

УДК 539.182 : 184

ГИПЕРСАТЕЛЛИТНЫЕ РАСПАДЫ ВАКАНСИЙ

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

Рассмотрены процессы радиационного распада двухдырочных состояний, в которых распадается только одна из начальных вакансий, в то время как вторая остается неизменно в процессе распада, — так называемые гиперсателлитные распады. В приближении Хартри—Фока найдена связь между вероятностями гиперсателлитных переходов и обычных радиационных распадов однодырочных состояний. Выяснена роль многоэлектронных корреляций в гиперсателлитных распадах. Проведены расчеты вероятностей гиперсателлитных переходов в атомах неона и аргона.

1. Распады возбужденных состояний атомов с двумя вакансиями в электронных оболочках приводят к появлению дополнительных линий в спектрах излучения. Основная часть из них находится вблизи главных или характеристических линий и возникает вследствие радиационного распада одной из начальных вакансий в присутствии другой. Процессы такого типа впервые наблюдались в [1] и получили название гиперсателлитных радиационных распадов, а соответствующие линии — гиперсателлитов. Изучению таких распадов в последнее время уделяется определенное внимание [2-6]. Этот интерес вызван тем, что исследование гиперсателлитных переходов позволяет провести идентификацию ряда наблюдаемых на опыте линий, а также получить весьма существенную информацию о структуре электронных оболочек атомов в высоковозбужденных состояниях и о релаксации дырочных состояний при появлении дополнительных вакансий.

Цель данной работы — вычисление методами квантовой теории многих тел [7] вероятности и энергии радиационного распада вакансии i в присутствии одной дополнительной дырки j , которая может принадлежать любой подоболочке атома.

2. В дипольном приближении вероятность излучения фотона при переходе из начального состояния $\psi_i (LSM_L M_S)$ с двумя вакансиями i и j в конечное $\psi_f (L'S' M_{L'} M_{S'})$ с дырками f и j (дырка j в процессе распада сохраняется) определяется выражением

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

где α — постоянная тонкой структуры; \mathbf{e} — вектор поляризации фотона; ω — его энергия (в ридбергах); L, S и L', S' — орбитальные и спиновые моменты начального и конечного состояний; 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: $e = \hbar = m = 1$.

При вычислении амплитуды

$$M = \langle \Psi_f | (\mathbf{d}, \mathbf{e}) | \Psi_i \rangle$$

процесса разумно применять теорию возмущений (ТВ), поскольку атомные подоболочки довольно сильно удалены друг от друга, а матричные элементы кулоновского взаимодействия между электронами различных подоболочек относительно малы.

В нулевом приближении, в качестве которого выбрано приближение Хартри—Фока (ХФ), амплитуда гиперсателлитного распада определяется диаграммами (рис. 1), где линии со стрелкой налево описывают дырочные состояния, а штриховая линия означает взаимодействие с электромагнитным полем. На рис. 1 представлены три случая: *a* — все три вакансии (начальная *i*, конечная *f* и дополнительная *j*) принадлежат различным подоболочкам, *b* — начальная вакансия *i* и дополнительная *j* принадлежат одной подоболочке (случай эквивалентных вакансий *i* и *j*), *в* — дополнительная вакансия *j* эквивалента конечной *f*. В первом случае вклад в амплитуду гиперсателлитного ра-

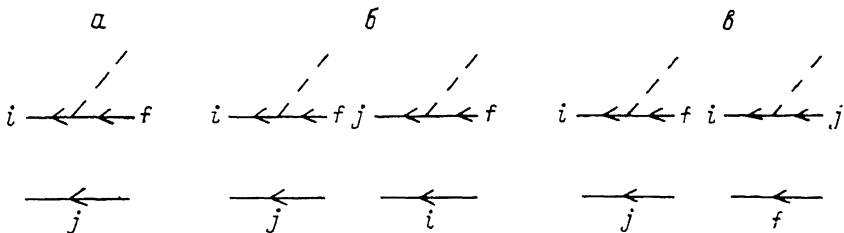


Рис. 1. Амплитуда гиперсателлитного распада в приближении ХФ.

диационного распада дает одна диаграмма (рис. 1, *a*). Во втором случае амплитуда определяется двумя диаграммами, поскольку электрон из подоболочки *f* может заполнить как дырку *i*, так и *j* (рис. 1, *б*). И наконец, в третьем случае, когда эквивалентными являются дырки *j* и *f*, также две диаграммы вносят вклад в амплитуду (рис. 1, *в*).

