

## Глава 2. Поглощение фотонов - результаты вычислений

### 2.1. Способ представления данных и используемые формулы

В этой Главе собраны результаты расчётов характеристик процесса фотоионизации. Мы приведём графики и таблицы, которые представляют данные, полученные в исследовании полных и парциальных сечений фотоионизации, различных отношений сечений, дипольных и недипольных параметров угловой анизотропии и спиновой поляризации фотоэлектронов, а также сил осцилляторов дискретных возбуждений. В некоторых случаях будут представлены также экспериментальные данные.

Нумерация рисунков организована следующим образом: сначала идёт номер соответствующего раздела, следующие буквы обозначают представляемый в соответствии с периодической системой элементов Менделеева атом (например в Разделе 2.2\_Ag\_a1, Ag обозначает атом Ag), следующая маленькая буква обозначает рассматриваемые величины или характеристики:

- a - полное сечение фотоионизации и квази-сечение возбуждения дискретных уровней атомов и ионов в основном и возбуждённых состояниях в приближении ХФ или ПСФО,
- b – парциальное сечение  $\sigma_{nl}(\omega)$  в тех же самых приближениях,
- c - отношение парциальных сечений,
- d – дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{nl}(\omega)$ ,
- e – недипольные параметры  $\gamma_{nl}(\omega)$  и  $\eta_{nl}(\omega)$ ,
- f - параметры  $A^j(\omega)$ ,  $\zeta^j(\omega)$  и  $\xi^j(\omega)$  спиновой поляризации фотоэлектронов,
- g - другие характеристики.

Наконец, последняя цифра представляет номер данного рисунка в рассмотренной группе.

Однако не все упомянутые выше данные имеются для каждого атома. В таких случаях не все буквы и цифры будут использоваться в приведенных рисунках.

Чтобы описать различные характеристики поглощения фотона атомами, использовались следующие формулы Главы 1. Полные сечения в ХФ и ПСФО получены помощью (1.70), парциальные сечения в ХФ и ПСФО даются (1.68) и (1.69), соответственно. Дипольные параметры угловой анизотропии в ХФ и ПСФО получены из (1.71) и (1.74). Недипольные параметры  $\gamma_{nl}(\omega)$  и  $\eta_{nl}(\omega)$  определяем, используя в приближении ХФ формулы (1.78) и (1.79), (1.82) и применяя замену (1.83) в ПСФО. Параметры спиновой поляризации фотоэлектронов находим, используя (1.89). Атомная дипольная поляризуемость вычисляется по формуле (1.86).

Наряду с ХФ и ПСФО, для промежуточных и внутренних оболочек применяются обобщённые ХФ и ПСФО, или ОХФ и ОПСФО, соответственно.

Вычисления для атомов с полузаполненными оболочками выполнены, используя соотношения (1.95-1.99), в рамках спин - поляризованного ПСФО или СП ПСФО. Сечения фотоионизации для атомов с незаполненными оболочками получаем из (1.69) с амплитудами в ХФ, данными (1.102) и (1.103), т.е. в ПСФО для незаполненных оболочек - ПСФОН (см. Раздел 1.11).

Вычисление сечений фотоионизации эндодральных атомов проведены, используя

формулы (1.117), (1.120) и (1.121).

Токи увлечения рассчитывались по формуле (1.125), а сечение фотоионизации с учётом неупругого рассеяния фотоэлектрона в процессе его выхода из ионизуемого атома – по формуле (1.130).

Чтобы добиться единообразия в изображении дискретных линий возбуждения и сечения фотоионизации в области энергий фотона над порогом ионизации, мы «размываем» дискретные линии, пользуясь постоянной шириной линии  $\Delta$ . В результате, вместо силы осциллятора  $g_{if}$  из (1.6) будет изображаться квази-сечение возбуждения дискретных уровней или линий

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi g_{if} \Delta}{c} \frac{1}{(\omega - \omega_{if})^2 + (\Delta/2)^2} \quad (2.1)$$

Параметр  $\Delta$  выбран, для определённости, равным  $0.1 \text{ eV}$ . Формула (2.1) подобна сечению возбуждения изолированного автоионизационного резонанса, которая следует из (1.50) при очень больших  $q$  и  $\rho = 1$ . В этом случае под  $\Delta/2$  понимается  $\Gamma$  - ширина уровня на его полувысоте (1.49).

