

О СТРУКТУРЕ СПЕКТРА ДЫРОЧНЫХ
ВОЗБУЖДЕНИЙ АТОМОВ

В. В. Балашов, Н. М. Кабачник и И. П. Сажина

В работе рассматривается структура глубоких дырочных состояний, возникающая как вследствие известного мультиплетного расщепления, так и вследствие связи дырочного состояния с возбужденными состояниями валентной оболочки. Рассмотренные явления приводят к появлению тонкой структуры краев рентгеновских спектров поглощения, причем максимумы тонкой структуры располагаются по обе стороны края.

Одним из общих свойств атомной и ядерной структуры, отражающих фермиевскую природу атомов и ядер, являются характерные «дырочные» состояния. При образовании вакансий в глубокой (удаленной от поверхности Ферми) оболочке остающаяся система приобретает большую энергию возбуждения; это возбуждение снимается либо путем электромагнитного перехода, либо путем испускания частицы (эффект Оже). В атомной физике такие «дырочные» состояния исследуются давно. Они представляют интерес в связи с изучением характеристических рентгеновских спектров, исследованием атомных процессов, сопутствующих k -захвату и внутренней конверсии, анализом краев фотопоглощения в рентгеновской области и др. Накоплен большой материал о положении «дырочных» возбуждений в атомах и ионах, имеются оценки вероятностей их распада (распадных ширин). В ядерной физике данные, относящиеся к «дырочным» возбуждениям, получены сравнительно недавно. Однако здесь с самого начала был использован метод, адекватный природе исследуемых состояний — квазиупругое рассеяние быстрых протонов или электронов с регистрацией «на совпадение» как рассеянной, так и выбитой частицы [1]. Возможность получения в реакциях ($p, 2p$) и ($e, e'p$) надежной и многосторонней информации о свойствах «дырочных» состояний в ядрах стимулировала разработку теории этих состояний. Особенно трудным оказался вопрос об их ширине. Согласно имеющимся экспериментальным данным, ширины глубоких «дырочных» состояний очень велики — сравнимы с расстояниями между отдельными оболочками. Существует представление [2], согласно которому эти ширины обусловлены развалом ядра: при столкновении двух нуклонов вблизи поверхности Ферми один из них заполняет дырку, а другой переходит в состояние непрерывного спектра. (Это представление в точности соответствует картине атомного Оже-перехода). Однако, как указывалось в работе [3], наряду с этим механизмом надо рассматривать и другой — разброс «дырочного» состояния по состояниям более сложной природы, плотность которых значительно выше, чем плотность простых дырочных состояний. При этом наблюдаемый широкий «резонанс» дырочного возбуждения следует понимать в духе «гигантского резонанса» — как огибающую по большому числу состояний. В этой же работе [3] показано, что при разбросе дырочного возбуждения возможно расщепление возникающего «гигантского резонанса» за счет вклада отдельных состояний типа «две дырки—частица», соответствующих возбуждению нуклонов вблизи поверхности Ферми.

Цель настоящей работы — рассмотреть возможность такого же явления в атомах, точнее — рассмотреть возможность разброса глубокого дырочного состояния в атоме за счет возбуждения электронов валентной оболочки.

Наши исследования были в значительной степени стимулированы экспериментальной работой [4]. В этой работе с хорошим разрешением исследовалась структура $N_{IV, V}$ -края фотопоглощения в редкоземельных элементах. Была обнаружена тонкая структура вблизи края поглощения. Особенно интересно, что максимумы тонкой структуры располагались не только перед порогом, но и за ним в непрерывном спектре. Было замечено также, что число максимумов сначала увеличивается с ростом числа $4f$ -электронов, а затем спадает к концу оболочки. Нам кажется, что рассматриваемое в данной статье явление разброса дырочного состояния может иметь отношение к обнаруженным в работе [4] особенностям краев фотопоглощения.

Для качественного рассмотрения вопроса и обсуждения мы рассмотрели достаточно простые системы: дырочные состояния $(2p)^{-1}$ в атомах фосфора и серы. Рассмотрим для определенности атом фосфора. Поскольку для атомов серы и фосфора спин-орбитальное взаимодействие очень мало по сравнению с рассматриваемым здесь явлением, то мы использовали схему LS -связи.

