

ИССЛЕДОВАНИЕ УГЛОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОЖЕ-ЭЛЕКТРОНОВ В АТОМЕ Хе

А. Ю. Елизаров^{a*}, И. И. Тупицын^{b**}

^a Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе
194021, Санкт-Петербург, Россия

^b Санкт-Петербургский государственный университет
198904, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 22 ноября 2002 г.

Рассматривается угловое распределение оже-электронов. Приводятся результаты численных расчетов параметра анизотропии углового распределения α_2 для переходов в атоме Хе вида $(M_3 \rightarrow N_2N_3)$, $(M_3 \rightarrow N_3N_3)$, $(M_4 \rightarrow N_1N_3)$, $(M_4 \rightarrow N_4N_5)$, $(M_4 \rightarrow N_5N_5)$ и $(M_{4,5} \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})$. Расчеты матричных элементов выполнены методом Хартри–Фока в нерелятивистском приближении в LS -связи, а также релятивистским методом Хартри–Фока–Дирака как в jj -связи (одноконфигурационное приближение), так и в промежуточном типе связи (многоконфигурационный метод).

PACS: 32.80.Nd

1. ВВЕДЕНИЕ

Впервые существование анизотропии углового распределения оже-электронов в атомах было предсказано в работе [1]. С тех пор экспериментальное и теоретическое исследование этого эффекта получило широкое распространение. Особый интерес в этих работах представляют исследования оже-электронов, образующихся в результате заполнения глубоких вакансий, появившихся в результате взаимодействия атомов с синхротронным излучением [2]. Общая теория анизотропии углового распределения оже-электронов была развита в работах [3–6], где был использован формализм матрицы плотности. Позднее расчеты коэффициентов углового распределения были выполнены несколькими теоретическими группами [7–9]. Однако, как это было отмечено в работах [6, 9, 10], довольно часто имеет место расхождение экспериментальных данных с результатами расчетов, что указывает на необходимость продолжения работ по исследованию углового распределения оже-электронов. Причины указанных расхождений до конца не выяснены. Они могут быть следствием несовершенства самой теории уг-

лового распределения оже-электронов (в частности, необходимости учета интерференции конечных состояний системы «ион + оже-электрон» [11]), а также использования различных приближений в расчетах волновых функций начальных и конечных состояний ионов и волновых функций сплошного спектра.

В настоящей работе использована теория углового распределения оже-электронов, развитая в работах [6–8]. Эта теория обобщена на случай атомов с незамкнутыми валентными оболочками как для LS -, так и для jj -типов связи. Кроме того, получены выражения для коэффициентов анизотропии углового распределения α_2 для промежуточного типа связи, т. е. для многоконфигурационных релятивистских волновых функций конечного и начального состояний иона. Волновые функции ионов рассчитывались методом Хартри–Фока и многоконфигурационным релятивистским методом Хартри–Фока–Дирака.

Величины параметров углового распределения оже-электронов зависят от качества волновой функции сплошного спектра, которая во многих более ранних работах рассчитывалась с использованием довольно грубых приближений. В частности, не учитывалось обменное взаимодействие

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

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

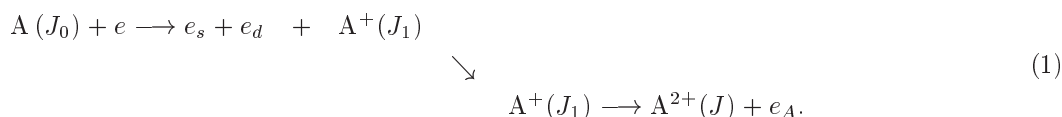
электрона сплошного спектра с остовными электронами и не учитывались недиагональные множители Лагранжа, обеспечивающие ортогональность волновой функции сплошного спектра к одноэлектронным занятым состояниям иона. В настоящей работе рассмотрено влияние этих приближений на величину параметра углового распределения α_2 . Волновая функция сплошного спектра в релятивистских расчетах была получена путем решения релятивистских уравнений Хартри–Фока–Дирака. Влияние релятивистских эффектов в расчетах функций сплошного спектра на величину α_2 может оказаться существенным, поскольку основной вклад в величину α_2 определяется поведением функции сплошного спектра в области остова.

Следующий раздел статьи посвящен описанию основных теоретических принципов, используемых

при вычислении параметра анизотропии углового распределения оже-электронов. В разд. 3 приведены результаты расчетов параметра угловой анизотропии α_2 для переходов типа $(M_3 \rightarrow N_{2,3}N_{2,3})$, $(M_4 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})$, $(M_4 \rightarrow N_1N_3)$ и $(M_{4,5} \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})$ в атоме Хе, полученные при помощи различных приближений.

2. ОБЩАЯ ТЕОРИЯ

Рассеяние электронов или фотонов на атоме $A(J_0)$ может привести к образованию вакансии во внутренней оболочке $A^+(J_1)$. Заполнение образовавшейся вакансии может происходить с испусканием фотона либо электрона (оже-процесс). В настоящей работе мы рассмотрим оже-процесс



Здесь e_s и e_d — соответственно, рассеянный и выбитый электроны. В результате оже-процесса, в конечном состоянии образуются двукратно заряженный ион $A^{2+}(J)$ и оже-электрон в непрерывном спектре, e_A . Время жизни возбужденного состояния много больше времени столкновения, поэтому можно представить, что процесс рассеяния происходит в два независимых этапа: первый — образование вакансии, второй — оже-распад [1]. Для того чтобы исключить интерференцию состояний двух электронов e_s и e_d , рассмотрим процесс, в котором энергии рассеянного электрона и оже-электрона не совпадают. Квантовые состояния электронов e_s , e_d и двукратного иона в эксперименте не фиксируются. Кроме того, будем считать, что ни электрон (e), ни атом

$A(J_0)$ в начальном состоянии ($A(\gamma_0 J_0)$) не поляризованы.