Соответствующие аналитические выражения имеют вид

$$\begin{aligned}
 a: \quad M^{(0)} &= M^{\text{ХФ}} = NN' \sum_{\substack{m_i m_j m_{j'} m_f \\ \mu_i \mu_j \mu_{j'} \mu_f}} B \langle f | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | i \rangle \delta_{m_j m_{j'}} \delta_{\mu_j \mu_{j'}}, \\
 б: \quad M^{(0)} &= M^{\text{ХФ}} = NN' \sum_{\substack{m_i m_j m_{j'} m_f \\ \mu_i \mu_j \mu_{j'} \mu_f}} B \langle f | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | i \rangle \delta_{m_j m_{j'}} \delta_{\mu_j \mu_{j'}} + \\
 &\quad + \langle f | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | j \rangle \delta_{m_j m_i} \delta_{\mu_j \mu_i}, \\
 в: \quad M^{(0)} &= M^{\text{ХФ}} = NN' \sum_{\substack{m_i m_j m_{j'} m_f \\ \mu_i \mu_j \mu_{j'} \mu_f}} B \langle f | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | i \rangle \delta_{m_j m_{j'}} \delta_{\mu_j \mu_{j'}} + \\
 &\quad + \langle j | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | i \rangle \delta_{m_j m_f} \delta_{\mu_j \mu_f}. \tag{2}
 \end{aligned}$$

Здесь \mathbf{e} — вектор поляризации фотона; N и N' — нормировочные множители начального и конечного состояний, равные 1, если *i*, *j* (*j*, *f*) неэквивалентны, и $2^{-1/2}$ в противном случае; множитель

$$\begin{aligned}
 B &= (-1)^{M_L + M_{L'} + M_S + M_{S'} - m_i - m_j - m_{j'} - m_f - \mu_i - \mu_j - \mu_{j'} - \mu_f} \begin{pmatrix} l_i & l_j & L \\ m_i & m_j & -M_L \end{pmatrix} \times \\
 &\times \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & S \\ \mu_i & \mu_j & -M_S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_f & l_{j'} & L' \\ m_f & m_{j'} & -M_{L'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & S' \\ \mu_f & \mu_{j'} & -M_{S'} \end{pmatrix} [L][L'][S][S']
 \end{aligned}$$

и суммирование по проекциям $m_i, m_j, m_{j'}, m_f$ и $\mu_i, \mu_j, \mu_{j'}, \mu_f$ появляются в результате связывания спиновых и орбитальных моментов начальных дырок *i*, *j*

в терм ^{2S+1}L , а конечных j, f — в терм $^{2S'+1}L'$ [8]; $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ — $3jm$ символ; $[\lambda] = (2\lambda + 1)^{1/2}$.

После интегрирования по угловым переменным и суммирования по проекциям орбитальных и спиновых моментов получаем

$$M_a^{X\Phi} = \sum_q e_q (-1)^{l_j} \begin{pmatrix} L & 1 & L' \\ M_L & q & -M_{L'} \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ l_f & l_j & l_i \end{Bmatrix} \langle f \| d \| i \rangle [L][L'] \times [S][S'] \delta_{SS'} \delta_{M_S M_{S'}} \quad (3)$$

$$M_a^{X\Phi} = M_s^{X\Phi} = \sqrt{2} M_a^{X\Phi} \quad (4)$$

где $\langle f \| d \| i \rangle$ — приведенный дипольный матричный элемент, определенный обычным образом [9]; e_q — сферическая компонента q вектора поляризации e ; $\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{Bmatrix}$ — $6j$ коэффициент Вигнера.

