

СПИНОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ И УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ОЖЕ-ЭЛЕКТРОНОВ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В РЕЗУЛЬТАТЕ РАСПАДА $3d^{-1}5p$ -СОСТОЯНИЯ В АТОМЕ Kr

А. Ю. Елизаров*

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия*

И. И. Тупицын**

*Санкт-Петербургский государственный университет
198904, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 4 марта 2004 г.

Приведены результаты численных расчетов энергий оже-переходов, параметров анизотропии углового распределения (α_2) и спиновой поляризации (β_2) для переходов в фотовозбужденном атоме Kr* с двумя открытыми оболочками. Расчеты матричных элементов были выполнены многоконфигурационным релятивистским методом Фока – Дирака с использованием промежуточного типа связи. Волновые функции начального и конечного состояний оже-перехода были вычислены с учетом эффектов релаксации. Одноэлектронная волновая функция сплошного спектра для оже-электрона была получена одноконфигурационным методом Фока – Дирака. Проведено сравнение с экспериментом и предложен новый эксперимент, позволяющий идентифицировать оже-состояния не только по энергии, но и по полному моменту оже-состояния.

PACS: 32.80.Nd

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование спиновой поляризации и углового распределения электронов позволяет получить полную информацию о динамике оже-распада в атомах. Общая теория анизотропии углового распределения оже-электронов была развита в работах [1–5], где был использован формализм матрицы плотности. Первые вычисления коэффициентов углового распределения были выполнены несколькими теоретическими группами [6–8]. Прогресс в экспериментальных исследованиях, в том числе реализация постановки полного квантовомеханического эксперимента для оже-процесса [9, 10], когда были измерены амплитуды оже-переходов и разности фаз парциальных волн оже-электронов, стимулирует дальнейшие теоретические исследования.

В настоящей работе использована теория углово-

го распределения оже-электронов, развитая в работах [5–7]. Эта теория обобщена на случай атомов с незамкнутыми валентными оболочками.

Волновые функции атома Kr* рассчитывались многоконфигурационным релятивистским методом Фока – Дирака с учетом релаксации для термов как начального, так и конечного состояний. Указанная релаксация существенным образом усложняет расчет, поскольку приводит к необходимости рассчитывать матричные элементы оже-перехода с неортогональными одноэлектронными функциями. Как правило, эффекты релаксации не учитывались в работах других авторов. В настоящей работе для выяснения роли этих эффектов были также проведены расчеты термов конечного состояния без учета релаксации. В этом случае термы конечного состояния рассчитывались методом конфигурационного взаимодействия с использованием замороженных одноэлектронных функций, полученных для начального состояния атома.

В многоконфигурационных расчетах были

*E-mail: a.elizarov@mail.ioffe.ru

**E-mail: tup@tup.usg.pu.ru

включены все релятивистские конфигурации, соответствующие одной нерелятивистской. Например, для возбужденной конфигурации $3d^9 5p^1$ атома Кг это означает, что в расчет были включены четыре различные релятивистские конфигурации: $3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^5 5p_{1/2}^1$, $3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 5p_{1/2}^1$, $3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^5 5p_{3/2}^1$ и $3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 5p_{3/2}^1$. Такой метод расчета фактически реализует промежуточный тип связи (intermediate coupling, IC), который приводит к более надежным данным, чем результаты, полученные ранее в наших [11] и в других работах в рамках чистых LS -или jj -связей.

Одноэлектронная волновая функция сплошного спектра оже-электрона рассчитывалась релятивистским одноконфигурационным методом Фока–Дирака с учетом нелокального обмена и недиагональных множителей Лагранжа, обеспечивающих ее ортогональность основным состояниям иона. Подробное описание метода вычисления функции сплошного спектра представлено в работе [11]. Влияние релятивистских эффектов в расчетах функций сплошного спектра на величину параметра α_2 анизотропии углового распределения может оказаться существенным, поскольку основной вклад в величину параметров α_2 и β_2 (параметр анизотропии спиновой поляризации) определяется поведением функции сплошного спектра в области атомного остова.

В следующем разделе статьи приведены основные выражения, с помощью которых вычислялись параметры α_2 и β_2 и описан способ вычисления матричных элементов с неортогональными волновыми функциями начального и конечного состояний. В заключительном разделе представлены результаты теоретических расчетов энергий оже-состояний $4s^{-1}4p^{-1}5p$, $4s^{-1}4p^{-1}6p$ и $4s^{-2}5p$ атома Кг, выполненных в приближении IC -связи, и проведено сравнение с результатами прецизионного эксперимента [12]. В этом же разделе представлены результаты расчетов величин параметров α_2 и β_2 и обсуждается возможность постановки эксперимента, в результате которого будет определяться полный момент конечного состояния атома в оже-переходе.

