5.Многоэлектронные эффекты в исследовании фотоэлектронов

5.1 Угловое распределение фотоэлектронов

В дипольном приближении угловое распределение фотоэлектронов, возникающих при ионизации неполяризованным светом, описывается формулой [АМ, АМУ,АЧ]:

$$\frac{d\sigma_i(\omega)}{d\Omega} = \sigma_i(\omega)\left[1 - \frac{\beta_i(\omega)}{2} P_2(\cos\theta)\right], \tag{5.1}$$

где $\sigma_i(\omega)$ есть сечение фотоионизации *i*-ой оболочки, определяемое *i*-м членом в сумме по i в (4.1), $P_l(\cos\theta)$ - полином Лежандра, зависящий от угла вылета фотоэлектрона θ относительно направления потока фотонов, а $\beta_i(\omega)$ есть так называемый параметр угловой анизотропии. Он выражается через приведенные дипольные матричные элементы (4.2) в одноэлектронном приближении

$$\left\langle nl\left\|\hat{d}\right\|\varepsilon, l \pm 1\right\rangle = (-1)^{l_>}\sqrt{l_>}\int_0^\infty P_{nl}(r) r P_{\varepsilon l\pm 1}(r) dr \equiv d_{l\pm 1}$$

($l_> = l+1$ для перехода в состояние $l+1$ и $l_> = l$ для перехода в состояние $l-1$) следующим образом

$$\beta_{nl}(\omega) = \frac{1}{(2l+1)\left[d_{l-1}^2 + d_{l+1}^2\right]}\left[(l-1)d_{l-1}^2 + (l+2)d_{l+1}^2 - 6\sqrt{l(l+1)}\,d_{l-1}d_{l+1}\cos(\delta_{l-1} - \delta_{l+1})\right] \tag{5.2}$$

Здесь $\delta_{l\pm 1}(\varepsilon)$ - фаза фотоэлектрона, ε - его энергия, $\varepsilon = \omega - I_{nl}$, а I_{nl} – потенциал ионизации оболочки. Параметр $\beta_{nl}(\omega)$ с учетом многоэлектронных корреляций в ПСФО (или ОПСФО) выражается через дипольные матричные элементы $\left\langle \varepsilon, l \pm 1\left\|\hat{D}(\omega)\right\|nl\right\rangle \equiv D_{l\pm 1}$, которые в ПСФО становятся комплексными величинами, поэтому выражение (5.2) усложняется

$$\begin{aligned}\beta_{nl}(\varepsilon) = \frac{1}{(2l+1)\left[|D_{l-1}|^2 + |D_{l+1}|^2\right]}&\Big\{(l-1)|D_{l-1}|^2 + (l+2)|D_{l+1}|^2 + \\ &+ 6\sqrt{l(l+1)}\big[(Re\,D_{l-1}\,Re\,D_{l+1} + Im\,D_{l-1}\,Im\,D_{l+1})\cos(\delta_{l+1} - \delta_{l-1}) - \\ &- (Re\,D_{l-1}\,Im\,D_{l+1} - Im\,D_{l-1}\,Re\,D_{l+1})\sin(\delta_{l+1} - \delta_{l-1})\big]\Big\}.\end{aligned} \tag{5.3}$$

Конкретные расчеты проводились в ХФ, ПСФО, ОПСФО [1-3]. Зависимость β_i от энергии ω для подоболочек с $l > 0$ довольно сложная, и параметр $\beta_i(\omega)$ есть, вообще говоря, осциллирующая функция, значения которой, как можно увидеть из (5.2), ограничены лишь общим условием -1≤ $\beta_i(\omega)$ ≤ 2. Параметр $\beta_i(\omega)$ чувствителен к влиянию многоэлектронных корреляций, притом не только в амплитуде фотопоглощения так называемого “главного” (или сильного) перехода $nl \to \varepsilon, l+1$, но и “второстепенного” (или слабого) перехода $nl \to \varepsilon, l-1$, поскольку содержит интерференционный член с произведением соответствующих матричных элементов, тогда как в сечение $\sigma_{nl}(\omega)$ входят лишь квадраты их модулей. В качестве иллюстрации на рис.5.1 представлен параметр $\beta_{3p}(\omega)$ для Ar [3]. Видно, что ПСФО позволяет добиться весьма хорошего согласия с данными эксперимента [4,5].

Межоболочечные корреляции сильно сказываются на зависимости β_i от ω [4,6]. Хорошим примером здесь может служить параметр анизотропии $5p^6$ электронов в Xe, приведенный на рис. 5.2. В этом случае учет воздействия гигантского резонанса - возбуждений 4*d* электронов - качественно изменяет поведение параметра $\beta_{5p}(\omega)$, в котором появляется дополнительная осцилляция [3]. Сравнение с экспериментом [7-10] демонстрирует высокое качество расчета.

Проявление многочастичных корреляций в параметре угловой анизотропии обнаружено практически для всех многоэлектронных оболочек во всех средних и тяжелых атомах и ионах.

Весьма существенна роль корреляционных эффектов для *s* электронов. В нерелятивистском приближении параметр $\beta_{ns}(\omega)$ для них не зависит от ω и равен 2, что прямо следует из нерелятивистского выражения для $\beta_{ns}(\omega)$ (5.2). Независимость β_{ns} от ω устраняется при даже весьма грубом учете релятивистского эффекта - разницы в волновых функциях вылетающего фотоэлектрона $\varepsilon p_{1/2}$ и $\varepsilon p_{3/2}$ с полными угловыми моментами j = 1/2 и j = 3/2 соответственно. В результате под определенным углом θ приходит не одна электронная волна, а две, $\varepsilon p_{1/2}$ и $\varepsilon p_{3/2}$, с разными вероятностями, определяемыми амплитудами $\left\langle \varepsilon, p_{1/2} \middle| \hat{D}(\omega) \middle| ns \right\rangle$ и $\left\langle \varepsilon, p_{3/2} \middle| \hat{D}(\omega) \middle| ns \right\rangle$. Эти две волны интерферируют, и при этом может возникать существенная зависимость β_{ns} от энергии кванта ω.

Выражение для $\beta_{ns}(\omega)$ через матричные элементы фотопоглощения имеет весьма простой вид [АМ,АМУ]

$$\beta_{ns}(\omega)=\frac{\left|D_{3/2}(\omega)\right|^{2}+2\sqrt{2}\left|D_{1/2}(\omega)\right|\left|D_{3/2}(\omega)\right|cos\left(\Delta_{1/2}-\Delta_{3/2}\right)}{\left|D_{3/2}(\omega)\right|^{2}+\left|D_{1/2}(\omega)\right|^{2}}\ , \tag{5.4}$$

где амплитуды комплексны $D_{3/2(1/2)}(\omega)=\left|D_{3/2(1/2)}(\omega)\right|exp\left(i\xi_{3/2(1/2)}(\omega)\right)$, $\Delta_{3/2(1/2)}=\delta_{3/2(1/2)}+\xi_{3/2(1/2)}(\omega)$, а $\delta_{3/2(1/2)}$- фаза рассеяния электронной волны с полным моментом j = 3/2 (1/2). Матричные элементы $D_{3/2(1/2)}(\omega)$ находятся решением уравнения (3.17).

Эффект отличия $\beta_{s}(\omega)$ от постоянного нерелятивистского значения $\beta_{i}=2$ был впервые обнаружен в работе [11] в применении к 5*s* электронам Xe. Поскольку ПСФО есть нерелятивистское приближение, в нем нельзя получить значения матричных элементов $D_{3/2(1/2)}(\omega)$. Поэтому были использованы результаты релятивистского одночастичного приближения Дирака - Слетера. Из анализа поведения матричных элементов в нем было получено полуэмпирическое соотношение $d_{3/2}(\omega)=0.75\cdot d_{1/2}(\omega-\eta)$, где η = 0.35 *Ry*. Это соотношение и было использовано для получения $D_{3/2(1/2)}(\omega)$ из нерелятивистской амплитуды, определенной в ПСФО.

Оказалось, что β_{5s} очень существенно изменяется при учете межоболочечных корреляций в ПСФО - воздействии $5p^6$ и $4d^{10}$ электронов на ионизацию электронов из $5s^2$ оболочки, приобретая глубокий минимум при $\omega\approx 2.5$ *Ry*. Сказанное иллюстрируется на рис.5.3. Экспериментальные данные [12] полностью подтверждают предсказанное существование минимума, который оказывается, однако, заметно менее глубоким. Отличие от эксперимента в значительной мере устраняется при вычислении $\beta_{5s}(\omega)$ с помощью полностью релятивистской версии ПСФО – РПСФ [13], развитой на основе работ авторов данной книги.

Интересные особенности возникают в параметре угловой анизотропии для атомов с полузаполненными оболочками, где сильно влияние гигантского автоионизационного резонанса. В качестве примера на рис 5.4 приводится параметр угловой анизотропии $\beta_{3d}(\omega)$ 3*d* электронов в свободном ионе Mn^{+} [14]. Видно, что учет взаимодействия с возбуждением сравнительно глубокого электрона приводит к сильному многоэлектронному эффекту - осцилляции в параметре β, который полностью отсутствует в пренебрежении влиянием $3p\rightarrow 3d$ перехода.