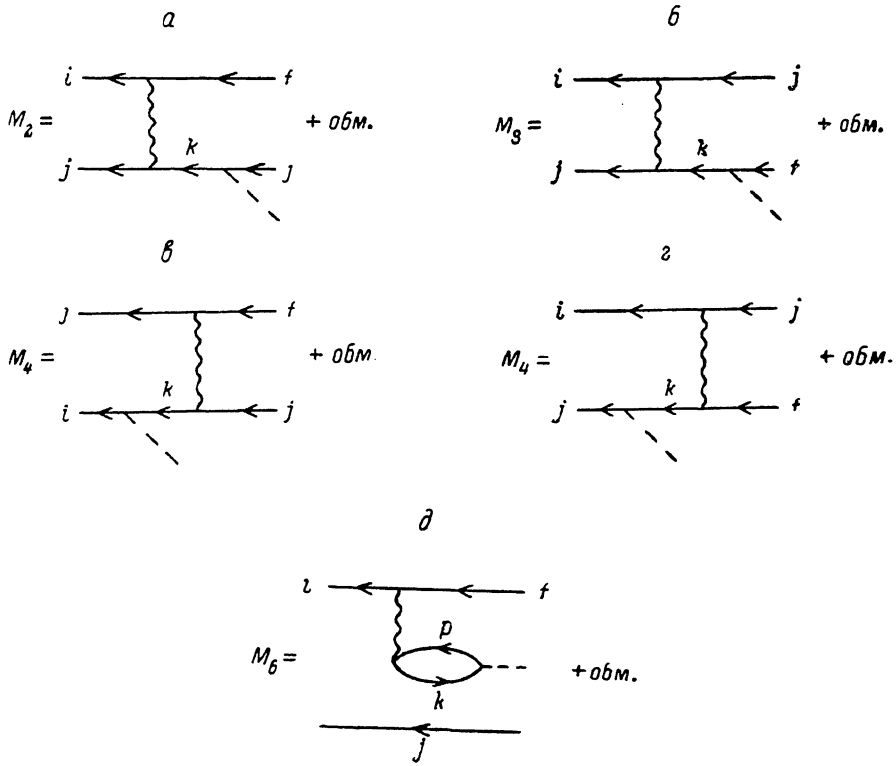


Рис. 2. Корреляционная амплитуда гиперсателлитного перехода.

Подставляя амплитуды (3) и (4) в выражение (1), получаем, что вероятность излучения фотона при переходе из терма ^{2S+1}L в состояние $^{2S'+1}L'$ в гиперсателлитном распаде $i^{-1}j^{-1} \rightarrow f^{-1}j^{-1} + \gamma$ определяется формулой

$$W_i^{X\Phi}(j) = \frac{\alpha^3 \omega^3}{3} [L']^2 \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ l_f & l_j & l_i \end{Bmatrix}^2 \langle f \| d \| i \rangle^2 \times 13.6 \text{ эВ.} \quad (5)$$

В случае эквивалентных вакансий выражение (5) следует умножить на два. Энергии фотонов, излучаемых в гиперсателлитных переходах, зависят от термов начального и конечного состояний. Поэтому в спектре излучения должна наблюдаться не одна, а несколько линий. Однако в нулевом приближении энергии гиперсателлитных фотонов совпадают между собой и оказываются равными

разности энергий вакансий f и i , $\omega^{(0)} = E_f - E_i$, т. е. энергии кванта, излучаемого в главном переходе. Используя это обстоятельство, можно найти связь между вероятностями главного и гиперсателлитного переходов. Для этого просуммируем выражение (5) по всем термам $2s'+1L'$ конечного состояния. В результате для неэквивалентных и эквивалентных вакансий соответственно получаем

$$\sum_{L'} W_i^{X\Phi}(j) = W_i^{X\Phi}, \quad \sum_{L'} W_i^{X\Phi}(j) = 2W_i^{X\Phi}. \quad (6), (7)$$

Отсюда видно, что вероятность излучения фотона в любом из каналов гиперсателлитного распада (под каналом понимается переход между определенными термами начального и конечного состояний) в случае неэквивалентных вакансий i и j меньше вероятности $W_i^{X\Phi}$ главного $i^{-1} \rightarrow f^{-1} + \gamma$, а роль дополнительной дырки j сводится просто к распределению вероятности между различными каналами распада.

В случае эквивалентных вакансий вероятность излучения гиперсателлитного фотона в одном из каналов распада может оказаться и больше вероятности главного перехода, например распад $2s^{-1}2p^{-1} [^1P] \rightarrow 2p^{-2} [^1D]$ в Ne, где в приближении XФ вероятность гиперсателлитного перехода составляет $1.64 \cdot 10^{-5}$ эВ, а главного $2s^{-1} \rightarrow 2p^{-1} - 1.45 \cdot 10^{-5}$ эВ.

3. В первом порядке ТВ по межэлектронному взаимодействию в амплитуду гиперсателлитного распада дают вклад диаграммы рис. 2, где волнистая линия означает кулоновское взаимодействие электронов, а линия со стрелкой направо — одноэлектронные состояния. На рис. 2 первые четыре графика описывают поправки, связанные с учетом взаимодействия вакансий в начальном ($a, б$) и конечном ($в, г$) состояниях, тогда как последняя диаграмма ($д$) описывает процессы виртуального возбуждения, в которых переход электрона f в подоболочку с вакансией i вызывает возмущение (виртуальное) других атомных электронов с последующим их возвращением в исходные состояния, в результате чего излучается фотон. С учетом диаграмм первого порядка амплитуда гиперсателлитного перехода принимает вид

$$M = \sum_{i=1}^6 M_i = M^{X\Phi} + M^{\text{corr}}, \quad (8)$$

где

$$M_1 \equiv M^{(0)} = M^{X\Phi}, \quad M^{\text{corr}} = \sum_{i=2}^6 M_i, \quad (9)$$

$$M_2 = NN' \sum_{\substack{m_i m_j m_{j'} m_{f'} \\ \mu_i \mu_j \mu_{j'} \mu_{f'}}} B \sum_k \langle ij | U | fk \rangle \langle k | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | j \rangle E_{ijfk}^{-1}, \quad (10)$$

$$M_3 = NN' \sum_{\substack{m_i m_j m_{j'} m_{f'} \\ \mu_i \mu_j \mu_{j'} \mu_{f'}}} B \sum_k \langle ij | U | jk \rangle \langle k | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | f \rangle E_{ik}^{-1}, \quad (11)$$