При рассеянии электронов на атоме в системе сталкивающихся частиц образуется выделенное направление, что, как было показано в работе [12], приводит к анизотропии в угловом распределении интенсивности потока $I(\Theta)$ оже-электронов. Выражение для углового распределения $I(\Theta)$ оже-электронов было получено несколькими авторами [1, 4–7]. В работе [6] для описания углового распределения $I(\Theta)$ были введены параметры $A(KkQ)$, содержащие информацию о динамике и геометрии оже-процесса. В той же работе были приведены общие выражения для параметров $A(KkQ)$:

$$\begin{aligned}
 A(KkQ) = & \sqrt{(2K+1)(2k+1)} \sum_{M, M_1, M'_1} \sum_{m_s, m'_s} (-1)^{J_1 - M_1 + 1/2 - m_s} \begin{pmatrix} J_1 & J_1 & K \\ M_1 & -M'_1 & -Q \end{pmatrix} \times \\
 & \times \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & k \\ m_s & -m'_s & -Q \end{pmatrix} \langle JM, p^{(-)} m_s | V | J_1 M_1 \rangle \langle JM, p^{(-)} m'_s | V | J_1 M'_1 \rangle^*, \tag{2}
 \end{aligned}$$

где V — оператор межэлектронного кулоновского взаимодействия:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), \quad v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (3)$$

2.1. Промежуточный тип связи и jj -связь

Используя разложение волновой функции сплошного спектра оже-электрона $\langle p^{(-)} m_s |$ в ряд по сферическим волнам с учетом спин-орбитального взаимодействия [7], можно получить следующее выражение для параметров $A(KkQ)$:

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

где $l+l'$ — четное. Здесь использованы обозначения коэффициентов Клебша–Гордана, $6j$ - и $9j$ - символов в соответствии с [13], σ_l^j — сдвиг фаз для электрона сплошного спектра в состоянии $\langle lj \rangle$.

Коэффициенты углового распределения α_K связаны с параметрами $A(KkQ)$ следующим образом [6]:

$$\alpha_K(J) = \frac{A(K00)}{A(000)}. \quad (5)$$

Для коэффициентов α_K нетрудно получить:

$$\begin{aligned} \alpha_K &= \left(\sum_{lj} \langle J_1 \parallel V \parallel (Jj) J_1 \rangle^2 \right)^{-1} \times \\ &\quad \times \sqrt{(2K+1)(2J_1+1)} \times \\ &\times \sum_{l'} \sum_{jj'} (-1)^{J+J_1-1/2+l'} i^{l+l'} C(K)_{jj'} \cos(\sigma_{l'} - \sigma_l) \times \\ &\quad \times \langle J_1 \parallel V \parallel (Jj) J_1 \rangle \langle J_1 \parallel V \parallel (Jj') J_1 \rangle, \quad (6) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} C(K)_{jj'} &= -(-1)^{K+2j'} \sqrt{\frac{(2j+1)(2j'+1)}{2K+1}} \times \\ &\quad \times C_{j'-1/2, j1/2}^{K0} \left\{ \begin{matrix} J & J_1 & j \\ K & j' & J_1 \end{matrix} \right\}. \quad (7) \end{aligned}$$

Приведенные матричные элементы $\langle J_1 \parallel V \parallel (Jj) J_1 \rangle$ определены для начальных и конечных многоэлектронных состояний произвольного атома. Эти матричные элементы могут быть получены в общем случае с помощью теоремы Вигнера–Эккарта [13, 14], если известны многоэлектронная волновая функция Ψ_{J_1, M_1} начального состояния $A^+(J_1)$, волновая функция $\Psi_{J, M}$ конечного состояния $A^{2+}(J)$ иона и одноэлектронная волновая функция оже-электрона ψ_{jm} :

$$\begin{aligned} \langle J_1 \parallel V \parallel (J, j) J_1 \rangle &= \\ &= \frac{\sqrt{2J_1+1}}{C_{J_1 M_1}^{J M, j m}} \langle J_1 M_1 | V | J M, j m \rangle. \quad (8) \end{aligned}$$

Волновые функции Ψ_{J_1, M_1} и $\Psi_{J, M}$ могут быть рассчитаны релятивистским методом Хартри–Фока–Дирака в одноконфигурационном приближении. В этом случае коэффициенты α_K определяются в jj -связи, и для атомов с замкнутыми оболочками этот подход эквивалентен подходу, развитому в работах [6–8], и оправдан только для тяжелых атомов с замкнутыми оболочками, когда конечное состояние иона $A^{2+}(J)$ имеет вакансии на глубоких остовных уровнях. Более корректные результаты могут быть получены многоконфигурационным методом Хартри–Фока. В частности, можно учесть наложение всех релятивистских конфигураций, соответствующих одной нерелятивистской конфигурации иона, т. е. всех конфигураций, имеющих одни и те же заселенности нерелятивистских оболочек (nl) и различные заселенности релятивистских оболочек (nlj). Такое приближение мы назовем промежуточным типом связи. Очевидно, что в нерелятивистском пределе промежуточный тип связи переходит в LS -связь. Этого нельзя утверждать для чистой jj -связи для систем с незамкнутыми оболочками и, в частности, для ионов с двумя вакансиями на внутренних уровнях.

В случае атомов с замкнутыми валентными оболочками для приведенных матричных элементов $\langle J_1 \parallel V \parallel (Jj) J_1 \rangle$ можно получить выражение в пред-

ставлении дырок в чистой jj -связи:

$$\langle (J, \varepsilon j) J_1 \parallel V \parallel J_1 \rangle = (-1)^{\theta+j} \langle (l_f j_f, l'_f j'_f) J \parallel v \parallel (l_i j_i, \varepsilon l j) J \rangle, \quad (9)$$

где $l_f j_f$ и $l'_f j'_f$ — квантовые числа двух вакансий иона $A^{2+}(J)$, $l_i j_i$ — квантовые числа одной вакансии начального состояния иона $A^+(J_1)$. Величина θ является полуцелой и зависит от выбора фазовых множителей волновых функций начального и конечного состояний иона. При подстановке (9) в выражения (4) и (6) зависимость от θ исчезает, а дополнительный фазовый множитель имеет вид $(-1)^{j+j'+1}$. Полученные выражения для $A(KkQ)$ и α_K в представлении дырок аналогичны выражениям (9) и (25) работы [7].