5.2. Недипольные поправки к угловому распределению

С ростом энергии фотона ω дипольное приближение, в рамках которого обычно рассматривается процесс фотоионизации атома, начинает нарушаться, и недипольные поправки играют все большую роль. При не слишком больших энергиях ω главными недипольными поправками являются те, которые обусловлены наличием импульса фотона. С его учетом оператор взаимодействия электрона с электромагнитным полем определяется в форме «скорости» не выражением $\hat{d}^{\nabla} = \vec{e}\vec{\nabla}$ (4.3), а более общим выражением:

$$\hat{d}^{\nabla} = e^{i\vec{k}\vec{r}}\left(\vec{e}\,\vec{\nabla}\right), \tag{5.5}$$

Аналогично оператор в форме «длины» вместо выражения $\hat{d}^{r} = \omega\vec{e}\vec{r}$ (4.3) имеет вид:

$$\hat{d}^{r} = \omega e^{i\vec{k}\vec{r}}\left(\vec{e}\vec{r}\right), \tag{5.6}$$

где $k = \omega / c$ есть импульс фотона. Порядок величины недипольных поправок характеризуется безразмерным множителем ka_i, где k - импульс фотона и a_i - радиус ионизуемой i-ой оболочки. Если ka_i заметно меньше единицы, то вместо выражений (5.5) и (5.6) достаточно точны следующие выражения для операторов d_k^{∇} и d_k^{r}, учитывающие поправки первого порядка по степеням ka_i:

$$\hat{d}^{\nabla} = \left(\vec{e}\vec{\nabla}\right) + i\left(\vec{k}\vec{r}\right)\left(\vec{e}\vec{\nabla}\right),$$

$$\hat{d}^{r} = \omega\left[\left(\vec{e}\vec{r}\right) + i\left(\vec{k}\vec{r}\right)\left(\vec{e}\vec{r}\right)\right] \tag{5.7}$$

Заметим, что выражения для оператора $\hat{d}$ приводятся в (5.5) и (5.6) в несколько упрощенной форме. Точные выражения можно найти в цитируемых далее оригинальных работах. Дополнительные, по сравнению с (4.3), члены в операторах (5.5), (5.6) приводят к тому, что отличными от нуля оказываются не только дипольные амплитуды с изменением углового момента электрона на единицу $l_i \to l_i \pm 1$, но и квадрупольные матричные элементы, для которых угловой момент изменяется на два или вообще не изменяется, т.е. матричные элементы с $l_i \to l_i \pm 2{,}0$.

В полных сечениях фотоионизации i-оболочки дипольные и квадрупольные члены в (5.7) не интерферируют, так что второй член в (5.7) приводит к поправкам порядка $(ka_i)^2$, и при $(ka_i) << 1$ его вклад в сечение гораздо меньше, чем в угловое распределение. В угловом распределении фотоэлектронов $d\sigma_i / d\Omega$ поправки, связанные с наличием членов $\left(\vec{k}\vec{r}\right)$ в операторах $\hat{d}^{\nabla}$ и $\hat{d}^{r}$, порядка ka_i, т.е. значительно больше, чем в сечении σ_i. В результате, изучение $d\sigma_i / d\Omega$ позволяет исследовать роль электронных корреляций не только в дипольном, но и квадрупольном переходах.

Выражение для дифференциального сечения $d\sigma_i / d\Omega$ с учетом недипольных поправок в (5.2) для неполяризованного света может быть представлено в виде [15,16]:

$$\frac{d\sigma_{nl}(\omega)}{d\Omega} = \frac{\sigma_{nl}(\omega)}{4\pi}\left\{1 - \frac{\beta_{nl}(\omega)}{2}P_2(cos\,\theta) + \frac{\omega}{c}\left[\gamma_{nl}(\omega)P_1(cos\,\theta) + \eta_{nl}(\omega)P_3(cos\,\theta)\right]\right\} \quad (5.8)$$

где $\beta_{nl}(\omega)$ - параметр угловой анизотропии, входящий в (5.1), $P_i(cos\,\theta)$ с i=1,2,3 - полиномы Лежандра, $\gamma_{nl}(\omega)$ и $\eta_{nl}(\omega)$ - недипольные параметры угловой анизотропии. В одноэлектронном приближении $\gamma_{nl}(\omega)$ и $\eta_{nl}(\omega)$ выражаются через дипольные $l_i \to l' = l_i \pm 1$ и квадрупольные $l_i \to l' = l_i \pm 2{,}0$ матричные элементы $\left\langle \varepsilon, l' \middle| \hat{d}_k^{\nabla,r} \middle| nl_i \right\rangle$.

В эксперименте обычно используются источники линейно поляризованного излучения. В этом случае вместо (5.6) применяется выражение несколько иного вида [17,18]:

$$\frac{d\sigma_{nl}(\omega)}{d\Omega} = \frac{\sigma_{nl}(\omega)}{4\pi}\left\{1 + \beta_{nl}(\omega)P_2(cos\,\vartheta) + \left[\delta_{nl}^C(\omega) + \gamma_{nl}^C(\omega)cos^2\,\vartheta\right]sin\,\vartheta\,cos\,\Phi\right\}. \quad (5.9)$$

Здесь ϑ - полярный угол между векторами скорости фотоэлектрона $\vec{v}$ и поляризации фотона $\vec{e}$, а Φ есть азимутальный угол, определённый проекцией скорости $\vec{v}$ в плоскости, перпендикулярной $\vec{e}$ и содержащей вектор распространения фотона. Недипольные параметры в (5.8) и (5.9) связаны простыми соотношениями

$$\gamma_{nl}^C / 5 + \delta_{nl}^C = k\gamma_{nl}, \qquad \gamma_{nl}^C / 5 = -k\eta. \quad (5.10)$$

Результаты вычислений недипольных параметров, представленные ниже, получены как по формуле (5.8), так и по формуле (5.9).

Соответствующие выражения для $\gamma_{n\ell}(\omega)$ и $\eta_{n\ell}(\omega)$ в общем виде достаточно громоздкие:

$$\gamma_{nl}(\omega) = \frac{3}{5\left[ld_{l-1}^2 + (l+1)d_{l+1}^2\right]}\left\{\frac{l+1}{2l+3}\left[3(l+2)q_{l+2}d_{l+1}\,cos(\delta_{l+2} - \delta_{l+1}) - lq_l d_{l+1}\,cos(\delta_{l+2} - \delta_{l+1})\right] - \right.$$
$$\left. - \frac{l}{2l+1}\left[3(l-1)q_{l-2}d_{l-1}\,cos(\delta_{l-2} - \delta_{l-1}) - (l+1)q_l d_{l-1}\,cos(\delta_l - \delta_{l-1})\right]\right\}$$

(5.11)

$$
\begin{aligned}
\eta_{nl}(\omega) = {} & \frac{3}{5\left[l d_{l-1}^2 + (l+1) d_{l+1}^2\right]} \left\{ \frac{(l+1)(l+2)}{(2l+1)(2l+3)} q_{l+2} \left[5 l d_{l-1}\, cos(\delta_{l+2} - \delta_{l-1}) - \right.\right. \\
& \left. - (l+3) d_{l+1}\, cos(\delta_{l+2} - \delta_{l-1})\right] - \frac{(l-1)l}{(2l+1)(2l+1)} q_{l-2} \times \\
& \times \left[5(l+1) d_{l+1}\, cos(\delta_{l-2} - \delta_{l+1}) - (l-2) d_{l-1}\, cos(\delta_{l-2} - \delta_{l-1})\right] + \\
& \left. + 2\frac{l(l+1)}{(2l-1)(2l+3)} q_l \left[(l+2) d_{l+1}\, cos(\delta_l - \delta_{l+1}) - (l-1) d_{l-1}\, cos(\delta_l - \delta_{l-1})\right] \right\}.
\end{aligned} \tag{5.12}
$$

Здесь, в отличие от (5.3), большая компактность достигается, если матричные элементы в r-форме $d_{l\pm1}$ определяются из (3.6), тогда как квадрупольные матричные элементы $q_{l\pm2,0}$ в r-форме даются уравнением

$$
q_{l\pm2,0} = \frac{1}{2}\int_0^\infty P_{nl}(r) r^2 P_{\varepsilon l\pm2,0}(r) dr. \tag{5.13}
$$

Учтем многоэлектронные корреляции при вычислении недипольных параметров. Соответствующие выражения для $\gamma_{nl}(\omega)$ и $\eta_{nl}(\omega)$ в ПСФО могут быть получены из (5.11) и (5.12) при использовании следующих подстановок

$$
\begin{aligned}
d_{l\pm1} q_{l\pm2.0}\, cos(\delta_{l\pm2,0} - \delta_{l\pm1}) \to {} & \left[(Re\, D_{l\pm1}\, Re\, Q_{l\pm2,0} + Im\, D_{l\pm1}\, Im\, Q_{l\pm2,0}) cos(\delta_{l\pm2,0} - \delta_{l\pm1}) - \right. \\
& \left. - (Re\, D_{l\pm1}\, Im\, Q_{l\pm2,0} - Im\, D_{l\pm1}\, Re\, Q_{l\pm2,0}) sin(\delta_{l\pm2,0} - \delta_{l\pm1})\right], \\
d_{l\pm1}^2 \to {} & Re\, D_{l\pm1}^2 + Im\, D_{l\pm1}^2.
\end{aligned} \tag{5.14}
$$

Квадрупольные матричные элементы $Q_{l\pm2,0}$ получаются из решения радиальной части квадрупольного ПСФО уравнения, подобного уравнению (3.17)

$$
\langle \nu_2 | Q(\omega) | \nu_1 \rangle = \langle \nu_2 | \hat{q} | \nu_1 \rangle + \sum_{\nu_3,\nu_4} \frac{\langle \nu_3 | Q(\omega) | \nu_4 \rangle (n_{\nu_4} - n_{\nu_3}) \langle \nu_4 \nu_2 | U | \nu_3 \nu_1 \rangle}{\varepsilon_{\nu_4} - \varepsilon_{\nu_3} + \omega + i\eta(1 - 2n_{\nu_3})}. \tag{5.15}
$$

Здесь в r-форме $\hat{q} = r^2 P_2(\cos\theta)$. Численная процедура для решения уравнения (5.15) подобна процедуре решения уравнения для дипольной компоненты. Это уравнение может быть обобщено для учета перестройки и релаксации таким же образом, как и уравнения для дипольной компоненты.

Выражения для недипольных параметров впервые были получены в работах [17,18]. Для s оболочек выражение (5.12) резко упрощается:

$$
\gamma_{nl}(\omega) = -\eta_{nl}(\omega) = \frac{6q_2}{5d_1} cos\left(\delta_d - \delta_p\right), \tag{5.16}
$$

где $d_1(q_2)$ - дипольный (квадрупольный) матричный элемент $\langle \varepsilon, p(d) | d(q) | ns \rangle$, а $\delta_{p(d)}$ - фаза рассеяния $p(d)$-фотоэлектрона. Для того, чтобы учесть многоэлектронные корреляции, следует решить уравнение (3.17) отдельно для дипольных и для квадрупольных матричных элементов.

