

С.В.Амбросов, к.т.н., Л.В.Никола

Одесский государственный экологический университет

S-МАТРИЧНЫЙ ФОРМАЛИЗМ ГЕЛЛ-МАНА И ЛОУ И МЕТОД ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ В РАСЧЕТАХ ОЖЕ-СПЕКТРОВ

Работа посвящена расчету характеристик Оже распада в сложных атомных системах на основе метода, базирующегося на S-матричном формализме Гелл-Мана и Лоу. Выполнены расчеты сечений ионизации внутренних оболочек ряда атомов (Na, Si, Au) и энергий Оже электронов

Ключевые слова: S-матричный формализм Гелл-Мана и Лоу, Оже спектры

Введение. Теория Оже эффекта подробно изложена в целом ряде обзоров [1,2]. Наиболее популярной в расчетах характеристик Оже распада является двух шаговая модель. Поскольку время жизни вакансии во внутренней оболочке атома достаточно велико ($\sim 10^{-17}$ - 10^{-14} с), ионизация атома и Оже эмиссия рассматриваются как два независимых процесса. В более корректной динамической теории Оже эффекта [1] искомые процессы не рассматриваются как независимые. Учитывается тот факт, что процессы релаксации, приводящие к перераспределению электронов в поле вакансии и обусловленные кулоновским взаимодействием между электронами, не успевают закончиться перед тем, как должен произойти переход. Фактически в последовательной теории Оже распада должен быть осуществлен корректный учет ряда корреляционных эффектов, включая энергетическую зависимость массового оператора вакансии, давление континуума, размазывание исходного состояния по целому набору конфигураций и др.[3-6]. Отметим, что искомые эффекты до сих пор не допускают своего адекватного описания, в частности, и в теории Оже распада [2]. Данная работа посвящена приложению нового метода расчета характеристик Оже распада сложных атомных систем, базирующегося на использовании S-матричного формализма Гелл-Мана и Лоу [3-8], к вычислению характеристик Оже распада в атомах. Новым элементом является применение оптимального базиса функций электронных состояний, полученного из условия, что уже в первом исчезающем приближении теории возмущений (ТВ) минимизируется калибровочно-неинвариантный вклад поляризационных диаграмм второго порядка ТВ в мнимую часть энергии многоэлектронной системы [9]. Метод применен для расчета сечений ионизации внутренних оболочек ряда атомов и энергий Оже электронов.

Новый подход к расчету интенсивностей и ширин линий в Оже спектрах.

В рамках КЭД ТВ подхода к описанию Оже эффекта вероятность Оже перехода и, соответственно, интенсивность Оже линии определяются квадратом матричного элемента межэлектронного взаимодействия, имеющим вид [3,4]:

$$V_{1234}^{\omega} = [(j_1)(j_2)(j_3)(j_4)] \left[\frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu} (-1)^{\mu} \begin{pmatrix} j_1 j_3 & \lambda \\ m_1 - m_3 & \mu \end{pmatrix} \times \operatorname{Re} Q_{\lambda}(1234), \right.$$

$$Q_{\lambda} = Q_{\lambda}^{\text{Qu}} + Q_{\lambda}^{\text{Br}}. \quad (1)$$

Величины Q_{λ}^{Qu} и Q_{λ}^{Br} соответствуют разбиению «потенциала» на кулоновскую: $\cos |\omega|r_{12}/r_{12}$ и брейтовскую: $\cos |\omega|r_{12}\alpha_1\alpha_2/r_{12}$ части. Действительная часть матричного элемента межэлектронного взаимодействия определяется с использованием разложения по функциям Бесселя :

$$\frac{\cos|\omega|r_{12}}{r_{12}} = \frac{\pi}{2\sqrt{\eta_1 r_2}} \sum_{\lambda=0} (\lambda) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_{<}) J_{-\lambda-1/2}(|\omega|r_{>}) P_{\lambda}(\widehat{\cos r_1 r_2}), \quad (2)$$