$$M_4 = NN' \sum_{\substack{m_i m_j m_{j'} m_{f'} \\ \mu_i \mu_j \mu_{j'} \mu_{f'}}} B \sum_k \langle jk | U | fj \rangle \langle i | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | k \rangle E_{kf}^{-1}, \quad (12)$$

$$M_5 = NN' \sum_{\substack{m_i m_j m_{j'} m_{f'} \\ \mu_i \mu_j \mu_{j'} \mu_{f'}}} B \sum_k \langle ik | U | fj \rangle \langle j | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | k \rangle E_{ikjf}^{-1}, \quad (13)$$

$$M_6 = NN' \sum_{\substack{m_i m_j m_{j'} m_{f'} \\ \mu_i \mu_j \mu_{j'} \mu_{f'}}} B \left(\sum_{\substack{p > F \\ k \leq F}} - \sum_{\substack{p \leq F \\ k > F}} \right) \langle pi | U | kf \rangle \langle k | (\mathbf{r}, \mathbf{e}) | p \rangle E_{pikf}^{-1}. \quad (14)$$

Здесь $\langle kl | U | mn \rangle = \langle kl | V | mn - nm \rangle$ — разность прямого и обменного кулоновского матричных элементов; $E_{kl} = E_k - E_l$, $E_{klmn} = E_k + E_l - E_m - E_n$; суммирование по k проводится по дырочным ($k \leq F$) и возбужденным одноэлектронным ($k > F$) состояниям, включая и интегрирование по непрерывному спектру.

В случае эквивалентных вакансий в начальном или конечном состояниях в парциальную амплитуду M_6 будут давать вклад две диаграммы, одна из которых приведена на рис. 2, δ , а другая имеет такой же вид, только в ней надо произвести перестановку $i \leftrightarrow j$ (эквивалентны i и j) или $j \leftrightarrow f$ (эквивалентны конечные дырки j и f).

После выделения в M_i ($i=1, 2, \dots, 6$) угловых и спиновых множителей и суммирования по проекциям $m_i, m_j, m_{j'}, m_f, m_k$ и $\mu_i, \mu_j, \mu_{j'}, \mu_f, \mu_k$ выражения для парциальных амплитуд принимают вид

$$M_1 = M^{\text{X}\Phi}, \quad M_2 = (-1)^{l_i+l'} Q \sum_{n_k l_k l} \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ l_j & l_f & l_k \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & l_k & l_f \\ l & l_i & l_j \end{Bmatrix} \times \\ \times (V_{ijfk}^l + (-1)^s W_{ijkf}^s) d_{kj} E_{ijfk}^{-1}, \quad (15)$$

$$M_3 = (-1)^{L+l_f+l_i+l_j} Q \sum_{n_k l_k l} \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ l_f & l_j & l_k \end{Bmatrix} (V_{ijkj}^l + (-1)^s W_{ijjk}^s) d_{kj} E_{ijk}^{-1}, \quad (16)$$

$$M_4 = (-1)^{l_f+l_j} Q \sum_{n_k l_k l} (-1)^{l_k} \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ l_k & l_j & l_i \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_k & l_j & L' \\ l_f & l_j & l \end{Bmatrix} \times \\ \times (V_{jkjf}^l (-1)^s + W_{jkjf}^s) d_{ik} E_{kif}^{-1}, \quad (17)$$

$$M_5 = (-1)^{L+l'+l_f+1} Q \sum_{n_k l_k l} \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ l_k & l_i & l_j \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_k & l_i & L' \\ l_j & l_f & l \end{Bmatrix} (V_{ikjf}^l (-1)^s + W_{ikjf}^s) d_{jk} E_{ikjf}^{-1}, \quad (18)$$

$$M_6 = \frac{(-1)^{l_j+1}}{3} Q \left(\sum_{\substack{n_k l_k \leq F \\ n_{p'l'} > F}} - \sum_{\substack{n_k l_k > F \\ n_{p'l'} \leq F}} \right) \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ l_f & l_j & l_i \end{Bmatrix} (2V_{p'ikf}^l - W_{p'ijk}^s) d_{pk} E_{p'ikf}^{-1}. \quad (19)$$

Здесь

$$Q = NN' \sum_q e_q \begin{pmatrix} L & 1 & L' \\ M_L & q & -M_{L'} \end{pmatrix} \delta_{SS'} \delta_{M_S M_{S'}}, \quad (20)$$

V_{ijpq}^l, W_{ijpq}^s — прямые и обменные приведенные матричные элементы кулоновского взаимодействия [9]; $d_{pk} = \langle p \| r \| k \rangle$. Энергии фотонов, излучаемых при гиперсателлитных переходах, в данной работе определялись с учетом взаимодействия вакансий в начальном и конечном состояниях. Учитывались только поправки первого порядка ТВ по межэлектронному взаимодействию, определяемые диагональными кулоновскими элементами $\langle ij | U | ij \rangle$ и $\langle ij | U | jf \rangle$. С учетом этих поправок выражение для ω принимает вид

$$\omega = \omega^{\text{X}\Phi} + \langle ij | U | ij \rangle - \langle jf | U | jf \rangle = \omega^{\text{X}\Phi} + \Delta, \quad (21)$$

где Δ есть сдвиг гиперсателлитных линий относительно главных.