Прежде чем обсуждать результаты ХФ и ПСФО вычислений недипольных парамеров, оценим их значения и приведём результаты расчётов в простейшем одночастичном приближении – водородоподобном. Оценим величину $\gamma_{nl}(\omega)$, определяемую в (5.11). Около порога ионизации отношение q_2/d_1 можно оценить, как $q_2/d_1 \sim a_{ns}$, где a_{ns} есть радиус ионизуемой оболочки, так что у порога вклад недипольного параметра, согласно (5.16), определяется соотношением

$$\frac{\omega}{c}\gamma_{ns} \sim \frac{\omega}{c}a_{ns} = ka_{ns} \tag{5.17}$$

Для внешних оболочек $\omega \approx 1$, $a_{ns} \approx 1$ и $\gamma_{nl}(\omega) \approx 1/137$. Простейшее водородное приближение, т. е. чисто кулоновского поля ядра с зарядом Z, даёт ещё много меньшее значение. Действительно, в этом случае имеем

$$\frac{q_2^K}{d_1^K} = \frac{2\sqrt{Z^2+4v^2}}{Z^2+v^2}, \tag{5.18}$$

$$\cos(\delta_d^K - \delta_p^K) = \frac{2v}{\sqrt{Z^2+4v^2}}, \tag{5.19}$$

где v - скорость фотоэлектрона. Отсюда получаем выражение

$$k\gamma_{1s} = \frac{12}{5}\frac{v}{c}, \tag{5.20}$$

которое обращается в нуль на пороге фотоионизации, в согласии с давними результатами А. Зоммерфельда [19]. Такое поведение есть результат деликатного баланса между фазами и матричными элементами q и d в чисто кулоновском поле, а именно соотношения

$$\delta_d^K - \delta_p^K = \frac{\pi}{2} - arcsin\frac{2v}{\sqrt{Z^2+4v^2}}. \tag{5.21}$$

Наличие, наряду с кулоновским, короткодействующего потенциала приводит к нарушению соотношения (5.20) и возвращает нас к оценке (5.17). Однако, как свидетельствуют приведенные далее результаты расчётов, вклад недипольных поправок может быть гораздо больше и даже превышать единицу. Качественно, причина этого кроется либо в особой малости дипольного, либо в особо большой величине квадрупольного матричных элементов.

Вычисления в рамках ХФ и ПСФО и сравнения результатов вычислений продемонстрировали большую роль внутри- и межоболочечных корреляций. Неожиданно обнаружилось, что в некоторых случаях недипольные поправки велики и даже вполне сравнимы с вкладом дипольных матричных элементов практически у порога ионизации наружных подоболочек. Это происходит тогда, когда вклад дипольного матричного элемента по каким-либо причинам подавлен. Интересным примером здесь является $3s$ подоболочка в Ar. Ее дипольный матричный элемент D_1 сильно подавлен и на пороге $3s$ подоболочки равен -0.15 в ПСФО при учете влияния $3p^6$ электронов, и 0.1 в ХФ. Квадрупольный матричный элемент Q_2 на пороге $3s$ подоболочки имеет нормальную величину и равен примерно 5 (в атомной системе единиц). При пороговой частоте импульс фотона k равен 0.0156, так что произведение kQ_2 = 0.08, что всего в два раза меньше, чем D_1 [20].

Возможность экспериментального измерения недипольных параметров угловой анизотропии появилась недавно, благодаря созданию новых источников электромагнитного излучения сплошного спектра, обладающих большой интенсивностью - синхротронов и накопителей. В результате появились экспериментальные данные для нескольких атомов благородных газов [21], главным образом для их внутренних оболочек и значительных энергий фотоэлектронов. С точки зрения выяснения роли многоэлектронных корреляций особый интерес представляют, однако, наружные и промежуточные оболочки и фотоэлектроны небольших энергий. Примером может служить расчет параметра $\gamma_{3s}(\omega)$ для Ar [22]. Выражение для параметров $\gamma_{nl}(\omega)$ и $\eta_{nl}(\omega)$ при учете многоэлектронных корреляций мало отличается от (5.16):

$$\gamma_{nl}(\omega) = -\eta_{nl}(\omega) = \frac{6|\ Q_2(\omega)\ |}{5|\ D_1(\omega)\ |} cos(\Delta_d - \Delta_p), \tag{5.22}$$

где использованы те же обозначения, что и в (5.4). Здесь $|D_1(\omega)|$ и $|Q_2(\omega)|$ - модули дипольного и квадрупольного матричного элемента в ПСФО – решения уравнения (3.17) в дипольном и квадрупольном каналах, а фазы задаются соотношением $\Delta_{p(d)} = \delta_{p(d)} + \xi_{p(d)}$. Поправка к фазе ξ_d определяется наличием мнимой части в квадрупольном матричном элементе ПСФО

$$Q_2(\omega) = |Q_2(\omega)| exp(i\xi_d) \tag{5.23}$$

Как следует из формулы (5.22), параметр $\gamma(\omega)$ существенно увеличивается вблизи нулей матричного элемента $|D_1(\omega)|$ и максимумов амплитуды $|Q_2(\omega)|$. В нулях $|D_1(\omega)|$ мало само сечение фотопоглощения, которое для *ns* подоболочки определяется выражением $\sigma_{ns}(\omega) \cong |D_1(\omega)|^2$, и это затрудняет наблюдение эффекта увеличения параметра $\gamma_{ns}(\omega)$. Иначе обстоит дело с максимумом в квадрупольной амплитуде $|Q_2(\omega)|$. Амплитуда $|Q_2(\omega)|$ может обладать значительным максимумом вблизи дискретного квадрупольного перехода из внутренней оболочки, т.е. вблизи автоионизационного резонанса [23,24]. Значительные усиления $\gamma_{ns}(\omega)$ возникают также в окрестности других, нежели рассмотренных в этих работах, квадрупольных резонансов (резонансов формы) [25].

Для того чтобы облегчить обнаружение недипольных поправок, сечение (5.9) измеряется под так называемым магическим углом, равным $\vartheta_m = 57.3^\circ$, для которого $P_2(\cos\vartheta_m) = 0$, так что вклад от члена с β_{nl} отсутствует. Под углом ϑ_m члены $\delta_{nl}(\omega)$ и $\gamma_{nl}(\omega)$ входят в следующей комбинации

$$\lambda_{nl} = \gamma_{nl} + 3\delta_{nl} \tag{5.24}$$

Так, исследование $\gamma_{1s}(\omega)$ в He позволило изучить детально профиль автоионизационного квадрупольного резонанса, практически невидимого в сечении поглощения фотонов [26]. На последующих рисунках приведены результаты наших расчетов недипольных параметров атомов благородных газов [27]. Рис.5.5 представляет результаты для He, где $\gamma_{nl}(\omega)$ вблизи порога имеет качественно водородоподобное поведение и количественно отличается от (5.20). Поле иона-остатка He^+ почти чисто кулоновское, что и определяет качественное согласие с (5.20), монотонность и близость ХФ значений в форме длины и результатов ПСФО.

Рис 5.6 представляет $\gamma_{2s}(\omega)$ для Ne в широком диапазоне энергий фотоэлектрона, вплоть до 1500 *eV*. Роль корреляций ПСФО вполне заметна во всем диапазоне рассмотренных энергий. Ничего практически не осталось от чисто водородного поведения, однако подход ХФ, хотя и плох количественно, качественно передает зависимость $\gamma_{2s}(\omega)$. Эта функция дважды меняет знак. Первый раз у самого порога при ω=78 *eV*, где меняется знак $\cos(\Delta_p - \Delta_d)$ (см. (5.22)). Следующий нуль при энергии 377 *eV* возникает от смены знака квадрупольного матричного элемента Q_2.

На рис.5.7 представлены результаты для λ_{2p} для Ne, определяемого уравнением (5.24). Общий характер кривой подобен зависимости, изображенной на рис. 5.5 для He.

Рис.5.8 изображает γ_{3s} для Ar. Уже кривая в приближении ХФ абсолютно не водородоподобна – γ_{3s} убывает от порога и становится отрицательной, затем начинает нарастать, проходя через нуль. Корреляции ПСФО в диапазоне энергий первых двух Ридбергов изменяют γ_{3s} кардинально, добавляя новую осцилляцию. Эта особенность является отражением существования интерференционного резонанса, о котором мы говорили в Разделе 4.2. Значение γ_{3s} велико уже у самого порога, изменяясь от +1 до –1.5. Максимум при энергии 5 *eV*, изменение знака при 7.6 *eV*, а также минимум при 8.9 *eV*, обусловлены поведением квадрупольного матричного элемента Q_2 и его фазы Δ_2.

Рис. 5.9 изображает параметр λ_{3p} для Ar. В пределах первых 200*eV* параметр λ_{3p} быстро нарастает практически от нуля, проходит максимум, а затем дважды проходит через нуль. Роль корреляций нарастает с энергией фотоэлектрона ε. Нули в λ_{3p} появляются в результате компенсации различных членов в (5.11) и (5.12).

Рис.5.10 изображает параметр γ_{4s} для Kr. Ситуация здесь во многом аналогична той, что имеет место для γ_{3p} в Ar и изображена на рис. 5.8. Параметр γ_{4s} по абсолютной величине больше, чем в Ar. Дополнительная вариация в рамках ПСФО есть отражение интерференционного резонанса в сечении фотоионизации 4*s* электронов, о котором мы говорили в Разделе 4.2.

