

САТЕЛЛИТНЫЕ ОЖЕ-ПЕРЕХОДЫ В $KrII$ Килин В.А.¹, Килин Р.Ю.¹¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет (634050, г. Томск, проспект Ленина, дом 30), e-mail: vak@tpu.ru

В работе представлены результаты исследования возможности реализации так называемых спутниковых Оже-переходов, в которых, наряду с испусканием одного электрона, происходит, благодаря корреляционным взаимодействиям, возбуждение второго на дискретный ионный уровень, что уменьшает энергию Оже-электрона и приводит к появлению дополнительных линий в Оже-спектрах. Общие формулы для расчета вероятности переходов получены в рамках низшего не исчезающего порядка теории возмущений в приближении LS-связи. Получены правила отбора, на основании которых установлено, что в спутниковых Оже-переходах возможны возбуждения пар электронов (nl, ql') с неограниченно большими значениями орбитального момента. Конкретные вычисления выполнены в базисе ХФ волновых функций для более 450 переходов вида $3d^{-1}[^2D] \rightarrow 4s^{-1}4p^{-2}[^4P, ^2D] nl[LS] + ql'$ и $3d^{-1}[^2D] \rightarrow 4p^{-3}[^4S, ^2P, ^2D] nl[LS] + ql'$ в Kr . Установлено, что наиболее вероятными являются переходы в состояния $4s^{-1}4p^{-2}[^2D]4d[^1S]$, $4p^{-3}[^2D]4f[^1P]$, $4p^{-3}[^2P]4f[^1D]$ и $4p^{-3}[^2D]4f[^3P]$. Наибольший вклад в полную ширину дают переходы в состояния $4s^{-1}4p^{-2}[^2D]$ и $4p^{-3}[^2D]$ конечного иона того же терма, что и начальное состояние $3d^{-1}[^2D]$. Наименее вероятны переходы в квартетные состояния ионного остова $4s^{-1}4p^{-2}[^4P]$ и $4p^{-3}[^4S]$, когда оба возбуждаемых электрона, nl и ql' , имеют параллельные спины.

Ключевые слова: Оже-переход, корреляционное взаимодействие, теория возмущений, спутниковые переходы и спектры, правила отбора.

SATELLITE AUGER TRANSITION IN $KrII$ Kilin V.A.¹, Kilin R.Y.¹¹National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia (634050, Tomsk, Lenin av., 30), e-mail: vak@tpu.ru

The results of studying the feasibility of so-called satellite Auger transitions, in which, along with the emission of an electron, the second one could be excited on a discrete ionic level due to the correlative interaction are presented. This excitation reduces the Auger electron energy that leads to the appearance of additional lines in the Auger spectra. General formulas for the calculation of the transition probabilities are obtained in the framework of the lowest non-vanishing order of the perturbation theory and the LS-coupling approximation. The derived transition selection rules show that various electron pairs (nl, ql') of infinitely large values of orbital angular momentum could be excited in such satellite Auger transitions. Concrete results are obtained with the use of HF wave functions basis for more than 450 transitions such as $3d^{-1}[^2D] \rightarrow 4s^{-1}4p^{-2}[^4P, ^2D] nl[LS] + ql'$ and $3d^{-1}[^2D] \rightarrow 4p^{-3}[^4S, ^2P, ^2D] nl[LS] + ql'$ in Kr . It is found that the most probable are the transitions to $4s^{-1}4p^{-2}[^2D]4d[^1S]$, $4p^{-3}[^2D]4f[^1P]$, $4p^{-3}[^2P]4f[^1D]$ and $4p^{-3}[^2D]4f[^3P]$ states. The largest contributions to the initial state total width arise from the transitions ending in $4s^{-1}4p^{-2}[^2D]$ and $4p^{-3}[^2D]$ states of the term of the initial state $3d^{-1}[^2D]$ one. The least probable are found the transition to the quartet states $4s^{-1}4p^{-2}[^4P]$ and $4p^{-3}[^4S]$ of ionic core, when both excited electrons nl and ql' have parallel spins.