Напомним, что нашей целью является не возможно более точное теоретическое описание данных опыта по конкретному атому или иону, а проведение массовых расчётов в наилучшем, пригодном для такой цели приближении – ПСФО и его различных обобщениях, и демонстрация, попутно, путём сравнения с результатами в ХФ, важности межэлектронных корреляций. Фактически, цель – создание нового исходного приближения, что стимулировало бы последующее проведение более точных измерений и необходимых для их интерпретации более сложных расчётов.

На самих рисунках результаты, полученные в ХФ и ПСФО, обозначены в соответствии со своими английскими названиями HF (Hartree-Fock) и RPAE (Random Phase Approximation with Exchange). Результаты представлены в формах "длины" и "скорости" (см. (1.13)), и помечены как ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д и ПСФО-с, соответственно. Как правило, даже ранее полученные в рамках используемых здесь теоретических подходов и опубликованные ранее результаты специально пересчитывались для этой книги. Поэтому ссылка на них даётся не просто номером в списке литературы, к примеру, [3], но указанием (см. [3]).

Для удобства читателя и последовательности, мы располагаем рассмотренные атомы и ионы в соответствии с Периодической системой элементов Менделеева, с тем только изменением, что начнём с атомов и некоторых ионов благородных газов.

Прокомментируем использованные подходы и рассмотренные объекты, имеющие определённую специфику. Начнём с атомов с полузаполненными оболочками – Cr, Mn и Eu. Все они отличаются наличием относительно узкого мощного резонанса в сечении фотоионизации, который является результатом распада дискретного перехода на вакантный полузаполненный уровень в непрерывный спектр ионизации электрона занятого полузаполненного уровня. Соответствующий матричный элемент очень велик. В результате, и ширина этого *Гигантского автоионизационного резонанса* весьма велика. Этот резонанс определяет сечения во всех других подоболочках [1, 2]<sup>1</sup>, существенно

---

<sup>1</sup> В других Главах эти и последующие ссылки даются с указанием её номера: так, ссылка [1] Главы 2 в

влияет на их угловые распределения и спиновую поляризацию фотоэлектронов .

Метод, развитый для рассмотрения атомов с полузаполненными оболочками был применен и к рассмотрению  $3d$ -подоболочек Хе, Cs и Ва [3]. А именно, было предложено рассмотреть  $3d_{5/2}$  и  $3d_{3/2}$  уровни как «вверх» и «вниз» компоненты  $3d$ - подоболочки. Тогда взаимодействие между «вверх» и «вниз» электронами может быть легко учтено и описано, используя уравнения из Раздела 1.10. В уравнения ПСФО и при вычислении сечения фотоионизации следует ввести поправки, учитывающие, что уровни  $5/2$  и  $3/2$  имеют неравное число «вверх» и «вниз» электронов, по 5, а соответственно, 6 и 4 электронов. Поэтому компоненты  $\chi$  «вверх» и «вниз» в (1.93) приобретают множители  $6/5$  и  $4/5$ , соответственно, равно как и сечения для «вверх» и «вниз» уровней.

Специальной группой атомов с полузаполненными оболочками являются щелочи, к примеру, Li, Na, K и Cs. Их можно рассматривать и как атомы с незаполненными оболочками. Заметим, однако, что влияние внешнего валентного электрона на внутренний мало, так что не слишком важно, как рассматривать внешний электрон.

Полезно иметь в виду, что пороговый закон Вигнера (1.105) для отрицательных ионов справедлив, как оказалось, в столь узкой области частот, что в разумном масштабе рисунки выглядят так, как будто сечение имеет скачок на пороге.

Отметим, что с ионизацией одного электрона корреляции могут стать еще более сильными, чем в соседних нейтральных атомах. Однако с дальнейшим ростом заряда иона относительная роль корреляций становится меньше. Действительно, больше полной силы осциллятора данной подоболочки "перемещается" в его дискретные возбуждения, в то время как сечения поглощения фотона становятся меньше.

