

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ім. І. І. МЕЧНИКОВА

Салістра Анатолій Григорійович

УДК 535, 537



Структура рентгенівських спектрів густих кулонівських систем

01.04.02 - Теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико - математичних наук

Одеса - 1997

Загальна характеристика роботи

Актуальність теми. Доцільність вивчення рентгенівських процесів навряд чи варто обґрунтовувати. Рентгенівські промені є одним з основних інструментів дослідження внутрішніх структур різноманітних речовин. Але, на відміну від добре відомих молекулярних оптичних спектрів, спектри металів ще 30 років тому описувались лише поверхньо, на рівні зв'язування піків, що спостерігаються, з хімічним складом та визначення суті сателітів – ліній дворазової іонізації. Що ж до форми ліній на відстанях порядку електронвольту від їх порогів, то складність задачі довго не давала можливості навіть якісно пояснити особливості їх структури. Тільки наприкінці 60-их років зусиллями Махана¹, Андерсона², Ноз'єра і ДеДомініціса³ "на папері" було не тільки знайдено форму ліній біля порогів відповідних переходів, а й розглянуто загальну проблему раптових збурень в фермі-системах. Дослідники встановили, що поблизу края лінії рентгенівського поглинання, висилання та фотоемісії у металах інтенсивність процесів описується степеневим законом, у багатьох випадках сингулярним на краю (див. малюнок): $I(\omega) = I_0|\omega|^\beta$, де $\omega > 0$ для поглинання, і $\omega < 0$ для висилання, β може бути як додатним (для більшості L, M-ліній), так і від'ємним (для більшості K-ліній). Спектр фотоемісії (тобто енергетичний спектр фотоелектронів, вибитих рентгенівським пучком постійної частоти) має крайову степеневу сингулярність $P(\omega) = c(-\omega)^{\sigma-1}$, де $\sigma > 0$, та в усіх практично можливих випадках $\sigma < 1$ (ω відраховується від порогу). На рис.1 зображено степеневий закон для фотоемісії (ось частот традиційно обертається) та можливу реальну форму лінії далі від порогу. Ми обрали $\sigma = 0.20$, таке його експериментальне значення у натрії, енергію Фермі обрано відповідно.

¹G.D. Mahan. Electrons in degenerate semiconductors.// Phys. Rev.- 1967 - Vol.153, 882-889

²P.W. Anderson. Infrared catastrophe in fermi gases with local scattering potentials.// Phys. Rev. Lett.- 1967- Vol.18, No.14, 1049-1051

³P. Nozieres, C. T. DeDominicis. Singularities in the X-ray absorption and emission spectra of metals: III. Onebody theory exact solution.// Phys Rev.- 1969 - 178, 1097-1107

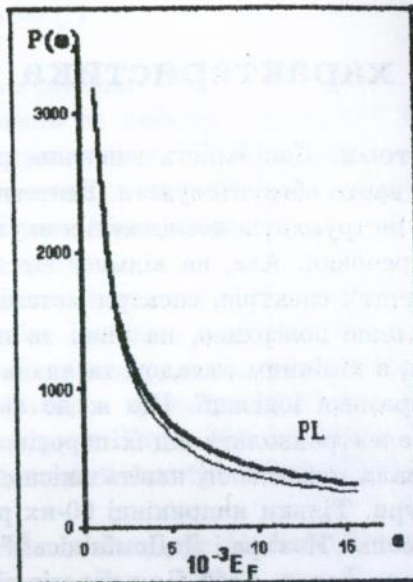


Рис.1. Форма лінії фотоемісії $P(\omega)$ з $\sigma = 0.2$. Лінію нормовано на нульовий частотний момент 2π . Крім лінії наведено відповідний степеневий закон (PL). Очевидно, реальна лінія поступово відхиляється від асимптотичної.