Приведенный матричный элемент в представлении дырок для случая jj -связи был получен в работе [15] и в окончательном виде приведен в работе [7]. В наших обозначениях он имеет вид

$$\begin{aligned} & \langle (l_f j_f, l'_f j'_f) J \parallel v \parallel (l_i j_i, \varepsilon l j) J \rangle = \\ & = \tau (-1)^{j_f+j_i} \sqrt{(2j_f+1)(2j'_f+1)(2J+1)} \times \\ & \times \left[(-1)^J \sum_k C_{j_f 1/2, k 0}^{j_i 1/2} C_{j'_f 1/2, k 0}^{j 1/2} \begin{Bmatrix} j'_f & j & k \\ j_i & j_f & J \end{Bmatrix} \times \right. \\ & \quad \times R^k(n_f l_f j_f, n'_f l'_f j'_f, n_i l_i j_i, \varepsilon l j) + \\ & \quad \left. + \sum_k C_{j'_f 1/2, k 0}^{j_i 1/2} C_{j_f 1/2, k 0}^{j 1/2} \begin{Bmatrix} j_f & j & k \\ j_i & j'_f & J \end{Bmatrix} \times \right. \\ & \quad \left. \times R^k(n_f l_f j_f, n'_f l'_f j'_f, \varepsilon l j, n_i l_i j_i) \right], \quad (10) \end{aligned}$$

где коэффициент τ зависит от того, являются ли две вакансии иона $A^{2+}(J)$ эквивалентными или нет:

$$\tau = \begin{cases} 1, & n_f l_f j_f \neq n'_f l'_f j'_f, \\ \frac{1}{\sqrt{2}}, & n_f l_f j_f = n'_f l'_f j'_f. \end{cases} \quad (11)$$

Радиальные интегралы R^k в выражении (10) совпадают со стандартными радиальными интегралами, используемыми в методе Хартри–Фока–Дирака [16]:

$$\begin{aligned} R^k(A, B, C, D) & = \\ & = \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2, [P_A(r_1)P_C(r_1) + Q_A(r_1)Q_C(r_1)] \times \\ & \times \gamma_k(r_1, r_2) [P_B(r_1)P_D(r_1) + Q_B(r_1)Q_D(r_1)], \quad (12) \end{aligned}$$

где A, B, C, D нумеруют релятивистские оболочки,

P и Q — большая и малая компоненты радиальной волновой функции, соответственно, и

$$\gamma_k(r_1, r_2) = \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \quad (13)$$

2.2. LS -связь

Если релятивистские эффекты невелики, то для описания состояний ионов можно использовать приближение LS -связи. Для того чтобы получить выражение для параметров углового распределения $A(K00)$ в LS -связи, нужно воспользоваться известным преобразованием от jj -связи к LS -связи для конечного состояния. Тогда для приведенного матричного элемента в LS -связи получим (см., например, [17])

$$\begin{aligned} & \langle (J, \varepsilon l j) J_1 \parallel V \parallel J_1 \rangle = \\ & = \sqrt{(2L_1+1)(2S_1+1)(2J+1)(2j+1)} \times \\ & \quad \times \begin{Bmatrix} L & S & J \\ l & \frac{1}{2} & j \\ L_1 & S_1 & J_1 \end{Bmatrix} \times \\ & \quad \times \left\langle \left(\left(LS, \varepsilon l \frac{1}{2} \right) L_1 S_1 \right) J_1 \parallel V \parallel (L_1 S_1) J_1 \right\rangle. \quad (14) \end{aligned}$$

Используя теорему Вигнера–Эккарта, нетрудно получить

$$\begin{aligned} & \left\langle \left(\left(LS, \varepsilon l \frac{1}{2} \right) L_1 S_1 \right) J_1 \parallel V \parallel (L_1 S_1) J_1 \right\rangle = \\ & = \sqrt{\frac{(2J_1+1)}{(2L_1+1)(2S_1+1)}} \times \\ & \quad \times \left\langle \left(LS, \varepsilon l \frac{1}{2} \right) L_1 S_1 \parallel V \parallel L_1 S_1 \right\rangle. \quad (15) \end{aligned}$$

В этом случае вместо (14) имеем

$$\begin{aligned} & \langle (J, \varepsilon l j) J_1 \parallel V \parallel J_1 \rangle = \sqrt{(2J_1+1)(2J+1)(2j+1)} \times \\ & \quad \times \begin{Bmatrix} L & S & J \\ l & \frac{1}{2} & j \\ L_1 & S_1 & J_1 \end{Bmatrix} \times \\ & \quad \times \left\langle \left(LS, \varepsilon l \frac{1}{2} \right) L_1 S_1 \parallel V \parallel L_1 S_1 \right\rangle. \quad (16) \end{aligned}$$

Тогда для параметров $A(K00)$ в LS -связи можно получить выражение

$$\begin{aligned}
 A(K00) &= \frac{1}{4\sqrt{2}\pi p} \sum_{l,l'} i^{l'-l} \exp[i(\sigma_l - \sigma_{l'})] \times \\
 &\times \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} C_{l_0,l'_0}^{K0} \sum_{j,j'} (-1)^{1/2-J-J_1+l+l'} \times \\
 &\times (2J_1+1)(2J+1)(2j+1)(2j'+1) \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & j' & l' \\ K & l & j \end{matrix} \right\} \times \\
 &\times \left\{ \begin{matrix} J & J_1 & j \\ K & j' & J_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J_1 & L_1 & S_1 \\ J & L & S \\ j & l & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} \times \\
 &\times \left\{ \begin{matrix} J_1 & L_1 & S_1 \\ J & L & S \\ j' & l' & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} \times \\
 &\times \left\langle \left(LS, \varepsilon l \frac{1}{2} \right) L_1 S_1 \parallel V \parallel L_1 S_1 \right\rangle \times \\
 &\times \left\langle \left(LS, \varepsilon l' \frac{1}{2} \right) L_1 S_1 \parallel V \parallel L_1 S_1 \right\rangle. \quad (17)
 \end{aligned}$$