После выделения угловых и спиновых множителей получаем

$$\omega = \omega^{\text{X}\Phi} + (-1)^L N^2 \sum_i \begin{Bmatrix} l_i & l_j & L \\ l_j & l_i & l \end{Bmatrix} (V_{ijij}^l + (-1)^s W_{ijij}^s) + \\ + (-1)^{L'+1} N'^2 \sum_i \begin{Bmatrix} l_f & l_j & L' \\ l_j & l_f & l \end{Bmatrix} (V_{jjjj}^l + (-1)^s W_{jjjj}^s). \quad (22)$$

Отсюда видно, что каждой фиксированной паре начальных (i, j) и конечных (j, f) вакансий соответствует не одна, а несколько линий, энергетическое положение которых (внутри одной группы) зависит только от терма начального и конечного состояний.

4. Численные расчеты проведены для атомов Ne и Ar. Найдены энергии и вероятности некоторых главных и соответствующих им гиперсателлитных переходов.

Таблица 1

Энергии и вероятности переходов внутри одной оболочки

Атом	Переход	Энергия фотона в Ry	Вероятности (10^{-5} эВ)		
			$W_r^{X\Phi}$	$W_v^{X\Phi}$	W^{corr}
Ne	$2s^{-1} [^2S] \rightarrow 2p^{-1} [^2P]$	2.16	1.45	0.95	0.69
	$1s^{-1}2s^{-1} [^1S] \rightarrow 1s^{-1}2p^{-1} [^1P]$	1.82	1.45	0.95	0.75
	$1s^{-1}2s^{-1} [^3S] \rightarrow 1s^{-1}2p^{-1} [^3P]$	2.35	1.45	0.95	0.28
	$2s^{-2} [^1S] \rightarrow 2s^{-1}2p^{-1} [^1P]$	2.13	2.90	1.90	0.25
	$2s^{-1}2p^{-1} [^1P] \rightarrow 2p^{-2} [^1S]$	2.26	0.32	0.21	0.04
	$2s^{-1}2p^{-1} [^3P] \rightarrow 2p^{-2} [^3P]$	1.98	0.97	0.64	0.28
	$2s^{-1}2p^{-1} [^1P] \rightarrow 2p^{-2} [^1D]$	2.57	1.61	1.06	0.30
Ar	$3s^{-1} [^2S] \rightarrow 3p^{-1} [^2P]$	1.37	0.82	0.45	0.25
	$2s^{-1}3s^{-1} [^1S] \rightarrow 2s^{-1}3p^{-1} [^1P]$	1.63	0.82	0.45	0.24
	$2s^{-1}3s^{-1} [^3S] \rightarrow 2s^{-1}3p^{-1} [^3P]$	1.49	0.82	0.45	0.19
	$2p^{-1}3s^{-1} [^1P] \rightarrow 2p^{-1}3p^{-1} [^1S]$	1.37	0.09	0.05	0.02
	$2p^{-1}3s^{-1} [^3P] \rightarrow 2p^{-1}3p^{-1} [^3S]$	1.55	0.09	0.05	0.02
	$2p^{-1}3s^{-1} [^1P] \rightarrow 2p^{-1}3p^{-1} [^1P]$	1.71	0.09	0.05	0.10
	$2p^{-1}3s^{-1} [^3P] \rightarrow 2p^{-1}3p^{-1} [^3P]$	1.50	0.27	0.15	0.09
	$2p^{-1}3s^{-1} [^1P] \rightarrow 2p^{-1}3p^{-1} [^1D]$	1.49	0.46	0.26	0.08
	$2p^{-1}3s^{-1} [^3P] \rightarrow 2p^{-1}3p^{-1} [^3D]$	1.59	0.46	0.26	0.12
	$3s^{-1}3p^{-1} [^1P] \rightarrow 3p^{-2} [^1S]$	1.49	0.18	0.10	0.02
	$3s^{-1}3p^{-1} [^3P] \rightarrow 3p^{-2} [^3P]$	1.31	0.54	0.30	0.14
	$3s^{-1}3p^{-1} [^1P] \rightarrow 3p^{-2} [^1D]$	1.69	0.90	0.50	0.79

Примечание. После учета корреляций r - и v -формы совпадают.