2. ТЕОРИЯ

2.1 Параметры асимметрии углового распределения оже-электронов

Вычисление параметров угловых распределений и спиновой поляризации проводится с использованием двухступенчатой модели оже-распада, предложенной в [1]. Общая теория оже-распада представ-

лена во множестве работ (см., например, [6]). Выражение для углового распределения оже-электронов имеет вид

$$\frac{dW_{A^+ \rightarrow A^{2+}}}{d\Omega} = \frac{dW_{A^+ \rightarrow A^{2+}}^\Sigma}{4\pi} [1 + \alpha_2 A_{20} P_2(\sin \theta)], \quad (1)$$

где $dW_{A^+ \rightarrow A^{2+}}^\Sigma$ — интегральная по направлению траекторий оже-электронов вероятность оже-процесса, величина A_{20} — заселенность по магнитным подуровням однозарядного иона, α_2 — параметр анизотропии углового распределения оже-электронов, P_2 — полином Лежандра второй степени и θ — угол между направлением эмиссии оже-электронов и поляризацией излучения. Мы использовали выражения для параметров анизотропии углового распределения оже-электронов и спиновой поляризации, полученные в работах [5, 6]:

$$\alpha_2 = \frac{A(200)}{A(000)}, \quad \beta_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \text{Im} \frac{A(211)}{A(000)}. \quad (2)$$

Здесь $A(KkQ)$ — коэффициенты углового распределения, определяемые выражением [6, 11]

$$\begin{aligned} A(KkQ) &= \frac{1}{4\pi p} \sqrt{(2K+1)(2k+1)} \times \\ &\times \sum_{l,l'} i^{l'-l} \exp[i(\sigma_l - \sigma_{l'})] \sum_{j,j'} (-1)^{J+J_1+j+Q+l'} \times \\ &\times \sqrt{(2l+1)(2l'+1)(2j+1)(2j'+1)} \begin{Bmatrix} J & J_1 & j \\ K & j' & J_1 \end{Bmatrix} \times \\ &\times \sum_X C_{i_0, l' 0}^{X 0} C_{K-Q, k Q}^{X 0} \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & k \\ j' & j & K \\ l' & l & X \end{Bmatrix} \times \\ &\times \langle (J, \varepsilon l j) J_1 \| \hat{V} \| J_1 \rangle \langle (J, \varepsilon l' j') J_1 \| \hat{V} \| J_1 \rangle, \quad (3) \end{aligned}$$

где J_1 — полный угловой момент начального состояния иона A^+ , J — полный угловой момент конечного состояния иона A^{2+} , ε — энергия свободного электрона, l — орбитальный момент, j — полный угловой момент и σ_{lj} — фаза волновой функции оже-электрона.

Приведенные матричные элементы $\langle J_1 \| \hat{V} \| (J j) J_1 \rangle$ оператора перехода \hat{V} определены для начальных и конечных многоэлектронных состояний произвольного атома. Эти матричные элементы могут быть получены в общем случае с помощью теоремы Вигнера–Экарта, если известны многоэлектронная волновая функция

Ψ_{J_1, M_1} начального состояния $A^+(J_1)$ иона, волновая функция $\Psi_{J, M}$ конечного состояния $A^{2+}(J)$ иона и одноэлектронная волновая функция ψ_{jm} оже-электрона:

$$\begin{aligned} \langle (J, \varepsilon l' j') J_1 \parallel \hat{V} \parallel J_1 \rangle &= \\ &= \frac{\sqrt{2J_1 + 1}}{C_{JM, jm}^{J_1 M_1}} \langle JM, jm | \hat{V} | J_1 M_1 \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

В расчетах матричных элементов (амплитуд) перехода с ортогональными орбиталями в оже-процессе оператором перехода \hat{V} может являться оператор межэлектронного взаимодействия либо оператор $\hat{H} - E$, где \hat{H} — полный гамильтониан системы. Эквивалентность этих двух вариантов обусловлена тем, что начальное и конечное состояния различаются двухэлектронным возбуждением, поэтому все одноэлектронные матричные элементы (по крайней мере в одноконфигурационном методе) обращаются в нуль. Если одноэлектронные функции начального и конечного состояний различны, то в качестве оператора перехода необходимо использовать оператор $\hat{H} - E$. Далее мы рассмотрим вычисление амплитуды оже-перехода $\langle F | \hat{H} - E | I \rangle$ между начальным состоянием I с квантовыми числами $J_1 M_1$ и конечным состоянием F с квантовыми числами $J M, j m$.

