

02

© 1991 г.

УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ДВОЙНОМ ОЖЕ-РАСПАДЕ

В. А. Килин, И. С. Ли, О. В. Ли

В рамках многочастичной теории возмущений исследовано угловое распределение электронов, испускаемых в двойном оже-распаде. Впервые получено выражение для функции угловой корреляции вылетающих электронов. Непосредственные вычисления проведены в атоме неона. При вычислении матричных элементов использовались хартри-фоковские волновые функции. Исследована зависимость функций угловой корреляции от распределения энергии между вылетающими электронами. Обсуждается вклад механизма «встряски» в рассматриваемый процесс. Показано, что угловое распределение является характеристикой, более чувствительной к выбору используемого приближения, чем полная вероятность двойного оже-распада.

Введение

В ряде работ [1-3] было показано, что весьма информативным методом изучения многоэлектронных эффектов является измерение сечения двойной фотонионизации атома с полной кинематической информацией о двух конечных электронах, регистрируемых на совпадение, — процесс (γ , $2e$). Два электрона из атома могут удалиться также в результате другого многоэлектронного процесса — двойного оже-эффекта, в котором внутренняя вакансия заполняется электроном из внешней оболочки, а высвободившаяся энергия передается двум другим электронам, совместно покидающим атом [4].

Обычный оже-эффект, в котором испускается один электрон, обусловлен кулоновским взаимодействием между двумя атомными электронами. Следовательно, процесс, в котором участвуют три электрона, может осуществляться только за счет многоэлектронных эффектов. В этом смысле двойной оже-переход является чисто многоэлектронным процессом, поэтому его изучение играет важную роль в исследовании электронных корреляций.

До настоящего времени как экспериментально, так и теоретически определялись полная вероятность двойного оже-распада и распределение энергии перехода между вылетающими электронами [4, 5]. В данной работе рассматривается вопрос об угловом распределении оже-электронов.

1. Функция угловой корреляции пары оже-электронов

В большинстве случаев время жизни внутренней вакансии достаточно велико. Поэтому можно считать, что процесс двойного оже-распада осуществляется в два последовательных этапа: сначала образуется вакансия в одной из внутренних оболочек, затем происходит распад этой вакансии с испусканием двух электронов. В этом приближении угловое распределение пары оже-электронов будет описываться двумя наборами параметров. Первые из них, называемые тензорами поляризации [6-8], характеризуют процесс образования вакансии и показывают, что состояния с различными проекциями полного углового момента могут заселяться неравномерно. Второй же набор параметров отвечает за процесс двойного оже-распада, в котором нас будет интересовать угловое распределение испускаемых оже-электронов.

Вероятность излучения одного электрона в направлении \mathbf{n}_1 , а второго в направлении \mathbf{n}_2 при использовании аппарата статистических тензоров [6-8] может быть выражена через тензор поляризации $\rho_{kq}(J, J)$ начального состояния, тензор $\varepsilon_{kq}(J, J)$ эффективности детектора, регистрирующего частицы с определенным направлением движения, а также через амплитуды $O(l_1, j_1, l_2 j_2)$ двойного оже-распада

$$\frac{dW}{d\varepsilon_1 d\mathbf{n}_1 d\mathbf{n}_2} = \sum_{\substack{kqJ_1 J'_1 \\ \{l_j\}}} O(l_1 j_1, l_2 j_2) \rho_{kq}(J, J) \varepsilon_{kq}(J, J) O^*(l'_1 j'_1, l'_2 j'_2), \quad (1)$$

где индекс $\{l_j\}$ означает суммирование по $l_1, l'_1, l_2, l'_2, j_1, j'_1, j_2, j'_2$; l и j — орбитальный и полный моменты оже-электронов; J — полный момент начального иона; $O(l_1, j_1, l_2 j_2)$ определяется соотношением

$$O(l_1 j_1, l_2 j_2) = \langle J_f ((l'_1, 1/2) j_1, (l'_2, 1/2) j_2) J_1 : J | V | J \rangle. \quad (2)$$