Експериментальна техніка, на жаль, зараз тільки на шляху до точності, необхідної для вивчення тонкої структури спектрів, втім, деякі результати вже варті розвитку теорії, хоча все ж цей розділ фізики носить переважно теоретичний характер. Але це не можна розглядати як недолік, тому що проблема Махана, Ноз'єра, ДеДомініція (МНД) значно поглиблює фізичне розуміння процесів в провідних конденсованих середовищах, а, крім того, дуже тісно пов'язана з іншими проблемами фізики металів, наприклад, ефектом Кондо, надпровідністю тощо. Доказом є незгасаючий інтерес до неї. Так, останнім часом опубліковано одразу декілька робіт з даної тематики. На меті сьогоденних досліджень – узагальнення результатів, що вважаються класичними, опис поведінки ліній за межами асимптотичної області. Можна додати, що тепер з можливістю монохроматизації до $\Delta\nu/\nu \sim 10^{-5}$, експериментатори знов звертають увагу на тонку структуру спектрів.

Зв'язок роботи з науковими програмами та темами Да-на робота знаходиться у тісному зв'язку з дослідженнями струк-

тури конденсованого стану, що проводяться на кафедрі теоретичної фізики Одеського державного Університету.

Мета і задачі дослідження. Визначити тонку структуру ліній рентгенівських спектрів металів, для чого:

- знайти явні вирази для інтенсивностей рентгенівських поглинання та фотоемісії в одночастинковому хвильовому базисі, що які враховували б усі можливі багатоелектронні збудження, індуковані взаємодією локалізованого електрона з глибокого рівня з квантом, складалися би з сутто одночастинкових операторів та мали б інваріантну до хвильового базису структуру;
- на базі знайденого виразу проаналізувати як припорогову асимптотичну форму ліній, так і їх поведінку за межами асимптотичної ділянки;
- розглянути залежність форми спектра від температури;
- визначити, як залежить форма лінії від колективної та локальної структури металів.

Наукова новизна одержаних результатів даної роботи міститься в тому, що

- отримано новий явний вираз для інтенсивностей рентгенівських процесів, який має одночастинковий та інваріантний вигляд, та описує весь спектр, а не лише деякі ділянки останнього;
- критичні показники степеневих законів узагальнено на випадок слабких потенціалів чи псевдопотенціалів довільної форми;
- частотні моменти спектра використано для аналізу та відновлення загальної форми рентгенівських ліній;
- метод степеневих моментів використано для аналізу спектрів із пороговою сингулярністю.
- встановлено основні риси залежності форми ліній від поведінки потенціалів на великих відстанях від джерела.

Практичне значення одержаних результатів. Результати, отримані в роботі можуть вживатись для вивчення форм спектральних ліній систем з дірковими потенціалами незвичайної форми (наприклад, спіні - орбітальних взаємодій). Метод відновлення форми ліній може бути придатнішим для чисельного аналізу спектрів, ніж, ті, що спираються на системи інтегральних рівнянь. Обговорено залежність форми спектральних ліній від поведінки потенціалів на великих відстанях від дірки. Результати надають можливість зробити інтерпретацію експериментальних кривих менш громіздкою. Значно спрощується, наприклад, використання параметрів підгонки для встановлення структури енергетичних зон та електронної густини в металах. Результати також мають певну методичну цінність, оскільки не використовують апарат функцій Гріна, традиційний для даної задачі.

Особистий внесок здобувача. Разом із співавторами було отримано загальний вираз для форми спектра. Здобувач брав участь у його виведенні та інтерпретації, а також в доведенні, що він призводить до сингулярної припорогової поведінки. Інші результати здобувач отримав особисто.

Апробація результатів дисертації. Основні результати дисертації було опубліковано в роботах, список яких наведено наприкінці автореферату. Вони також докладались на наукових семінарах кафедри теоретичної фізики Одеського державного Університету та Інституту фізики конденсованих систем НАН України (Львів), а також на Міжнародній науковій конференції, присвяченій 150-річчю від дня народження видатного українського фізика і електротехніка Івана Пулюя (Львів, 1995 р.).

Публікації Результати опубліковані в 3 статтях у наукових журналах та в тезах міжнародної конференції.

Структура і обсяг роботи. Дисертація складається з вступу, шести розділів, висновків, списку використаних джерел, який містить 44 найменування, і вміщує 126 сторінок тексту і 5 малюнків.

Зміст

У Вступі розглянуто актуальність теми роботи, визначено її мету та обговорено основні ідеї.