2.2. Вычисление матричных элементов оператора перехода с неортогональными функциями

Во всех расчетах многоэлектронных волновых функций однозарядного иона начального состояния и двухзарядного иона конечного состояния использовался многоконфигурационный метод Фока – Дирака. Обычно волновые функции начального и конечного состояний при оже-процессе вычисляются в приближении замороженных орбиталей, согласно которому одноэлектронные функции начального и конечного состояний образуют единый набор ортонормированных функций. Такой способ вычислений принято называть расчетом без учета релаксации. Учет релаксации приводит к необходимости рассматривать два взаимно неортогональных набора орбиталей конечного и начального состояний. Рассмотрим более подробно метод вычисления матричных элементов оже-перехода с неортогональными орбиталями.

В многоконфигурационном методе Фока – Дирака волновые функции начального Ψ^I или конечного Ψ^F состояний N -электронной системы могут быть

представлены в виде линейной комбинации слетеровских детерминантов \det_α , построенных из одноэлектронных волновых функций соответственно $\{\phi_j^I(x)\}$ и $\{\phi_j^F(x)\}$:

$$\begin{aligned} \Psi^I &= \sum_\alpha C_\alpha^I \det_\alpha \{\phi_j^I(x_i)\}, \\ \Psi^F &= \sum_\alpha C_\alpha^F \det_\alpha \{\phi_j^F(x_i)\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Для оже-процесса, когда полная энергия атома сохраняется в течение оже-распада ($E = \text{const}$), амплитуда перехода из начального состояния $|I\rangle$ в конечное $|F\rangle$ имеет вид

$$\langle F | \hat{H} - E | I \rangle = \sum_{\alpha\beta} C_\alpha^{F*} C_\beta^I (H_{\alpha\beta}^{FI} - E B_{\alpha\beta}^{FI}), \quad (6)$$

где индекс α нумерует детерминанты Слетера для начального состояния, а индекс β — для конечного, H^{FI} — матрица гамильтониана \hat{H} в базисе детерминантов Слетера, B^{FI} — матрица неортогональности в этом же базисе.

Матрица B^{FI} не равна единичной матрице, поскольку детерминанты, составленные из одноэлектронных волновых функций начального и конечного состояний, не ортогональны. Матрица B^{FI} может быть представлена в виде [13]

$$B_{\alpha\beta}^{FI} = \langle \det_\alpha | \det_\beta \rangle = (D_{\alpha\alpha} D_{\beta\beta})^{-1/2} D_{\alpha\beta}, \quad (7)$$

где $D_{\alpha\beta}$ — детерминант матрицы интегралов перекрытия $S^{\alpha\beta}$ в базисе одноэлектронных орбиталей:

$$D_{\alpha\beta} = \det | S_{i,j}^{\alpha\beta} |, \quad S_{i,j}^{\alpha\beta} = \langle \phi_i^F | \phi_j^I \rangle. \quad (8)$$

Матричные элементы матрицы $S^{\alpha\beta}$ вычисляются между двумя наборами орбиталей $\{\phi_i^F\}_\alpha$ и $\{\phi_j^I\}_\beta$, которые образуют два слетеровских детерминанта соответственно α и β .

Для вычисления матричных элементов перехода для одноэлектронных и двухэлектронных операторов можно воспользоваться выражениями для одночастичной и двухчастичной матриц плотности перехода между двумя состояниями, которые описываются слетеровскими детерминантами α и β . Выражение для одночастичной матрицы плотности имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \rho_1^{\alpha,\beta}(x, x') &= \\ &= (D_{\alpha\alpha} D_{\beta\beta})^{-1/2} D_{\alpha\beta} \sum_{i,j}^N (S^{-1})_{i,j}^{\alpha,\beta} \phi_i^F(x) \phi_j^{I*}(x'). \end{aligned} \quad (9)$$

Двухчастичная матрица плотности выражается через одночастичную и определяется выражением

Таблица 1. Энергии E оже-переходов, коэффициенты анизотропии углового распределения (α_2) и спиновой поляризации (β_2), рассчитанные с учетом (+) и без учета (–) релаксации для оже-переходов $4s^{-1}4p^{-1}5p$ для атома Kr

