

Институт проблем
технологии микроэлектроники
и особочистых материалов
АН СССР, Черноголовка

Поступило в Редакцию
28 марта 1990 г.

Письма в ЖТФ, том 16, вып. 22

26 ноября 1990 г.

01; 02

© 1990

АНОМАЛЬНОЕ ПОВЕДЕНИЕ УГЛОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В РЕЗОНАНСНЫХ ОЖЕ РАСПАДАХ

М.Я. А м у с ь я, В.А. К и л и н,
И.С. Л и

Недавно в работах [1, 2] было обнаружено необычное поведение углового распределения электронов, испускаемых в резонансных оже переходах (РОП) в атомах Ar , Kr и Xe . Оказалось, что при распаде резонансно возбужденных $2p^{-1} 4s$ (Ar), $3d^{-1} 5p$ (Kr) и $4d^{-1} 6p$ (Xe) состояний (возбуждение производилось линейно-поляризованными фотонами) практически не наблюдаются электроны, вылетающие в направлениях, параллельных или антипараллельных направлению пучка налетающих фотонов. Следствием такого „аномального“ поведения углового распределения электронов является то, что в ряде РОП параметры угловой анизотропии β оказываются порядка -1 . Например, в $2p^{-1} 4s \rightarrow 3p^{-2} 4s + q$ переходе (Ar) $\beta = -0.69$ [2].

В данной работе впервые показано, что при использовании линейно-поляризованных фотонов для возбуждения начального состояния параметры угловой анизотропии некоторых РОП должны равняться строго минус единице. В схеме $L S$ -связи полученный нами результат оказывается не зависящим от динамики Оже распада, т.е. от амплитуды РОП.

Начальное состояние в РОП содержит одну вакансию (дырку) во внутренней оболочке и один электрон на дискретном уровне. Непосредственное участие в Оже распаде принимает только внутренняя вакансия, которая заполняется электроном одной из внешних оболочек, и освободившаяся энергия уносится другим электроном. Электрон на дискретном уровне при этом остается в прежнем состоянии. Таким образом, конечное состояние в РОП содержит две вакансии и два электрона - в дискретном и непрерывном спектрах. В легких

и средних атомах такие состояния, также как и начальное, могут быть описаны в схеме LS -связи [3]. Далее учтем, что тонкая структура Оже линий в эксперименте не наблюдается. В этом случае можно пренебречь спин-орбитальным взаимодействием. В результате состояния Оже электронов будут характеризоваться не полным, а орбитальным моментом l . При этих условиях угловое распределение Оже электронов будет определяться выражением

$$W(\theta) = \frac{W_0}{4\pi} (1 + \beta \cdot P_2(\cos \theta)), \quad (1)$$

где W_0 - общая вероятность излучения Оже электронов, $P_2(\cos \theta)$ полином Лежандра, угол θ отсчитывается от направления пучка падающих фотонов. Параметр асимметрии углового распределения равен произведению выстроенности A_{20} начального резонансно-возбужденного состояния и коэффициента углового распределения α_2 ,

$$\beta = A_{20} \cdot \alpha_2. \quad (2)$$

При использовании линейно-поляризованных фотонов для возбуждения начального частично-дырочного состояния выстроенность A_{20} постоянна и равна $-(2)^{-1/2}$. Это достаточно легко показать, однако мы в этой работе этим заниматься не будем. Вторая величина, входящая в β , в общем случае содержит зависимость от амплитуды M_l резонансного Оже распада и определяется выражением

$$\alpha_2 = (-1)^{L_i + L_f} \hat{L}_i \sum_{l \leq l'} (l_0 l' 0 | 20) \begin{Bmatrix} L_i & L_i & 2 \\ l' & l & L_f \end{Bmatrix} \times \quad (3)$$

$$\times (2 - \delta_{ll'}) \operatorname{Re} (M_l M_{l'}^*) \left| \sum_l M_l \right|^2.$$

Здесь L_i и L_f - полные орбитальные моменты начального и конечного ионов, $(\alpha \alpha \beta \beta | c \gamma^*)$ - коэффициенты Клебша-Гордана, $\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{Bmatrix} 6j$ - коэффициент Вигнера, $\hat{\lambda} = (2\lambda + 1)^{1/2}$.

Отметим одно важное для дальнейшего обстоятельство. В случаях, когда возможно излучение электрона лишь с одним значением орбитального момента (одноканальные РОП) амплитуды Оже переходов в числителе и знаменателе выражения (3) сокращаются и угловое распределение Оже электронов оказывается не зависящим от динамики Оже распада.