Розділі 1 сформульовано постановку проблеми, введено позначення, описано деталі фізичних процесів, що розгортаються у системі після поглинання рентгенівського кванта, та основні припущення моделі, використаної в роботі.

Першим припущенням є розподіл на швидкі та повільні процеси взаємодії кістякових глибоких рівнів з квантом та наступної релаксації оточення (підрозділ 1.1.). Для моделі істотним є уявлення, що потенціал дірки, що який порушує початкове середнє поле металу та відповідну багаточастинкову конфігурацію (дірку залишив збуджений електрон кістяка), виникає миттєво при $t = 0$. Тому можна виключити з розгляду усі процеси, що відбувались від моменту поглинання до часу відносної стабілізації поля дірки. Оскільки процеси вторинного висилання, Оже та динамічного екранування згуртовані біля характерних частот $10^{15} - 10^{16}$ Гц, модель адекватно описує формування лінії на відстанях $\Delta\omega < 1eV$ від її порогу. Додамо, що модель також нехтує повільною релаксацією дірки: віддачею кістяка, повільною частиною динамічного екранування тощо. Головний аргумент на користь дійсного існування такого метастабільного утворення – наслідки для спектрів, що які підтверджено експериментами, хоча точні умови виникнення такої структури досі не визначено. Очевидно тільки, що швидкі частини релаксації кістякового іона та динамічного екранування формують дірку, у полі якої не існує жодного зв'язаного стана.

В такий спосіб проблема перетворюється на задачу теорії багаточастинкових систем в рамках моделі незалежних орбіталей: існує система фермі-частинок з гамільтоніаном $H_0 = \sum_i h_0(x_i)$ – сумою самоузгоджених одночастинкових внесків; раптово виникає локальне збурення $V = \sum_i v(x_i)$, утворюється $H = H_0 + V$; треба описати реакцію системи. Кінцевий результат релаксаційних процесів в металах – зміна кількості електронів провідності у кулі з центром в джерелі локального збурення згідно з правилом сум

Фріделя.

$$\delta n_f = \sum_l 2\delta_l(0)/\pi$$

– сюди входять фази розсіяння парціальних хвиль на потенціалі дірки. Хопфідл зазначав, що саме з цим δn_f пов'язана швидкість релаксації.

Саме метали мають бути чутливими до зсування гамільтоніана, адже в них існує зона провідності – ділянка квазінеперервного енергетичного спектра, в якій вільні та заповнені стани розділено поверхнею Фермі, а не щільною. Як наслідок, навіть малої енергії збудження вистачає, щоб створити поблизу поверхні Фермі скільки завгодно електронно-діркових пар (підрозділ 1.2.) Саме таке збудження передає поглинений рентгенівський квант з частотою, дещо більшою порогової. Посередником процесу стає поле кістякової дірки, яке і пов'язує одночастинковий перехід з іншими степенями вільності. Очевидно, що істотна багаточастинковість процесів ускладнює використання квазічастинкових методів: біля порогу утворюється нескінченно багато збуджень майже нульової енергії (аналог інфрачервоної катастрофи квантової теорії поля, де випромінюється нескінченно багато фотонів майже нульової частоти).

У Розділі 2 оглянуто найважливіші внески до розв'язання даної проблеми, головні методи розгляду та фізичні ідеї, запропоновані дослідниками.

Серед них особливої уваги заслуговують роботи Махана, який саме і відкрив степеневу сингулярність "на папері", помітивши, що в діаграмних рядах, які описують поведінку електронно-діркової пари в полі кістякової дірки, кожний порядок містить простий полюс при нульовій енергії збудження, а сума містить логарифмічне $\ln E$ (тобто $\rightarrow e^{\beta \ln E} = E^\beta$) (підрозділ 2.1.).

Після відкриття самого ефекту багато зусиль привернуло обчислення показників σ , β . Ноз'єр і ДеДомініціс спромоглися для сферично симетричних контактних потенціалів знайти показники експонент точної асимптотики розв'язків рівняння Дайсона для функції Гріна електронів у металі (підрозділ 2.2.):

$$\sigma = \sum_l 2(2l+1)[\delta_l(0)/\pi]^2, \quad (1)$$

$$\beta = -2[\delta_{l_0}(0)/\pi] + \sum_l 2(2l+1)[\delta_l(0)/\pi]^2,$$

де $\delta_l(0)$ – фазовий зсув парціальної хвилі l на рівні Фермі, а l_0 визначає оптично збуджений канал.