где J –функция Бесселя 1-го рода, $(\lambda)=2\lambda+1$. Кулоновская часть Q_{λ}^{Qu1} выражается через радиальные интегралы R_{λ} и угловые коэффициенты S_{λ} [7] следующим образом:

$$\begin{aligned} \text{Re } Q_{\lambda}^{Qu1} = \frac{1}{Z} \text{Re} \{ & R_I(1243) S_{\lambda}(1243) + R_{\lambda}(\tilde{1} 24\tilde{3}) S_{\lambda}(\tilde{1} 24\tilde{3}) \\ & + R_{\lambda}(1\tilde{2}\tilde{4}3) S_{\lambda}(1\tilde{2}\tilde{4}3) + R_{\lambda}(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) S_{\lambda}(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) \} \end{aligned} \quad (3)$$

Вероятность Оже распада выражается через матричные элементы $\text{Re } Q_{\lambda}(1243)$ вида:

$$\text{Re } R_{\lambda}(1243) = \iint dr_1 r_1^2 r_2^2 f_1(r_1) f_3(r_1) f_2(r_2) f_4(r_2) Z_{\lambda}^{(1)}(r_{<}) Z_{\lambda}^{(1)}(r_{>}), \quad (4)$$

где f –большая компонента радиальной части дираковской функции одноэлектронного состояния, а функция Z определяется выражением:

$$Z_{\lambda}^{(1)} = \left[\frac{2}{|\omega_{13}| \alpha Z} \right]^{\lambda+1/2} \frac{J_{\lambda+1/2}(\alpha|\omega_{13}|r)}{r^{\lambda} \Gamma(\lambda + 3/2)}.$$

Угловой множитель имеет только действительную часть [4]:

$$S_{\lambda}(1243) = \{ \lambda l_1 l_3 \} \{ \lambda l_2 l_4 \} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & \lambda \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_4 & \lambda \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix},$$

где $\{ \lambda l_1 l_3 \}$ означает, что $\lambda+l_1+l_3$ –четное число. Остальные слагаемые в (3) включают малые компоненты функций Дирака, причем знак «~» обозначает, что в (4) большую радиальную компоненту f_i нужно заменить на малую g_i , а в выражении для $S_{\lambda} l_i$ заменить на $\tilde{l}_i = l_i - 1$ для $\alpha_1 > 0$ и $l_i + 1$ для $\alpha_1 < 0$. Известно, что в ряде случаев брейтовское взаимодействие может существенно изменять динамику Оже распада [5,9,13]. Брейтовская часть величины Q определяется суммой

$$Q_{\lambda}^{Br} = Q_{\lambda,\lambda-1}^{Br} + Q_{\lambda,\lambda}^{Br} + Q_{\lambda,\lambda+1}^{Br}, \quad (5)$$

где интересующий нас вклад определяется выражением:

$$\begin{aligned} Q_{\lambda}^{Br} = \frac{1}{Z} \text{Re} \{ & R_{\lambda}(12\tilde{4}\tilde{3}) S_{\lambda}^l(12\tilde{4}\tilde{3}) + R_{\lambda}(\tilde{1}\tilde{2}43) S_{\lambda}^l(1243) + \\ & + R_I(\tilde{1} 2\tilde{4}3) S_{\lambda}^l(\tilde{1} 2\tilde{4}3) + R_I(1\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) S_{\lambda}^l(1\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) \} \end{aligned} \quad (6)$$

Угловая часть брейтовского матричного элемента $S(1243)$ факторизируется по индексам 1, 3 и 2, 4:

$$\left. \begin{aligned} S_{\lambda}^{(1)}(1243) &= (\lambda)(-1)^{\lambda+l+1} S_{\lambda}^l(13) S_{\lambda}^l(24), \\ S_{\lambda}^{(1)}(13) &= (-1)^{l_3+j_3} (l_1 l_3) \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & \lambda \\ -1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\lambda(\lambda+1)}} \times \right. \\ &\times \left[(-1)^{j_1+j_3+\lambda} (j_3) + (j_1) \right] \begin{pmatrix} \lambda & 1 & l \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} + (-1)^{l_3+j_1+\lambda} \begin{pmatrix} \lambda & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left. \right\}. \end{aligned} \right\}$$