Здесь L_1, S_1, J_1 — квантовые числа, описывающие состояние однозарядного иона A^+ ; L, S, J — квантовые числа, описывающие состояние двухзарядного иона A^{2+} ; l, l' — орбитальные квантовые числа электрона сплошного спектра (оже-электрона). В нерелятивистском приближении волновая функция оже-электрона не зависит от квантового числа j , поэтому приведенные матричные элементы в выражении (17) не зависят от j, j' . Тогда, осуществив суммирование по j и j' , формулу (17) можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned}
 A(K00) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{4\pi p} (2J+1)(2J_1+1) \times \\
 &\times \sum_{l,l'} i^{l'-l} \exp[i(\sigma_l - \sigma_{l'})] \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} C_{l_0,l'_0}^{K0} \times \\
 &\times \sum_x (-1)^{x+J_1} (2x+1) \left\{ \begin{matrix} x & J_1 & l \\ K & l' & J_1 \end{matrix} \right\} \times \\
 &\times \left\{ \begin{matrix} L & S & J \\ \frac{1}{2} & x & S_1 \end{matrix} \right\}^2 \left\{ \begin{matrix} L & L_1 & l \\ J_1 & x & S_1 \end{matrix} \right\} \times \\
 &\times \left\{ \begin{matrix} L & L_1 & l' \\ J_1 & x & S_1 \end{matrix} \right\} \left\langle \left(LS, \varepsilon l \frac{1}{2} \right) L_1 S_1 \parallel V \parallel L_1 S_1 \right\rangle \times \\
 &\times \left\langle \left(LS, \varepsilon l' \frac{1}{2} \right) L_1 S_1 \parallel V \parallel L_1 S_1 \right\rangle. \quad (18)
 \end{aligned}$$

Приведенные матричные элементы могут быть получены с помощью теоремы Вигнера–Эккарта [13, 14], если известны многоэлектронная волновая функция $\Psi_{L_1, M_{L_1}, S_1, M_{S_1}}$ начального состояния A^+ , волновая функция Ψ_{L, M_L, S, M_S} конечного состояния иона A^{2+} и одноэлектронная волновая функция оже-электрона $\psi_{lm, 1/2m_s}$:

$$\begin{aligned}
 \left\langle \left(LS, \varepsilon l \frac{1}{2} \right) L_1 S_1 \parallel V \parallel L_1 S_1 \right\rangle &= \\
 &= \frac{\sqrt{(2L_1+1)(2S_1+1)}}{C_{L M_L, l m}^{L_1 M_{L_1}, S_1 M_{S_1}} C_{S M_S, l m}^{S_1 M_{S_1}}} \times \\
 &\times \langle L_1 M_{L_1} S_1 M_{S_1} | V | L M_L, l m \rangle. \quad (19)
 \end{aligned}$$

Для случая атомов с замкнутыми валентными оболочками приведенные матричные элементы в выражениях (17) и (18) могут быть вычислены в представлении дырок [15] аналогично случаю jj -связи (10):

$$\begin{aligned}
 \left\langle \left(LS, \varepsilon l \frac{1}{2} \right) L_1 S_1 \parallel V \parallel L_1 S_1 \right\rangle &= \\
 &= \left\langle \left(l_f \frac{1}{2}, l'_f \frac{1}{2} \right) LS \parallel v \parallel \left(\varepsilon l \frac{1}{2}, l_i \frac{1}{2} \right) LS \right\rangle = \\
 &= \tau (-1)^{l_f+l_i} \sqrt{(2l_f+1)(2l'_f+1)} \times \\
 &\times \left[(-1)^L \sum_k R^k(n_f l_f, n'_f l'_f, n_i l_i, \varepsilon l) \times \right. \\
 &\times C_{l_f 0, k 0}^{l_i 0} C_{l'_f 0, k 0}^{l_i 0} \left\{ \begin{matrix} l'_f & l_f & L \\ l_i & l & k \end{matrix} \right\} + \\
 &+ (-1)^S \sum_k R^k(n_f l_f, n'_f l'_f, \varepsilon l, n_i l_i) \times \\
 &\times C_{l_f 0, k 0}^{l_i 0} C_{l'_f 0, k 0}^{l_i 0} \left\{ \begin{matrix} l'_f & l_f & L \\ l & l_i & k \end{matrix} \right\} \left. \right], \quad (20)
 \end{aligned}$$

где $R^k(nl, n'l', n_1 l_1, n'_1 l'_1)$ — радиальный интеграл:

$$\begin{aligned}
 R^k(A, B, C, D) &= \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 P_A(r_1) \times \\
 &\times P_B(r_2) \gamma_k(r_1, r_2) P_C(r_1) P_D(r_2), \quad (21)
 \end{aligned}$$

2.3. Вычисление волновых функций сплошного спектра

В нерелятивистском случае волновые функции сплошного спектра определялись в приближении

Хартри–Фока путем решения уравнения

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} P_{\varepsilon l}(r) + \left[\frac{l(l+1)}{2r^2} + V_c(r) \right] P_{\varepsilon l}(r) + W_{ex}(r) = \varepsilon P_{\varepsilon l}(r) + \sum_{nl} \lambda_{\varepsilon l, nl} P_{nl}(r), \quad (22)$$

где n, l — квантовые числа занятых атомных оболочек иона A^{2+} , $\lambda_{\varepsilon l, nl}$ — недиагональные множители Лагранжа, обеспечивающие ортогональность функции сплошного спектра $P_{\varepsilon l}$ к атомным радиальным функциям P_{nl} той же симметрии, $V_c(r)$ — кулоновский потенциал, W_{ex} — результат действия нелокального обменного оператора на радиальную волновую функцию сплошного спектра.