Не можна не пригадати і піонерську статтю Андерсона, який визначив, що інтеграл перекриття повних багаточастинкових функцій основних станів системи до і після збудження прямує до нуля, як

$$|\Delta|^2 \equiv |\langle \Psi | \Phi \rangle|^2 = CN^{-\sigma},$$

якщо число частинок у системі $N \rightarrow \infty$ (підрозділ 2.3.). Теорема свідчила, що збудження кістякового електрона без одночасного збудження електронно-діркових пар не можливе, тобто, на відміну від переходів в інших системах, тут одночастинкове збудження кістякового рівня тільки створює умови для основного поглинання енергії, а не складає суть процесу – отже, одночастинкові уявлення (як в оптичних переходах) не можуть бути придатними.

Згадано також точні аналітичні вирази Комбескотта і Ноз'єра⁴ та Отаки і Танабе⁵, що які мали описати загальну форму спектрів. В дисертації отримано вираз саме такого типу (підрозділ 2.6.).

У Розділі 3 виведено явні точні вирази для інтенсивностей поглинання та фотоемісії (підрозділ 3.1.). Ми виходили з золотого правила Фермі (вважалося $\hbar \equiv 1$):

$$I(\omega) = 2\pi \sum_{(f)} \delta(E_f - E_0 - \omega) |\langle f | \hat{D} | 0 \rangle|^2. \quad (2)$$

Тут E_0 позначає енергію основного стану повного багаточастинкового гамільтоніана H_0 , $|0\rangle$ – власний вектор основного багаточастинкового стану; E_f та $|f\rangle$ – власні енергія та вектор багаточастинкового кінцевого гамільтоніана H , сума по (f) – сума по усіх можливих кінцевих багаточастинкових станах. Після переходу до лаплас-образів $I(t)$ енергії було замінено відповідними

⁴М. Combescott, P. Nozieres. Infrared catastrophe and excitons in the X-ray spectra of metals. // J. Phys. (Paris) - 1971 - 32, No.11-12, 913-929

⁵К. Ohtaka, Y. Tanabe, Theory of the soft-x-ray edge problem in simple metals: historical survey and recent developments. // Rev. Mod. Phys. - 1990 - 62, No.4, 929-1000

гамільтоніанами, що діяли на власні функції, а потім виключено кінцеві функції з використанням повноти їх набору. Щоб одночастинкові оператори увійшли в добутках, розраховувалось

$$Q(s, s'; t) \equiv \langle 0 | e^{i\hat{D}s} e^{-i\hat{H}t} e^{-i\hat{D}s'} | 0 \rangle,$$

друга похідна якого у точці $s = s' = 0$ нас власне і цікавить. Така форма після заміни функцій $|0\rangle$ слетерівськими детермінантами з одночастинкових $\phi_k(x_l)$, а повних операторів – відповідним сумами внесків набуває вигляду

$$Q(s, s'; t) = \frac{1}{N!} \int \dots \int dx_1 \dots dx_N \times \quad (3)$$

$$\times \det \|\phi_p(x_q; t, s, s')\|_{p,q=1}^N \overline{\det \|\phi_{p'}(x_{q'}\|_{p',q'=1}^N}.$$

де $\phi_p(x_q; t, s, s') = e^{ids} e^{-iht} e^{-ids'} \phi_p(x_q)$, та вважалось, що перші N станів заповнені.

Було введено оператор ортогонального проектування P_0 на одностинкові стани, заповнені в початковому багаточастинковому стані, та інтегральний оператор \hat{K} з ядром

$$\hat{K}(x, x'; t, s, s') = \sum_{p=1}^N \phi_p(x; t, s, s') \phi_p(x'). \quad (4)$$