Здесь $V = r_{12}^{-1}$ — оператор кулоновского взаимодействия электронов. В конечном состоянии двойного оже-распада, как видно из (2), мы выбрали следующую схему сложения моментов: момент J_f трехкратного иона-остатка связывается с суммарным моментом J_1 пары вылетающих электронов. Будем рассматривать далее случай, когда ион-остаток не регистрируется, а спиновые состояния вылетающих электронов не фиксируются. Тогда выражение (1) приводится к виду

$$\begin{aligned} \frac{dW}{d\varepsilon_1 d\mathbf{n}_1 d\mathbf{n}_2} &= \frac{1}{16\pi} \sum_{kq} \hat{J}^2 \hat{J}_f^{-2} (-1)^{J+J_f+J'_1+k+1} \left\{ \begin{matrix} J_1 & J'_1 & k \\ J & J & J_f \end{matrix} \right\} \rho_{kq}(J, J) \times \\ &\times \sum_{k_1 q_1 k_2 q_2} \hat{l}_1 \hat{l}'_1 \hat{l}_2 \hat{l}'_2 \hat{j}_1 \hat{j}'_1 \hat{j}_2 \hat{j}'_2 (-1)^{j'_1+j'_2} (l_1 0 l'_1 0 | k_1 0) (l_2 0 l'_2 0 | k_2 0) \times \\ &\times \left\{ \begin{matrix} j_1 & j'_1 & k_1 \\ l'_1 & l_1 & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_2 & j'_2 & k_2 \\ l'_2 & l_2 & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & J_1 \\ j'_1 & j'_2 & J'_1 \\ k_1 & k_2 & k \end{matrix} \right\} Y_{k_1 k_2}^{k_1 k_2}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) O(l_1 j_1, l_2 j_2) O^*(l'_1 j'_1, l'_2 j'_2), \quad (3) \end{aligned}$$

где

$$\left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ d & e & f \end{matrix} \right\}, \quad \left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & j \end{matrix} \right\}$$

— $6j$ - и $9j$ -коэффициенты Вигнера, $(a \alpha b \beta | c \gamma)$ — коэффициенты Клебша—Гордана, $\hat{\lambda} = \sqrt{2\lambda+1}$;

$$Y_{kq}^{k_1 k_2}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) = \sum_{q_1 q_2} (k_1 q_1, k_2 q_2 | kq) Y_{k_1 q_1}(\mathbf{n}_1) Y_{k_2 q_2}(\mathbf{n}_2) \quad (4)$$

представляет тензорное произведение двух сферических функций.

Выражение (3) определяет вероятность распада как ориентированных, так и неориентированных ионов. Однако в случае неориентированной вакансии, т. е. когда

$$\rho_{kq}(J, J) = \delta_{k0} \delta_{q0} \hat{J}^{-1}, \quad (5)$$

выражение значительно упрощается. В частности, угловая часть $F(\theta)$ содержит зависимость только от угла θ_{12} между направлениями \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 ,

$$F(\theta_{12}) = 1 + \sum_{k>0} a_k(\varepsilon_1, \varepsilon_2) P_k(\cos \theta_{12}). \quad (6)$$

Здесь $F(\theta_{12})$ — функция угловой корреляции, нормированная следующим образом:

$$\frac{1}{16\pi^2} \int F(\theta_{12}) d\Omega_1 d\Omega_2 = 1. \quad (7)$$

Параметры $a_k(\epsilon_1, \epsilon_2)$ в (6) определяются соотношением

$$a_k(\epsilon_1, \epsilon_2) N^{-1} \sum_{(l_1 j_1)} \hat{l}_1 \cdot \hat{l}'_1 \cdot \hat{l}_2 \cdot \hat{l}'_2 \cdot \hat{j}_1 \cdot \hat{j}'_1 \cdot \hat{j}_2 \cdot \hat{j}'_2 (-1)^{j_1 + j_2 + j_1'} (l_1 0 l_1' 0 | k_1 0) (l_2 0 l_2' 0 | k_2 0) \times \\ \times \begin{Bmatrix} j_1 & j_1' & k \\ l_1 & l_1' & 1/2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_2 & j_2' & k \\ l_2 & l_2' & 1/2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_1 \\ j_2' & j_1' & k \end{Bmatrix} O(l_1 j_1, l_2 j_2) O^*(l_1' j_1', l_2' j_2'), \quad (8)$$

$$N = \sum_{l_1 j_1, l_2 j_2} |O(l_1 j_1, l_2 j_2)|^2, \quad (9)$$

$P_k(\cos \theta)$ — полиномы Лежандра; ϵ_1, ϵ_2 — энергии оже-электронов.