На рис. 5.11 представлен недипольный параметр λ_{4p} для 4*p* электронов Kr. Отчетливо видна роль электронных корреляций как разница между сплошной (ПСФО) и пунктирной (ХФ) линиями. Однако самым впечатляющим является осцилляция в λ_{4p} в Kr, наблюдаемая уже в приближении ХФ. Абсолютная величина λ_{3p} в Ar примерно в четыре раза меньше, чем λ_{4p} в Kr. Заметим, что роль корреляций значительна и при высоких энергиях фотона ω (ср. Раздел 4.7)

На рис. 5.12 приведены результаты расчета параметра γ_{5s}^{C} в Xe. Общее поведение γ_{5s}^{C} совпадает с поведением γ_{4s}^{C} в Kr (см. рис. 5.10). Однако существенным отличием является появление максимума в окрестности порога ионизации 4*d* оболочки при энергиях фотонов 100-180 *эВ*. Этот максимум обусловлен корреляционным взаимодействием с 4*d* оболочкой, описанным в разделе 4.2. Измерения параметра γ_{5s}^{C} в

Xe [28] подтвердили, по меньшей мере качественно, предсказание теории. Был обнаружен не только максимум, обусловленный влиянием дипольных возбуждений $4d^{10}$ электронов, но и квадрупольных - $4p^6$ электронов. Оказалось, что в канале $4p \to \varepsilon f$ имеется квадрупольный гигантский резонанс, что и приводит к небольшому дополнительному максимуму на высокоэнергичной стороне главного максимума. Стоит иметь в виду, что в сечении фотоионизации $5s^2$ электронов Xe вклад квадрупольного гигантского резонанса ненаблюдаемо мал.

На рис. 5.13 представлен недипольный параметр λ_{5p} для $5p$ электронов Xe. Здесь также наблюдается поведение, аналогичное параметру λ_{4p} в Kr.

5.3 Угловое распределение фотоэлектронов из спин-орбитальных дублетов

В разделе 5.1 была продемонстрирована важная роль внутриоболочечных и межоболочечных многоэлектронных корреляций, приводящих к появлению дополнительных осцилляций параметра угловой анизотропии β как функции частоты фотона ω. Кроме того, корреляционные эффекты, вместе со спин-орбитальным взаимодействием, которое по существу является релятивистским эффектом, ведут к качественному изменению параметра $\beta(\omega)$ для s электронов. Вместо того чтобы быть равным 2, как это следует из нерелятивистского приближения, он становится осциллирующей функцией энергии ω. Однако проблема влияния корреляций внутри спин-орбитального дублета на параметр угловой анизотропии представляет особый интерес. Выше в разделе 4.5 была показана важная роль взаимодействия электронов внутри спин-орбитального дублета. Естественно предположить, что это взаимодействие существенно скажется и на параметрах угловой анизотропии, как дипольных, так и с учетом недипольных поправок. Начнем с дипольного параметра $\beta_{nl}(\omega)$ фотоэлектронов, относящихся к отдельным уровням дублета. Покажем, что $\beta_{nl}(\omega)$ для $3d$ электронов в Xe, Cs, Ba находится под заметным влиянием внутри-дублетных корреляций. Это следует из поведения парциальных сечений фотоионизации $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ уровней.

В разделе 4.5 было показано, что взаимодействие между электронами, принадлежащими различным компонентам спин-орбитального дублета $3d_{3/2}$ и $3d_{5/2}$ в Xe, Cs и Ba воздействуют очень сильно на парциальное сечение фотоионизации. Именно благодаря этому взаимодействию парциальное сечение $3d_{5/2}$ приобретает дополнительный максимум. Это позволило объяснить недавнее экспериментальное наблюдение этого максимума в Xe [29] и одновременно предсказать ещё более сильные проявления внутри-дублетного взаимодействия для $3d$ электронов в Cs и Ba [30]. Оказывается, что и у параметра $\beta_{5/2}(\omega)$ появляется дополнительный максимум в Xe и дополнительные осцилляции в Cs и Ba.

Рассмотрим $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ электроны аналогично тому, как рассматривались электроны на полузаполненных атомных уровнях. Это позволяет применять непосредственно метод учета межэлектронных корреляций, развитый в разделе 4.5 для полузаполненных подоболочек. Обменом между этими двумя типами электронов пренебрегается, а именно, между шестью $3d_{5/2}$ (называемыми "вверх") электронами, и четырьмя $3d_{3/2}$ (называемыми "вниз") электронами. Исследуем влияние "вверх" и "вниз" электронов друг на друга и покажем, что воздействие "вниз" электрона на "вверх" сильно проявляется в поведении параметра $\beta(\omega)$. Во всех рассматриваемых случаях действие $3d_{3/2}$ электронов на $3d_{5/2}$ ведет к изменению параметров $\beta_{5/2}(\omega)$, в то время как действие $3d_{5/2}$ на $3d_{3/2}$ существенно меньше или даже пренебрежимо мало. В данном разделе нам интересен случай $l = 2$, для которого $\beta_{n2}(\omega)$ определяется формулой (5.2).

Как и в разделе 4.5, к рассматриваемой проблеме применим тот же нерелятивистский подход [30]. Поскольку само расщепление $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ уровней является релятивистским эффектом, проблему следовало бы целиком рассматривать, используя релятивистское приближение - РПСФ [31]. Однако такое рассмотрение гораздо сложнее, чем нерелятивистское ПСФО. Подтверждением целесообразности использования более простого нерелятивистского подхода является сравнение результатов СП ОПСФО и РПСФ с перестройкой для $\beta_{5/2}(\omega)$ и $\beta_{3/2}(\omega)$ для $3d$ электронов в Xe, которые почти совпадают [32].

Результаты для $\beta_{5/2}(\omega)$, $\beta_{3/2}(\omega)$ в Xe, Cs и Ba изображены на рис.5.14-5.16, соответственно. Каждый рисунок представляет результаты в ХФ и СП ОПСФО для обоих уровней, 5/2 и 3/2. Видно, что уже в приближении ХФ результаты необычны. Включение внутридублетного взаимодействия меняет кривые $\beta_{5/2}(\omega)$ вполне заметно для Xe, тогда как изменения для Cs и Ba буквально драматические.

Рис.5.14 показывает поведение $\beta_{3d}(\omega)$ для $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ уровней Xe с учетом электронных корреляций (ПСФО) и без них (ХФ). Хотя кривые необычны даже без учета взаимодействия, включение взаимодействия между $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ электронами добавляет качественно новую, но относительно малую особенность в параметре $\beta(\omega)$ для $3d_{5/2}$ электронов, а именно, специфический максимум в пороговой области $3d_{3/2}$, отмеченный стрелкой. Заметим, что дополнительный максимум на рис. 5.14 является результатом влияния $3d_{3/2}$ электронов на $3d_{5/2}$ электроны в дипольном канале (так же, как и в парциальном сечении, см. раздел 4.5) [30]. В эксперименте [28] можно видеть этот небольшой дополнительный максимум в параметре $\beta_{5/2}(\omega)$ при той же ω, что и в расчёте.

Рис. 5.15 представляет аналогичные результаты для Cs. Включение внутридублетного взаимодействия ведет к новой особенности: резкому и высокому максимуму в $\beta_{5/2}(\omega)$, тогда как $\beta_{3/2}(\omega)$, хотя и имеет, как и $\beta_{5/2}(\omega)$, минимум около порога, под действием внутридублетного взаимодействия остается без изменений. Происхождение дополнительного максимума в Cs такое же, как в Xe, но действие $3d_{3/2}$ электронов на $3d_{5/2}$ в Cs гораздо существеннее, чем в Xe. Это действие сильнее потому, что расщепление между $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ уровнями в Cs больше, чем в Xe, и порог уровня с $j = 3/2$ лежит в области практически постоянных ХФ значений $\beta_{5/2}(\omega)$. Это объясняет, почему обратное влияние, а именно $3d_{5/2}$ электронов на $3d_{3/2}$, очень мало. Что же касается соответственных дипольных матричных элементов и матричных элементов межэлектронного взаимодействия, то они одного порядка для переходов с $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ уровней.

Рис. 5.16 содержит результаты для Ba. Здесь $\beta(\omega)$ значительно отличается от предыдущих случаев в Xe и Cs. Обе кривые, для $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ электронов, имеют максимум, вместо минимума в Cs, уже вблизи порогов. Включение внутридублетного взаимодействия качественно влияет на $\beta_{5/2}(\omega)$, повышая максимум у порога $3d_{5/2}$ и приводя к глубокому дополнительному минимуму ниже $3d_{3/2}$ порога, в области дискретного возбуждения этих электронов.

Представленные результаты интересны как объекты для экспериментального изучения, так как предсказание дополнительной вариации дипольного параметра, которая появляется благодаря внутридублетному взаимодействию, далеко не тривиально. Интересно было бы исследовать модификацию $\beta(\omega)$ для $3d$ электронов в других атомах, например, таких как I, и в их положительных и отрицательных ионах. Такой же эффект, который наблюдался здесь, может определенно иметь место везде, где многоэлектронная оболочка расщепляется на два уровня любым статическим внешним полем, например, обусловленным молекулярной связью.

5.4 Внутридублетные корреляции в недипольных параметрах

В этом разделе, следуя работам [33,34], мы покажем на примере $3d$ электронов Xe, Cs, Ba, что включение взаимодействия между $3d_{3/2}$ и $3d_{5/2}$ электронами приводит также к качественному изменению недипольных параметров, характеризующих угловое распределение фотоэлектронов. Существенно отметить, что это первое в литературе изучение этих параметров для d подоболочек. Оказалось, специфический максимум появляется в параметрах для $3d_{5/2}$ уровня, тогда как $3d_{3/2}$ остается без изменения. Результаты, как и для $\beta(\omega)$ в предыдущем разделе, получены в рамках приближения СП ОПСФО, в котором учитывается наряду с эффектами ПСФО перестройка всех атомных электронов, вызванная появлением $3d$ вакансии. Представляется естественным, что при сильном изменении матричных элементов фотоионизации все характеристики этого процесса, включая, например, поляризацию фотоэлектронов, (см. [35] и ссылки в ней), также заметно изменяются.

Выражения для недипольных параметров асимметрии через дипольные d_i и квадрупольные q_i матричные элементы приведены в формулах (5.11)-(5.12). Наибольшее внимание в проведенных до настоящего момента расчетах обращено на подоболочки с $l = 0$ и $l = 1$, где эти выражения весьма просты. В этом разделе нас интересует случай $l = 2$, и рассматриваться будут недипольные параметры в (5.9) [17] определяемые соотношениями

$$\delta_{n2}^{C} = \frac{\omega}{c}\left(\gamma_{n2} + \eta_{n2}\right); \qquad \gamma_{n2}^{C} = -5\frac{\omega}{c}\eta_{n2}. \tag{5.25}$$

Как уже отмечалось, недипольные параметры обычно измеряются (к примеру, см. [21]) под магическим углом $\vartheta_m = 57.3^\circ$, когда из эксперимента может быть получена только комбинация недипольных параметров $\lambda_{n2} = \gamma_{n2} + 3\delta_{n2}$ (ниже мы опустим нижний индекс $n2$ в этих параметрах). Результаты наших вычислений для $\gamma + 3\delta$ и отдельные данные по γ и δ даны для Xe, Cs, Ba приводятся ниже.