Декілька перетворень з використанням властивостей детермінантів та очевидної комутації h_0 і P_0 призвели до висновку, що Q пропорційне до N -того коефіцієнта степеневого розкладу функції

$$\Delta(\lambda) = \det [\hat{I} + \lambda e^{ids} e^{-iht} e^{-ids'} P_0].$$

Але це – детермінант Фредгольма оператора $\hat{I} + \lambda \hat{K}$. Використавши властивості останнього та той факт, що ранг визначників також N , після кількох перетворень і подвійного диференціювання $Q(s, s'; t)$ одержуємо

$$I(\omega) = \int_0^\infty \lim_{\Gamma \rightarrow +0} P(t) I_0(t) e^{i(\omega+i\Gamma)t} dt, \quad (5)$$

де

$$P(t) = \det[\hat{I} + (e^{-iht} e^{ihs_0 t} - \hat{I})P_0]. \quad (6)$$

$$\begin{aligned}
I_0(t) = & Sp\{de^{-iht}e^{ih_0t}P_0[\hat{I} + (e^{-iht}e^{ih_0t} - \hat{I})P_0]^{-1}\} \times \quad (7) \\
& \times Sp\{e^{-iht}de^{ih_0t}P_0[\hat{I} + (e^{-iht}e^{ih_0t} - \hat{I})P_0]^{-1}\} - \\
& - Sp\{de^{-iht}e^{ih_0t}P_0[\hat{I} + (e^{-iht}e^{ih_0t} - \hat{I})P_0]^{-1}e^{-iht} \times \\
& \times de^{ih_0t}P_0[\hat{I} + (e^{-iht}e^{ih_0t} - \hat{I})P_0]^{-1}\} + \\
& + Sp\{de^{-iht}de^{ih_0t}P_0[\hat{I} + (e^{-iht}e^{ih_0t} - \hat{I})P_0]^{-1}\}.
\end{aligned}$$

У випадку процесів фотоemisії множник $I_0(t)$ перетворюється на сталу з частотним зсувом (підрозділ 3.2.) – ae^{-iat} (тут використано той факт, що фотоелектрон практично втрачає зв'язок з системою, і тому може не включатись до антисиметризації) Для поглинання ми маємо використовувати обидва множники.

Існування двох характерних множників P та I_0 було встановлено Ноз'ером і ДеДомініцісом. Отриманий вираз автоматично враховує усі багаточастотні збудження і містить тільки одночастинкові оператори, крім того, важливою є його інваріантна до базису структура – сліди та визначники.

Отриманий загальний вираз використано для вивчення припорогової асимптотики спектра (підрозділ 3.3.). На мову лаплас-образів малі відстані від порогу перекладаються як великі часи t . Розглядалися слабкі потенціали довільної форми. Множник $P(t)$ з огляду на теорему

$$\det[\hat{A}] = \exp[Sp(\ln \hat{A})] \quad (8)$$

набуває зручного експоненційного вигляду. Перший за ν порядок розкладу показника експоненти (згідно з традиційною технікою нестационарної теорії збурень) є звичайним частотним зсувом $\sum v_{ii}$, але другий порядок

$$A^{(2)}(t) = - \sum_{i \leq N, k > N} |v_{ii}|^2 \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 \exp[-i(E_i - E_k)(s_2 - s_1)] \quad (9)$$

(де стани i заповнені, а k – вільні) володіє особливістю, якщо заповнені та вільні стани не розділено скінченною щільною. Показано, що особливість призводить до логарифмічної розбіжності часових інтегралів при великих t . Отже, $e^{-R \ln t} = t^{-R}$, що, після оберненого лаплас-перетворення утворює ω^{R-1} , тобто відомий степеневий закон. Тут

$$R = \sum_{S_{F_i} S_{F_k}} |V_{ik}|^2 \frac{d\nu_i}{dE} \frac{d\nu_k}{dE}, \quad (10)$$

де сума стосується тільки станів на поверхні Фермі, а dv/dE – енергетична густина одночастинкових станів, що при обмеженнях Ноз'єра-ДеДомініціса співпадає з їх σ . У множинку I_0 ситуація дещо складніша, тому що він не набуває експоненційного вигляду (підрозділ 3.4.). Але розглянуті перші за v доданки також мають вигляд розкладу $\exp[-Q \ln t]$ по α , отже, виведено степеневий закон для поглинання. Останній показник

$$\alpha = \left[\sum_{S_{Fi} S_{Fk}} d_{ci} V_{ij} d_{jc} \frac{dv_i}{dE} \frac{dv_k}{dE} \right] / \left[\sum_{S_{Fi}} |d_{ci}|^2 \frac{dv_i}{dE} \right] - R, \quad (11)$$

де d_{ci} – матричний елемент переходу з кістякового стану до стану i на рівні Фермі, що також узгоджується з результатом Ноз'єра-ДеДомініціса.

