9981

Таблица 2. Рассчитанные вероятности образования конечных ионов Au^{q+} при каскадном распаде вакансий в 3p_{3/2}-, 3d_{3/2}-, 3d_{5/2}-, 4s-, 4p_{1/2}- и 4p_{3/2}-подоболочках атома золота и полные вероятности образования ионов P_{tot}^{calc}, рассчитанные без учета (a) и с учетом (b) SO-процессов

q	Начальная вакансия											
	3p _{3/2}		3d _{3/2}		3d _{5/2}		4s		4p _{1/2}		4p _{3/2}	
	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b
1	0.0004	0.0003							2.E-5	1.E-5	2.E-5	1.E-5
2	0.0001	0.0001	0.0222	0.0213	0.0208	0.0200	0.0005	0.0004	0.0004	0.0004	0.0007	0.0007
3	0.0026	0.0024	0.0254	0.0239	0.0247	0.0233	0.0070	0.0067	0.0166	0.0155	0.0272	0.0254
4	0.0440	0.0363	0.2583	0.2199	0.2705	0.2303	0.0971	0.0834	0.1069	0.0948	0.1743	0.1546
5	0.0319	0.0329	0.1358	0.1550	0.1301	0.1523	0.1407	0.1349	0.1854	0.1658	0.2818	0.2511
6	0.2228	0.1705	0.1866	0.1631	0.1899	0.1643	0.2329	0.2135	0.3478	0.3121	0.4269	0.3773
7	0.1779	0.1915	0.1609	0.1730	0.1580	0.1716	0.3540	0.3375	0.2486	0.2840	0.0892	0.1734
8	0.3402	0.3390	0.1697	0.1852	0.1668	0.1826	0.1651	0.2101	0.0943	0.1229		0.0171
9	0.1512	0.1789	0.0383	0.0523	0.0367	0.0500	0.0027	0.0133	1.E-6	0.0043		0.0004
10	0.0283	0.0457	0.0029	0.0062	0.0026	0.0056		0.0002		0.0001		6.E-6
11	0.0006	0.0025	1.E-5	0.0001	1.E-5	8.E-5						
12		3.E-5										
P _{tot} ^{calc}	0.9998	0.9988	0.9999	0.9994	0.9999	0.9995	1.0000	0.9999	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

ионов на 2.0–2.8%. Исключение составляют распады вакансий в 4p_{3/2}-, 4d_{3/2}- и 4d_{5/2}-подоболочках. Для них относительное увеличение среднего заряда конечных ионов составляет 3.6–3.9%. Наименьшее увеличение среднего заряда ионов при учете SO-процессов, рав-

ное 0.8%, наблюдается для распада вакансии в 4f-подоболочке.

Приведенные результаты подтверждают качественные соображения работы [40] об ожидаемом незначительном влиянии SO-процессов в тяжелых атомах. Несмотря на

Таблица 3. Рассчитанные вероятности образования конечных ионов Au^{q+} при каскадном распаде вакансий в $4d_{3/2}$ -, $4d_{5/2}$ -, $4f$ -, $5s$ -, $5p_{1/2}$ - и $5p_{3/2}$ -подоболочках атома золота и полные вероятности образования ионов P_{tot}^{calc} , рассчитанные без учета (а) и с учетом (б) SO-процессов

q	Начальная вакансия											
	$4d_{3/2}$		$4d_{5/2}$		$4f$		$5s$		$5p_{1/2}$		$5p_{3/2}$	
	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b
1					4.E-5	4.E-5			3.E-5	3.E-5	1.E-5	1.E-5
2	0.0097	0.0093	0.0096	0.0093	0.7463	0.7371	0.0802	0.0782	1.0000	0.9608	1.0000	0.9609
3	0.2254	0.2109	0.2257	0.2111	0.2537	0.2551	0.9198	0.8571		0.0391	0	0.0391
4	0.6278	0.5352	0.6284	0.5361		0.0076		0.0635		4.E-5		
5	0.1363	0.2187	0.1356	0.2183		0.0002		0.0015				
6	0.0008	0.0244	0.0007	0.0242				8.E-6				
7		0.0012		0.0010								
8		0.0003		5.E-6								
9		4.E-6										
P_{tot}^{calc}	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