Рис. 5.17 показывает γ для $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ электронов Xe с электронными корреляциями (ПСФО) и без них (ХФ). Включение внутридублетного взаимодействия добавляет специфический максимум в недипольном параметре для $3d_{5/2}$ электронов, отмеченный на рисунке стрелкой. В целом влияние междублетного взаимодействия в

Xe остается слабым. Остановимся более подробно на случае Cs. Рис. 5.18 и 5.19 дают результаты для параметров γ и δ для обоих компонент $3d$ дублета, в то время как рис. 5.20 представляет результаты для комбинации $\gamma + 3\delta$. Так как параметр δ примерно на порядок меньше, чем γ, сумма $\gamma + 3\delta$ определяется параметром γ. Заметим, что хотя кривые весьма необычны, не монотонны даже без учета междублетного взаимодействия, его включение добавляет качественно новую особенность к обоим недипольным параметрам для $3d_{5/2}$ электронов, а именно, специфический максимум в области $3d_{3/2}$ порога. Эти дополнительные максимумы являются результатом влияния $3d_{3/2}$ электронов на $3d_{5/2}$ в дипольном канале, так же как и в парциальном сечении [30] и в дипольных параметрах угловой анизотропии [32]. Определенный интерес представляют также быстрые вариации и изменение знака параметра δ для $3d_{5/2}$ уровня около его порога, обусловленные взаимодействием $3d_{3/2}$ и $3d_{5/2}$ электронов.

Результаты для параметра $\lambda = \gamma + 3\delta$ для атома Ba приведены на рис 5.21. Здесь основной эффект связан с мощным автоионизационным резонансом, появляющимся в $3d_{5/2}$ канале и приведенном на рис. 4.30.

В этом разделе мы исследовали происхождение и природу максимумов в недипольных параметрах. В принципе это могло быть результатом роста квадрупольных матричных элементов $q_{l\pm2,0}$ или $Q_{l\pm2,0}(\omega)$. Однако выяснилось, что появление максимумов в параметрах происходит в основном за счет изменения знаменателя, величина которого определяется матричным элементом $D_{l\pm1}(\omega)$. Именно минимум знаменателя и приводит к корреляционному максимуму в обоих недипольных параметрах γ и δ, так же как и в их комбинации $\lambda = \gamma + 3\delta$. Заметим, что параметр дипольной анизотропии $\beta_{n2}(\omega)$ также имеет узкий максимум для той же энергии кванта и вызван той же причиной, что и максимум в недипольных параметрах γ и δ.

5.5. Спиновая поляризация фотоэлектронов

Большой теоретический и практический интерес представляет рассмотрение спиновой поляризации фотоэлектронов в процессах фотоионизации. В работах [36-38] было предсказано появление спиновой поляризации фотоэлектронов, обусловленной спин-орбитальным расщеплением атомных уровней с угловым моментом $l \geq 1$. Так как оператор взаимодействия электромагнитного излучения с атомами не действует непосредственно на спиновые переменные, спиновая поляризация фотоэлектронов может появиться только в результате воздействия спин-орбитального взаимодействия на процесс фотоионизации. Ранее, до появления работ [36,37], на протяжении нескольких десятилетий считалось, что заметная спиновая поляризация может возникнуть только при ионизации глубоких оболочек атомов с большим Z (что соответствует релятивистским энергиям квантов) за счет спин-орбитального взаимодействия в непрерывном спектре, которое пропорционально параметру $(\alpha Z)^2$, где α - постоянная тонкой структуры. Соответственно, ожидаемая степень поляризации считалась пропорциональной $(\alpha Z)^2$ и в большинстве случаев должна была быть мала. Лишь в 1969г. У. Фано [39] впервые предсказал возможность появления спиновой поляризации фотоэлектронов со степенью поляризации порядка единицы при поглощении циркулярно поляризованного света наружными s-оболочками атомов щелочных металлов. Эффект Фано также обусловлен спин-орбитальным взаимодействием в непрерывном спектре и возникает в окрестности Куперовского минимума сечения. Последний имеет место вблизи порогов ионизации, то есть при энергии фотонов порядка нескольких электронвольт. При этом малость порядка $(\alpha Z)^2$ проявляется не в степени поляризации фотоэлектронов, а в величине сечения фотоионизации. При удалении в обе стороны от Куперовского минимума сечение фотоионизации возрастает, а степень поляризации падает.

В работах [36,37] было впервые показано, что при разделении по энергии электронов, выбитых из различных подуровней тонкой структуры атомных оболочек с угловым моментом $l \geq 1$, фотоэлектроны, вылетающие в определенном направлении, оказываются поляризованными при поглощении квантов любой энергии и любой поляризации, в том числе при поглощении неполяризованного излучения. Рассмотрение было выполнено в электрическом дипольном приближении и справедливо при любых энергиях квантов от порогов ионизации вплоть до нескольких килоэлектронвольт. Этот эффект возникает благодаря спин-орбитальному расщеплению связанных состояний, и этим кардинально отличается от спиновых эффектов, рассмотренных ранее для s-оболочек, в которых спин-орбитальное расщепление отсутствует. Если спин-орбитальное расщепление удается разрешить экспериментально, то поляризация фотоэлектронов возникает за счет дипольных правил отбора, и степень поляризации оказывается порядка единицы при любой энергии квантов. При этом малость порядка $(\alpha Z)^2$ определяет величину тонкого расщепления уровней, а не поляризацию электронов. В настоящее время не представляет труда разрешить тонкое расщепление уровней в атомах уже с $Z \geq 10$. Аналогичный эффект возникает также при фотоионизации неориентированных (вращающихся) молекул [35]. Таким образом, было показано, что поляризация фотоэлектронов является не исключением, а скорее правилом.

В общем случае угловое распределение фотоэлектронов с определенной ориентацией спина, выбитых из неполяризованных атомов (а также неориентированных молекул) циркулярно поляризованным излучением, дается следующим выражением [36-38]

$$I_j^{\pm 1}\left(\vec{k},\vec{s}\right) = \frac{\sigma(\omega)}{8\pi}\times$$
$$\left\{1-\frac{\beta}{2}P_2\left(\vec{k}\vec{s}_\gamma\right)+A^j\left(\vec{s}\vec{s}_\gamma\right)-\alpha^j\left[\frac{3}{2}\left(\vec{k}\vec{s}_\gamma\right)\left(\vec{k}\vec{s}\right)-\frac{1}{2}\left(\vec{s}\vec{s}_\gamma\right)\right]-2\xi^j\left(\vec{s}\left[\vec{k}\times\vec{s}_\gamma\right]\right)\left(\vec{k}\vec{s}_\gamma\right)\right\} \tag{5.26}$$

Здесь $\vec{k},\ \vec{s},\ \vec{s}_\gamma$ суть единичные векторы в направлениях импульса фотоэлектрона, спина фотоэлектрона и спина (или импульса) фотона соответственно, j - полный момент электрона в начальном состоянии, P_2 – полином Лежандра. Как следует из приведенного выражения, угловое распределение фотоэлектронов определяется пятью параметрами, а именно сечением фотоионизации $\sigma(\omega)$, параметром анизотропии углового распределения β, и тремя спиновыми параметрами A, α и ξ. Параметры $A^j(\omega)$, $\alpha^j(\omega)$ и $\xi^j(\omega)$ задаются следующими соотношениями:

$$\begin{gathered}
A^j(\omega)=\frac{(-1)^{j-l-1/2}\,l(l+1)}{2j+1}\,\frac{l d_{l+1}^2-(l+1)d_{l-1}^2}{d_{l-1}^2+d_{l+1}^2},\\
\alpha^j(\omega)=\frac{2(-1)^{j-l-1/2}\,l(l+1)}{(2j+1)(2l+1)}\Big[l(l+2)d_{l+1}^2-\left(l^2-1\right)d_{l-1}^2-\\
-3\sqrt{l(l+1)}\,d_{l+1}d_{l-1}\cos(\delta_{l+1}-\delta_{l-1})\Big]\times\left[d_{l-1}^2+d_{l+1}^2\right]^{-1},\\
\xi^j(\omega)=\frac{3(-1)^{j-l-1/2}\sqrt{l(l+1)}}{2j+1}\,\frac{d_{l+1}d_{l-1}\sin(\delta_{l+1}-\delta_{l-1})}{d_{l-1}^2+d_{l+1}^2}.
\end{gathered} \tag{5.27}$$

В ПСФО параметры $A^j(\omega)$, $\alpha^j(\omega)$ и $\xi^j(\omega)$ можно получить, используя следующие подстановки:

$$\begin{gathered}
d_{l\pm1}^2 \to |D_{l\pm1}|^2,\\
d_{l+1}d_{l-1}\cos(\delta_{l+1}-\delta_{l-1}) \to Re\left[D_{l+1}D_{l-1}^{*}e^{i(\delta_{l+1}-\delta_{l-1})}\right],\\
d_{l+1}d_{l-1}\sin(\delta_{l+1}-\delta_{l-1}) \to Im\left[D_{l+1}D_{l-1}^{*}e^{i(\delta_{l+1}-\delta_{l-1})}\right].
\end{gathered} \tag{5.28}$$

При поглощении линейно поляризованного и неполяризованного излучения члены, пропорциональные параметрам A и α, как показано в [37], не дают вклада, и спиновая поляризация определяется лишь одним последним членом приведенного выше уравнения (5.26).