У Розділі 4 використано той ж загальний вираз задля дослідження загальної форми та моментів спектра. Сам вираз, попри його одночастинкову та інваріантну форму, дуже складно аналізувати безпосередньо. Але його форма є зручною для точного розрахування частотних моментів. Було розраховано перші чотири частотні моменти спектрів фотоемісії і поглинання. Їх відносні значення можуть дозволити сформувати певні уявлення щодо загальної форми лінії. Так, позитивність третього центрованого момента (частоту відраховано від середньої частоти лінії $\omega_0 = \int \omega I(\omega) d\omega$), свідчить про достатньо довгий високочастотний "хвіст" лінії. Фотоемісійні моменти мають прозорий фізичний зміст. Вони містять дві характерні частини: перша пропорційна до повних імовірностей багатостепеневих переходів з урахуванням принципу Паулі (без діагональних за заповненням множинників типу V_{lm} , де l і m в початковому стані обидва вільні чи заповнені), друга – до математичного очікування $n - 2$ -го степеня енергії багаточастинкового збудження в системі (n – номер момента) з урахуванням зсування всіх рівнів в полі дірки. Так, четвертий центрований фотоемісійний момент є

$$P_4 = \sum_{i < N, k > N} \{(\bar{\epsilon}_k - \bar{\epsilon}_i)^2\} |v_{ii}|^2 + \\ + \sum_{i, j < N, k, l > N} [3|v_{ii}|^2 |v_{jl}|^2 - 2v_{kj} v_{jl} v_{li} v_{ii}], \quad (12)$$

де $\bar{\epsilon}_k$ – власні енергії зсунутого гамільтоніана

$$\bar{h} = h + P_0 v P_0 + (\hat{I} - P_0) v (\hat{I} - P_0), \quad (13)$$

та введено власний базис цього гамільтоніана.

У Розділі 5 формули узагальнено на випадок скінчених температур. Достатньо було замінити проєктор P_0 , що вважався проєктором на багаточастинковий основний стан проєктором P_e на довільний збуджений багаточастинковий стан та усереднити останні по Гіббсу (підрозділ 5.1.). Звичайний для металів метод інтегралів Зоммерфельда був застосований при вивченні поведінки моментів та крайових особливостей. З'ясувалось, що знайдені перші температурні поправки до моментів пропорційні до $(T/E_F)^2$ і можуть відчутно змінюватися лише за наявності особливостей в енергетичних спектрах (підрозділ 3.2.). Отже, загальна форма спектра, пов'язана з моментами, слабо залежить від температури. Навпаки, крайова поведінка значно чутливіша (підрозділ 3.3.). Показано (це співпадає з результатом Андерсона і Ювала⁶, що узагальнення сингулярності досягається заміною

$$1/(\tau - \tau') \rightarrow \pi T / \sinh \pi T (\tau - \tau')$$

в лаплас-образі.

У Розділі 6 розроблено метод відновлення форми спектральної лінії при фіксованій крайовій сингулярності і відомих перших частотних моментах. Він базується на відомій проблемі степеневих моментів Стілг'еса⁷, тобто проблемі відновлення функцій, які мають початок (поріг) та декілька відомих перших моментів (підрозділ 6.1.). Щоб відновити спектр, будують набори поліномів, коефіцієнти яких відомим чином залежать від моментів. З них сконструйовано формулу, що яка наближує форму спектра все точніше, якщо зростає кількість відомих моментів. Крім того, до формул входить так звана функція Неванлінни $\omega(x)$,

⁶P.W. Anderson, G. Yuval. Exact results for the Kondo problem: one-body theory and extension to finite temperature. // Phys. Rev. B - 1970, 1, No.4, 1522-1528

⁷М.Г. Крейн, А.А. Нудельман. Проблема моментов Маркова и экстремальные задачи. / М. Наука - 1973 - 551с.