Если спин-орбитальное взаимодействие пренебрежимо мало (например, для легких атомов), то в выражении (8) можно провести суммирование по моментам $j_1, j_1', j_2, j_2', J_1, J_1'$ и J_f

$$a_k(\epsilon_1, \epsilon_2) = (N')^{-1} \sum_{l_1, l_1', l_2, l_2'} (-1)^{k+L} \hat{l}_1 \cdot \hat{l}'_1 \cdot \hat{l}_2 \cdot \hat{l}'_2 \cdot (l_1 0 l_1' 0 | k_1 0) (l_2 0 l_2' 0 | k_2 0) \times \\ \times \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L_1 \\ l_1' & l_2' & k \end{Bmatrix} \text{Re} (M_{l_1 l_2}^{(L_1 S_1)} \cdot M_{l_1' l_2'}^{*(L_1 S_1)}), \quad (10)$$

где L_1 и S_1 — полный орбитальный момент и спин-пары оже-электронов, а $M_{l_1 l_2}^{(L_1 S_1)}$ — матричные элементы двойного оже-распада в LS -представлении,

$$N' = \sum_{l_1 l_2} |M_{l_1 l_2}^{(L_1 S_1)}|^2. \quad (11)$$

2. Двойной оже-распад в неоне

В атоме неона распад только $1s$ -вакансии может привести к испусканию двух электронов — двойному оже-эффекту. Рассмотрим, к примеру, переход $1s^{-1} < 2s^{-2} 2p^{-1} q_1 q_2$.

Электронный спектр атома неона хорошо описывается в схеме LS -связи, спин-орбитальное взаимодействие мало и им можно пренебречь. Кроме того,

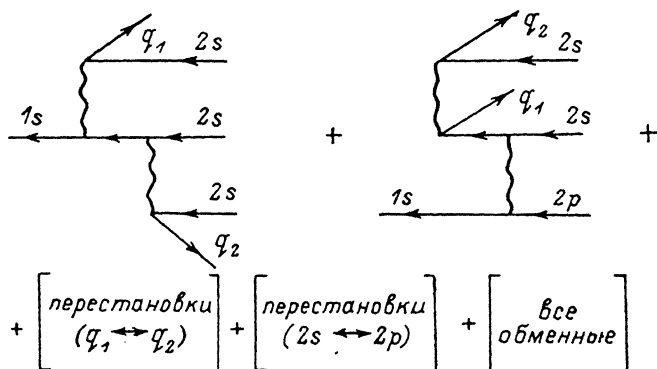


Рис. 1. Фейнмановские диаграммы двойного оже-перехода $1s^{-1} \rightarrow 2s^{-2} 2p^{-1} q_1 q_2$ в Ne в низшем неисчезающем порядке теории возмущений.

$1s$ -вакансия не поляризуется в процессе ионизации [8]. Поэтому угловое распределение оже-электронов можно описывать с помощью формул (8), (10).

Рассмотрим ограничения, которые накладываются правилами отбора двойного оже-процесса на этот переход. При распаде $1s$ -вакансии в конечное состояние $2s^{-2} 2p^{-1} q_1 q_2$ пара оже-электронов может быть связана только в два терма: 1P и 3P . Это означает, что орбитальные моменты l_1 и l_2 либо равны между собой (кроме $l_1 = l_2 = 0$) с либо отличаются друг от друга на единицу.

$$P_i = (-1)^{l_1+l_2} P_f,$$

где P_i и P_f — внутренние четности состояний начального и конечного ионов.

В переходе $1s^{-1} < 2s^{-2}p^{-1}q_1q_2$ P_i и P_f разные, поэтому l_1 и l_2 могут отличаться только на единицу.