Keywords: Auger transition, correlative interaction, perturbation theory, satellite transitions and spectra, selection rules.

Рассматриваемые в работе спутниковые Оже-переходы (СОП) весьма близки по характеру к двойным Оже-переходам (ДОП) [1,2], в которых при автоионизационном распаде внутренней атомной вакансии испускается сразу два электрона с непрерывно распределенной между ними энергией перехода. В СОП же лишь один электрон q вполне определенной энергии излучается в непрерывный спектр, а второй возбуждается на дискретный уровень nl двукратного иона. Таким образом, конечное состояние характеризуется тремя вакансиями f_1, f_2, f_3 , электроном на возбужденном дискретном уровне nl и Оже-электроном q в непрерывном спектре, рис 1. В таком переходе участвуют, как

минимум, три атомных электрона. Поскольку часть энергии перехода затрачивается на

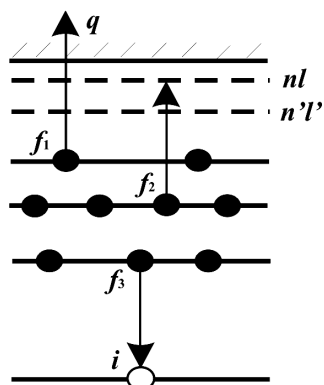


Рис. 1. Сателлитный Оже-переход

возбуждение второго электрона на уровень nl , то кинетическая энергия Оже-электрона уменьшается на соответствующую величину, что приводит к появлению дополнительных (сателлитных) линий в Оже-спектрах. Последующий распад таких резонансов приводит к появлению дополнительных линий [4,5] в спектрах и структур в сечениях.

Рассчитаны энергии и вероятности более 450 СОП вида



Характеристики этих переходов полезны при интерпретации

экспериментальных спектров флюоресценции и сечений фотоионизации, полученных методом ФИФС [4] при фотовозбуждении Kr в области порога ионизации его $3d$ -оболочки.

Возбуждение короткоживущих резонансов типа $4s^{-1}4p^{-2}nl$ и $4p^{-3}nl$ одним фотоном (по сути, двойная фотоионизация с возбуждением третьего электрона на дискретный уровень) может происходить напрямую за счет корреляционных взаимодействий. Однако при этом можно выделить такие реальные промежуточные состояния, разрешенные законом сохранения энергии и правилами отбора, через которые наиболее вероятно идут последовательно процессы фотовозбуждения и автоионизации. Таким образом, имеет смысл исследовать двухступенчатую траекторию, первая ступень которой есть фотоионизация $3d$ -оболочки, а вторая – СОП указанного вида.

Теоретическая основа

Вероятность безызлучательного перехода между начальным Ψ_i и конечным Ψ_f состоянием с энергиями E_i и E_f в первом порядке ТВ по межэлектронному взаимодействию \hat{V} определяется известным выражением:

$$\Gamma_{i,f} = 2\pi \left| \langle \Phi_f | \hat{V} | \Phi_i \rangle \right|^2 \delta(E_i - E_f).$$

На этой основе в рамках методического подхода [1] с использованием нестационарной многочастичной теории возмущений (ТВ) в формализме вторичного квантования построена теория двойного Оже-эффекта [2,3], физический механизм которого аналогичен таковому для рассматриваемых СОП. Использован базис нерелятивистских хартри-фоковских волновых функций (ВФ), поэтому взаимодействие \hat{V} равно остаточному взаимодействию $\hat{V} = \hat{H} - \hat{H}^{x\phi}$.