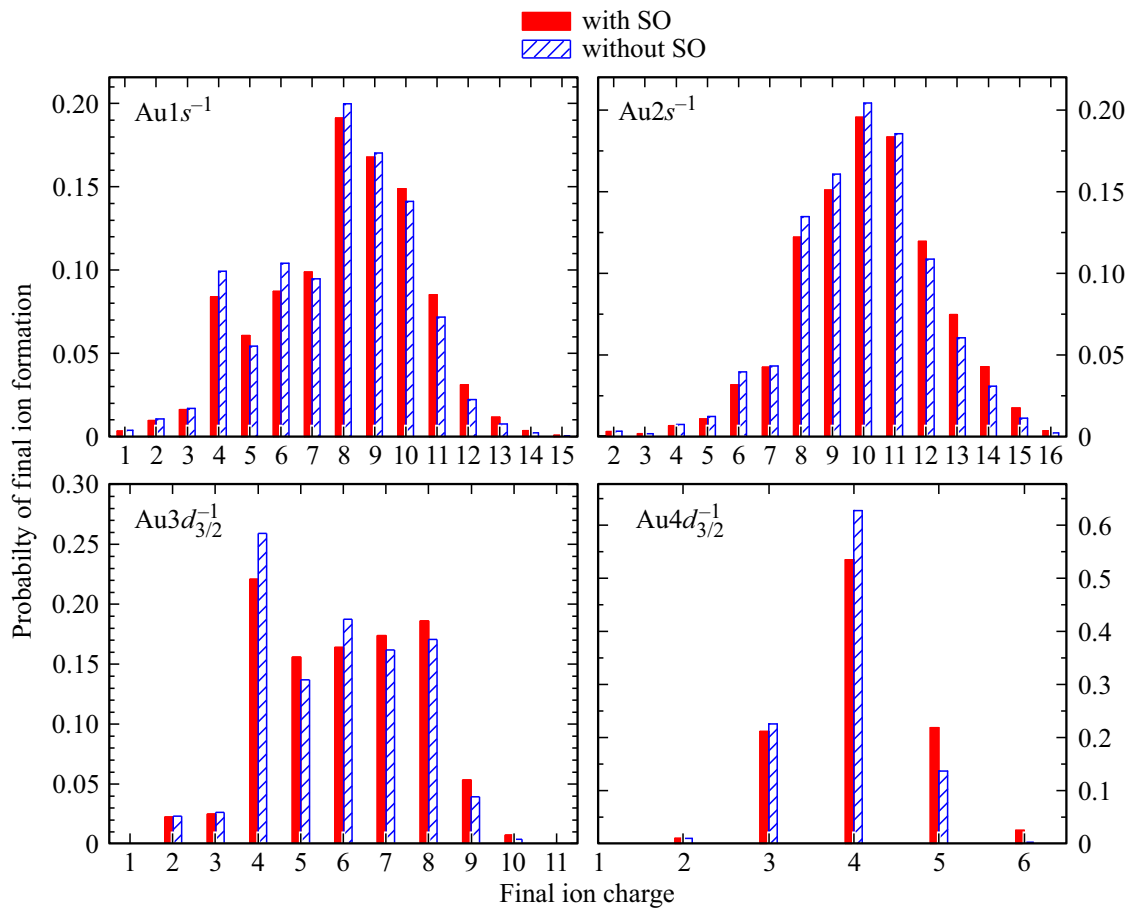


Рис. 4. Зарядовые спектры конечных ионов при каскадном распаде вакансий в $1s$ -, $2s$ -, $3d_{3/2}$ - и $4d_{3/2}$ -подоболочках атома золота. Заштрихованные столбики — расчет без учета SO-процессов, сплошные столбики — расчет с учетом SO-процессов.

то, что на первых шагах распада внутренних вакансий имеют место весьма многочисленные безрадиационные переходы с участием внутренних оболочек, например, *LMM* оже-переходы, которые приводят формально к воз-

никновению дополнительного заряда +1 внутри внешних оболочек, из которых возможны дополнительные монополярные выбросы электрона, этот заряд сильно экранируется электронной плотностью большого числа

электронов промежуточных оболочек тяжелого атома. В результате относительное изменение потенциала для внешних оболочек, вызывающее SO-процессы, оказывается небольшим. Безрадиационные переходы, происходящие на средних и финальных шагах каскадного распада, происходят в сильно ионизированных конфигурациях, содержащих большое число вакансий, поэтому появление новой вакансии приводит лишь к относительно незначительному изменению потенциала для внешних оболочек.