Функция сплошного спектра $P_{\varepsilon l}$, использованная выше, нормирована на δ -функцию по энергии $\langle P_{\varepsilon l} | P_{\varepsilon' l} \rangle = \delta(\varepsilon - \varepsilon')$. В этом случае асимптотика $P_{\varepsilon l}$ имеет вид

$$P_{\varepsilon}(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi p}} \sin(\tau + \sigma_l), \quad (23)$$

$$\tau = pr + \frac{Z}{p} \ln(2pr) - l \frac{\pi}{2},$$

где $p = \sqrt{2\varepsilon}$, Z — заряд иона, σ_l — фаза рассеяния. Сшивая произвольное ненормированное регулярное в нуле решение $\tilde{P}_{\varepsilon}(r) = N P_{\varepsilon}(r)$ уравнения (22) и его производную с асимптотикой (23), можно определить нормировку N и фазу решения $\tilde{P}_{\varepsilon}(r)$. Однако для достижения достаточно высокой точности сшивание необходимо проводить на расстоянии порядка 10^4 – 10^5 ат. ед., т. е. находить регулярное в нуле решение $\tilde{P}_{\varepsilon}(r)$ уравнения (22) в очень большом интервале радиальной переменной r . Существенно более эффективной является процедура сшивания решения и его производной с линейной комбинацией регулярной F и иррегулярной G в нуле кулоновских функций [18]:

$$\tilde{P}_{\varepsilon}(R_a) = AF(R_a) + BG(R_a). \quad (24)$$

Здесь R_a — точка сшивания. Кулоновские функции могут быть вычислены, например, при помощи эффективной процедуры, описанной в работе [19], где использована техника цепных дробей. В этом случае точка сшивания R_a может быть выбрана в той области, где все атомные радиальные волновые функции пренебрежимо малы и атомный потенциал является кулоновским с высокой степенью точности, т. е. при $R_a \sim 20$ – 50 ат. ед. Нормировка N и фаза σ_l могут быть найдены из коэффициентов A и B при помощи соотношений

$$\begin{aligned} \cos \sigma_l &= \frac{1}{N} (A \cos \sigma_l^0 - B \sin \sigma_l^0), \\ \sin \sigma_l &= \frac{1}{N} (A \sin \sigma_l^0 + B \cos \sigma_l^0), \\ N &= \sqrt{A^2 + B^2}, \end{aligned} \quad (25)$$

где σ_l^0 — фаза кулоновских функций [18],

$$\sigma_l^0 = \arg \Gamma(l + 1 + i\eta), \quad \eta = -\frac{Z}{\sqrt{2\varepsilon}}. \quad (26)$$

Релятивистские волновые функции сплошного спектра определялись в приближении Хартри–Фока–Дирака путем решения уравнений [16]

$$\begin{aligned} c \left(-\frac{d}{dr} + \frac{k}{r} \right) Q_{\varepsilon k} + V_c P_{\varepsilon k} + W_{ex}^P &= \varepsilon P_{\varepsilon k} + \sum_{nl} \lambda_{\varepsilon l, nl} P_{nk}, \\ c \left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r} \right) P_{\varepsilon k} + [-2c^2 + V_c] Q_{\varepsilon k} + W_{ex}^Q &= \varepsilon Q_{\varepsilon k} + \sum_{nl} \lambda_{\varepsilon l, nl} Q_{nk}. \end{aligned} \quad (27)$$

Здесь $P_{\varepsilon k}$ и $Q_{\varepsilon k}$ — большая и малая компоненты радиальной волновой функции сплошного спектра, P_{nk} и Q_{nk} — большие и малые компоненты радиальных волновых функций занятых оболочек иона A^{2+} , W_{ex}^P и W_{ex}^Q — большая и малая компоненты, полученные в результате действия нелокального обменного оператора на двухкомпонентную радиальную волновую функцию сплошного спектра, k — релятивистское квантовое число.

Нормировка на энергию для релятивистских волновых функций имеет вид

$$\int_0^{\infty} dr [P_{\varepsilon}(r) P_{\varepsilon'}(r) + Q_{\varepsilon}(r) Q_{\varepsilon'}(r)] = \delta(\varepsilon - \varepsilon'). \quad (28)$$

Радиальная волновая функция сплошного спектра, нормированная на δ -функцию по энергии при больших r имеет асимптотику [20]

$$\begin{aligned} P(r) &\approx \frac{1}{c} \left(\frac{\varepsilon + 2c^2}{\pi p} \right)^{1/2} \sin(\tau + \sigma_k), \\ Q(r) &\approx \frac{1}{c} \left(\frac{\varepsilon}{\pi p} \right)^{1/2} \cos(\tau + \sigma_k), \\ \tau &= pr - \eta \ln(2pr) - \frac{\pi l^*}{2}, \end{aligned} \quad (29)$$

где

$$l^* = \begin{cases} \gamma, & k > 0, \\ \gamma - 1, & k < 0 \end{cases} \quad (30)$$

Таблица 1. Коэффициенты α_2 для некоторых оже-переходов в Хе. Использовалось приближение LS -связи