При построении ВФ конечных состояний определенного термина использована следующая схема сложения моментов: $|f_1 f_2 [L_1 S_1] f_3 [L_2 S_2], nl q [L_q S_q] L' S' M'_L M'_S \rangle$ (в приближении LS-связи). В низшем неисчезающем порядке ТВ полная амплитуда СОП может быть

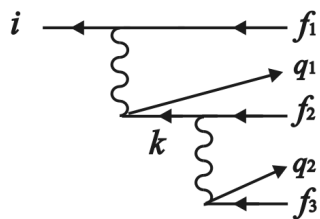


Рис. 2. Диаграмма Фейнмана для СОП

представлена суммой девяти парциальных амплитуд [2,3], фейнмановская диаграмма одной из которых представлена на рис. 2. Угловые и спиновые множители парциальных амплитуд содержат $3nj$ -коэффициенты и δ -символы Кронекера. Условия, при которых они отличны от нуля, и четность состояний определяют правила отбора для рассматриваемых переходов.

Основные результаты

Проведен расчет вероятностей и энергий более 450 СОП вида $3d^1[{}^2D] \rightarrow 4s^{-1}4p^{-2}[{}^4P, {}^2D] nl[LS] + q$ и $3d^1[{}^2D] \rightarrow 4p^{-3}[{}^4S, {}^2P, {}^2D] nl[LS] + q$ в Kr со значениями главного квантового числа $n=1,2,\dots,9$. Поскольку с ростом n и l вероятность переходов значительно убывает, мы ограничились значениями орбитального момента $l=0,1,2,3$. Результаты расчета приведены в таблицах 1-5. Для сокращения объема таблиц данные по ряду переходов с $\Gamma < 1.0$ (мкэВ) опущены, но включены в суммарные значения ширины. Приведенные энергии ε_q большинства переходов определены на основе экспериментальных данных [7,8].

Таблица 1

Энергия ε (эВ) и ширина Γ (мкэВ) СОП $3d^1[{}^2D] \rightarrow 4s^{-1}4p^{-2}[{}^2D] nl[LS] + q$.

$nl [LS]$	ε (эВ)	Γ (мкэВ)	$8p$	4.422	0.683	$4d[{}^3D]$	17.999	5.698
$5s[{}^1D]$	16.944	3.656	$5p[{}^3D]$	14.309	4.737	$5d$	9.746	7.404
$6s$	9.644	1.306	$6p$	8.507	3.814	$6d$	6.498	4.581
$7s$	6.471	0.663	$7p$	5.885	2.676	$7d$	4.804	3.040
$5s[{}^3D]$	18.067	12.105	$8p$	4.459	1.929	$8d$	3.811	2.106
$6s$	9.989	5.336	$9p$	3.596	1.410	$9d$	3.177	1.514
$7s$	6.625	2.838	$5p[{}^1F]$	14.471	13.805	$4d[{}^1S]$	16.677	462.430
$8s$	4.883	1.722	$6p$	8.567	4.912	$5d$	9.544	95.087
$9s$	3.860	1.118	$7p$	5.915	2.376	$6d$	6.415	30.466
$5p[{}^1P]$	13.838	16.897	$8p$	4.475	1.352	$7d$	4.770	24.729
$6p$	8.392	11.273	$9p$	3.607	0.859	$8d$	3.792	10.185
$7p$	5.839	6.889	$5p[{}^3F]$	14.845	15.690	$9d$	3.166	3.006
$8p$	4.433	4.504	$6p$	8.704	7.104	$4d[{}^3S]$	17.956	32.755
$9p$	3.585	3.077	$7p$	5.980	3.999	$5d$	9.907	25.235
$5p[{}^3P]$	14.598	7.442	$8p$	4.512	2.528	$6d$	6.569	13.663
$6p$	8.633	7.742	$9p$	3.629	1.721	$7d$	4.851	8.427
$7p$	5.949	5.555	$4d[{}^1D]$	16.594	21.678	$8d$	3.841	5.524
$8p$	4.496	4.043	$5d$	9.427	12.171	$9d$	3.196	3.840
$9p$	3.619	2.947	$6d$	6.349	7.009	$4d[{}^1P]$	16.594	39.089
$5p[{}^1D]$	13.963	5.838	$7d$	4.731	4.417	$5d$	9.489	22.780
$6p$	8.373	2.215	$8d$	3.766	2.906	$6d$	6.384	11.248
$7p$	5.821	1.137	$9d$	3.147	2.019	$7d$	4.751	6.557