Конечное состояние	$E^-, \text{эВ}$	α_2^-	β_2^-	$E^+, \text{эВ}$	α_2^+	β_2^+
$^4S_{3/2}$	47.7	0.565	0.0	44.3	0.565	0.0
$^4D_{7/2}$	47.4	0.673	0.0	44.0	0.673	0.0
$^4D_{5/2}$	47.4	0.608	0.018	43.9	0.604	0.019
$^4D_{3/2}$	47.2	0.565	0.0	43.8	0.565	0.0
$^2D_{5/2}$	47.2	0.437	0.067	43.7	0.419	0.071
$^4D_{1/2}$	47.0	0.0	0.0	43.6	0.0	0.0
$^2P_{3/2}$	46.8	-0.409	-0.068	43.4	-0.390	-0.075
$^4P_{5/2}$	46.8	0.680	-0.026	43.4	0.679	-0.024
$^4P_{3/2}$	46.8	-0.636	0.050	43.3	-0.636	0.050
$^4D_{1/2}$	46.8	-1.351	0.025	43.3	-1.358	0.025
$^4P_{1/2}$	46.7	0.420	-0.023	43.2	0.463	-0.023
$^2D_{3/2}$	46.5	0.703	-0.005	43.1	0.697	-0.004
$^2S_{1/2}^*$	46.3	-1.409	0.023	42.9	-1.392	0.021
$^2S_{1/2}^{**}$	40.5	-0.675	0.0	37.0	-0.727	0.0
$^2D_{3/2}$	40.4	0.149	-0.187	37.0	0.033	-0.173
$^2D_{5/2}$	40.3	0.570	0.032	36.9	0.527	0.045
$^2P_{1/2}$	40.1	-0.700	0.0	36.7	-0.706	0.0
$^2P_{3/2}$	40.1	-0.052	-0.159	36.7	0.003	-0.169

Примечание: * соответствует начальному состоянию 1P_1 , ** соответствует начальному состоянию 3P_2 .

Таблица 2. Энергии E оже-переходов, коэффициенты анизотропии углового распределения (α_2) и спиновой поляризации (β_2), рассчитанные для оже-переходов $4s^{-2}5p$ для атома Kr

Конечное состояние	$E^-, \text{эВ}$	α_2^-	β_2^-	$E^+, \text{эВ}$	α_2^+	β_2^+
$^2P_{1/2}$	24.7	-0.707	0.0	21.5	-0.707	0.0
$^2P_{3/2}$	24.6	-0.530	0.0	21.4	-0.556	0.0

$$\rho_2^{\alpha,\beta}(x_1, x_2|x'_1, x'_2) = (D_{\alpha\alpha}D_{\beta\beta})^{-1/2} \times \sum_{\substack{i \neq k \\ j \neq l}}^N D_{i,j,k,l}^{\alpha\beta} \phi_i^F(x_1) \phi_j^{F*}(x'_1) \phi_k^I(x_2) \phi_l^{I*}(x'_2), \quad (10)$$

где

$$D_{i,j,k,l}^{\alpha\beta} = D_{\alpha\beta} \varepsilon_{i,k} \varepsilon_{j,l} \times \left[(S^{-1})_{i,j}^{\alpha,\beta} (S^{-1})_{k,l}^{\alpha,\beta} - (S^{-1})_{i,l}^{\alpha,\beta} (S^{-1})_{k,j}^{\alpha,\beta} \right], \quad (11)$$

$$\varepsilon_{i,k} = \begin{cases} 1, & i < k, \\ -1, & i > k. \end{cases}$$

Гамильтониан \hat{H} можно представить как сумму одночастичных и двухчастичных операторов:

$$\hat{H} = \sum_{i=1,N} \hat{h}_i + \sum_{i \neq j}^N \hat{v}_{i,j}. \quad (12)$$

Матричные элементы имеют вид

$$H_{\alpha\beta}^{FI} = \langle \alpha | \hat{H} | \beta \rangle = \text{Tr}(\hat{h} \rho_1^{\alpha\beta}) + \text{Tr}(\hat{v} \rho_2^{\alpha\beta}). \quad (13)$$

Используя выражения (9) и (10) для одночастичной и двухчастичной матриц плотности, получаем

Таблица 3. Коэффициенты анизотропии углового распределения (α_2) и спиновой поляризации (β_2), рассчитанные с для оже-переходов $4s^{-1}4p^{-1}6p$ для атома Kг