Терм	α_2^{11}	α_2^{00}	α_2 [10]	α_2 [9]	α_2 [24]	α_2 [25]
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^1S_0$	-1.0000	-1.0000		-1.000		-1.000
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^3P_0$	-1.0000	-1.0000		-1.000		-1.000
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^3P_1$	-0.8000	-0.8000		-0.800		-0.800
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^3P_2$	0	0.7100		0		0
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^1D_2$	-0.2240	-0.1917		-0.167		-0.189
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^3F_2$	0.5817	0.5867		0.558	0.55	0.607
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^3F_3$	0.4597	0.4659		0.43	0.42	0.493
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^3F_4$	-0.7513	-0.7390		-0.806	-0.82	-0.608
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^1G_4$	-0.6203	-0.6144		-0.640		-0.499
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^1S_0$	-1.0690	-1.0690	-1.069	-1.069		-1.069
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^3P_0$	-1.0690	-1.0690	-1.069	-1.069		-1.069
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^3P_1$	-0.7483	-0.7483	-0.749	-0.748		-0.748
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^3P_2$	-0.3818	-0.3818	-0.371	-0.382		-0.382
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^1D_2$	-0.2394	-0.2050	-0.124	-0.178		-0.202
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^3F_2$	0.5157	-0.7134	0.738	0.0056	-0.02	0.115
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^3F_3$	0.3695	0.3338	0.336	0.322	0.32	0.412
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^3F_4$	0.4658*	0.3774	0.386	0.435	0.420	0.506
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})^1G_4$	-0.6631	-0.6568	-0.710	-0.685		-0.533

Примечание. * Для указанной линии экспериментальное значение параметра $\alpha_2 = 0.431 \pm 0.120$ было представлено в работе [23].

Таблица 2. Коэффициенты α_2 для некоторых переходов в Хе, рассчитанные в приближении связи LSJ -типа и промежуточного типа связи (I)

Терм		${}_{(00)}\alpha_2$ [7]	${}_{(11)}\alpha_2^{HF(LSJ)}$	${}_{(11)}\alpha_2^{HFD}$	$\alpha_2^{HFD(I)}$
$\text{Xe}(M_3 \rightarrow N_2N_3)^3P_2$	α_2	-0.0905	0	-0.0836	0
$\text{Xe}(M_3 \rightarrow N_3N_3)^3P_2$	α_2	0.5431	0.8000	0.5332	0.6212
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_4N_5)^3F_4$	α_2	-0.6805	-0.7948	-0.6706	-0.8266
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_5N_5)^3F_4$	α_2	0.4161	0.4409	0.2703	0.3837
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_4N_5)^3F_4$	α_2	-0.6041	-0.8004	-0.6034	-0.8314
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_5N_5)^3F_4$	α_2	0.1544	0.4370	0.1688	0.3796
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_1N_3)^3P_2$	α_2	0.4760	0.6818	0.5058	0.5034

Примечание. α_2^{HF} (α_2^{HFD}) – параметр анизотропии углового распределения фотоэлектронов в случае расчета волновых функций методом Хартри-Фока (Хартри-Фока-Дирака).

и

$$\gamma = \sqrt{k^2 - \frac{Z^2}{c^2}}, \quad p = \frac{1}{c} \sqrt{(\varepsilon + c^2)^2 - c^4}, \quad (31)$$

$$\eta = -\frac{Z(\varepsilon + c^2)}{c^2 p}.$$

Величина σ_k так же, как и в нерелятивистском случае, является фазой волновой функции сплошного спектра.

Для определения фазы и нормировки произволь-

Таблица 3. Коэффициенты α_2 для некоторых оже-переходов в Хе в приближении LS -связи и промежуточного типа связи

Оже-переход	Эксперимент [26]	MHFD [10]	HF(LS)	HFD(I)
$\text{Xe}(N_4 \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})^1S_0$		-1.000	-1.000	-1.0000
$\text{Xe}(N_4 \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})^3P_2$	0.72 ± 0.13	0.231	0.000	-0.1674
$\text{Xe}(N_4 \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})^3P_1$	-0.73 ± 0.11	-0.837	-0.800	-0.8321
$\text{Xe}(N_4 \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})^3P_0$		-1.000	-1.000	-1.0000
$\text{Xe}(N_4 \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})^1D_2$	0.05 ± 0.06	-0.116	0.5160	0.3634
$\text{Xe}(N_5 \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})^1S_0$		-1.069	-1.069	-1.0690
$\text{Xe}(N_5 \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})^3P_2$	0.47 ± 0.13	-0.385	-0.382	-0.2017
$\text{Xe}(N_5 \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})^3P_1$	-0.77 ± 0.17	-0.743	-0.748	-0.7309
$\text{Xe}(N_5 \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})^3P_0$	-1.07 ± 0.10	-1.069	-1.069	-1.0690
$\text{Xe}(N_5 \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})^1D_2$	0.24 ± 0.10	0.094	0.551	0.6167

ного ненормированного регулярного в нуле решения уравнения Дирака $\tilde{P}_\varepsilon, \tilde{Q}_\varepsilon$, так же как и в нерелятивистском случае, мы использовали сшивание найденного решения с линейной комбинацией регулярной P_r, Q_r и иррегулярной P_i, Q_i в нуле релятивистских кулоновских функций:

$$\begin{aligned} \tilde{P}_\varepsilon(R_a) &= AP_r(R_a) + BP_i(R_a), \\ \tilde{Q}_\varepsilon(R_a) &= AQ_r(R_a) + BQ_i(R_a). \end{aligned} \tag{32}$$

Асимптотика релятивистских кулоновских функций может быть выбрана в виде

$$\begin{aligned} P_r(r) &\approx \frac{1}{c} \left(\frac{\varepsilon + 2c^2}{\pi p} \right)^{1/2} \sin(\tau + \sigma_k^0), \\ Q_r(r) &\approx \frac{1}{c} \left(\frac{\varepsilon}{\pi p} \right)^{1/2} \cos(\tau + \sigma_k^0), \\ P_i(r) &\approx \frac{1}{c} \left(\frac{\varepsilon + 2c^2}{\pi p} \right)^{1/2} \cos(\tau + \sigma_k^0), \\ Q_i(r) &\approx -\frac{1}{c} \left(\frac{\varepsilon}{\pi p} \right)^{1/2} \sin(\tau + \sigma_k^0). \end{aligned} \tag{33}$$