8d	3.781	4.138	4d ^[3G]	19.879	4.878	9f	2.716	1.252
9d	3.158	2.835	5d	10.091	4.305	4f ^[1F]	8.812	4.510
4d ^[3P]	17.917	33.051	6d	6.630	3.177	5f	6.096	1.435
5d	9.832	26.097	7d	4.879	2.284	6f	4.592	0.685
6d	6.531	14.657	8d	3.856	1.662	7f	3.690	0.380
7d	4.830	9.172	9d	3.206	1.242	8f	3.100	0.235
8d	3.828	6.108	4f ^[1P]	9.184	175.904	9f	2.694	0.156
9d	3.187	4.318	5f	6.271	62.843	4f ^[3F]	8.847	8.194
4d ^[1F]	16.992	6.520	6f	4.689	24.895	5f	6.128	2.748
5d	9.470	4.762	7f	3.738	10.535	6f	4.615	1.463
6d	6.362	3.279	8f	3.139	4.075	7f	3.706	0.879
7d	4.735	2.285	9f	2.721	1.130	8f	3.110	0.567
8d	3.770	1.616	4f ^[3P]	9.237	95.985	9f	2.702	0.390
9d	3.151	1.183	5f	6.313	32.421	4f ^[1G]	8.782	0.184
4d ^[3F]	18.505	8.752	6f	4.716	15.626	5f	6.078	0.119
5d	9.768	7.880	8f	3.151	7.204	6f	4.588	0.078
6d	6.500	5.346	9f	2.731	4.784	4f ^[3G]	8.820	0.187
7d	4.804	3.725	4f ^[1D]	8.984	3.599	5f	6.112	0.125
8d	3.813	2.653	5f	6.177	1.750	6f	4.613	0.083
9d	3.176	1.944	6f	4.638	1.010	4f ^[1H]	9.084	0.031
4d ^[1G]	18.237	30.034	7f	3.706	0.637	5f	6.240	0.011
5d	9.795	18.033	4f ^[3D]	9.027	26.851	4f ^[3H]	9.150	1.647
6d	6.505	11.273	5f	6.215	8.265	5f	6.275	1.130
7d	4.813	7.491	6f	4.663	4.559	6f	4.712	0.768
8d	3.815	5.168	7f	3.735	2.762	Сумма		1807.26
9d	3.181	3.710	8f	3.129	1.823			

Таблица

Энергия ε (эВ) и ширина Γ (мкэВ) СОП $3d^1[{}^2D] \rightarrow 4s^{-1}4p^{-2}[{}^4P] nl[LS] + q$.

nl [LS]	ε (eV)	Γ (мкэВ)	5d	11.892	1.287	6f	7.418	9.894
5s ^[3P]	19.860	3.877	6d	9.037	0.761	7f	6.515	4.156
6s	12.507	1.348	4d ^[3P]	18.332	16.352	8f	5.938	2.304
7s	9.316	0.653	5d	11.991	5.362	9f	5.531	1.384
5p ^[3P]	13.287	14.785	6d	9.077	2.577	4f ^[3F]	3.675	4.598
6p	10.108	2.370	7d	7.508	1.489	5f	9.025	1.104
7p	8.194	0.722	4d ^[3F]	20.134	0.695	6f	7.479	0.344
5p ^[3D]	17.112	0.823	5d	12.431	0.424	4f ^[3G]	11.729	0.127
6p	11.338	0.390	6d	9.262	0.279	5f	8.980	0.084
7p	8.715	0.263	4f ^[3D]	11.612	111.864	Сумма		222.12
4d ^[3D]	13.545	3.582	5f	8.910	22.497			

Таблица 3

Энергия ε (эВ) и ширина Γ (мкэВ) СОП $3d^1[{}^2D] \rightarrow 4p^{-3}[{}^2D] nl[LS] + q$

nl [LS]	ε (eV)	Γ (мкэВ)	6s	26.948	0.443	8p	25.214	1.408
5s ^[1D]	34.767	10.186	7s	24.241	0.301	9p	24.538	0.883
6s	26.673	1.785	5p ^[1D]	30.799	14.028	5p ^[3D]	31.904	16.953
7s	23.787	0.806	6p	27.913	5.099	6p	25.840	6.584
5s ^[3D]	35.594	0.441	7p	26.245	2.475	7p	23.136	3.384