Мы приведём сечение фотоионизации ряда возбуждённых состояний атомов, которые могут рассматриваться в рамках представленных выше приближений, а именно ХФ, ПСФО, ОПСФО и СП ПСФО. В принципе, указанные методики могут быть применены и к другим объектам. К примеру, можно было бы рассчитать, сечение фотоионизации, равно как и силы осцилляторов в высоко возбужденных *спиново-насыщенных состояниях* (СНС), в которых все атомные электроны или по крайней мере те, кто принадлежит внешней оболочке, имеют ту же самую проекцию спина, таким образом формируя наиболее высокий возможный полный спин рассматриваемого атома.

Интерес к свойствам СНС определяется желанием понять возможное влияние полного изменения квантовых чисел занятых состояний на атомные свойства. По сравнению с соответствующими атомами в их основных состояниях, СНС имеют значительно больше электронов, находящихся гораздо дальше от ядра, чем в основном состоянии. Поэтому в СНС роль межэлектронного взаимодействия значительно больше, а потому электронные корреляции становятся намного более сильными, чем в основных состояниях рассматриваемых атомов.

## 2.2. Атомы и некоторые ионы благородных газов

В этом Разделе представлены результаты наших уже известных и новых вычислений полных и парциальных сечений фотоионизации, параметров дипольной и недипольной угловой анизотропии, параметров спиновой поляризации фотоэлектронов и сил осциллятора для атомов благородных газов и некоторых их ионов.

---

других главах записывается как [2.1].

Вычисления были выполнены в одноэлектронном приближении ХФ и со учетом много электронных корреляций в рамках ПСФО. В некоторых случаях для иллюстрации наши результаты сравниваются с экспериментальными данными. Результаты представлены в формах "длины" и "скорости" (см. (1.13)), помеченными как ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д и ПСФО-с, соответственно. Если различие между ПСФО-д и ПСФО-с меньше 2%, на рисунках представлена только одна кривая. В некоторых случаях многоэлектронные эффекты рассчитаны, используя ОПСФО (см. Раздел 1.6).

Атомы благородных газов рассмотрены особенно подробно. Конкретно, в этом Разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подоболочек атомов благородных газов Ne ( $Z=2$ )  $1s^2$ ; Ne ( $Z=10$ )  $1s^2, 2s^2, 2p^6$ ; Ar ( $Z=18$ )  $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6$ ; Kr ( $Z=36$ )  $3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6$ ; Xe ( $Z=54$ )  $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6$  и некоторых их ионов  $Ne^{3+} 2s^2, 2p^3$ ,  $Kr^{+5} 3d^{10}, 4s^2, 4p$ ,  $Xe^{+} 4d^{10}, 5s^2, 5p^5$ ,  $Xe^{3+} 4d^{10}, 5s^2, 5p^3$ ,  $Xe^{+5}, 4d^{10} 5s^2, 5p$ ,  $Xe^{+6} 4d^{10}, 5s^2$ .

**Рисунки 2.2\_Не** представляет данные по Не.

Рис. 2.2\_Не\_a1 изображает сечение фотоионизации  $\sigma_{1s}(\omega)$  Не в ХФ и ПСФО.

Различия в формах ХФ-д и ХФ-с малы, в то время как небольшая роль корреляций отражена в малом различии между результатами ХФ и ПСФО. Согласие с экспериментальными данными [4] - в пределах заданной точности.

Рис. 2.2\_Не\_e1 изображает недипольный параметр  $\gamma_{1s}(\omega)$  для Не в ХФ и ПСФО (см. [5]). Эта величина находится с помощью (1.126). Обращает внимание довольно быстрый рост у порога с последующим выходом на линейную зависимость.

Рис. 2.2\_Не\_g1 изображает дипольную поляризуемость  $\alpha_{d1s}(\omega)$  для Не в ХФ и ПСФО. Она положительна при нулевой частоте, быстро нарастает с приближением к энергии первого возбуждения, а за порогом ионизации в ПСФО всюду отрицательна и имеет минимум при энергии фотона в  $2.5Ry$  (см. [6]).

Рис. 2.2\_Не\_g2 приводит ток увлечения  $1s$  - подболочки атома Не. Эта величина находится с помощью (1.128) (см. [7]). Приведен ток при потоке фотонов  $10^{13}$  фотонов/см<sup>2</sup> сек, легко достижимом на синхротронах и накопителях. Виден минимум при  $6Ry$ .