Вычисление амплитуды РОП производится в рамках приближения Хартри-Фока, в котором M_l определяется выражением

$$M_l = (-1)^{L_f + S_f + l_i + l_n + l_{f_1} + 1/2} \hat{L}_i \cdot \hat{S}_i \cdot \hat{L}_f \cdot \hat{S}_f \cdot \begin{Bmatrix} l_i & l_i & l_q \\ l_{f_2} & l & l_{f_1} \end{Bmatrix} \times$$

$$\begin{Bmatrix} L_n & L_i & L \\ L_q & L_f & L_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1/2 & 1/2 & S \\ 1/2 & S_f & S_1 \end{Bmatrix} \left[(-1)^{S_1} V_{i q f_1 f_2}^{(L)} + W_{i q f_1 f_2}^{(L)} \right]. \quad (4)$$

Здесь L_i , L_n и L_{f_1} , L_{f_2} - орбитальные моменты начальной дырки, возбужденного электрона n и конечных вакансий f_1 , f_2 . L_1 и S_1 - суммарный орбитальный и спиновый моменты двух конечных вакансий, $V_{i q f_1 f_2}^{(L)}$ и $W_{i q f_1 f_2}^{(L)}$ - «прямой» и «обменный»

приведенные матричные элементы кулоновского взаимодействия электронов, определенные обычным образом [4].

Рассмотрим распад синглетного $2p^{-1}4s$ состояния в Ar , а именно, переход $2p^{-1}4s \rightarrow 3p^{-2}4s + q$. Правилами отбора разрешены три различных Оже распада:

- а) $2p^{-1}4s [^1P] \rightarrow 3p^{-2} [^1S] 4s [^2S] q p [^1P]$,
- б) $2p^{-1}4s [^1P] \rightarrow 3p^{-2} [^3P] 4s [^2P] q p [^1P]$,
- в) $2p^{-1}4s [^1P] \rightarrow 3p^{-2} [^1D] 4s [^2D] (q p + q f) [^1P]$.

Первые два перехода являются одноканальными - возможно лишь излучение р-электронов. Поэтому α_2 определяется весьма просто. В первом переходе $\alpha_2 = -(2)^{1/2}$, во втором $\alpha_2 = (2)^{-1/2}$. Соответствующие значения параметра β равны 2 и -1. Отрицательный знак β во втором случае обусловлен отрицательным значением выстроенности начального состояния. В случае использования других квантов для возбуждения начального состояния, например неполяризованного света изменится выстроенность начального состояния, а вместе с ней и β , хотя следует отметить, что коэффициент α_2 при этом останется неизменным. Следовательно, наблюдаемые в эксперименте отрицательные значения β и обусловленные этим особенности углового распределения электронов, испускаемых в РОП, вызваны, во-первых, использованием линейно-поляризованных фотонов для возбуждения начального состояния и, во-вторых, тем, что коэффициент α_2 в некоторых РОП оказывается равным $(2)^{-1/2}$. В соответствии с этим необходимо искать такие переходы, у которых α_2 равняется именно этому значению. В этих случаях угловое распределение электронов будет иметь вышеуказанные особенности. Так, например, при распаде $3d^{-1}5p$ состояния в Kr два перехода имеют значения α_2 , равные $(2)^{-1/2}$. Это переходы $3d^{-1}5p \rightarrow 4p^{-2} [^3P] 5p [^2D] q d [^1P]$ и $3d^{-1}5p \rightarrow 4p^{-2} [^1D] 5p [^2D] q d [^1P]$. Следовательно, здесь параметры β равны минус единице.

Нами найдены значения α_2 и β и в третьем переходе в Ar , где возможно излучение как р-, так и f-электронов. Вычисления проводились в базисе хартри-фокковских волновых функций. Мы получили следующие значения: $\alpha_2 = -1.23$, $\beta = 1.74$. При учете многоэлектронных корреляций эти значения изменяются. Однако следует

подчеркнуть, что в одноканальных случаях учет корреляций не вызывает изменений α_2 и β , так как количество каналов при этом остается неизменным. Изменения возможны лишь при переходе к другой схеме связи. Последнее обстоятельство может служить весьма хорошим критерием применимости той или иной схемы связи для описания сложных возбужденных состояний.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Carlson T.A., Mullins D.R., Beall C.E., Yates B.W., Taylor J.W., Lindle D.W., Pullen B.P., and Grimm F.A. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. P. 1382.
- [2] Carlson T.A., Mullins D.R., Beall C.E., Yates B.W., Taylor J.W., Lindle D.W., Pullen B.P., and Grimm F.A. // Phys. Rev. 1989. A 36. P. 1170.
- [3] Aksela H. and Aksela S. // J. Phys. B. At. Mol. Phys. 1974. V. 7. P. 1262.
- [4] Амусья М.Я. Атомный фотоэффект. М.: Наука, 1987.

Поступило в Редакцию
19 февраля 1990 г.