того, до формул входить так звана функція Неванлинни $\omega(x)$, підпорядкована певним обмеженням, яку обирають так, щоб вона задовільняла бажаним умовам. В даному випадку, така умова – існування крайової сингулярності з відомим показником та предекспоненційним множником. Для далеких від -1 показників досягти цього було нескладно. Але, якщо $\sigma \ll 1$ для фотоемісії, тобто показник $\sigma - 1$ майже дорівнює -1 , "якість" відновлення різко знижується, тому що дуже близько від порогу значну роль починають відігравати не тільки нульові, а й перші за частотою члени поліномів ($x^{\sigma-1}x = x^\sigma$ зростає надто швидко при малих x). Щоб виправити становище, ми обрали "обернений" шлях: визначили, яка функція призводить до тотожної рівності розгляданого наближення відомій сингулярній формі та розглянули рівність як рівняння з точністю до лінійних членів

$$\rho_{\text{app}}[\omega(x); x] \equiv cx^{\sigma-1} + O(x).$$

Але знайдена звідси функція Неванлинни ω не задовільняє необхідним обмеженням. Тому фіксується уявна частина знайденого "ідеала" і відновляється дійсна частина з умов аналітичності, додатності уявної частини в верхній півплощині тощо. Так ми отримали найкращу, на наш погляд, форму $\omega(x)$.

Щоб проілюструвати метод, ми розглянули фотоемісійну L -лінію натрію (підрозділ 6.2.). Для опису електронної структури обиралась непогана для лужних металів модель вільних електронів. Дірка моделювалась, як відсутній $2s$ - електрон з екрануванням типу Ліндхардта. Оскільки екранування, очевидно, не встигне досягти статичного значення, її обирали постійний множник $M < 1$ при ліндхардтівській функції з експерименту ($\sigma_{\text{exp}} = 0.20$). Крім того, ми припустили, що цей множник може залежати від хвильового вектора, обравши той же степеневий закон q^σ , як форму останньої залежності. Отримано форми ліній для згаданих потенціалів.

Модель не претендувала на точність, але підтвердила висновки чисельних та аналітичних досліджень з попередніх робіт: відхилення від степеневого закону починається при $10^{-3} - 10^{-2} E_F$, але не є значним, реальна крива розташована нижче за степеневий закон, тобто реальна фотоемісія слабкіша за "МНД". При цьому виявляється, що степінь відхилення залежить від поведін-

вою асимптотикою на великих відстанях відновлені лінії лежать вище ніж лінії для потенціалів з експоненційною асимптотикою. Зауважимо, що лінія "ідеальної" моделі (контактний потенціал $V_{kk'} = -V = \text{const}$ та зона типу прямокутного потенціального бар'єра) лежить суттєво нижче степеневого закону. Зауважимо також, що навіть подібна примітивна модель демонструє деякі риси динаміки процесів (наприклад, щодо відстані від ядра, де дірка має стабілізуватися).

Основні результати та висновки.

1. З золотого правила Фермі отримано в одночастинковому наближенні явний вираз для інтенсивностей рентгенівських процесів: поглинання, висилання, фотоемісія, – що враховує усі багатоферміонні збудження, залежить лише від одночастинкових гамільтоніанів початкового та кінцевого станів системи і елементу переходу та складається з інваріантних до хвильового базису визначників та слідів.
2. Асимптотичну припорогову поведінку ліній спектра узагальнено на випадок довільних слабких потенціалів дірки, яку залишають збудженні квантами електрони кістяка. Сформульовано теорему щодо степеней порядків теорії збурень, які роблять внесок до величини показника порогові сингулярності.
3. Розраховано частотні моменти спектрів і використано їх для аналізу та відновлення форми ліній. Для останньої процедури метод степеневих моментів вжито до випадку припорогових сингулярностей. Отримано формулу, яка дозволяє побудувати приблизну форму лінії на базі відомого показника сингулярності та перших частотних моментів. Метод використано для простої моделі. Вказано на залежність форми лінії від поведінки потенціалів на великих відстанях від дірки. Зроблено зауваження, що які можуть допомогти інтерпретації експериментальних результатів.
4. Результати узагальнено на випадок скінчених температур. Загальна форма спектра, як і очікувалось слабо залежить

від температури, але сингулярна поведінка відчуває розмазування поверхні Фермі.