Оже ширина получается из адиабатической формулы Гелл-Мана и Лоу для



энергетического сдвига [3]. Вклад диаграммы A_d вида в Оже ширину
уровня с вакансией $n_\alpha l_\alpha j_\alpha m_\alpha$ равен

$$\sum_{\lambda} \frac{2}{(\lambda)(j_\alpha)} \sum_{\beta\gamma \leq f} \sum_{k > f} Q_\lambda(\alpha k \gamma \beta) Q_\lambda(\beta \gamma k \alpha), \quad (7)$$

а вклад диаграммы A_{ex} вида 

$$\frac{2}{(j_\alpha)} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \sum_{\beta\gamma \leq f} \sum_{k > f} Q_{\lambda_1}(\alpha k \gamma \beta) Q_{\lambda_2}(\beta \gamma k \alpha) \left\{ \begin{matrix} j_\alpha & j_\gamma & \lambda_2 \\ j_k & j_\beta & \lambda_1 \end{matrix} \right\}. \quad (8)$$

Формулы (7-8) дают полную Оже ширину уровня. Отдельные члены суммы $\sum_{\beta\gamma} \sum_k$ соответствуют вкладам каналов $\alpha^{-1} \rightarrow (\beta\gamma)^{-1} K$ с образованием 2 новых вакансий

$\beta\gamma$ и свободного электрона k : $\omega_k = \omega_\alpha + \omega_\beta - \omega_\alpha$. Окончательное выражение для ширины в представлении jj-схемы связывания одноэлектронных моментов дается выражением:

$$\Gamma(2j_1^o l_1^o, 2j_2^o l_2^o; J) = 2 \sum_{jkl} |\Gamma(2j_1^o l_1^o, 2j_2^o l_2^o; l_o, kjl)|^2. \quad (9)$$

Здесь суммирование производится по всем возможным каналам распада. Базис функций электронных состояний определяется решением уравнения Дирака (численно интегрировалась методом Рунге-Кутты). Вычисление радиальных интегралов $ReR_\lambda(1243)$ сведено к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\left. \begin{aligned} y_1' &= f_1 f_3 Z_\lambda^{(1)}(\alpha|\omega|r) r^{2+\lambda}, \\ y_2' &= f_2 f_4 Z_\lambda^{(1)}(\alpha|\omega|r) r^{2+\lambda}, \\ y_3' &= [y_1 f_2 f_4 + y_2 f_1 f_3] Z_\lambda^{(2)}(\alpha|\omega|r) r^{1-\lambda}. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

При этом: $y_3(\infty) = ReR_\lambda(1243)$, $y_1(\infty) = X_\lambda(13)$. В систему дифференциальных уравнений включены также уравнения для функций $f/r^{|\alpha|-1}$, $g/r^{|\alpha|-1}$, $Z_\lambda^{(1)}$, $Z_\lambda^{(2)}$. В формулы для вероятности Оже распада входят радиальные интегралы $R_\alpha(\alpha k \gamma \beta)$, где одна из функций описывает электрон в состоянии континуума. При вычислении этого интеграла возникает задача правильной нормировки функции Ψ_k . Правильно нормированная функция должна при $r \rightarrow 0$ иметь асимптотику [4]:

$$\left. \begin{aligned} f \\ g \end{aligned} \right\} \rightarrow (\lambda\omega)^{-1/2} \left\{ \begin{aligned} & \left[\omega + (\alpha Z)^{-2} \right]^{-1/2} \sin(kr + \delta), \\ & \left[\omega - (\alpha Z)^{-2} \right]^{-1/2} \cos(kr + \delta). \end{aligned} \right.$$

При интегрировании мастерной системы одновременно вычисляется функция:

$$N(r) = \left\{ \pi \omega_k \left[f_k^2 \left[\omega_k + (\alpha Z)^{-2} \right] + g_k^2 \left[\omega_k + (\alpha Z)^{-2} \right] \right] \right\}^{-1/2}.$$

Можно показать, что при $r \rightarrow \infty$, $N(r) \rightarrow N_k$, где N_k – нормировка функций f_k , g_k непрерывного спектра, удовлетворяющих выше приведенным условиям.