Конечное состояние	$E^-, \text{эВ}$	α_2^-	β_2^-	$E_{eV}^+, \text{эВ}$	α_2^+	β_2^+
$^4S_{3/2}$	45.1	0.706	-0.005	41.8	0.706	-0.005
$^4D_{7/2}$	45.0	0.673	0.0	41.7	0.673	0.0
$^4D_{5/2}$	45.0	0.545	0.040	41.7	0.535	0.043
$^2D_{5/2}$	44.9	0.646	0.0	41.6	-0.768	-0.038
$^2P_{3/2}$	44.9	0.706	-0.006	41.6	0.705	-0.006
$^2S_{1/2}$	44.8	-1.16	0.023	41.5	-1.15	0.023
$^4D_{3/2}$	44.6	0.565	0.0	41.3	-0.666	0.023
$^4D_{5/2}$	44.5	0.672	-0.017	41.2	0.673	-0.018
$^2D_{3/2}$	44.5	0.538	0.0	41.2	-0.667	0.070
$^4D_{1/2}$	44.5	-1.26	0.024	41.2	-1.27	0.024
$^4P_{1/2}$	44.4	-0.845	0.003	41.2	-0.825	0.003
$^2D_{3/2}$	44.2	0.696	-0.004	40.9	0.687	-0.004
$^2P_{1/2}$	40.9	-0.707	0.0	40.9	-0.707	0.0
$^2S_{1/2}$	38.0	0.0	0.0	34.7	-0.707	0.0
$^2D_{3/2}$	38.0	0.563	0.004	34.7	0.564	0.0
$^2D_{5/2}$	38.0	0.546	0.040	34.7	0.515	0.049
$^2P_{1/2}$	37.9	0.0	0.0	34.6	-0.707	0.0
$^2P_{3/2}$	37.9	0.555	0.0	34.6	0.562	0.0

$$\langle \alpha | \sum_i \hat{h}_i | \beta \rangle = (D_{\alpha\alpha} D_{\beta\beta})^{-1/2} D_{\alpha\beta} \sum_{i \neq j}^N (S^{-1})_{i,j} \alpha, \beta \langle i | \hat{v} | j \rangle, \quad (14)$$

$$\langle \alpha | \sum_{i \neq j} \hat{v}_{i,j} | \beta \rangle = (D_{\alpha\alpha} D_{\beta\beta})^{-1/2} \sum_{i \neq k}^N \sum_{j \neq l}^N D_{i,j,k,l}^{\alpha\beta} \langle i, j | \hat{v} | k, l \rangle. \quad (15)$$

Как уже отмечалось ранее, в настоящей работе использован многоконфигурационный метод Фока–Дирака. В расчет были включены все релятивистские конфигурации, соответствующие одной нерелятивистской. Такой подход фактически реализует промежуточный тип связи. В нерелятивистском пределе, когда скорость света стремится к бесконечности, такой промежуточный тип связи переходит в чистую LS -связь. Отметим, что одноконфигурационный метод Фока–Дирака, которому соответствует jj -тип связи, для атомов с открытыми

оболочками не обладает правильным нерелятивистским пределом. Для атомов с замкнутыми оболочками использованный в данной работе подход эквивалентен методу развитому в работах [5–7].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В табл. 1–3 приведены результаты вычисления энергий и параметров α_2 и β_2 для оже-электронов, образующихся в результате распада возбужденных из основного состояния однофотонным процессом состояний $3d_{5/2}^{-1}5p$ и $3d_{3/2}^{-1}5p$ в конечное состояние $4s^{-1}4p^{-1}5p$ иона Kg^+ . В расчетах использовался промежуточный тип связи (IC). Представлены два варианта расчетов. Первый вариант соответствует приближению «замороженного остова». Во втором варианте учитывается релаксация одноэлектронных состояний как начального, так и конечного состояний. Как известно, сравнение вычислений, выполненных в приближении замороженного остова, с вычислениями для неортогональных орбиталей начального и конечного состояний продемонстрировало, что эффект релаксации имеет небольшое влия-

Таблица 4. Энергии и интенсивности оже-переходов из состояния $3d_15p$ атома Kr (эксперимент) [12]

Конечное состояние	E , эВ	Интенсивность, отн. ед.
$4s^{-1}4p^{-1}(^1P)5p$	42–45	≈ 4.2
$4s^{-1}4p^{-1}(^1P)6p$	39–41	≈ 2.0
$4p^{-3}4d5p$ (двойной оже-распад)	35–39	≈ 3.7
$4s^{-2}(^1S)5p^2P$	28–32	≈ 4.3