Основні результати дисертації відображено в публікаціях:

- [1] Adamjan, V. M., J. Ortner, A. G. Salistra, I. M. Tkachenko, X-ray-absorption problem in metals within the one-electron approximation // Phys. Rev. B - 1995 - Vol.52, No.19 13827-13838
- [2] Salistra, A. G., Moments of X-ray spectra in simple metals (edge fine structure; MND problem) // Physica B - 1996 - 229, 63-73.
- [3] Salistra, A. G., Frequency moments: fine structure of x-ray spectra in metals and other applications // Condensed Matter Physics - 1997 - 11, 179 - 190
- [4] Тези Міжнародної наукової конференції, присвяченої 150-річчю від дня народження видатного українського фізика і електротехніка Івана Пулюя. Спектр м'якого рентгенівського випромінювання у простих металах.// Львів - 1995.

Салистра А.Г. Структура рентгеновских спектров плотных кулоновских систем.-Рукопись.

Диссертация на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 - теоретична фізика. - Одеський державний університет ім. І.І. Мечникова., Одеса, 1997

Тонка структура рентгеновських ліній металів (припорогова сингулярність у вигляді степеневого закону) є результатом раптового зсуву середнього поля системи з рівнем Фермі в неперервному енергетичному спектрі. Система збурюється діркою, яка залишається в кістяку після збудження електрона квантом. В дисертації отриманий явний вираз для інтенсивності поглинання та фотоemisії. Його аналіз дозволяє визначити параметри степеневого закону для слабких діркових потенціалів довільного вигляду та відновити форму ліній поза межами асимптотичної ділянки з використанням частотних моментів. Встановлена залежність форми спектра від поведінки діркового потенціалу на великих відстанях.

Ключові слова: рентгеновське випромінювання, метали, припорогова сингулярність, степеневий закон, проблема моментів.

Салистра А.Г. Структура рентгеновских спектров плотных кулоновских систем.- Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 - Теоретическая физика. Одесский государственный университет им. И.И. Мечникова, Одесса, 1997.

Тонкая структура рентгеновских линий металлов (припороговая сингулярность в форме степенного закона) является результатом внезапного сдвига среднего поля системы с уровнем Ферми в непрерывном энергетическом спектре. Система возмущается дыркой, оставшейся в остове после возбуждения электрона квантом. В диссертации получено явное выражение для интенсивности поглощения и фотоэмиссии. Его анализ позволяет определить параметры степенного закона для слабых дырочных потенциалов произвольного вида и восстановить форму линий вне асимптотической области с использованием частотных мо-

ментов. Установлена зависимость формы спектра от поведения дырочного потенциала на больших расстояниях.

Ключевые слова: рентгеновское излучение, металлы, приповерхностная сингулярность, степенной закон, проблема моментов.

Salistra A.G. Structure of X-ray spectra of dense Coulomb systems.
- Manuscript.

Thesis for a candidate's degree by speciality 01.04.02 - Theoretical physics.- Odessa State University, Odessa, 1997.

Fine structure of X-ray lines in metals (threshold singularity as a power law) results from a sudden shift of the mean field in the system with the Fermi level lying in continuous energy spectrum. The system is perturbed by a hole left in the core after a quantum excites an electron. In the thesis an explicit expression for absorption and photoemission intensities is obtained. Its analysis enables to define parameters of the power law and to restore lines' forms beyond the asymptotic region. Frequency moments are used. Spectrum form proves to specifically depend on the long-range behaviour of the core-hole potential.

Key words: X-ray radiation, metals, Mahan-Nozières-DeDominicis model, threshold singularity, power law, moments problem

Здано до складання 10.12.97. Підписано до друку 12.11.97.

Обсяг 1.0 друк. арк. Формат 60x90/16.

Тираж 100 прим. Папір офсетний. Зам. № 550.

Надруковано у друкарні видавництва "Астропринт"

м. Одеса, вул. Преображенська, 24, к.13.

Тел./факс: (0482) 26-98-82.

10 1422

AB 39.210
AB 39.210