Энергия электрона, образовавшегося в результате перехода jkl , определяется разностью энергий атома с дыркой на уровне j и дважды ионизованного атома на уровнях kl , в конечном состоянии:

$$E_A(jkl, {}^{2S+1}L_J) = E(j) - E(k) - E(l) - \Delta(k, l; {}^{2S+1}L_J), \quad (11)$$

где член Δ учитывает атомные динамические корреляционные эффекты (релаксация вследствие экранировки дырок электронами и др). Для учета этих эффектов использован набор процедур, развитых в теории атома [8]. Для твердой фазы уравнение (12) уточняется таким образом [1]:

$$E^s_A(jkl, {}^{2S+1}L_J) = E_A(jkl, {}^{2S+1}L_J) + \Delta E^s + R_{rel} + e\Phi, \quad (12)$$

где ΔE^s – поправка на изменение энергии связи в твердом теле, R_{rel} – поправка на внеатомную релаксацию; $e\Phi$ учитывает работу выхода. В реальных Оже спектрах из-за размытия линий вследствие взаимодействия Оже электронов с электронами внутренних оболочек, наружных зон, перекрытия отдельных линий мультиплета, многочастичных эффектов возникает характерная для данных переходов и для каждого элемента форма линии. В твердых телах Оже спектры уширены в своей низкоэнергетической части в результате неупругого рассеяния эмитируемых из атома Оже электронов при их движении в кристалле [1].

Расчет сечений ионизации внутренних оболочек и Оже спектров.

Перейдем теперь к изложению некоторых результатов расчета характеристик Оже переходов, сечений ионизации внутренних оболочек атомов. Как указывалось выше, вероятность выхода Оже электронов из атома по различным каналам, связанным с ионизацией с основного уровня, определяется матричным элементом (1). При этом коэффициент пропорциональности в уравнении совпадает с сечением ионизации σ_j уровня j электронным ударом. Разумеется, при рассмотрении вопроса определения вероятности выхода Оже электрона из атома следует рассматривать два аспекта, а именно, процесс радиационного перехода при нейтрализации дырки уровня j , а также возможность сильного изменения исходного распределения дырок на основных уровнях к моменту Оже распада по излучаемому каналу $ijkl$ вследствие, как правило, значительного различия в вероятностях безизлучательных переходов. Далее рассмотрим для определенности случай ионизации L уровней многоэлектронного атома. Вероятность излучения Оже электрона из атома по каналу, скажем, L_3Kl будет определяться сечением ионизации уровня L_3 , а также некоторым эффективным сечением, зависящим также от сечений ионизации уровней L_1, L_2 . Интенсивность Оже линии определяется тремя атомными константами: $A_{jkl} = \sigma_j f_i a_{jkl}$, где a_{jkl} – вероятность безизлучательного перехода, f_i – коэффициент Кострера-Кронига, σ_j – сечение ионизации, определяемое матричным элементом (1), рассчитанным на волновых функциях связанного состояния и состояния континуума.

В табл. 1 приведены результаты расчета сечений ионизации (в см^2) внутренних оболочек ряда атомов на основе метода данной работы, а также имеющиеся экспериментальные данные [1]. Отметим, что, в отличие от распространенного метода расчета искомых сечений в рамках приближения Борна [1.2], используемый нами подход в теоретическом отношении является более корректным, следствием чего является достаточно хорошее согласие теории и эксперимента. В таблице 2 приведены данные по энергиям Оже электронов для некоторых твердых тел, полученные на основе расчета методом настоящей работы [формулы (7-12)], а также расчета полуэмпирическим методом с использованием приближения эквивалентного остова Ларкинса [1] и имеющиеся экспериментальные данные. В среднем точность расчета методом [2] составляет $\sim 2\text{эВ}$. Наш подход дает более точные результаты, во многом вследствие более корректного учета сложных межэлектронных корреляций.

Благодарность. Авторы выражают глубокую признательность проф. Глушкову А.В. за постановку задачи и ценные советы.