Основное состояние атома фосфора 4S имеет конфигурацию $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$. Первые два возбужденных состояния 2D и 2P имеют ту же конфигурацию. При отсутствии взаимодействия между электронами дырочное состояние характеризуется волновой функцией $\Psi_0 = |(2p)^{-1} [{}^3S] \rangle$. Когда взаимодействие электронов учитывается, появляется известное мультиплетное расщепление дырочного состояния [5], возникающее из-за различия в энергиях состояний, у которых по-разному складываются спин и орбитальный момент «дырки» и валентных электронов. Разброс дырочного состояния, связанный с возбуждением валентной оболочки, который является предметом настоящей статьи, также возникает из-за кулоновского взаимодействия электронов. Кулоновское взаимодействие может связывать состояния $\Psi_0 = |(2p)^{-1}, (3p)^3 {}^4S; LS \rangle$ с другими состояниями, отличающимися квантовыми числами валентной оболочки, например $(2p)^{-1}, (3p)^3 {}^2D; LS \rangle$ и т. п. Волновая функция дырочного состояния для взаимодействующих электронов есть суперпозиция состояний типа $|(2p)^{-1}, (3p)^3 L_1 S_1; LS \rangle - \Psi_g = \sum_{i=0, 1, \dots} \alpha_i \Psi_i$, коэффициенты которой могут быть найдены диагонализацией энергетической матрицы.

Мы рассчитали энергетическую матрицу и нашли коэффициенты α_i , используя водородоподобные функции с эффективными зарядами, которые выбирались согласно рецепту Коулсона [6]. (Для фосфора $Z_{эфф.} (3p) = 5.35$, $Z_{эфф.} (2p) = 11.2$; для серы $Z_{эфф.} (3p) = 6.0$, $Z_{эфф.} (2p) = 12.2$). Результаты диагонализации приведены на рис. 1 для фосфора и на рис. 2 для серы. На этих рисунках приводятся положения дырочных уровней в шкале энергий возбуждения атома, причем за начало отсчета принимается энергия дырочного состояния без учета взаимодействия. По оси ординат отложен квадрат коэффициента α_0^2 , характеризующий примесь к данному сложному дырочному уровню состояния Ψ_0 . Рисунки *a* и *б* показывают соответственно разброс дырки с учетом возбуждений валентной оболочки и обычное мультиплетное расщепление. Как видно из рисунков, дырочное состояние распределяется по интервалу $\sim 10 \div 15$ эв и масштабы разброса дырочного состояния сравнимы с мультиплетным расщеплением.

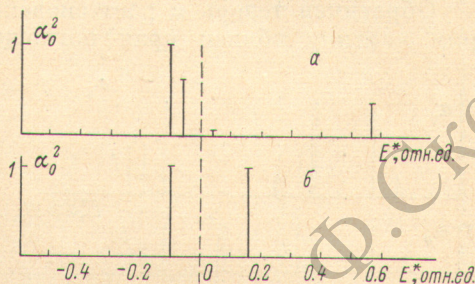


Рис. 1. Спектр генеалогической связи «дырочных» состояний $(2p)^{-1}$ с основным состоянием атома фосфора; с учетом (а), и без учета виртуальных возбуждений валентной оболочки (б).

Очевидно, что число уровней, возникающих в результате связи дырки с возбужденными состояниями валентной оболочки, зависит от степени ее заполнения и нарастает к середине оболочки. В то же время число уровней, возникающих в результате мультиплетного расщепления, определяется просто моментами дырки и валентной оболочки и поэтому не обнаруживает такой регулярной зависимости от степени ее заполнения.

Спектр дырочных состояний, показанный на рис. 1 и 2, может быть непосредственно получен экспериментально при изучении реакции $(e, 2e)$ [7, 8]. Если измерять зависимость сечения реакции $(e, 2e)$ от суммарной энергии выбитого и рассеянного электрона, то на месте соответствующих дырочных уровней в сечении образуются максимумы.

Обратимся теперь к рентгеновским спектрам поглощения и рассмотрим картину вблизи края поглощения, возникающую из-за разброса дырочного состояния. При фотопоглощении возбуждаются состояния типа «частица-дырка», в которых частица находится в одном из разрешенных правилами отбора незанятых, связанных состояний или за порогом в непрерывном спектре.

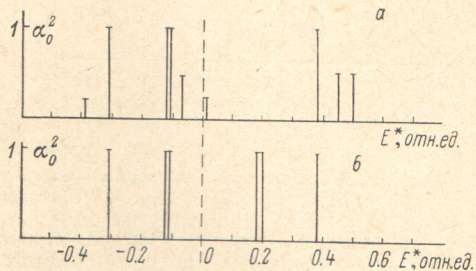


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но для атома серы (основное состояние $3P$).

Для рассмотренных нами атомов фосфора и серы были рассчитаны спектры частично-дырочных уровней $(2p)^{-1}4s$ и $(2p)^{-1}3d$. Из-за значительной разницы эффективных зарядов (для $4s$ - и $3d$ -электронов $Z_{\text{эфф}}$ принималось

равным единице) интегралы перекрывания волновых функций малы, связь внешней частицы с «дыркой» и валентными электронами очень слаба и приводит к некоторому сдвигу всех уровней, что в нашем случае несущественно. Относительное же положение уровней меняется слабо. Таким образом, спектр частично-дырочных возбуждений будет в значительной степени повторять спектр дырочных состояний. Так как дырочное состояние оказывается распределенным по нескольким состояниям, то и край поглощения расщепляется, а весь спектр поглощения должен представлять собой наложение нескольких спектров, сдвинутых друг относительно друга. Пример такой структуры спектра поглощения в области $L_{II, III}$ -края атомов P и S схематически изображен на рис. 3 и рис. 4. Здесь вертикальными линиями показаны интенсивности переходов электрона в nd -состояния с образованием различных дырок в соответствии с рис. 1, а и 2, а. Сплошная кривая показывает суммарный спектр поглощения.