**Рисунки 2.2\_Не\*** представляет данные по Не\*.

Рис. 2.2\_Не\*\_a2 изображает сечение фотоионизации  $\sigma_{1s,2s}(\omega)$  в возбужденном состоянии  $1s, 2s^3S_1$  Не\* в ХФ и СП ПСФО.

**Рисунки 2.2\_Не** включают все результаты вычислений для Не.

Рис. 2.2\_Не\_a1 представляет полное сечение  $\sigma(\omega)$  для Не в ХФ и ПСФО. Здесь ПСФО-корреляции учтены во всех дипольных переходах  $2p-n(\epsilon)d$ ,  $2p-n(\epsilon)s$ ,  $2s-n(\epsilon)p$  и  $1s-n(\epsilon)p$ . Роль  $2p-n(\epsilon)d$  весьма значительна, но только при  $\omega \leq 25Ry$ . Влияние других переходов в этой области частот мало.

Рис. 2.2\_Не\_b1 представляет парциальное сечение фотоионизации  $\sigma_{1s}(\omega)$   $1s$  - оболочка Не в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Роль электронных корреляций очень мала.

Рис. 2.2\_Не\_b2 изображает парциальное сечение  $\sigma_{2s}(\omega)$   $2s$  - подболочки Не в ХФ и ПСФО. Здесь поправки ПСФО, главным образом из-за  $2p-n(\epsilon)d$  перехода, велики при  $\omega \leq 25Ry$ .

Рис. 2.2\_Не\_b3 представляет сечение  $\sigma_{2p}(\omega)$   $2p$  - подболочки Не, с учётом влияния

(и без него)  $2s$  подоболочки Ne.

Приведены результаты в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Заметим, что воздействие  $2s$  на  $2p$ -подоболочку становится довольно важным при высоких частотах. В то же время, с ростом  $\omega$  влияние взаимодействия между самими  $2p$  электронами "затухает" весьма быстро. Важность межоболочечных поправок ПСФО при высоких энергиях фотона видна на врезке

Рис. 2.2\_Ne\_c1 приводит отношение  $\sigma_{2p}^{RPAE}(\omega)/\sigma_{2p}^{HF-\nu}(\omega)$ .

Для Ne в [8] было численно показано и на основе теоретического рассмотрения в [3] продемонстрировано как общее свойство сечений фотоионизации, что это отношение при высоких энергиях фотона  $\omega$  должно достигнуть независимой от  $\omega$  и отличной от единицы величины. Потенциалы ионизации в расчёте приняты равными  $I_{2s,exp}=3.564 Ry$ ,  $I_{2p,theor}=1.7 Ry$ ,  $I_{1s,theor}=65.54 Ry$ . Порог  $2s$  взят экспериментальным для более аккуратного учёта влияния  $2p$  электронов на  $2s$  (см. [AM]).

Рис. 2.2\_Ne\_c2 приводит отношения сечений  $2s$  и  $2p$  – электронов с учётом ПСФО корреляций только  $2p$ ,  $2p+2s$  и  $2p+2s+1s$  электронов Ne.

Рис. 2.2\_Ne\_c3 представляет отношение  $\sigma_{2s}(\omega)/\sigma_{2p}(\omega)$  в различных приближениях.- с учётом ПСФО корреляций только  $2p$ ,  $2p+2s$  и  $2p+2s+1s$  электронов Ne. Около порога  $2s$  сечение значительно меньше сечения  $2p$ - подоболочки. Заметим, что во всех приближениях это отношение начиная с  $\omega \geq 40 Ry$  становится больше единицы. Заметная вариация отношения при  $\omega \approx 40 Ry$  есть результат действия  $1s$ - оболочки на  $\sigma_{2s}(\omega)$ .

Рис. 2.2\_Ne\_d1 изображает результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии  $\beta_{2p}(\omega)$  для  $2p$  –электронов с учётом ПСФО корреляций только  $2p$ ,  $2p+2s$  и  $2p+2s+1s$  электронов. Видна существенная вариация этого параметра под влиянием  $1s$  электронов.

Рис. 2.2\_Ne\_e1 представляет результаты расчёта недипольного параметра угловой анизотропии  $\gamma_{1s}$   $1s$  - электронов в Ne в ХФ и ПСФО (см. [9]). В отличие от Ne, появляется заметный минимум сразу за порогом.