Эксперименты, выполненные для различных атомов, полностью подтвердили предсказания теории. В качестве примера на рис.5.22 приведены результаты расчетов в ПСФО [40] и измерений [41] параметра β и поляризационных параметров при фотоионизации атома Tl в окрестности автоионизационного резонанса $6s6p^2$ (J=1/2). Следует отметить, что экспериментальные данные появились лишь через 10 лет после публикации результатов расчета. Наиболее систематические измерения поляризационных параметров были выполнены для $5p^6$ оболочки Xe в [42-44]. Результаты последних измерений приведены на рис. 5.23 вместе с результатами различных расчетов, включая расчеты в ПСФО [38,45,46]. Приведенные на рисунке величины, *переданная* спиновая поляризация P_{transf} и *динамическая* спиновая поляризация P_{dyn}, определяются следующими выражениями

$$P_{transf} = -\frac{(A+\alpha/2)}{1+\beta/4} \tag{5.29}$$

$$P_{dyn} = \frac{-2\xi}{1+\beta/4} \tag{5.30}$$

Как следует из рисунка, расчеты в ПСФО [46] правильно описывают резкие изменения степени поляризации электронов, обусловленные как Куперовским минимумом в сечении фотоионизации $5p^6$ оболочки Xe, так и многоэлектронными корреляциями, главным образом взаимодействием между $5p^6$ и $4d^{10}$ оболочками.

Измерения степени поляризации фотоэлектронов впервые позволили рассмотреть фундаментальную квантово-механическую задачу - извлечение матричных элементов и разностей фаз из результатов измерений, что принято называть полным квантово-механическим экспериментом. Действительно, процесс фотоионизации атомов в дипольном приближении определяется пятью теоретическими величинами, именно - тремя дипольными матричными элементами, соответствующими переходам $l, j \rightarrow l$-1, j-1; l±1, j; l+1, j+1, и двумя разностями фаз между этими переходами. Эти теоретические величины могли бы быть определены из результатов измерений углового распределения фотоэлектронов с определенной ориентацией спина, который характеризуется как раз пятью параметрами. Однако более детальное исследование этого вопроса позволило установить, что поляризационные параметры не являются независимыми, и между ними имеется следующее соотношение [47]

$$(A+\alpha/2)^2+(2\xi)^2=\tfrac{1}{2}(1+\beta)\left(1-\tfrac{1}{2}\beta+A-\alpha\right). \qquad (5.31)$$

Вследствие этого только 4 величины могут быть определены из эксперимента. В качестве наиболее разумного приближения в работе [47] предложено считать, что в конкретном случае $5p^6$ оболочки Xe разность фаз между $d_{5/2}$ и $d_{3/2}$ парциальными волнами равна нулю. После этого можно определить оставшиеся 4 параметра из экспериментальных данных. Матричные элементы и разности фаз, полученные таким способом из экспериментальных данных для $5p$ оболочки Xe [41], находятся в хорошем согласии с результатами расчетов в ПСФО [38,45,46].

Обнаружение почти полной поляризации фотоэлектронов может иметь важное практическое значение как метод создания пучков поляризованных электронов.

5.6. Недипольные поправки к спиновой поляризации фотоэлектронов

Недипольные поправки могут давать существенный вклад не только в угловое распределение, но также и в спиновую поляризацию фотоэлектронов. Этот вопрос наиболее подробно исследовался в работах [48-50]. При учете недипольных поправок в низшем приближении по импульсу фотона, изложенном в разделе 5.2, угловое распределение фотоэлектронов с определенной ориентацией спина, приведенное в (5.26), значительно усложняется

$$\begin{aligned}
I_j^{\pm1}(\vec{k},\vec{s}) &= \frac{\sigma(\omega)}{8\pi}\times\Biggl\{1-\frac{\beta}{2}P_2(\vec{k}\vec{s}_\gamma)+A^j(\vec{s}\vec{s}_\gamma)-\alpha^j\left[\frac{3}{2}(\vec{k}\vec{s}_\gamma)(\vec{k}\vec{s})-\frac{1}{2}(\vec{s}\vec{s}_\lambda)\right]- \\
&-2\xi^j\left(\vec{s}\left[\vec{k}\times\vec{s}_\gamma\right]\right)(\vec{k}\vec{s}_\gamma)-3\sqrt{6/5}\,(\vec{k}\vec{s}_\gamma)Re\,b_{110}^j(E1,E2)-2\sqrt{21/5}\,P_3(\vec{k}\vec{s}_\gamma)Re\,b_{330}^j(E1,E2)+ \\
&+\frac{9}{\sqrt{5}}\left(\vec{s}\left[\vec{k}\times\vec{s}_\gamma\right]\right)Im\,b_{111}^j(E1,E2)-3\left[3(\vec{k}\vec{s}_\gamma)(\vec{s}\vec{s}_\gamma)-(\vec{k}\vec{s})\right]Re\,b_{211}^j(E1,E2)- \\
&-3\sqrt{\frac{3}{2}}\left[2(\vec{k}\vec{s}_\gamma)(\vec{s}\vec{s}_\gamma)-(\vec{k}\vec{s})\left[5(\vec{k}\vec{s}_\gamma)^2-1\right]\right]Re\,b_{231}^j(E1,E2)\Biggr\}
\end{aligned} \qquad (5.32)$$

где параметры b определяются соотношением

$$\begin{aligned}
b_{kLx}^j(\pi\Lambda,\pi'\Lambda') &= \frac{\sqrt{6}}{N}\sum_{l_1 l_2}\hat{l}\,\sqrt{\hat{l}_1\hat{l}_2\hat{L}}\,(i)^{l_2-l_1}(-1)^{l-j-\frac{1}{2}+l_2-x+\Lambda+\Lambda'}\,exp\left[i\left(\delta_{l_1}-\delta_{l_2}\right)\right]\times \\
&\times\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{Bmatrix} 1/2 & 1/2 & x \\ l & l & j\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} k & L & x \\ \Lambda' & l_2 & l \\ \Lambda & l_1 & l\end{Bmatrix}\left\langle \varepsilon l_1\|H(\pi\Lambda)\|nlj\right\rangle\left\langle nlj\|H^*(\pi'\Lambda')\|\varepsilon l_2\right\rangle
\end{aligned} \qquad (5.33)$$

Здесь были использованы обозначения

$$\hat{l} \equiv 2l+1,\ N = \sum_{l_1} \left| \left\langle \varepsilon l_1 \left\| H(E1) \right\| nlj \right\rangle \right|^2 ,$$

а также следующие определения приведенных дипольных и квадрупольных матричных элементов

$$\begin{gathered} \left\langle \varepsilon l_1 \left\| H(E1) \right\| nlj \right\rangle = \left(-1\right)^{l_1} \begin{pmatrix} l_1 & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sqrt{\hat{l}\hat{l}_1} \int_0^\infty r^3 R_{\varepsilon l_1}(r) R_{nl}^j(r) dr \\ \left\langle \varepsilon l_1 \left\| H(E2) \right\| nlj \right\rangle = ik \left(-1\right)^{l_1} \begin{pmatrix} l_1 & 2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\sqrt{\hat{l}\hat{l}_1}}{2\sqrt{3}} \int_0^\infty r^4 R_{\varepsilon l_1}(r) R_{nl}^j(r) dr \end{gathered} \tag{5.34}$$

Как было показано в [49], наибольший вклад в недипольные поправки дает квадрупольный переход из *p*-оболочек в состояние ε*f*, что обусловлено возникновением мощного резонанса в *f*-волне. Резонанс в *f*-волне приводит к появлению гигантского дипольного резонанса в сечении ионизации $4d^{10}$ оболочки Xe, рассмотренному ранее, в разделе 4.1 и он же обусловливает резкое усиление недипольных эффектов в квадрупольном канале. В качестве примера в работах [48-50] была рассмотрена ионизация $4p^6$ оболочки Xe и $5p^6$ оболочки Hg. Однако экспериментальное измерение степени поляризации для $4p^6$ оболочки Xe затруднено тем, что $4p_{1/2}$ линия в фотоэлектронном спектре вообще отсутствует, а $4p_{3/2}$ линия сильно уширена. В случае же $5p^6$ оболочки Hg обе фотоэлектронные линии, $5p_{1/2}$ и $5p_{3/2}$, наблюдаются и хорошо разделены. Поэтому ниже мы приведем только результаты расчетов для атомов Hg. Важно отметить, что квадрупольный резонанс в Hg возникает при энергии фотонов порядка 100 *eV*, то есть при энергии, при которой недипольные поправки обычно считаются пренебрежимо малыми. На рис. 5.24 приведены матричные элементы и фазы для квадрупольных $5p \rightarrow \varepsilon f$ переходов в атомах Hg и Rn. В то время как в Hg фаза в окрестности резонанса возрастает только на π/2, в Rn она возрастает почти на π, что является свидетельством существования резонанса. Однако, хотя в Hg резонансное поведение еще слабо выражено, этого достаточно для резкого усиления вклада квадрупольного перехода.

В общем случае недипольные поправки в угловом распределении фотоэлектронов составляют порядка 10% или менее от вклада дипольных членов. Таким же ожидается и вклад в спиновую поляризацию. Чтобы облегчить экспериментальное измерение, представляет интерес исследовать такие направления вылета фотоэлектронов, когда в дипольном приближении спиновая поляризация вообще отсутствует. Ниже будут рассмотрены именно такие случаи, которых не так много. В частности, в дипольном приближении спиновая поляризация отсутствует при наблюдении электронов, вылетающих в направлении, перпендикулярном пучку циркулярно поляризованного света (см. рис. 5.25а). При этом возможны два направления спина фотоэлектронов. В первом случае спин фотоэлектрона выбирается в направлении, перпендикулярном как направлению пучка света, так и направлению вылета фотоэлектронов (поперечная поляризация).

Уравнение для степени поляризации электронов имеет вид

$$P_{tr}^{\pm1} \equiv \frac{I_j^{\pm1}(\vec{p},\vec{s}) - I_j^{\pm1}(\vec{p},-\vec{s})}{I_j^{\pm1}(\vec{p},\vec{s}) + I_j^{\pm1}(\vec{p},-\vec{s})} = \frac{-\frac{9}{\sqrt{5}}\operatorname{Im} b_{111}^j + \frac{3\sqrt{21}}{2\sqrt{5}}\operatorname{Im} b_{331}^j}{1+\frac{1}{4}\beta}, \tag{5.35}$$

где индексы ±1 соответствуют правой или левой круговой поляризации света. При замене правой поляризации света на левую эта степень поляризации не меняет знак. В другом частном случае, когда спин фотоэлектрона направлен параллельно его импульсу (см. рис. 5.25а), степень поляризации определяется уравнением

$$P_{lon}^{\pm1} = \pm\frac{3\operatorname{Re} b_{211}^j - \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{2}}\operatorname{Re} b_{231}^j}{1+\frac{1}{4}\beta}, \tag{5.36}$$

В этом случае при замене правой поляризации света на левую степень поляризации фотоэлектронов меняет знак, что облегчает ее измерение.