Эти соображения подтверждаются прямыми расчетами относительных вероятностей SO-процессов при создании внутренней вакансии в зависимости от атомного номера, проведенными в [39]. В этой работе рассчитаны отношения вероятности ионизации подоболочки n_0l_0 с дополнительным монопольным возбуждением/ионизацией электрона из подоболочки n_1l_1 к вероятности однократной ионизации n_0l_0 -подоболочки, приходящиеся на один n_1l_1 -электрон, $P_1(n_0l_0; n_1l_1)$. Зависимости $P_1(n_0l_0; n_1l_1)$ от заряда ядра атома Z носят монотонно убывающий характер и могут быть аппроксимированы аналитическими функциями:

$$P_1(n_0l_0; n_1l_1) = \frac{a}{(b - Z)^2}. \quad (22)$$

Несмотря на то, что учет SO-процессов довольно незначительно меняет средний заряд ионов, распределения вероятностей образования ионов (зарядовые спектры) могут в ряде случаев достаточно заметно изменяться. На рис. 4 показаны зарядовые спектры, обусловленные распадом вакансий в некоторых подоболочках атома золота, которые иллюстрируют влияние учета процессов SO на их структуру.

В настоящее время в лучевой терапии онкологических заболеваний интенсивно исследуется возможность применения соединений, содержащих атомы золота, и золотых наночастиц в качестве радиосенсибилизаторов [50], т. е. объектов, способных локально увеличить поглощенную дозу внутри опухолевых тканей. Эта возможность обусловлена, во-первых, большим сечением фотоионизации атомов золота и, во-вторых, способностью атомов золота переизлучать энергию поглощенного фотона вместе с каскадными электронами и фотонами, образующимися при каскадном распаде исходной вакансии. Оценка энергий, унесенных из ионизированного атома радиосенсибилизатора каскадными электронами E_{out}^{el} и фотонами E_{out}^{phot} является важной задачей при разработке стратегий радиационной терапии. В работе [25] E_{out}^{el} и E_{out}^{phot} рассчитаны для атома железа при распаде вакансий в K -, L - и M -оболочках.

Представляет интерес исследовать влияние учета SO-процессов при развитии каскадов на переизлученные энергии E_{out}^{el} и E_{out}^{phot} . Из общих соображений следует, что такой учет не должен значительно повлиять на эти величины. При безрадиационных, например, оже-переходах, при наличии дополнительного SO-выброса

энергия перехода лишь делится между оже-электроном и SO-электроном, так что общая унесенная энергия остается неизменной. Что касается радиационных переходов, то они не приводят к возникновению дополнительных вакансий и сильному изменению потенциала, так что вероятности SO-процессов гораздо меньше, чем в случае безрадиационных переходов [47]. Надо, однако, иметь в виду, что включение SO-ветвей модифицирует дерево каскада, что может повлиять на переизлученные энергии E_{out}^{el} и E_{out}^{phot} . Этот вопрос требует дополнительного исследования.

Заключение

Методом прямого построения и анализа деревьев распада рассчитаны вероятности образования конечных ионов при каскадном распаде вакансий в K -, L -, M -, N - и O -оболочках атома золота. Включение в рассмотрение SO-процессов, вызванных изменением атомного потенциала в процессе каскадных переходов, существенно (в несколько десятков раз) увеличивает число ветвей дерева распада и значительно увеличивает вычислительные затраты. В то же время учет SO-процессов приводит лишь к незначительному (на 0.15–0.23e) изменению среднего заряда конечных ионов. При этом структура зарядовых спектров конечных ионов при распаде некоторых начальных вакансий, хоть и незначительно, но меняется. Высказано предположение, что учет SO-процессов при расчете переизлученных каскадными электронами и фотонами энергий, представляющих интерес в задачах радиосенсибилизации, не будет играть существенной роли в случае тяжелых атомов-радиосенсибилизаторов.

Благодарности

Авторы благодарны профессору И.Д. Петрову за предоставление формул для расчета ширин переходов с участием уровней, расщепленных спин-орбитальным взаимодействием.

Финансирование

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00222, <https://rscf.ru/project/23-22-00222/>.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] M.O. Krause, M.L. Vestal, W.H. Johnston, T.A. Carlson. Phys. Rev., **133** (2A), A385 (1964). DOI: 10.1103/PhysRev.133.A385
- [2] T.A. Carlson, M.O. Krause. Phys. Rev., **137** (6A), A1655 (1965). DOI: 10.1103/PhysRev.137.A1655