Рис. 2.2\_Ne\_e2 даёт результаты расчёта магической комбинации недипольных параметров  $(\gamma^c + 3\delta^c)$   $2p$  – электронов в Ne в ХФ и ПСФО. (см. обсуждение (1.81)). Кривая как будто состоит из трёх линейных участков – около порога, до 600 эВ и далее.

Рис. 2.2\_Ne\_e3 изображает результаты расчёта недипольного параметра угловой анизотропии  $\gamma_{2s}$   $2s$  - электронов в Ne в ХФ и ПСФО. Параметр быстро меняется около порога, достигая максимума, проходит через минимум при  $10 Ry$  и далее линейно нарастает.

Рис. 2.2\_Ne\_g1 представляет ток увлечения  $2p$ - подоболочки атома Ne в ПСФО, приведённый к единице потока фотонов  $W$ . Точки – параметр  $\gamma_{2p}^c(\omega)$  (см. [5]).

Рис. 2.2\_Ne\_g2 даёт ток увлечения  $2s$ -подоболочки атома Ne в ПСФО. приведённый к единице потока фотонов  $W$ . Точки – параметр  $\gamma_{2s}^c(\omega)$  (см. [5]). В отличие от  $2p$  - подоболочки, имеется сильный максимум вблизи порога. Здесь, как и на предыдущем рисунке, обращает на себя внимание совпадение зависимостей от энергии фотона тока и недипольного параметра.

**Рисунки 2.2\_Ne<sup>3+</sup>** содержат результаты расчетов для Ne<sup>3+</sup>.

Рис. 2.2\_Ne<sup>3+</sup>\_a1 изображает полное сечение фотоионизации иона Ne<sup>3+</sup> от порога до



20 Ry в рамках СП ПСФО. «Частокол» максимумов – проявление дискретных возбуждений.

Рис. 2.2\_Ne<sup>3+</sup>\_a2 изображает «квази-сечения» дискретных линий возбуждения иона Ne<sup>3+</sup> для частот от порога до 10 Ry. На врезках приведены интенсивности сравнительно слабых линий. Отметим, что этот ион есть объект с наружной полузаполненной оболочкой 2p<sup>3</sup>.

Рис. 2.2\_Ne<sup>3+</sup>\_d1 представляет результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии  $\beta_{2p}(\omega)$  для 2p –электронов. Обращаем внимание на резкие вариации параметра вблизи дискретных линий..

**Рисунки 2.2\_Ar** содержат результаты расчетов для Ar.

Рис. 2.2\_Ar\_a1 представляет полное сечение фотоионизации Ar. Учтены ПСФО корреляции во всех дипольных переходах 3p-n( $\epsilon$ )d, 3p-n( $\epsilon$ )s, 3s-n( $\epsilon$ )p, 2p-n( $\epsilon$ )d, 2p-n( $\epsilon$ )s, 2s-n( $\epsilon$ )p и 1s-n( $\epsilon$ )p. Рассмотренная область  $\omega$  очень широка, приблизительно до 900 Ry. Роль канала 3p-n( $\epsilon$ )d весьма внушительна, но лишь для значений  $\omega$ , довольно близких к порогу 3p-подоболочки. Влияние других переходов в этой области частот мало.

Рис. 2.2\_Ar\_b1 представляет результаты для 3p- подоболочки Ar, с учётом и без учёта влияния ряда переходов, которые даются на рисунке. Замечено, что различие между  $\sigma_{3p}^{RPAE}(\omega)$  и  $\sigma_{3p}^{HF}(\omega)$  сохраняется до весьма высоких  $\omega$ , и там наиболее важным является влияние 3s на 3p- подоболочку. Существенно, что с ростом  $\omega$  влияние взаимодействия между самими электронами 3p "затухает" весьма быстро. Обратим внимание на небольшой максимум при 6 Ry.

Рис. 2.2\_Ar\_b2 представляет сечение фотоионизации 3p электронов вблизи порога. Видно большое отличие результатов в формах «длины» и «скорости» и большая роль ПСФО (см. [10]). Точки – эксперимент [11].

Рис. 2.2\_Ar\_b3 представляет результаты для 3s- подоболочки Ar. Здесь ПСФО поправки, главным образом из-за влияния 3p-n( $\epsilon$ )d перехода, очень велики всюду, для  $\omega \leq 25Ry$ . Из-за корреляций появляется второй, после порогового, максимум, при  $\omega \approx 6Ry$ , называемый *интерференционным максимумом*. Перед ним, при  $\omega \approx 3Ry$ , находится *интерференционный минимум*.