Все переходы, которые были рассмотрены в данной работе, можно разделить на две группы: а) переходы внутри одной оболочки без изменения главного квантового числа; б) переходы между соседними оболочками, когда $n_j - n_i = 1$.

Рассмотрим сначала радиационные распады группы «а». В Ne изучались главный $2s^{-1} [^2S] \rightarrow 2p^{-1} [^2P] + \gamma$ и соответствующие ему гиперсателлитные переходы $2s^{-1}j^{-1} \rightarrow 2p^{-1}j^{-1} + \gamma$, в которых дополнительная вакансия j может принадлежать любой из $1s$ -, $2p$ -подоболочек. В Ar был исследован распад $3s$ -вакансии. Здесь были рассмотрены случаи, когда дырка j принадлежала $2s$ -, $2p$ -, $3p$ -подоболочкам. Результаты расчетов приведены в табл. 1. Поскольку переходы этой группы осуществляются внутри одной оболочки, то энергия излучаемого фотона относительно невелика — порядка 2—3 Ry. Из табл. 1 видно, что гиперсателлиты этой группы должны наблюдаться как со стороны низких, так и высоких энергий по отношению к характеристическим линиям.

В приближении ХФ выполняются соотношения между вероятностями главных и гиперсателлитных переходов, полученные нами в п. 2. Поэтому подробно останавливаться на результатах расчетов в нулевом порядке теории возмущений не будем. Отметим только, что при распаде s -дырок наименьшая вероятность будет наблюдаться в переходах, где орбитальный момент L' конечного состояния атома равен нулю, так как в этих случаях

$$W^{X\Phi} = \frac{a^3 \omega^3}{3} (2L' + 1) \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & L' \\ L_j & 1 & 0 \end{matrix} \right\}^2 \langle f \| d \| i \rangle^2 \times 13.6 \text{ эВ}$$

и минимальное значение действительно будет встречаться при $L' = 0$. Эта особенность распада s -дырок сохраняется и после учета корреляций.

В следующем, первом, порядке ТВ по межэлектронному взаимодействию поправки к амплитудам гиперсателлитных переходов определялись с учетом всех диаграмм рис. 2. Определенный класс диаграмм высших порядков был учтен выбором волновых функций возбужденных одноэлектронных состояний [9]. Другая часть диаграмм высших порядков может быть учтена путем изменения энергетических знаменателей. Например, при вычислении вклада диаграммы M_6 , добавление в энергетический знаменатель слагаемого $\langle fp | U | fp \rangle$

эквивалентно суммированию бесконечной совокупности графиков (рис. 3) [9]. Суммирование таких графиков означает учет изменения энергии состояния за счет взаимодействия вакансий f и p .

При изучении распада $3s^{-1}$ и $3s^{-1}j^{-1}$ состояний в Ag было принято во внимание, что вакансия $3s^{-1}$ может смешиваться с более сильными возбуждениями

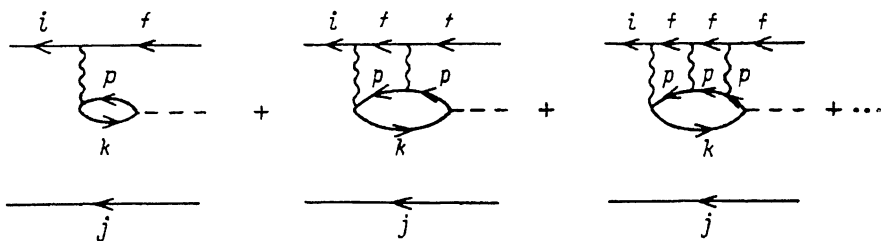


Рис. 3. Последовательность диаграмм, учитываемых введением в энергетический знаменатель амплитуды M_6 поправки $\langle j p | U | i p \rangle$.

типа две дырки и одна частица, а именно с состояниями $3p^{-2}nd(\epsilon d)$ [10]. На диаграммном языке это означает учет совокупности графиков (рис. 4), где через Σ обозначена собственно-энергетическая часть функции Грина. Суммируя их, можно показать, что вероятности главных и гиперсателлитных переходов необходимо дополнительно умножить на спектроскопический фактор F_{3s} , который характеризует вес вакансии $3s^{-1}$ в новых $\bar{3}s^{-1}$ и $\bar{3}s^{-1}j^{-1}$ состояниях. Значения F_{3s} были взяты из работы [11]. В конечных состояниях $3p^{-1}$ и $3p^{-1}j^{-1}$ ($j=2s, 2p, 3p$) примесь других конфигураций мала, поэтому спектроскопический фактор вакансии $3p$ полагался равным единице.

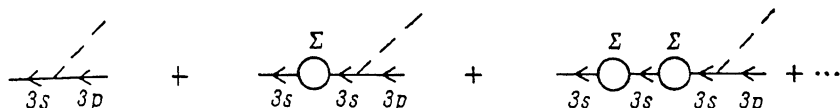


Рис. 4. Влияние спектроскопического фактора на распад $3s$ -вакансии в Ag.