- [3] T.A. Carlson, M.O. Krause. *Phys. Rev. Lett.*, **14** (11), 390 (1965). DOI: 10.1103/PhysRevLett.14.390
- [4] M.O. Krause, T.A. Carlson. *Phys. Rev.*, **149** (1), 52 (1966). DOI: 10.1103/PhysRev.149.52
- [5] T.A. Carlson, W.E. Hunt, M.O. Krause. *Phys. Rev.*, **151** (1), 41 (1966). DOI: 10.1103/PhysRev.151.41
- [6] M.O. Krause, T.A. Carlson. *Phys. Rev.*, **158** (1), 18 (1967). DOI: 10.1103/PhysRev.158.18
- [7] T. Mukoyama. *Bull. Inst. Chem. Res., Kyoto Univ.*, **63**, 373 (1985).
- [8] T. Mukoyama, T. Tonuma, A. Yagishita, H. Shibata, T. Koizumi, T. Matsuo, K. Shima, H. Tawara. *J. Phys. B*, **20** (17), 4453 (1987). DOI: 10.1088/0022-3700/20/17/023
- [9] M.N. Mirakhmedov, E.S. Parilis. *J. Phys. B*, **21** (5), 795 (1988). DOI: 10.1088/0953-4075/21/5/010
- [10] G. Omar, Y. Hahn. *Phys. Rev. A*, **44** (1), 483 (1991). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.44.483>
- [11] G. Omar, Y. Hahn. *Z. Phys. D*, **25** (1), 41 (1992). DOI: 10.1007/BF01437518
- [12] G. Omar, Y. Hahn. *Z. Phys. D*, **25** (1), 31 (1992). DOI: 10.1007/BF01437517
- [13] A.G. Kochur, A.I. Dudenko, V.L. Sukhorukov, I.D. Petrov. *J. Phys. B*, **27** (9), 1709 (1994). DOI: 10.1088/0953-4075/27/9/011
- [14] A.G. Kochur, V.L. Sukhorukov, A.J. Dudenko, P.V. Demekhin. *J. Phys. B*, **28** (3), 387 (1995). DOI: 10.1088/0953-4075/28/3/010
- [15] A. El-Shemi, Y. Lotfy, I. Reiche, G. Zschornack. *Radiat. Phys. Chem.*, **49** (4), 403 (1997). DOI: 10.1016/S0969-806X(96)00178-8
- [16] A.H. Abdullah, A.M. El-Shemi, A.A. Ghoneim. *Radiat. Phys. Chem.*, **68** (5), 697 (2003). DOI: 10.1016/S0969-806X(03)00433-X
- [17] V. Jonauskas, L. Partanen, S. Kučas, R. Karazija, M. Huttula, S. Aksela, H. Aksela. *J. Phys. B*, **36** (22), 4403 (2003). DOI: 10.1088/0953-4075/36/22/003
- [18] A.M. El-Shemi. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **43** (5R), 2726 (2004). DOI: 10.1143/JJAP.43.2726
- [19] A.M. El-Shemi. *Can. J. Phys.*, **82** (10), 811 (2004). DOI: 10.1139/p04-045
- [20] Y.A. Lotfy, A.M. El-Shemi. *Symmetry, Integr. Geom. Methods Appl.*, **2**, 015 (2006). DOI: 10.3842/SIGMA.2006.015
- [21] A.M. Mohammedein, A.A. Ghoneim, K.M. Kandil, I.M. Kadad. *AIP Conf. Proc.*, **1202**, 213 (2010). DOI: 10.1063/1.3295600
- [22] А.П. Чайников, А.Г. Кочур, В.А. Явна. *Опт. и спектр.*, **119** (2), 179 (2015). DOI: 10.7868/S003040341508005X [A.P. Chaynikov, A.G. Kochur, V.A. Yavna. *Opt. Spectrosc.*, **119** (2), 171 (2015). DOI: 10.1134/S0030400X15080056].
- [23] X.L. Wang, B.X. Liu, G.H. Zhang, P.Y. Wang, L.W. Liu, X.Y. Li. *J. Electron Spectros. Relat. Phenomena.*, **250**, 147083 (2021). DOI: 10.1016/j.elspec.2021.147083
- [24] V.L. Jacobs, J. Davis, B.F. Rozsnyai, J.W. Cooper. *Phys. Rev. A*, **21** (6), 1917 (1980). DOI: 10.1103/PhysRevA.21.1917
- [25] A.G. Kochur, A.P. Chaynikov, A.I. Dudenko, V.A. Yavna. *JQSRT*, **286**, 108200 (2022). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2022.108200
- [26] S. Kučas, P. Drabužinskis, A. Kynienė, Š. Masys, V. Jonauskas. *J. Phys. B*, **52** (22), 225001 (2019). DOI: 10.1088/1361-6455/ab46fa