Рис. 2.2\_Ar\_b4 изображает результаты для 3s- подоболочки Ar вблизи так называемого *интерференционного минимума*. Экспериментальные данные взяты из [12].

Важность поправок ПСФО, учитывающих взаимодействие электронов разных подоболочек при высоких энергиях фотона, иллюстрируется врезкой на Рис. 2.2\_Ar\_b2, где приводится отношение  $\sigma_{3p}^{RPAE}(\omega) / \sigma_{3p}^{HF-v}(\omega)$ . В [13, 14] демонстрировалось, что это отношение при высоких  $\omega$  должно достигнуть величины, независимой от частоты и отличной от той, которая приведена на врезке, на рис. 2.2\_Ar\_b3.

Рис. 2.2\_Ar\_b5 представляет сечение фотоионизации 2p электронов в ХФ, ПСФО, ХФ с самосогласованным учётом 2p вакансии (ОХФ) и в ОПСФО. Видно, что вблизи порога сечение в ХФ и ПСФО имеет острый и узкий максимум, отсутствующий в ОХФ и ОПСФО. Роль ПСФО и ОПСФО корреляций (в сравнении с ХФ и ОХФ, соответственно) невелика.

Рис. 2.2\_Ar\_b6 приводит результаты для 1s-оболочки Ar в ОПСФО. Точки – данные эксперимента из [15]. Примечательно, что даже на пороге внутренней оболочки роль электронных корреляций, при том вне рамок ПСФО, велика, и уменьшает сечение на

пороге примерно в два раза.

Рис. 2.2\_Ar\_c1 представляет относительную роль ОПСФО корреляций в сечении ионизации  $3p$  - электронов. Взаимодействие электронов учтено в рамках ОПСФО, с экспериментальными значениями порогов ионизации  $3p$ -,  $3s$ -,  $2p$ - и  $2s$ - подоболочек.

Рис. 2.2\_Ar\_c2 приводит отношения  $\sigma_{3s}(\omega)/\sigma_{3p}(\omega)$ , вычисленное в ОПСФО, с учётом влияния различных подболочек. Около порога  $3s$ - сечение намного меньше сечения  $3p$ - подболочки. Видно, что во всех приближениях это отношение растёт довольно быстро, но не достигает таких больших значений как  $\sigma_{2s}(\omega)/\sigma_{2p}(\omega)$  в Ne.

Рис. 2.2\_Ar\_d1 представляет результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии  $\beta_{3p}(\omega)$  в ОПСФО, в довольно широкой области частот  $\omega$  с учётом влияния корреляций в различных переходах.

Рис. 2.2\_Ar\_d2 демонстрирует важную роль ПСФО корреляций в  $\beta_{3p}(\omega)$  в около пороговой области, где для сравнения даны результаты в ХФ-д, и данные эксперимента из [16,17]. Параметр  $\beta_{3p}(\omega)$  как функция  $\omega$  имеет значительный максимум и глубокий минимум. Согласие с опытом хорошее.

Рис. 2.2\_Ar\_d3 сопоставляет результаты расчёта дипольных параметров  $\beta_{3p}(\omega)$  и  $\beta_{2p}(\omega)$ , и то и то – в ОПСФО. Параметр  $\beta_{3p}(\omega)$  имеет, в сравнении с  $\beta_{2p}(\omega)$ , дополнительный максимум и небольшой минимум в окрестности порога  $I_{3p}$ .

Рис. 2.2\_Ar\_d4 приводит результаты расчёта дипольных параметров  $\beta_{2p}(\omega)$  в ПСФО и ОПСФО. В ОПСФО у порога исчезает минимум и параметр  $\beta_{2p}(\omega)$  просто быстро растёт.

Рис. 2.2\_Ar\_e1 представляет результаты расчёта недипольного параметра угловой анизотропии  $\gamma_{3s}(\omega)$   $3s$  электронов в довольно широкой области частот  $\omega$  в ХФ и с учётом корреляций в ПСФО. Параметр  $\gamma_{3s}(\omega)$  имеет максимум при 5 эв и минимум при 9 эв.