На рис. 5.26 приведены результаты расчета в ПСФО дипольных поляризационных параметров, а также степени поляризации фотоэлектронов, определяемой уравнениями (5.35)-(5.36) для $5p_{1/2}$ подоболочки Hg. Поперечная степень поляризации фотоэлектронов достигает почти 6%, что легко может быть измерено на эксперименте. Степень поляризации имеет резко выраженный максимум, положение которого совпадает с положением квадрупольного резонанса в *f*-волне. На рис. 5.26 приведены также результаты расчета степени поляризации фотоэлектронов при поглощении линейно поляризованного света для геометрии эксперимента, указанной на рис. 5.25б, где векторы $\vec{e}_1$ и $\vec{e}_2$ соответствуют двум взаимно перпендикулярным линейным поляризациям света. Степень поляризации электронов в этом случае определяется уравнением

$$P_{e_1} = \frac{\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{2}}\operatorname{Im} b_{231}^j - 3\operatorname{Im} b_{211}^j}{1+\frac{1}{4}\beta}, \quad P_{e_2} = -P_{e_1}. \tag{5.37}$$

Как видно из рис. 5.26, степень поляризации электронов для линейно поляризованного света сравнительно мала. Однако имеется случай, когда степень поляризации электронов оказывается неожиданно большой.

При геометрии эксперимента, указанной на рис. 5.25в, степень поляризации электронов дается уравнением

$$P_{\vec{s}\vec{e}} = \frac{\mathrm{Im}(-\frac{9}{\sqrt{5}}b^{j}_{111} + 3b^{j}_{211} + \sqrt{6}b^{j}_{231} + \sqrt{\frac{21}{5}}b^{j}_{331})}{1-\frac{1}{2}\beta} \tag{5.38}$$

Важной особенностью этого уравнения является знаменатель, который стремится к нулю, когда параметр β стремится к 2. Как видно из рис. 5.26, параметр β приближается к 2 как раз в области квадрупольного резонанса в *f*-волне. На рис. 5.27 приведена степень поляризации электронов (5.38) для $5p_{1/2}$ подоболочки Hg [50]. Она достигает почти 100%, то есть не является малой поправкой. Однако следует иметь в виду, что при этом угле интенсивность электронного пучка стремится к 0 при β стремящемся к 2, что усложняет возможность экспериментального измерения.

Естественно, квадрупольные резонансы проявляются не только в спиновой поляризации электронов, но и в угловом распределении фотоэлектронов. В качестве примера на рис. 5.28 приведено угловое распределение электронов для геометрии эксперимента, показанного на рис. 5.25г, при поглощении циркулярно поляризованного света. Направление движения пучка фотонов находится в плоскости рис. 5.28 и соответствует 0 градусов. Отношение интенсивностей потоков электронов вперед и назад по отношению к потоку фотонов, то есть под углами 0 и 180 градусов, равно 1.23 и легко может быть измерено.

5.7. Спиновая поляризация в спин-орбитальных дублетах

Метод, развитый в разделах 4.5, 5.3 и 5.4 для рассмотрения сечений фотоионизации и угловых распределений фотоэлектронов с учётом взаимодействия компонент спин-орбитальных дублетов, может быть, естественно, применён и для вычисления спиновой поляризации, дипольной и недипольной (см. разделы 5.5 и 5.6). При этом в выражения для вычисляемых параметров (5.27) и (5.32) входят матричные элементы дипольных и квадрупольных переходов, а также фазы рассеяния фотоэлектронов, в иных комбинациях, нежели в парциальных сечениях (4.1)-(4.2), параметры угловой анизотропии - дипольные(5.2), (5.3) и недипольные (5.9), (5.11), (5.12).

Спиновая поляризация и недипольные поправки к ней определяются формулами (5.26) и (5.32), соответственно. В качестве примера, здесь, как и в других разделах, посвященных исследованию внутри-дублетных корреляций, рассмотрен пример $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ уровней в Xe, Cs и Ba.

Результаты вычислений для Xe, Cs and Ba [51] представлены на рис. 5.29, 5.30, 5.31, соответственно. Видно, что для Cs и Ba, все параметры в рассматриваемой области энергий 5-25~eV над порогом $3d_{5/2}$ являются сложными функциями ω. Их вариация особенно велика в непосредственной близости к порогам. Внутридублетное взаимодействие влияет на параметры спиновой поляризации 5/2 - уровня, оставляя почти неизменным те же характеристики уровня 3/2, так же как и в парциальных сечениях (см. Раздел 4.5), и в дипольных и недипольных параметрах угловой анизотропии (см. раздел 5.3). В то время как внутридублетное взаимодействие мало в Xe, его роль в Cs и Ba очень велика.

Известно, что спин-поляризационные параметры, как и параметр угловой анизотропии $\beta_l(\omega)$, не меняются драматически, когда учитываются многоэлектронные корреляции. Особенно это имеет место, когда фазовые сдвиги не меняются существенно, а обе дипольные амплитуды $d_{l\pm1}$ меняются одинаково, так как $\beta_l(\omega)$ и все спин-поляризационные параметры зависят от отношений амплитуд. В результате, сильные вариации сечения не всегда связаны с сильными вариациями спин-поляризационных параметров. Поэтому неудивительно, что в Xe спин-поляризационные параметры в СП ПСФО (раздел 4.4) близки к результатам, полученным в приближении ХФ. Однако, ситуация в Cs совершенно другая. Для $3d_{3/2}$ - уровня влияние корреляций еще мало как в Xe, в то время как для $3d_{5/2}$ - уровня эффект существенен. Параметр $A^{5/2}(\omega)$, который зависит только от разности между квадратом модулей дипольных матричных элементов, имеет минимум в области, где сечение имеет дополнительный максимум. Из (5.27) явно следует, что минимум должен быть связан с относительным минимумом дипольного матричного элемента, соответствующего переходу $3d_{5/2} \to \varepsilon f$. Сильная осцилляция параметра $\xi^{5/2}(\omega)$в той же области очевидно отражает вариацию разности фазовых сдвигов p и f парциальных волн как это видно из (5.27). Что касается параметра $\alpha^{5/2}(\omega)$, он меняется менее существенно, та как он содержит и квадраты дипольных матричных элементов, и интерференционный член (с косинусом разности фазовых сдвигов), которые частично уничтожают друг друга.

Из сравнения этих параметров на соответствующих рисунках можно сделать вывод, что поведение параметра $\alpha^{5/2}(\omega)$ имеет сходство с параметром $A^{5/2}(\omega)$. Это означает, что основной вклад дают квадраты дипольных матричных элементов. Это означает также, что резкое изменение всех параметров около 737.12 eV (рис.5.30), связано с автоионизационным резонансом $3d_{3/2} \to 4f$. Есть еще много других резонансов, которые не учтены в наших расчетах.

Ситуация в Ва существенно отлична от Cs. Здесь около порога резонанс смещается в дискретный спектр и сечение $3d_{3/2}$ уровня не содержит максимумов. Сечение $3d_{5/2}$ уровня характеризуется автоионизационным резонансом, соответствующим переходу $3d_{3/2} \to 4f$. Вариации спин - поляризационных параметров, очевидно, определяются этим резонансом. В особенности, параметр $A^{5/2}(\omega)$ имеет глубокий минимум в месте, которое совпадает с минимумом (близким к нулю) дипольного матричного элемента, соответствующего переходу $3d_{5/2} \to \varepsilon f$. Параметр $\xi^{5/2}(\omega)$ имеет сильную вариацию в этой области, как и в Cs, определяемую синусом разности фазовых сдвигов. В результате, параметр $\alpha^{5/2}(\omega)$ меняется не так быстро и имеет минимум при той же энергии как и параметр $A^{5/2}(\omega)$. Значения этих параметров при минимуме сечения (когда $d_f \to 0$) следуют непосредственно из (5.27) и равны $\alpha^{5/2} = -0.2$, $A^{5/2} = -0.5$, $\xi^{5/2} = 0$. Эти значения точно совпадают с граничными значениями около 791.52 eV.

Согласно расчетам, изложенным в разделе 4.5, в Xe и Cs максимумы имеются в переходах $3d_{5/2} \to \varepsilon f$ и $3d_{3/2} \to \varepsilon f$ точно над порогами ионизации соответствующих уровней, которые уже проявлялись в приближении ХФ. Благодаря спин-орбитальному межканальному взаимодействию между $3d_{3/2}$ и $3d_{5/2}$ уровнями, околопороговый резонанс в канале $3d_{3/2} \to \varepsilon f$ передается в канал $3d_{5/2} \to \varepsilon f$ и проявляется как дополнительный сильный максимум в сечении $3d_{5/2}$ уровня точно над порогом $3d_{3/2}$ уровня. Этот максимум также проявляется в параметре угловой анизотропии $\beta_2(\omega)$ как небольшое увеличение в Xe и существенный максимум в Cs [см. раздел 5.3]. Подобное влияние этого эффекта на спин-поляризационные параметры показано в данном разделе.

Интересно, что очень большое отклонение корреляционных спин-поляризационных параметров от соответствующих ХФ значений в Cs появляется не при энергии, при которой имеется дополнительный максимум в сечении (около 747 eV), но при более низкой энергии (742-743 eV), где матричный элемент перехода $3d_{5/2} \to \varepsilon f$ имеет локальный минимум. Осцилляция параметра $\xi^{5/2}(\omega)$ есть следствие сильной вариации разности фазовых сдвигов в той же области энергий.