яние на значение параметров анизотропии углового распределения для оже-переходов атомов с заполненными оболочками [14] и для атомов с незаполненными оболочками [15]. Для атомов в возбужденном состоянии мы видим заметное влияние эффекта релаксации на значение параметров асимметрии углового распределения и особенно на величину энергии оже-перехода. Это видно из результатов, приведенных в табл. 1–3. В работе [12] приведен экспериментальный спектр указанных выше состояний, на основе которого составлена табл. 4. Идентификация состояний в работе [12] была выполнена на основе релятивистского многоконфигурационного расчета, где были сделаны усреднения по экспериментально наблюдаемым группам резонансов, в связи с чем прямое сравнение с результатами наших расчетов представляется затруднительным. Сравнение может быть выполнено только по идентификации групп резонансов (см. табл. 4). Сравнение экспериментальных данных с нашими расчетами демонстрирует совпадение результатов идентификации оже-резонансов за исключением одной группы резонансов, которым в работе [12] приписывается конфигурация двойного оже-распада ($4p^{-3}4d5p$). В наших расчетах эта область энергий оже-состояний соответствует результатам вычислений, приведенным в табл. 1.

Для идентификации оже-состояний по полному моменту может быть использован экспериментальный метод, основанный на правилах отбора при трехступенчатом фотовозбуждении оже-состояний поляризованным излучением. В этом случае в зависимости от суммарной проекции момента, вносимой в атом излучением, будут возбуждаться оже-состояния с определенным полным моментом. Изменяя комбинации взаимной ориентации поляризаций излучения трех ступеней, можно вносить различные суммарные проекции моментов фотонов от каждой ступени возбуждения атома и тем самым выполнять идентификацию оже-состояний по полному моменту. Указанный метод был использо-

ван для идентификации оже-состояний атома Ва конфигурации $6p7p$ [16]. Использование указанного метода позволит более продуктивно проводить сравнение расчетов с экспериментом.

В работе были выполнены вычисления энергий и параметров углового распределения и спиновой поляризации оже-электронов распада состояния $3d^{-1}5p$ в конечные состояния $4s^{-1}4p^{-1}5p$, $4s^{-2}5p$ и $4s^{-1}4p^{-1}6p$ атома Kr, разрешенные правилами отбора для одноступенчатого фотовозбуждения из основного состояния. Вычисления были выполнены с использованием релятивистского многоэлектронного приближения с наложением конфигурации в промежуточном типе связи с учетом релаксации. Волновые функции оже-электрона ортогональны основному волновому функциям. Учитывалось обменное взаимодействие. Получено удовлетворительное согласие рассчитанных энергий оже-распада с экспериментальными значениями.

Работа поддержана программой «Интеграция» (проект Л-01-02). Вычисления выполнены на многопроцессорном MISD компьютере «Кластер» ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Mehlhorn, Phys. Lett. **26**, 166 (1968).
2. J. Eichler and W. Fritsch, J. Phys. B **9**, 1477 (1976).
3. E. G. Berezhko and N. M. Kabachnik, J. Phys. B **10**, 2467 (1977).
4. H. Klar, J. Phys. B **13**, 4741 (1980).
5. K. Blum, B. Lohmann, and E. Taute, J. Phys. B **19**, 3915 (1986).
6. B. Lohmann, J. Phys. B **23**, 3147 (1990).
7. N. M. Kabachnik, H. Aksela, and S. Ricz, Phys. Rev. A **49**, 4653 (1994).

8. M. H. Chen, *Phys. Rev. A* **45**, 1684 (1992).
9. U. Hergenbahn, G. Snell, M. Drescher et al., *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5020 (1999).
10. B. Schmidtke, M. Drescher, N. Müller et al., *J. Phys. B* **34**, 4293 (2001).
11. А. Ю. Елизаров, И. И. Тупицын, *ЖЭТФ* **124**, 733 (2003).
12. M. Drescher, T. Khalil, N. Müller et al., *J. Phys. B* **36**, 3337 (2003).
13. R. McWeeny, *Methods in Computational Molecular Physics*, Ser. B, ed. by S. Wilson and G. H. F. Diercksen, Plenum Press, New York (1992).
14. J. Tulkki, N. M. Kabachnik, and H. Aksela, *Phys. Rev. A* **48**, 1277 (1993).
15. A. Yu. Elizarov and I. I. Tupitsyn, *Phys. Scripta* **70**, 139 (2004).
16. А. Ю. Елизаров, Н. А. Черепков, *Письма в ЖЭТФ* **44**, 3 (1986).