Многочастичные корреляции существенно изменяют ХФ значения вероятностей распадов. В рассматриваемых переходах корреляционная амплитуда, равная сумме M_2, \dots, M_6 , как показывают расчеты, имеет знак, противоположный $M^{X\Phi} = M_1$. Поэтому учет корреляций уменьшает вероятности распада. В Ne, например, вероятность $1s^{-1}2s^{-1} [^3S] \rightarrow 1s^{-1}2p^{-1} [^3P]$ перехода уменьшается до $0.28 \cdot 10^{-5}$ эВ по сравнению с $W^{X\Phi} = 1.45 \cdot 10^{-5}$ эВ, т. е. корреляции почти в 6 раз уменьшают вероятность гиперсателлитного распада. Аналогичная картина наблюдается и в Ag.

Таким образом, радиационные распады данной группы переходов характеризуются тем, что корреляция значительно понижает их вероятности, происходит как бы «корреляционное заприраие» таких распадов. Отметим, что аналогичное поведение было ранее [9] обнаружено при изучении главных переходов, где учет корреляций в рамках метода случайных фаз с обменом вызывал уменьшение радиационного распада вакансий в 4–6 раз.

Во второй группе переходов были изучены распады однодырочных состояний $1s^{-1}$ (Ne) и $2p^{-1}$ (Ar) и соответствующие им гиперсателлитные переходы

$$\text{Ne: } 1s^{-1}j^{-1} 2s+1L \rightarrow 2p^{-1}j^{-1} 2s+1L' (1s, 2s, 2p),$$

$$\text{Ar: } 2p^{-1}j^{-1} 2s+1L \rightarrow 3s^{-1}j^{-1} 2s+1L' (2s, 2p, 3p).$$

Результаты расчетов представлены в табл. 2. Линии спектра этой группы лежат в рентгеновской области излучения. Значение Δ почти для всех рассматриваемых гиперсателлитных переходов положительно, и поэтому эти линии должны лежать выше соответствующих характеристических линий.

Т а б л и ц а 2

Энергии и вероятности переходов между соседними оболочками

Атом	Переход	Энергия фотона в Ry	Вероятности (10^{-4} эВ)		
			$W_{\Gamma}^{X\Phi}$	$W_{\Upsilon}^{X\Phi}$	W^{corr}
Ne	$1s^{-1} [^2S] \rightarrow 2p^{-1} [^2P]$	63.84	35.57	30.96	57.88
	$1s^{-2} [^1S] \rightarrow 1s^{-1}2p^{-1} [^1P]$	72.86	71.14	61.92	269.64
	$1s^{-1}2s^{-1} [^1S] \rightarrow 1s^{-1}2p^{-1} [^1P]$	64.55	35.57	30.96	80.60
	$1s^{-1}2s^{-1} [^3S] \rightarrow 1s^{-1}2p^{-1} [^3P]$	64.97	35.57	30.96	71.94
	$1s^{-1}2p^{-1} [^1P] \rightarrow 2p^{-2} [^1S]$	64.50	7.89	6.87	16.66
	$1s^{-1}2p^{-1} [^3P] \rightarrow 2p^{-2} [^3P]$	64.82	23.68	20.61	49.40
	$1s^{-1}2p^{-1} [^1P] \rightarrow 2p^{-2} [^1D]$	64.81	39.48	39.44	82.32
	Ag	$2p^{-1} [^2P] \rightarrow 3s^{-1} [^2S]$	16.59	0.213	0.185
$2s^{-1}2p^{-1} [^1P] \rightarrow 2s^{-1}3s^{-1} [^1S]$		20.64	0.213	0.185	0.741
$2s^{-1}2p^{-1} [^3P] \rightarrow 2s^{-1}3s^{-1} [^3S]$		18.68	0.213	0.185	0.477
$2p^{-2} [^1S] \rightarrow 2p^{-1}3s^{-1} [^1P]$		20.64	0.425	0.370	0.929
$2p^{-2} [^3P] \rightarrow 2p^{-1}3s^{-1} [^3P]$		19.35	0.425	0.370	1.022
$2p^{-2} [^1D] \rightarrow 2p^{-1}3s^{-1} [^1P]$		19.82	0.425	0.370	1.177
$2p^{-1}3p^{-1} [^1S] \rightarrow 3s^{-1}3p^{-1} [^1P]$		16.88	0.213	0.185	0.592
$2p^{-1}3p^{-1} [^3S] \rightarrow 3s^{-1}3p^{-1} [^3P]$		17.15	0.213	0.185	0.460
$2p^{-1}3p^{-1} [^1P] \rightarrow 3s^{-1}3p^{-1} [^1P]$		16.54	0.213	0.185	0.341
$2p^{-1}3p^{-1} [^3P] \rightarrow 3s^{-1}3p^{-1} [^3P]$		17.20	0.213	0.185	0.472
$2p^{-1}3p^{-1} [^1D] \rightarrow 3s^{-1}3p^{-1} [^1P]$		16.76	0.213	0.185	0.421
$2p^{-1}3p^{-1} [^3D] \rightarrow 3s^{-1}3p^{-1} [^3P]$		17.10	0.213	0.185	0.419

Примечание. После учета корреляций Γ - и Υ -формы совпадают.