8p	21.680	1.981	9d	21.039	1.614	4f[¹ P]	23.139	785.580
9p	20.803	1.260	4d[³ D]	32.748	1.206	5f	20.082	108.346
5p[¹ P]	31.888	71.090	5d	26.372	0.637	6f	18.543	52.307
6p	25.861	13.506	6d	23.098	0.386	7f	17.612	29.482
7p	23.167	5.723	7d	21.401	0.252	8f	17.009	14.336
8p	21.715	3.100	4d[¹ F]	31.619	3.105	9f	16.596	6.140
9p	20.839	1.906	5d	25.850	1.457	4f[³ P]	22.796	268.525
5p[³ P]	31.354	18.370	6d	23.078	0.851	5f	20.029	53.449
6p	25.789	7.935	7d	21.561	0.541	6f	18.509	20.287
7p	23.223	4.163	4d[³ F]	36.735	4.011	7f	17.590	9.189
8p	21.816	2.473	5d	27.315	2.316	8f	16.995	3.856
9p	20.963	1.594	6d	23.925	1.411	9f	16.585	1.925
5p[¹ F]	31.783	11.870	7d	22.190	0.920	4f[¹ F]	22.739	5.774
6p	25.844	5.055	4d[¹ G]	35.766	3.415	5f	19.987	2.258
7p	23.176	2.661	5d	24.543	2.801	6f	18.482	1.324
8p	21.735	1.579	6d	21.242	2.101	7f	17.571	0.835
9p	20.864	1.014	7d	19.539	1.553	8f	16.981	0.564
5p[³ F]	31.859	0.889	4d[³ G]	27.024	0.536	4f[³ F]	23.025	1.847
6p	25.850	0.443	5d	25.123	0.432	5f	20.085	1.030
4d[¹ P]	32.618	0.841	6d	23.677	0.349	6f	18.544	0.615
5d	24.782	0.710	7d	21.954	0.264	7f	17.614	0.396
6d	21.576	0.522	4f[¹ D]	22.792	16.159	4f[¹ G]	22.736	0.124
7d	19.904	0.377	5f	20.026	5.287	5f	19.985	0.010
4d[³ P]	32.933	15.092	6f	18.508	2.515	4f[³ G]	21.989	6.124
5d	26.451	1.343	7f	17.589	1.408	5f	20.104	1.713
6d	23.336	0.571	8f	16.993	0.877	6f	18.555	0.999
4d[¹ D]	31.946	17.568	4f[³ D]	22.979	8.510	7f	17.620	0.628
5d	27.024	6.766	5f	20.053	3.746	8f	17.015	0.422
6d	24.140	4.405	6f	18.525	1.958	9f	16.995	0.284
7d	22.580	3.119	7f	17.600	1.154	Сумма		1734.65
8d	21.644	2.193	8f	17.001	0.739			

Таблица 4

Энергия ε (эВ) и ширина Γ (мкэВ) СОП $3d^{-1}[^2D] \rightarrow 4p^{-3}[^2P] nl[LS] + q$

$nl [LS]$	ε (эВ)	Γ (мкэВ)	6p	23.984	5.800	6p	24.315	0.578
5s[¹ P]	33.482	3.555	7p	21.384	3.244	7p	21.602	0.316
6s	24.654	0.728	8p	19.973	1.965	5p[¹ P]	29.638	0.417
7s	22.492	0.370	9p	19.116	1.278	6p	23.640	0.212
5s[³ P]	33.717	0.464	5p[³ D]	30.056	13.760	7p	20.953	0.273
6s	24.927	0.388	6p	24.024	6.332	5p[³ P]	29.741	22.372
7s	22.346	0.282	7p	21.328	3.712	6p	23.950	9.554
8s	20.610	0.208	8p	19.870	2.271	7p	21.310	5.679
9s	19.588	0.154	9p	18.995	1.482	8p	19.883	3.375
5p[¹ D]	29.655	13.608	5p[³ S]	30.402	1.279	9p	19.017	2.168