Как видно из рисунков, расчет приводит к появлению резонансов за порогом поглощения в области непрерывного спектра. Ввиду того что эти рисунки носят чисто иллюстративный характер, распадные ширины дырочных состояний выбраны весьма произвольно — порядка 1 эв. Кроме того, не показаны переходы в ns -состояния, интенсивность которых, правда, значительно меньше, чем интенсивность переходов в состояния nd . (Разумеется, для наблюдения этого явления необходимо изучать L -, M -или N -края поглощения элементов середины периодов в газах или парах для того, чтобы избавиться от твердотельной тонкой структуры за краем поглощения).

Для количественного анализа конкретных экспериментальных данных необходим более детальный расчет с использованием лучших волновых функций состояний, более аккуратным выбором взаимодействия частицы и дырки, учетом спин-орбитального расщепления и пр. Но во всяком случае ориентировкой в величине явления может служить то уже отмечен-

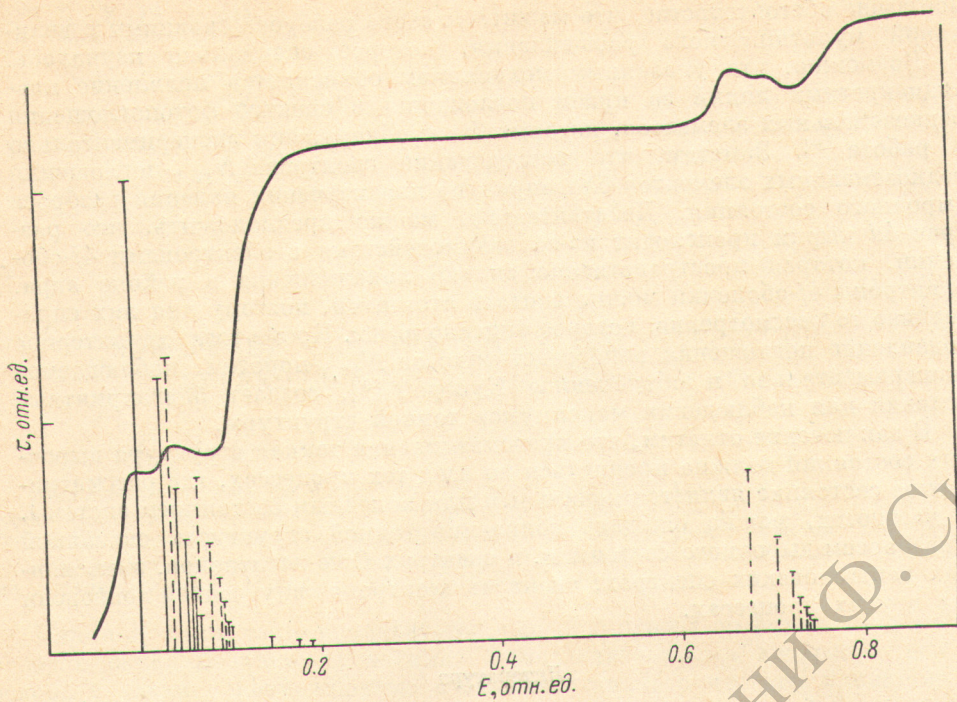


Рис. 3. Схематический спектр поглощения для атома фосфора вблизи $L_{II,III}$ края.