Здесь σ_k^0 — фаза релятивистских кулоновских функций, для которой с использованием стандартного выражения [20] нетрудно получить

$$\sigma_k^0 = \arg \Gamma(l^* + 1 + i\eta) + \frac{1}{2} \arg \left(\frac{k + i\eta c^2 / (\varepsilon + c^2)}{\gamma k / |k| + i\eta} \right). \tag{34}$$

Для релятивистских волновых функций с асимптотикой (33) вронскиан имеет вид

$$W = P_i Q_r - P_r Q_i = \frac{1}{c\pi}. \tag{35}$$

Для вычисления релятивистских кулоновских функций мы использовали предложенное в работах [21, 22] преобразование, которое позволяет свести радиальное кулоновское уравнение Дирака к двум дифференциальным уравнениям, формально совпадающим с нерелятивистскими уравнениями Шредингера. Это преобразование можно записать в виде

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} P' \\ Q' \end{pmatrix} &= U \begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix}, \\ U &= \begin{pmatrix} 1 & X \\ X & 1 \end{pmatrix}, \quad X = -\frac{Z}{c} \frac{k}{|k|} \frac{1}{|k| + \gamma}. \end{aligned} \tag{36}$$

Используя преобразование U , можно получить дифференциальные уравнения второго порядка:

$$\begin{aligned} \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_1^*(l_1^* + 1)}{r^2} - \frac{2Z^*}{r} \right] P' &= 2\varepsilon^* P', \\ \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_2^*(l_2^* + 1)}{r^2} - \frac{2Z^*}{r} \right] Q' &= 2\varepsilon^* Q', \end{aligned} \tag{37}$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon^* &= \frac{(\varepsilon + c^2)^2 - c^4}{2c^2} = \varepsilon \left(1 + \frac{\varepsilon}{2c^2} \right), \\ Z^* &= \frac{Z(\varepsilon + c^2)}{c^2} = Z \left(1 + \frac{\varepsilon}{c^2} \right), \\ l_1^* &= \begin{cases} \gamma, & k > 0, \\ \gamma - 1, & k < 0, \end{cases} \\ l_2^* &= \begin{cases} \gamma - 1, & k > 0, \\ \gamma, & k < 0. \end{cases} \end{aligned} \tag{38}$$

Таблица 4. Коэффициенты α_2 , рассчитанные в приближении jj -связи для оже-процесса в $\text{Xe}(M_{4,5} \rightarrow N_{4,5}N_5)$, где орбитальный момент оже-электрона принимает значения $l'_1 = 2, 4, 6$

Терм	jj	α_2^{00}	α_2^{01}	α_2^{11}
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_4N_5)$	$\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)_0$	-1.0690	-1.0690	-1.0690
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_4N_5)$	$\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)_2$	-0.3059	0.2914	-0.7881
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_4N_5)$	$\left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right)_1$	-0.8000	-0.8000	-0.8000
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_4N_5)$	$\left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right)_2$	0.0408	0.0258	0.0247
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_4N_5)$	$\left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right)_3$	0.4616	0.4574	0.4553
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_4N_5)$	$\left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right)_4$	-0.6398	-0.6644	-0.4553
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_5N_5)$	$\left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}\right)_0$	-1.0000	-1.0000	-1.0000
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_5N_5)$	$\left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}\right)_2$	-0.7806	-0.7605	-0.7591
$\text{Xe}(M_4 \rightarrow N_5N_5)$	$\left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}\right)_4$	-0.1992	0.1426	-0.1441
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_4N_5)$	$\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)_0$	-1.0690	-1.0690	-1.0690
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_4N_5)$	$\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)_2$	-0.7877	-0.7873	-0.7881
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_4N_5)$	$\left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right)_1$	-0.7483	-0.7483	-0.7483
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_4N_5)$	$\left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right)_2$	-0.1198	-0.1346	-0.1372
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_4N_5)$	$\left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right)_3$	0.3719	0.3665	0.3639
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_4N_5)$	$\left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right)_4$	-0.5858	-0.5951	-0.5972
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_5N_5)$	$\left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}\right)_0$	-1.0690	-1.0690	-1.0690
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_5N_5)$	$\left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}\right)_2$	-0.3255	-0.3376	-0.3401
$\text{Xe}(M_5 \rightarrow N_5N_5)$	$\left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}\right)_4$	0.1994	0.1874	0.1839

Дифференциальные уравнения (37) отличаются от уравнений, приведенных в работе [21], поскольку записаны в виде, более удобном для решения поставленной в данной работе задачи. Регулярное, F_1 , и иррегулярное, G_1 , решения первого из уравнений (37),

а также регулярное, F_2 , и иррегулярное, G_2 , решения второго уравнения могут быть найдены при помощи той же процедуры [19], что и в нерелятивистском случае. Тогда для релятивистских кулоновских функций нетрудно получить:

$$\begin{aligned}
 P_r &= \frac{N_0}{1-X^2} (F_1 - X F_2), \\
 Q_r &= \frac{N_0}{1-X^2} (F_2 - X F_1), \\
 P_i &= \frac{N_0}{1-X^2} (G_1 - X G_2), \\
 Q_i &= \frac{N_0}{1-X^2} (G_2 - X G_1),
 \end{aligned}
 \tag{39}$$

где нормировка N_0 определяется выражением

$$N_0^2 = \frac{(1-X^2)}{c \pi \gamma p} \left[c(\gamma + |k|) + \frac{\varepsilon |k|}{c} \right]
 \tag{40}$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В работе вычислены параметры α_2 анизотропии углового распределения оже-электронов для переходов вида $(M_3 \rightarrow N_{2,3}N_{2,3})$, $(M_4 \rightarrow N_1N_3)$ и $(M_4 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})$ и $(M_{4,5} \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})$ в атоме Хе. Получено удовлетворительное согласие с единственным известным экспериментальным значением параметра α_2 для перехода Хе $(M_5 \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})$, которое равняется $\alpha_2 = 0.431 \pm 0.120$ [23] (см. табл. 1). Вычисленное значение α_2 в релятивистском приближении для случая промежуточного типа связи равно $\alpha_2 = 0.3796$ (см. табл. 2). Для оже-переходов вида $(M_{4,5} \rightarrow O_{2,3}O_{2,3})$ согласие с экспериментом существенно хуже. Для некоторых переходов имеется различие даже в знаке параметра α_2 (см. табл. 3), что указывает на необходимость проведения дальнейших исследований.