4d ^[1P]	30.147	20.831	6d	23.305	1.785	6f	20.295	9.603
5d	24.486	8.000	7d	21.684	1.273	7f	19.366	5.366
6d	21.746	4.603	8d	20.722	0.932	8f	18.763	3.337
7d	20.240	2.848	4d ^[3F]	34.272	3.901	9f	18.352	2.240
8d	19.329	1.878	5d	24.993	0.422	4f ^[3F]	26.443	28.683
9d	18.739	1.306	6d	21.621	0.293	5f	21.821	7.434
4d ^[3P]	34.260	3.571	7d	19.889	0.221	6f	20.287	3.623
5d	25.486	0.324	4f ^[1D]	24.995	131.121	7f	19.361	2.065
6d	22.163	0.578	5f	21.745	33.072	8f	18.761	1.296
7d	20.446	0.364	6f	20.237	14.424	9f	18.347	0.873
4d ^[1D]	35.441	24.914	7f	19.329	5.621	4f ^[1G]	24.541	26.073
5d	26.852	1.141	8f	18.735	2.505	5f	21.781	2.589
6d	23.554	0.578	9f	18.331	0.318	6f	20.260	1.146
7d	21.846	0.383	4f ^[3D]	25.833	84.708	7f	19.343	0.623
4d ^[3D]	34.492	8.692	5f	21.847	14.628	4f ^[3G]	24.344	28.367
5d	26.620	0.695	6f	20.302	7.078	5f	21.862	2.399
6d	23.408	0.381	8f	18.767	2.518	6f	20.313	1.189
7d	21.729	0.266	9f	18.354	1.704	7f	19.377	0.684
4d ^[1F]	33.270	8.438	4f ^[1F]	23.115	79.259	Сумма	726.74	
5d	26.362	2.814	5f	21.836	20.348			

Таблица 5

Энергия ε (эВ) и ширина Γ (мкэВ) СОП $3d^{-1}[^2D] \rightarrow 4p^{-3}[^4S] nl[LS] + q$

$nl [LS]$	ε_q (эВ)	Γ (мкэВ)	9p	23.384	0.827	4f ^[3F]	25.317	3.534
5p ^[3P]	33.645	11.428	4d ^[3D]	37.545	22.760	5f	23.939	0.772
6p	28.167	4.504	5d	28.761	1.027	6f	22.438	0.415
7p	25.628	2.262	6d	25.825	0.194	Сумма	49.69	
8p	24.233	1.313	7d	24.248	0.077			

По данным таблиц видно, что среди множества рассчитанных наиболее вероятными являются переходы в состояния $4s^{-1}4p^{-2}[^2D]4d[^1S]$, $4p^{-3}[^2D]4f[^1P]$, $4p^{-3}[^2P]4f[^1D]$ и $4p^{-3}[^2D]4f[^3P]$. Это обусловлено сравнительно большими значениями кулоновских матричных элементов, входящих в парциальные амплитуды, при малых значениях энергетических знаменателей, что отражает сильное смешивание указанных состояний с начальным $3d^{-1}[^2D]$.

Наибольший вклад в сумму Γ_{ic} дают переходы в состояния $4s^{-1}4p^{-2}[^2D]$ и $4p^{-3}[^2D]$ конечного ионного остова того же терма, что и начальное состояние $3d^{-1}[^2D]$. Наименее вероятны переходы в кватертные состояния $4s^{-1}4p^{-2}[^4P]$ и $4p^{-3}[^4S]$, когда оба возбуждаемых электрона, nl и q , имеют параллельные спины.