Дополнительная вакансия j в нулевом порядке ТВ влияет на вероятность радиационного распада $1s$ -вакансии в Ne точно также, как и на любые s -дырки. В случае распада $2p$ -дырки наличие дополнительной вакансии j , как следует из формулы (7), приводит к увеличению вероятности распада в 2 раза, если вакансия j принадлежит $2p$ -подоболочке. Во всех остальных случаях вероятность гиперсателлита совпадает с вероятностью главного перехода.

Учет многоэлектронных корреляций в отличие от переходов внутри одной оболочки, где вероятности уменьшались, в рассматриваемой группе распадов приводит к увеличению вероятностей излучения фотонов, поскольку корреляционная амплитуда имеет тот же знак, что и $M^{X\Phi}$. Основные поправки в M^{corr} вносят диаграммы M_5 и M_6 . Наибольшее отличие наблюдается в переходе $1s^{-2} [^1S] \rightarrow 1s^{-1}2p^{-1} [^1P]$, где учет корреляций вызывает увеличение вероятности радиационного распада дырки $1s$ при наличии второй, дополнительной, вакансии в этой же оболочке почти в 4 раза. В остальных случаях корреляции изменяют вероятности как минимум в два раза.

5. Проведенное нами исследование показывает, что наличие дополнительной вакансии в атоме вызывает появление целого класса новых линий-сателлитов в радиационных спектрах, вероятности возникновения которых существенным образом зависят от типа распадающейся вакансии, а также от того, где образована «вакансия-наблюдатель». Показано, что вероятности гиперсателлитных переходов сравнимы, а в некоторых случаях и превосходят вероятности обычных радиационных распадов однодырочных состояний. Обнаружено, что наряду с простым механизмом излучения фотона, в котором электрон из вышележащей оболочки заполняет вакансию i , а вторая дырка выполняет роль простого «наблюдателя» (рис. 1), весьма важную роль играют более сложные процессы, в частности процессы виртуального возбуждения, в которых энергия перехода поглощается другими электронами атома. Последующее девозбуждение этих электронов вызывает излучение кванта. Учет таких процессов, т. е. многоэлектронных корреляций, значительно изменяет вероятность гиперсателлитных переходов, вызывая в одних случаях «запирание», а в других, напротив, увеличение вероятности распадов. В отдельных случаях важную роль играет также взаимодействие исходной вакансии с «дыркой-наблюдателем». Все это означает,

что процессы гиперсателлитных переходов, так же как и распады однодырочных состояний [9], могут быть существенно коллективными процессами, в которых принимают активное участие многие электроны атома.

Литература

- [1] Briand J. P., Chevallier P., Tavenien M., Rozet J. Phys. Rev. Lett., 1971, v. 27, N 5, p. 777—779.
- [2] Каразия Р. И., Кучас С. А. Лит. физ. сб., 1979, т. 19, № 4, с. 495—499.
- [3] Бриюнас В. Э., Киселюс В. С., Купляускене А. В., Купляускис Э. И. Изв. вузов. Физика, 1982, т. 25, № 8, с. 119—120.
- [4] Safronova U. I., Senashenko V. S. Phys. Lett. A, 1978, v. 66, p. 185—187.
- [5] Gavrila M., Hansen J. J. Phys. B, 1978, v. 11, N 8, p. 1353—1381.
- [6] Bhatta C. P., Folland N. O., Hein M. H. Phys. Rev., 1973, v. A8, N 2, p. 649—657.
- [7] Марч Н., Янг У., Сампантхар С. Проблема многих тел в квантовой механике. М.: Мир, 1969. 496 с.
- [8] Джадд Б. Вторичное квантование и атомная спектроскопия. М.: Мир, 1970. 136 с.
- [9] Amusia M. Ya., Cherepkov N. A. Case Studies in Atomic Physics, 1975, v. 5, p. 147—149.
- [10] Амусья М. Я. Изв. АН СССР. Сер. физ., 1984, т. 48, № 4, с. 642—650.
- [11] Amusia M. Ya., Kheifets A. S. J. Phys., 1985, v. 18, p. L679—L684.

Томский политехнический
институт им. С. М. Кирова

Поступило в Редакцию
27 апреля 1987 г.