Таким образом, в переходе $1s^{-1} < 2s^{-2}p^{-2}q_1q_2$ разрешено испускание пар оже-электронов (s, p), (p, d), (d, f) и т. д., что практически учесть невозможно. Однако в данном случае можно ограничиться вкладами достаточно малого числа каналов с небольшими значениями моментов l_1 и l_2 . Действительно, как показано ранее [5, 9], основной вклад в вероятность двойного оже-распада в неоне вносит механизм «встряски», в рамках которой в переходе $1s^{-1} < 2s^{-2}p^{-1}q_1q_2$ разрешено лишь испускание (s, p) и (p, d) пар. Поэтому вероятность перехода в основном определяется этими каналами. Они и учитывались в нашем расчете. Дополнительно проведена оценка влияния вклада (d, f) пары электронов на угловое распределение, поскольку малое изменение амплитуды может, вообще говоря, весьма заметно сказаться на параметрах a_k (ϵ_1, ϵ_2).

Парциальные амплитуды $M_{l_1 l_2}^{(L_i S_i)}$ двойного оже-перехода определялись методами многочастичной теории возмущений. В качестве базисных выбраны хартри-фоковские волновые функции, вычисленные с помощью программ [10, 11].

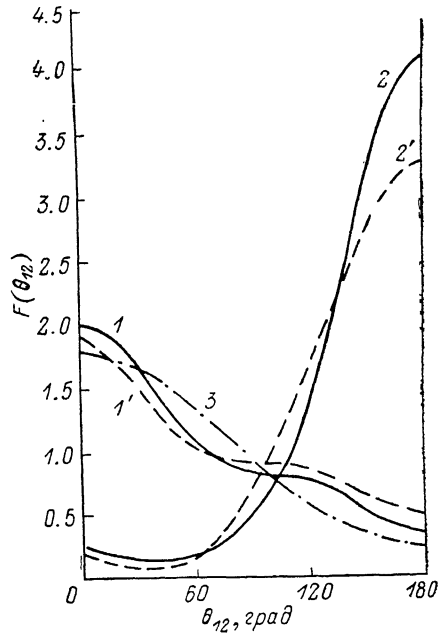


Рис. 2. Функция угловой корреляции.

1 — $\epsilon_1 \gg \epsilon_2$; 2 — $\epsilon_1 = \epsilon_2$; 1' — $\epsilon_1 \gg \epsilon_2$, без учета канала (d, f); 2' — $\epsilon_1 = \epsilon_2$, без учета канала (d, f); 3 — $\epsilon_1 \gg \epsilon_2$, модель «встряски».

Процесс рассматривался в первом исчезающем порядке теории возмущений по межэлектронному взаимодействию. Соответствующие диаграммы представлены на рис. 1. Линия со стрелкой влево (вправо) соответствует распространению дырки (электрона), волнистая линия означает кулоновское взаимодействие. Вклады диаграмм рис. 1 вычислялись по программе [12].

Энергия перехода $E_{i,f}$ определялась как разность $E_i - E_f$ самосогласованных хартри-фоковских энергий начального и конечного ионов и составляет ≈ 50.38 Ry. В двойном оже-процессе эта энергия произвольно распределяется между двумя оже-электронами $E_{i,f} = \epsilon_1 + \epsilon_2$.

Нами исследованы два предельных случая: 1) энергия одного электрона много больше энергии другого ($\epsilon_1 = 49.38$ Ry, $\epsilon_2 = 1$ Ry); 2) оба электрона имеют одинаковую энергию ($\epsilon_1 = \epsilon_2 = 25.19$ Ry)

Результаты расчета приведены в табл. 1 и 2. В табл. 1 даны относительные вклады пар электронов с различными угловыми моментами в интегральную по углу вероятность перехода. Вклад пары (d, f) электронов в вероятность незначителен и составляет всего несколько процентов, как и предполагалось.

Для коэффициентов a_k (табл. 2) выделены результаты расчета с учетом (б) и без учета (в) вклада пары (d, f). Как видим, влияние пары электронов (d, f) на угловое распределение оже-электронов в отличие от интегральной вероятности более заметно, но все же относительно мало.