Приведем здесь еще и суммарные по $n=1,2,\dots,9$ и $l=0,1,2,3$ абсолютные Γ_{ic} (мкэВ) и относительные $\eta=\Gamma_{ic}/\Gamma_{tot}$ ширины СОП из $3d^{-1}[^2D]$, приводящие к ионным остовам:

$$4s^{-1}4p^{-2} [^4P] \quad \Gamma_{ic}= 222.124 \quad \eta =5; \quad 4s^{-1}4p^{-2} [^2D] \quad \Gamma_{ic}=1807.262 \quad \eta =40;$$

$4p^{-3} [^4S]$	$\Gamma_{ic}=49.695$	$\eta=1;$	$4p^{-3} [^2P]$	$\Gamma_{ic}=726.738$	$\eta=16;$
$4p^{-3} [^2D]$	$\Gamma_{ic}=1734.648$	$\eta=38.$	сумма	$\Gamma_{tot}=4540.467$	$\eta=100$

Экспериментальное значение полной ширины Γ_{3d} состояния $3d^{-1}[^2D]$, к сожалению, не известно. Ее значение оценено по литературным данным следующим образом. Предполагается, что полная ширина состояний $KrII 3d_{3/2}^{-1}$ и $KrII 3d_{5/2}^{-1}$ примерно равна полной ширине высоковозбужденных резонансов $KrI 3d^{-1}np$, а именно, 98 ± 12 мэВ. Эксперимент высокого разрешения [8] показал меньшее значение ширины резонансов при возрастании n , а именно от 83 ± 1 мэВ для $KrI 3d_{5/2}^{-1}5p$ до 75 ± 8 мэВ для $KrI 3d_{5/2}^{-1}10p$ и от 83 ± 2 мэВ для $KrI 3d_{3/2}^{-1}5p$ до 68 ± 8 мэВ для $KrI 3d_{3/2}^{-1}10p$. Полагая, что полная ширина $\Gamma_{3d}=70$ мэВ, суммарная ширина Γ_{tot} всех исследованных переходов составляет около 6.5% от Γ_{3d} .

На основе рассчитанных ширин и энергий переходов, приведенных в таблицах 1-5, построены модели электронного спектра для рассмотренных групп переходов, а также модель суммарного спектра (рис. 3). Для этого проведено “размазывание” рассчитанных ширин Γ_{α} каждого перехода с энергией ε_{α} по Лоренцу, $\gamma_{\alpha}(\varepsilon) = \frac{2\Gamma_{\alpha}}{\pi} \frac{\sigma}{4(\varepsilon - \varepsilon_{\alpha})^2 + \sigma^2}$, где Γ_{α} численно равна площади под кривой Лоренца, ε_{α} соответствует энергетическому положению пика, σ - ширина пика на его полувысоте. Параметр σ может быть подобран соответственно разрешению эксперимента.

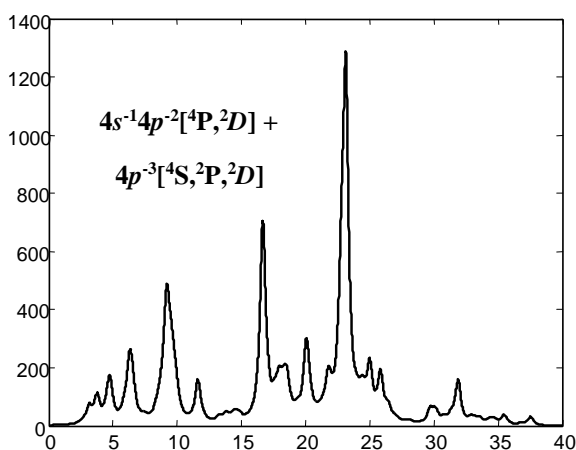


Рис.3. Модельный спектр СОП $3d^{-1} \rightarrow 4s^{-1}4p^{-2}[^4P, ^2D] + 4p^{-3}[^4S, ^2P, ^2D]$ при $\sigma=0.5$ на по данным таблиц 1-5