Таблица 1 - Сечения ионизации (в см^2) внутренних оболочек ряда атомов

Элемент	Уровень	Энергия ионизации, E_i , эВ	Энергия налетающих электронов, эВ ($U=E/E_i$)	Сечение ионизации: Эксперимент	Сечение ионизации: Теория
Si	L_3	103	4	$6,15 \cdot 10^{-19}$	$6,33 \cdot 10^{-19}$
Au	K	$80,7 \cdot 10^3$	6,2	$6,5 \cdot 10^{-24}$	$6,7 \cdot 10^{-24}$

Таблица 2 - Экспериментальные данные по энергиям Оже электронов для твердых тел и результаты расчета: А- полуэмпирический расчет [1]; В- настоящая работа

Элемент	Оже линия	Эксперимент	Теория: А	Теория: В
Na	$KL_{2,3}L_{2,3}^1D_2$	994,2	993,3	994,1
Si	$KL_{2,3}L_{2,3}^1D_2$	1616,4	1614,0	1615,9
Ge	$L_3M_{4,5}M_{4,5}^1G_4$	1146,2	1147,2	1146,6
Ag	$M_5N_{4,5}N_{4,5}^1G_4$	353,4	358,8	354,1

Список литературы

1. *Aberg T., Hewat G.*, Theory of Auger effect.-Berlin: Springer, 2004.-750P.
2. Photonic, Electronic and Atomic Collisions. Eds. *W.Aumayr, H.Winter.*- Singapore: World Scientific Publ., 1997.-680P.
3. *Glushkov A.V., Rusov V.D., Ambrosov S.V., Loboda A.V.* Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions // In: New projects and new lines of research in nuclear physics.Eds. G.Fazio, F.Hanappe, Singapore: World Scientific.-2003.-P.126-132.
4. *Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Ignatenko A.V., Korchevsky D.A.*, DC Strong Field Stark Effect for Non-hydrogenic Atoms: Consistent Quantum Mechanical Approach // Int.Journ.Quant.Chem.-2004.-Vol.99,N5.-P.936-939.
5. *Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Loboda A.V., Chernyakova Yu. G., Khetselius O.Yu, Svinarenko A.V.* QED calculation of the superheavy elements ions: energy levels, radiative corrections and hyperfine structure for different nuclear models// Nucl. Phys.A.-2004.-Vol. 734.-p.21-24.
6. *Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Loboda A.V., Gurnitskaya E.P., Prepelitsa G.P.*, Consistent QED approach to calculation of electron-collision excitation cross-sections and strengths: Ne-like ions // Int. Journ.Quant.Chem.-2005.-Vol.104, N4 .-P. 562-569.
7. *Glushkov A. V., Ambrosov S. V., Malinovskaya S. V.* Spectroscopy of the neutral and highly ionized atoms: calculation of the oscillator strengths for Na-, F-like ions// Bound Volume of Paris – Meudon Observatory.-1995.-Vol.1.-P.138-142.
8. *Ambrosov S.V.*, Computer modeling optimal schemes for laser ionization method of isotopes and nuclear isomers division and detection// Вісник Київського ун-ту.-Сер. Фіз.-мат.-2005.-№3.-С. 215-222.

S-матричний формалізм Гелл-Мана і Лоу і метод теорії збурень в розрахунках Оже-спектрів. Амбросов С.В., Нікола Л.В.

Робота присвячена розрахунку характеристик Оже розпаду у складних атомних системах на основі методу, що базується на S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу. Виконані розрахунки перерізів іонізації внутрішніх оболонок ряду атомів (Na, Si, Au) і енергій Оже електронів.

Ключові слова: *S-матричний формалізм Гелл-Мана і Лоу, Оже спектри.*

S-matrix Gell-Mann and Low formalism and perturbation theory approach to calculation of Auger spectra. Ambrosov S., Nikola L.

Paper is devoted to calculation of characteristics of the Auger decay in the complicated atomic systems on the basis of S-matrix Gell-Mann and Low formalism. The cross-sections of ionization of the internal shells for a number of atoms (Na, Si, Au) and energies of Auger electron transitions are calculated with account of the correlation effects.

Keywords: *S-matrix Gell-Mann and Low formalism, Auger spectra.*