На рис. 2 представлены графики функций $F(\theta)$ угловой корреляции для двух рассматриваемых случаев распределения энергии между вылетающими

Таблица 1

Относительные вклады различных пар электронов и интегральная по углу вероятность перехода $1s^{-1} \rightarrow 2s^{-2}2p^{-1}q_1q_2$ в атоме неона

(l_1, l_2)	$\epsilon_1 \gg \epsilon_2$		$\epsilon_1 = \epsilon_2$
	а	б	б
(s, p)	0.80	0.51	0.72
(p, d)	0.20	0.47	0.22
(d, f)	0.00	0.02	0.06
$W(\epsilon_1, \epsilon_2) \cdot 10^5$	2.13	2.36	0.15

Примечание. а — модель «встряски», б — теория возмущений.

Таблица 2

Коэффициенты анизотропии $\alpha_k(\epsilon_1, \epsilon_2)$ для различных соотношений энергии между оже-электронами

k	$\epsilon_1 \gg \epsilon_2$			$\epsilon_1 = \epsilon_2$	
	а	б	в	б	в
1	0.72	0.35	0.52	-1.67	-1.57
2	0.05	0.18	0.21	1.16	0.76
3	0.00	0.29	0.28	-0.39	-0.03
4	0.00	0.05	0.00	0.08	0.00
5	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00

Примечание. а — модель «встряски», б — теория возмущений, в — без учета канала (d, f) .

электронами. Степень анизотропии углового распределения оказывается довольно высокой и сильно зависит от распределения энергии перехода внутри пары оже-электронов.

На этом же рисунке приведены графики функций $F(\theta)$ без учета вклада пары электронов (d, f) (штриховые кривые $1'$ и $2'$). Качественно эти кривые правильно воспроизводят результаты более полного расчета. Однако при больших углах разлета θ_{12} разница может составлять порядка 20 %.

3. Модель «встряски»

Интересно сравнить результаты расчета, проведенного выше, с расчетом в приближении «встряски», часто используемым при качественных и количественных оценках.

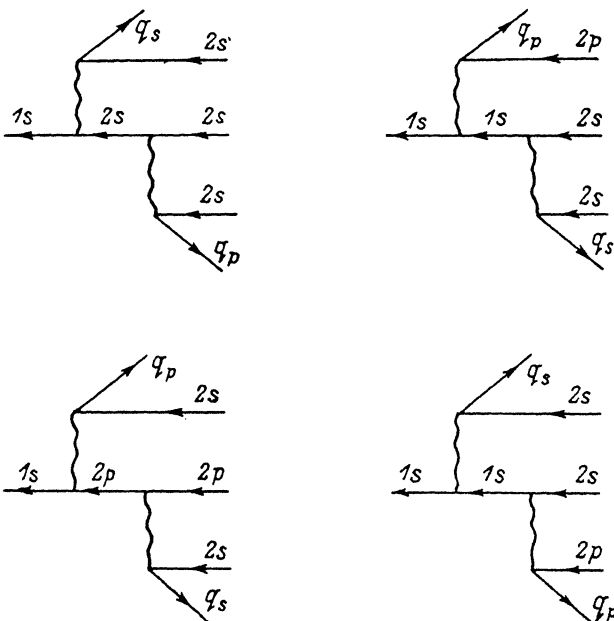


Рис. 3. Диаграммы, соответствующие модели «встряски».

В модели «встряски» [13] предполагается, что двойной оже-распад осуществляется следующим образом. На первом этапе происходит обычный оже-распад внутренней вакансии, что приводит к испусканию быстрого оже-электрона. Это вызывает внезапное изменение поля, в котором находятся остальные

атомные электроны. В результате еще один внешний электрон «стряхивается» в непрерывный спектр, образуя второй (медленный) оже-электрон.

В работе [14] показано, что среди диаграмм рис. 1 можно выделить графики, отвечающие за модель «встряски». Для этого необходимо в диаграмме рис. 1 оставить определенные промежуточные состояния. Например, для перехода $1s^{-1} \rightarrow 2s^{-2}2p^{-1}q_1q_2$ диаграммы, соответствующие механизму «встряски», представлены на рис. 3. Каждая такая диаграмма содержит кулоновский матричный элемент, отвечающий за распад $1s$ -вакансии в результате обычных оже-переходов $1s^{-1} \rightarrow 2s^{-2}q$ или $1s^{-1} \rightarrow 2s^{-1}2p^{-1}q$. Отметим, что матричных элементов, соответствующих оже-переходу $1s^{-1} \rightarrow 2p^{-2}q$, на рис. 2 нет, поскольку в таком переходе образуются две $2p$ -дырки в конечном состоянии.