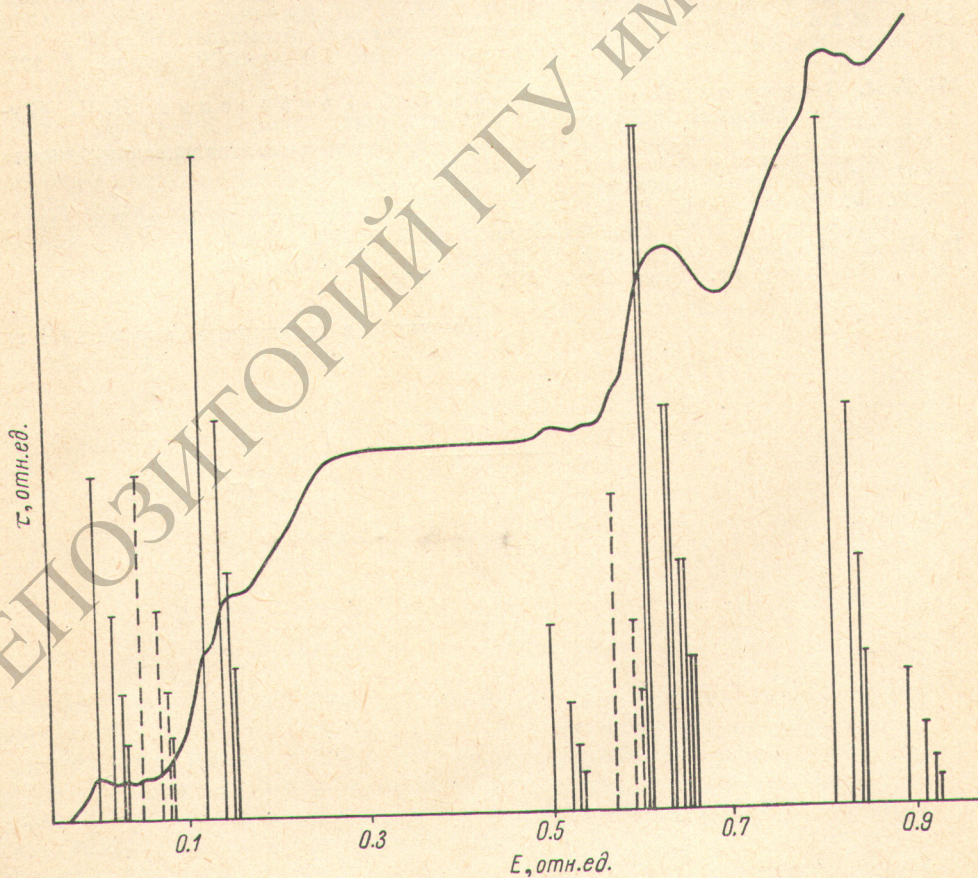


Рис. 4. Схематический спектр поглощения для атома серы вблизи $L_{II,III}$ края.
 На рис. 1—4 по оси абсцисс E приведена в от. ед.

ное выше обстоятельство, что масштабы этого разброса сравнимы с величиной мультиплетного расщепления, которое специально изучалось.

Возможно, что указанным механизмом объясняется появление квазидискретных линий за краем поглощения в спектре фотопоглощения редкоземельных элементов, которые были обнаружены экспериментально в работе [4]. Заметим, что исследование спектров $N_{IV,V}$ -поглощения редкоземельных элементов благоприятно для изучения явления разброса дырочного состояния. Действительно, можно предположить, что разброс $4d$ дырки происходит из-за взаимодействия с электронами $4f$ -оболочки, которая пространственно сильно локализована в районе ядра. Электроны $4f$ -оболочки можно считать атомными, поэтому для них справедливо то рассмотрение, которое описано выше. Кроме того, характерное подавление поглощения непосредственно за $N_{IV,V}$ -порогом, наблюдаемое экспериментально и объясненное Купером [9], создает благоприятные условия для наблюдения максимумов тонкой структуры.

В заключение отметим, что предсказываемая тонкая структура дырочных состояний должна проявиться во всех тех процессах, где рассматриваемое состояние является начальным или конечным состоянием системы. В частности, можно ожидать появление тонкой структуры, связанной с разбросом дырочного состояния, в спектрах Оже-электронов, эмиссионных рентгеновских спектрах, спектрах электронов внутренней конверсии и в других процессах.

Литература

- [1] G. Jacob, Th. A. J. Maris. Rev. Mod. Phys., 38, 121, 1966. U. Amaldi. Tr. международной конференции по электромагнитным взаимодействиям при низких и средних энергиях. Дубна, 1967.
- [2] Т. Марис. Прямые процессы в ядерных реакциях. Атомиздат, М., 1965.
- [3] В. В. Балашов, Д. В. Мебония. Изв. АН АрмССР, физика, 3, 122, 1968.
- [4] Т. М. Зимкина, В. А. Фомичев, С. А. Грибовский, И. И. Жукова. Изв. АН СССР, сер. физ., 31, 874, 1967.
- [5] Р. Л. Баринский, В. И. Нефедов. Рентгено-спектральное определение заряда атомов в молекулах. Изд. «Наука», М., 1966.
- [6] Ч. Коулсон. Валентность. Изд. «Мир», М., 1965.
- [7] Ю. Ф. Смирнов, В. Г. Неудачин. Письма в ЖЭТФ, 3, 298, 1966. U. Amaldi, Tr. Ann. Ist. Super. Sanita, 5, 680, 1969.
- [8] В. И. Нефедов. Изв. АН СССР, сер. физ., 28, 816, 1964.
- [9] J. W. Cooper. Phys. Rev., 123, 681, 1962.

Поступило в Редакцию 14 апреля 1971 г.