- [27] S. Kučas, P. Drabužinskis, V. Jonauskas. *At. Data Nucl. Data Tables*, 135–136, 101357 (2020). DOI: 10.1016/j.adt.2020.101357
- [28] G. Omar, Y. Hahn. *Phys. Rev. A*, **43** (9), 4695 (1991). DOI: 10.1103/PhysRevA.43.4695
- [29] S. Fritzsche, P. Palmeri, S. Schippers. *Symmetry (Basel)*, **13** (3), 520 (2021). DOI: 10.3390/sym13030520
- [30] S. Kučas, R. Karazija, A. Momkauskaitė. *Astrophys. J.*, **750** (2), 90 (2012). DOI: 10.1088/0004-637X/750/2/90
- [31] C. Gerth, A.G. Kochur, M. Groen, T. Luhmann, M. Richter, P. Zimmermann. *Phys. Rev. A*, **57** (5), 3523 (1998). DOI: 10.1103/PhysRevA.57.3523
- [32] A. El-Shemi, Y. Lotfy, G. Zschornack. *J. Phys. B*, **30** (2), 237 (1997). DOI: 10.1088/0953-4075/30/2/017
- [33] A. El-Shemi, A. Ghoneim, Y. Lotfy. *Turk. J. Phys.*, **27**, 51 (2003). URL: <https://journals.tubitak.gov.tr/physics/vol27/iss1/5>
- [34] A. El-Shemi. *Turk. J. Phys.*, **28**, 229 (2004). URL: <https://journals.tubitak.gov.tr/physics/vol28/iss4/3/>
- [35] A.M. El-Shemi, Y.A. Lotfy. *Eur. Phys. J. D*, **32** (3), 277 (2005). DOI: 10.1140/epjd/e2005-00003-3
- [36] V.P. Sachenko, V.F. Demekhin. *Sov. Phys. JETP*, **49** (3), 765 (1965).
- [37] T.A. Carlson, C.W. Nestor, T.C. Tucker, F.B. Malik. *Phys. Rev.*, **169** (1), 27 (1968). DOI: 10.1103/PhysRev.169.27
- [38] T. Mukoyama, K. Taniguchi. *Phys. Rev. A*, **36** (2), 693 (1987). DOI: 10.1103/PhysRevA.36.693
- [39] A.G. Kochur, A.I. Dudenko, D. Petrini. *J. Phys. B*, **35** (2), 395 (2002). DOI: 10.1088/0953-4075/35/2/315
- [40] A.P. Chaynikov, A.G. Kochur, A.I. Dudenko, I. Petrov, V.A. Yavna. *Phys. Scr.*, **98** (2), 025406 (2023). DOI: 10.1088/1402-4896/acb407
- [41] F. von Busch, J. Doppelfeld, C. Gunther, E. Hartmann. *J. Phys. B*, **27** (11), 2151 (1994). DOI: 10.1088/0953-4075/27/11/011
- [42] R. Kau, I.D. Petrov, V.L. Sukhorukov, H. Hotop. *Z. Phys. D*, **39** (4), 267 (1997). DOI: 10.1007/s004600050137
- [43] S.T. Perkins, D. Cullen, M.H. Chen, J. Rathkopf, J. Scofield, J.H. Hubbell. *Tables and Graphs of Atomic Subshell and Relaxation Data Derived from the LLNL Evaluated Atomic Data Library (EADL), Z=1-100*, Vol. UCRL-50400 (US Department of Energy, Office of Scientific and Technical Information, United States, 1991).
- [44] D.L. Walters, C.P. Bhalla. *Phys. Rev. A*, **3** (6), 1919 (1971). DOI: 10.1103/PhysRevA.3.1919
- [45] V.G. Yarzhemsky, A. Sgamellotti. *J. Electron Spectros. Relat. Phenomena*, **125** (1), 13 (2002). DOI: 10.1016/S0368-2048(02)00042-7
- [46] A.G. Kochur, A.I. Dudenko, I.D. Petrov, V.F. Demekhin. *J. Electron Spectros. Relat. Phenomena*, **156–158**, 78 (2007). DOI: 10.1016/j.elspec.2006.11.033
- [47] А.Г. Кочур. *Процессы распада вакансий в глубоких электронных оболочках*. Автореф. дис. докт. физ.-мат. наук (Ростов-на-Дону, 1997). URL: <https://search.rsl.ru/ru/record/01000199628>
- [48] R. Karazija. *Sums of Atomic Quantities and Mean Characteristics of Spectra* (Mokslas, Vilnius, 1991).
- [49] S. Kučas, R. Karazija. *Phys. Scr.*, **47** (6), 754 (1993). DOI: 10.1088/0031-8949/47/6/012
- [50] Y. Liu, P. Zhang, F. Li, X. Jin, J. Li, W. Chen, Q. Li. *Theranostics*, **8** (7), 1824 (2018). DOI: 10.7150/thno.22172