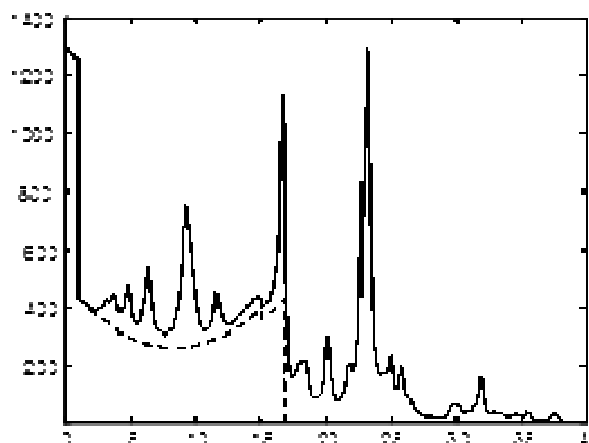


Рис. 4. Модельный спектр рис.3 на подложке непрерывного спектра от ДОП (штриховая линия - - -)

На основе полученных результатов, а также проведенного ранее расчета энергетического спектра электронов при двойном Оже-распаде $3d$ -вакансии в Kr [NN] можно построить

модельный электронный спектр (рис.4), порождаемый при распаде $3d$ -вакансии в Kr , путем наложения дискретного спектра СОП (рис.3, Сумма) и подложки непрерывного спектра в области (0–18 эВ) от ДОП ([3], штриховая линия - - -). Отметим, что подложка меняет как высоту низкоэнергетических пиков, так и их форму.

Список литературы

1. Килин В.А. Методика расчета амплитуд и вероятностей переходов в атомах с учетом корреляций в рамках многочастичной нестационарной теории возмущений // Вестник ТПУ – 2004. – т. 307. – №6. – С. 5–13.
2. Килин В.А., Ли И.С. Двойной Оже-распад в рамках МТВ // Известия ВУЗов. Физика – 1989. – Т. 7. – С. 78–82.
3. Килин В.А. Лазарев Д.А. Двойной Оже-распад $3d$ -вакансии в Kr // Изв. вузов. Физика. – 1997. – № 10. – С. 54–63.
4. Ehresmann A., Kilin V.A., Schmoranzner H., Schartner K.-H., and Amusia M.Ya. Assignment of new fluorescence lines from $KrIII 4p^3 6s/5d$ states observed after excitation of the $KrI 3d^9 5/2 5p$ -resonance // J. Phys.B.: Atom. Mol. Opt. Phys. – 1995. – V. 28. – P. 965–977.
5. Kilin V.A., Lazarev D.A., Zelichenko V.M., Ehresmann A., Vollweiler F., Schmoranzner H., and Schartner K.-H. Perturbation theory study of double Auger decay channels of $3d$ -vacancy in Kr // Abstracts VI ECAMP, Italy, Siena, 1998 – P. P1–70.
6. Kilin V.A., Ehresmann A., Vollweiler f., Schartner K.-H. and Schmoranzner H., Perturbation theory study of triple photoionization. I. Two-step approximations in triple photoionization of Kr in the exciting photon energy region of $KrI 3d^9 np$ resonances (90 eV–100 eV) // J. Phys. B.: Atom. Mol. Opt. Phys. – 1997 – V. 30 – P. 5715–5727.
7. Sugar J. and Musgrove A. Energy Levels of Krypton, $Kr I$ through $Kr XXXVI$ // J. Phys. Chem. Ref. Data. - 1991. - V. 20. – № 5. - P. 859–916.
8. O.-P. Sairanen, A. Kivimäki, E. Nömmiste, H. Aksela, and S. Aksela. High-resolution pre-edge structure in the inner-shell ionization threshold region of rare gases Xe , Kr , and Ar // Phys. Rev. A. – 1996. – V. 54. – № 4. – P. 2834–2839.

Рецензенты:

Гриняев С.Н., д.ф.-м.н., профессор, кафедра теоретической и экспериментальной физики, Физико-технический институт, Научно-исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск;

Шаповалов А.В., д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой теоретической физики, физический факультет, Научно-исследовательский Томский государственный университет, г. Томск.