В расчетах учитывалось обменное взаимодействие и была выполнена ортогонализация волновой функции парциальной волны оже-электрона к остовным функциям A^{2+} при помощи множителей Лагранжа. Результаты расчетов для случая связи jj -типа приведены в табл. 4, где используются обозначения: α_2^{00} — в расчетах не учитывается ортогонализация и обмен, α_2^{01} — расчеты без ортогонализации, α_2^{11} — расчеты с учетом и ортогонализации, и обмена. Из таблицы видно, что величины параметра α_2 сильно различаются в зависимости от учета обмена и ортогонализации для различных переходов. Результаты вычислений, представленные в табл. 1 и 2, хорошо согласуются с расчетами других авторов [7, 9, 10]. В указанных работах атомные волновые функции были получены путем решения релятивистского уравнения Хартри–Фока–Дирака при помощи процедуры, описанной в работе [27]. Наши расчеты параметра α_2 для оже-переходов вида

$(M_{4,5} \rightarrow N_{4,5}N_{4,5})$ в атоме Хе, выполненные как в приближении LS -, так и jj -связи, показали, что примерно одинаковые влияния на величину параметра α_2 имеют учет обмена и ортогонализации волновой функции оже-электрона к остовным орбитальям и учет релятивистских эффектов. Наиболее значительные изменения величины α_2 происходят при использовании промежуточного типа связи для многоконфигурационного случая. Как было отмечено в работе [7], в случае использования приближения LS -связи значения орбитального момента парциальных волн оже-электрона могут принимать значения $l = 2, 4$, тогда как при использовании jj -связи учитываются и состояния оже-электрона с $l = 6$. Численные расчеты для коэффициентов α_2 при значениях $l = 2, 4, 6$ даны в табл. 4. Отметим, что основной вклад в значение параметра α_2 дают парциальные волны с $l = 2$ и/или $l = 4$.

В работе выполнены вычисления «из первых принципов» параметров угловой анизотропии оже-электронов, образующихся в результате рассеяния электронов на атомах. В качестве приближения использовались различные типы связи: LS -, jj - и промежуточный тип связи для одно- и многоэлектронных волновых функций. Расчеты показали, что значения коэффициентов α_2 исключительно чувствительны к методу вычислений. Это может быть использовано в качестве теста метода вычислений для широкого класса задач рассеяния частиц на атомах.

Настоящая работа выполнена при поддержке программы «Интеграция» (проект № Л-01-02).

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Mehlhorn, Phys. Lett. **26**, 166 (1986).
2. H. Winick and S. Doniach, *Synchrotron Radiation Researches*, John Wiley & Sons, Inc., New York (1980).
3. J. Eichler and W. Fritsch, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **9**, 1477 (1976).
4. E. G. Berezhko and N. M. Kabachnik, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **10**, 2467 (1977).
5. H. Klar, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **13**, 4741 (1980).
6. K. Blum, B. Lohmann, and E. Taute, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **19**, 3915 (1986).

7. B. Lohmann, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **23**, 3147 (1990).
8. N. M. Kabachnik, H. Aksela, and S. Ritz, Phys. Rev. A **49**, 4653 (1994).
9. M. H. Chen, Phys. Rev. A **45**, 1684 (1992).
10. J. Tulkki, N. M. Kabachnik, and H. Aksela, Phys. Rev. A **48**, 1277 (1993).
11. N. M. Kabachnik, J. Tulkki, H. Aksela, and S. Ritz, Phys. Rev. A **49**, 4653 (1994).
12. B. Cleff and W. Mehlhorn, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **7**, 593 (1974).
13. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Ленинград, (1975).
14. И. И. Собельман, *Введение в теорию атомных спектров*, Физматгиз, Москва (1963).
15. W. N. Asaad, Nucl. Phys. **44**, 415 (1963).
16. I. P. Grant, Adv. Phys. **19**, 747 (1970).
17. R. Karazija, *The Theory of X-Ray and Electronic Spectra of Free Atoms*, Mokslas, Vilnius (1987), p. 274.
18. М. Абрамовиц, И. Стиган, *Справочник по специальным функциям*, Наука, Москва (1979).
19. A. R. Barnett, Comput. Phys. Commun. **24**, 141 (1981).
20. M. E. Rose, *Relativistic Electron Theory*, J. Wiley & Sons, New York (1961).
21. R. A. Swainson and G. W. F. Drake, J. Phys. A **24**, 79 (1991).
22. L. Infeld, Phys. Rev. **59**, 737 (1941).
23. U. Hahn, J. Semke, H. Merc, and J. Kessler, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **18**, L417 (1985).
24. N. M. Kabachnik and I. P. Sazhina, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **21**, 267 (1988).
25. N. M. Kabachnik, I. P. Sazhina, I. S. Lee, and O. V. Lee, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **18**, L417 (1985).
26. B. Kammerling, V. Schmidt, W. Mehlhorn, W. B. Peatman, F. Schaefer, and T. Schroeter, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **22**, L597 (1989).
27. I. P. Grant, B. J. McKenzie, P. H. Norrington, D. F. Mayers, and N. C. Pyper, Comput. Phys. Commun. **21**, 207 (1980).