В оже-распадах $1s^{-1} \rightarrow 2s^{-2}q$ и $1s^{-1} \rightarrow 2s^{-1}2p^{-1}q$ испускаются только s - и p -электроны. Следовательно, при вычислении характеристик двойного оже-распада в модели «встряски» учитываются только пары оже-электронов (s, p) и (p, d). Вкладом остальных пар пренебрегается. Из физических соображений также ясно, что модель «встряски» имеет смысл применять при $\epsilon_1 \ll \epsilon_2$, т. е. когда результатом процесса является испускание сначала быстрого, а затем медленного электронов.

Результаты расчета, выполненного в модели «встряски», приведены в табл. 1, 2 и на рис. 2. Интегральная по углу вероятность «встряски» получается близкой ($\sim 90\%$) к суммарному вкладу всех диаграмм рис. 1. Относительные вклады различных пар электронов в интегральную вероятность оказываются разными в модели «встряски» и теории возмущений, что приводит к предсказанию разного вида угловых распределений оже-электронов. Например, коэффициент a_3 в модели «встряски» в отличие от более полного расчета строго равен нулю. Это обстоятельство связано с пренебрежением в этой модели амплитудами, в которых быстрый оже-электрон имеет орбитальный момент, равный двум.

Т. о., мы показали, что даже при распаде неполяризованной вакансии степень угловой анизотропии электронов, испускаемых в двойном оже-распаде, оказывается весьма высокой и самым существенным образом зависит от распределения энергии внутри пары вылетающих электронов, также что угловое распределение является характеристикой, значительно более чувствительной к выбору используемого приближения, чем полная вероятность перехода.

В заключение авторы выражают признательность М. Я. Амусье, Н. М. Кабачнику и В. Г. Неудачину за полезное обсуждение настоящей работы.

Список литературы

- [1] Smirnov Yu. F., Pavlichenkov A. V., Levin V. G., Neudachin V. G. // J. Phys. B. 1978. Vol. 11. P. 3587—3601.
- [2] Levin V. G., Neudachin V. G., Pavlichenkov A. V., Smirnov Yu. F. // J. Phys. B. 1984. Vol. 17. P. 1525—1536.
- [3] Judin N. P., Pavlichenkov A. V., Neudachin V. G. // Z. Phys. A. 1985. Vol. 320. P. 565—573.
- [4] Carlson T. A., Krause M. O. // Phys. Rev. Lett. 1965. Vol. 14. N 11. P. 390—392.
- [5] Амусья М. Я., Кулин В. А., Ли И. С. // Тез. докл. IX Всесоюз. конф. по физике электронных и атомных столкновений. Рига, 1984. С. 8.
- [6] Фергюсон А. Методы угловых корреляций в гамма-спектроскопии. М.: Атомиздат, 1969. 256 с.
- [7] Блум К. Теория матрицы плотности и некоторые ее приложения. М.: Мир, 1982. 248 с.
- [8] Теоретический практикум по ядерной и атомной физике / Под ред. В. В. Балашова. М.: Энергоатомиздат, 1984. 176 с.
- [9] Варшавский Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975. 438 с.
- [10] Чернышева Л. В., Черепков Н. А., Радоевич В. Препринт ФТИ им. А. Ф. Иоффе АН СССР. № 486. Л., 1975. 38 с.
- [11] Чернышева Л. В., Черепков Н. А., Радоевич В. Препринт ФТИ им. А. Ф. Иоффе АН СССР. № 487. Л., 1975. 35 с.
- [12] Чернышева Л. В., Амусья М. Я., Кулин В. А., Ли И. С. Препринт ФТИ им. А. Ф. Иоффе АН СССР. № 944. Л., 1985. 25 с.
- [13] Матвеев В. И., Парилис Э. С. // УФН. 1982. Т. 138. № 4. С. 573—602.
- [14] Кулин В. А., Ли И. С. // Изв. вузов. Физика. 1989. № 7. С. 78—82.