В Xe околопороговый максимум появляется около 20 eV над порогом ионизации, в то время как в Cs он появляется только при 5 eV над порогом. В Ba ситуация меняется драматически, максимум сдвигается в дискретный спектр и проявляется как сильный автоионизационный резонанс, соответствующий, переходу $3d_{3/2} \to 4f$. Этот резонанс очень велик в парциальном сечении (поднимаясь до 120 Мб, см. рис. 4.30) и имеет форму типичного профиля Фано. В результате, сильные вариации всех спин - поляризационных параметров в этом резонансе показаны на рис. 5.31. Глубокие минимумы появляются в параметрах $A_{3d}^{5/2}(\omega)$ и $\alpha_{3d}^{5/2}(\omega)$, в то время как $\xi^{5/2}(\omega)$ имеют сильные осцилляции. Это поведение параметров типично для резонансов и демонстрируется в [45] для случая атома Tl. В Cs резонанс $3d_{3/2} \to 4f$ относительно слаб как видно на рис 5.30.

Спин - поляризационные параметры для Xe были вычислены и в [32], используя релятивистскую версию ПСФО, РПСФ [31]. Там спин-орбитальное расщепление $3d$ подоболочки естественно было принято в расчёт уже в нулевом приближения Дирака-Фока и было «включено» межканальное взаимодействие между $3d_{3/2}$ и $3d_{5/2}$ уровнями. Кроме того, учитывалась перестройка атомных орбиталей после образования глубокой $3d$ дырки. Результаты, полученные в [45] хорошо согласуются с представленными здесь.

Мы показали, что сильное межканальное взаимодействие между переходами из спин-орбитплльных расщепленных $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ в Xe, Cs и Ba, приводит к существенным вариациям в спин - поляризационных параметрах $3d_{5/2}$ подоболочек в областях дополнительных максимумов.

Крупные вариации этих параметров в окрестности порога особенно важны. Они вызваны довольно резкими изменениями разностей фазовых сдвигов и их функциями синусов и косинусов в выражении (5.27) для спин - поляризационных параметров.

Формулы (5.32) и (5.33) использовались в [52] для вычисления недипольных поляризационных параметров. На результаты для $3d_{5/2}$ уровня сильно воздействуют максимумы $3d_{3/2}$ уровня, но абсолютная величина соответственных параметров очень мала.

Литература к гл. 5

1. *Amusia M.Ya., Cherepkov N.A., Chernysheva L.V.* Phys. Lett. A. 1972. V. 40. P. 15-16.
2. *Амусья М.Я., Чернышева Л.В.* Автоматизированная система исследования структуры атомов. Л.: Наука, 1983.
3. *Амусья М.Я., Иванов В.К.* Изв. АН СССР, сер. физ. 1977. Т. 41, № 12. С. 2509-2517.
4. *Houlgate R.G., West J.B., Codling K., Marr G.V.* J. Phys. B 1974. V. 7. P. L470-L473; J. Electron Spectr. Rel. Phenom. 1976. V. 9. P. 205-209.
5. *Dehmer J.L., Chupka W.A., Berkowitz J., Jivery W.T.* Phys. Rev A. 1975. V. 12. P. 1966-1977.
6. *Amusia M.Ya., Ivanov V.K.* Phys. Lett. A. 1976. V. 59. P. 194-196.
7. *Lynch M.J., Gardner J.L., Codling K., Marr G.V.* Phys. Lett. A. 1973. V. 43. P. 237-238.
8. *Torop L., Morton J., West J.B.* J. Phys. B. 1976. V. 9. P. 2035-2041.
9. *Krause M.O., Carlson T.A., Woodruff P.R.* Phys. Rev. A. 1981. V. 24. P. 1374-1385.
10. *Southworth S., Becker U., Truesdale C.M., Kobrin P.H., Lindle D.W., Owaki S., Shirley D.A.* Phys.Rev. A. 1983. V. 28. P. 261-273.
11. *Cherepkov N.A*. Phys. Lett. A. 1978. V. 66. P. 204-206.
12. *White M.G., Southworth S.H., Kobrin P., Poliakoff E.D., Rosenberg R.A., Shirley D.A.* Phys. Rev. Lett. 1979. V. 43. P. 1661-1664, *Derenbach H., Schmidt V.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1983. V. 16. P. L337-L342.
13. *Johnson W.R., Lin C.D., Cheng K.T., Lee C.M*. Phys. Scr. 1980. V. 21. P. 409-420.
14. *Dolmatov V.K., Amusia M.Ya*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1994. V. 27. P. L281-L285.
15. *Амусья М.Я., Балтенков А.С., Гринберг А.А., Шапиро С.Г*. ЖЭТФ. 1975. Т. 68. С. 28-40.
16. *Amusia M.Ya., Arifov P.U., Baltenkov A.S., Grinberg A.A., Shapiro S.G.* Phys. Lett A. 1974. V. 47. P. 66-69.
17. *Cooper J.W.* Phys. Rev. A 1990. V. 42.P. 6942-6945; Phys. Rev. 1992. V. 45. P. 3362-3373; Phys. Rev. A 1993. V. 47. P. 1841-1851.
18. *Bechler A., Pratt R.H.* Phys. Rev. A. 1990. V. 42. P. 6400-6413.
19. *Sommerfeld A*. Wave mechanics. London: Matheun, 1930.

20. *Amusia M.Ya., Cherepkov N.A.* Case Studies in Atomic Physics 1975. V. 5, N 2. P. 47-179.
21. *Krassig B., Jung M., Gemmell D.S., Kanter E.P., LeBrun T., Southworth S.H., Young L.* Phys. Rev. Lett. 1995. V. 175. P. 4736-4739.
22. *Amusia M.Ya., Baltenkov A.S., Felfli Z., Msezane A.Z.* Phys. Rev A. 1999. V. 59. P. R2544-R2547.
23. *Амусья М.Я., Долматов В.К., Иванов В.К.* Письма в ЖТФ. 1980. Т. 6, № 23. С. 1465-1467.
24. *Dolmatov V.K., Manson S.T.* Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. P. 939-942.
25. *Cherepkov N.A., Semenov S.K.* J. Phys. B. 2001. V. 34. P. L495-L502.
26. *Kanter E.P., Krassig B., Southworth S.H., Guillemin R., Hemmers O.D. Lindle W., Wehlitz R., Amusia M.Ya, Chernysheva L.V., Martin N.L.S.* Phys. Rev. A. 2003. V. 68. P. 012714-1-10.
27. *Amusia M.Ya., Baltenkov A.S., Chernysheva L.V., Felfli Z., Msezane A.Z.* Phys. Rev. A. 2001. V. 63. P. 052506.
28. *Hemmers O., Guillemin R., Kanter E.P., Krassig B.,. Lindle D., Southworth S.H., Wehlitz R., Baker J., Hudson A., Lotrakul M., Rolles D., Stolte W.C., Tran I.C., Wolska A., Yu S.W., Amusia M.Ya., Cheng K.T., Chernysheva L.V., Johnson W.R., MansonS.T.* Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91(5). P. 053002/1-4.
29. *Kivimäki A., Hergenhahn U., Kempgens B., Hentges R., Piancastelli M.N., Maier K., Ruedel A., Tulkki J.J., Bradshaw A.M.* Phys. Rev. 2000. V. 63. P. 012716.
30. *Amusia M.Ya., Chernysheva L.V., Manson S.T., Msezane A.Z., Radoevic V.* Phys. Rev. Lett. 2002. V. 88. P. 093002.
31. *Johnson W.R., Lin C.D.* Phys. Rev. A. 1979. V. 20. P. 964-971; *Johnson W.R., Cheng K.T.* Phys. Rev. A, 1979. V. **20. P.** 978-989.
32. *Radojevic V., Davidovic D., Amusia M.Ya.* Phys. Rev. A. 2003. V. 67. P. 022719.
33. *Amusia M.Ya., Baltenkov A.S., Chernysheva L.V., Felfli Z., Manson S.T., Msezane A.Z.* INFN Frascati Physics series, 2003. V. XXXII. P. 3-8.
34. *Amusia M.Ya., Baltenkov A.S., Chernysheva L.V., Felfli Z., Manson S.T., Msezane A.Z. M.* Phys. Rev. A. 2003. V. 67 (6). P. 060702-1-4.
35. VUV and Soft X-Ray Photoionization, ed. U. Becker and D. A. Shirley / *Heinzmann U., Cherepkov N. A.* N.-Y. and London: Plenum Press, 1996. P. 521-559.
36. *Cherepkov N. A.* Phys. Lett. A. 1972. V. 40. P. 119-121.
37. *Черепков Н. А.* ЖЭТФ. 1973. Т. 65 С. 933-946.

38. *Cherepkov N. A*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1981. V. 14 P. L73-L78.
39. *Fano U.* Phys. Rev. 1969. V. 178. P. 131-136.
40. *Черепков Н. А*. Оптика и спектроскопия. 1980. Т. 49. С. 1067-1075.
41. *Müller M., Bowering N., Svensson A., Heinzmann U.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1990. V. 23. P. 2267S-2275S.
42. *Heinzmann U.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1980. V. 13. P. 4353-4366; V. 13. P. 4367-4381.
43. *Heckenkamp C., Schäfers F., Schönhense G., Heinzmann U.* Z. Phys. D. 1986. V. 2. P. 257-274.
44. *Snell G., Hergenhahn U., Müller N., Drescher M., Viefhaus J., Becker U., Heinzmann U*. Phys. Rev. A. 2001. V. 63. P. 032712.
45. *Cherepkov N. A*. Adv .At. Mol. Phys. 1983. V. 19. P. 395-447.
46. *Zimmermann B., Snell G., Schmidtke B., Viefhaus J., Cherepkov N. A., Langer B., Drescher M., Müller M., Heinzmann U., Becker U.* Phys. Rev. A. 2001. V. 64. P. 062501.
47. *Schmidtke B., Drescher M., Cherepkov N. A., Heinzmann U*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2000. V. 33. P. 2451-2466.
48. *Cherepkov N. A., Semenov S. K.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2001. V. 34. P. L211-L217.
49. *Cherepkov N. A., Semenov S. K*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2001. V. 34. P. L495-L502.
50. *Cherepkov N. A., Semenov S. K., Drescher M., Heinzmann U.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2001. V. 36. P. 3063-3078.
51. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z.* Phys. Rev. A. 2004. V. 70, P. 062709/1-8.
52. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z.* J. Phys. B. 2005. V. 38, P. 1133-1142.