Рис. 2.2\_Ar\_e2 изображает магическую комбинацию (см. обсуждение (1.81)) недипольных параметров  $3p$  электронов Ar в ХФ и ПСФО. Имеется весьма узкий максимум сравнительно близко к порогу ионизации атома.

Рис. 2.2\_Ar\_g1 приводит вклад в дипольную поляризуемости Ar перехода  $3p - \epsilon s$  в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО (см. [6]). При нулевой энергии поляризуемость положительна, и заметно больше, чем в Ne. После порога ионизации она отрицательна и имеет минимум при  $1.5 R_y$ .

Рис. 2.2\_Ar\_g2 даёт вклад в дипольную поляризуемости Ar перехода  $3p - \epsilon d$  в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Поведение этого вклада подобно изображённому на Рис. 2.2\_Ar\_g1, а величина – в 5-10 раз больше по амплитуде.

**Рисунки 2.2\_Kg** содержат результаты вычислений для Kг.

Рис. 2.2\_Kg\_a1 представляет полное сечение фотоионизации Kг в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Здесь ПСФО корреляции включены во всех дипольных переходах  $4p-n(\epsilon)d$ ,  $4p-n(\epsilon)s$ ,  $4s-n(\epsilon)p$ ,  $3d-n(\epsilon)f$ ,  $3d-n(\epsilon)p$ ,  $3p-n(\epsilon)d$ ,  $3p-n(\epsilon)s$  и  $3s-n(\epsilon)p$ . Рассмотренная область  $\omega$  весьма широка, приблизительно до  $120 R_y$ . Роль перехода  $4p-n(\epsilon)d$  внушительна, гораздо более сильна чем  $3p-n(\epsilon)d$  в Ar, но по значениям  $\omega$  сконцентрирована ближе к порогу  $4p$ -подболочки. Замечено, что из-за перехода  $4p-n(\epsilon)d$  появляется второй минимум, при  $\omega \approx 15 R_y$ . Влияние других переходов в этой области частот мало.

Рис. 2.2\_Kg\_b1 даёт результаты для  $4p$  подболочки в ПСФО. Роль корреляций ПСФО велика. Виден большой максимум. При весьма значительной энергии фотона сечение имеет второй, однако гораздо меньший, максимум (не приведенный на рис.).

Рис. 2.2\_Kr\_b2 изображает результаты для  $4s$  подболочки в ПСФО, где явно видны интерференционные минимум и максимум (см. обсуждение при (1.47)) (см. [18]).

Рис. 2.2\_Kr\_b3 представляет сечение  $3d$ -подболочки Кг в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. ПСФО поправки, главным образом из-за  $3p-n(\epsilon)d$  перехода, велики для  $\omega \leq 70Ry$ . Виден переход к минимуму при  $\omega = 110Ry$ .

Рис. 2.2\_Kr\_d1 даёт результаты расчётов параметра угловой анизотропии  $\beta_{4p}(\omega)$  и  $\beta_{3d}(\omega)$   $4p$  и  $3d$  электронов. Роль корреляций ПСФО очень велика. Кривые подобны по форме и как будто просто сдвинуты по энергии целиком друг относительно друга.

Рис. 2.2\_Kr\_e1 изображает недипольный параметр  $\gamma^C$  для  $4s$  электронов в ХФ и ПСФО. Учёт корреляций в ПСФО приводит к появлению широкого максимума за порогом, за которым следует сравнительно узкий и глубокий минимум.

Рис. 2.2\_Kr\_e2 представляет магическую комбинацию  $(\gamma^C + 3\delta^C)$  (см. обсуждение (1.81)) недипольных параметров угловой анизотропии  $4p$  электронов в Кг в ХФ и ПСФО. Зависимость параметра от энергии сложна, с тремя минимумами и максимумами.

**Рисунки 2.2\_Kr<sup>5+</sup>** содержат результаты вычислений для  $Kr^{5+}$ .

Рис. 2.2\_Kr<sup>5+</sup>\_a1 представляет полное сечение фотоионизации и квази-сечения некоторых дискретных возбуждений иона  $Kr^{5+}$  в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО.

Рис. 2.2\_Kr<sup>5+</sup>\_a2 изображает дискретные уровни возбуждения иона  $Kr^{5+}$  в ПСФО.

Рис. 2.2\_Kr<sup>5+</sup>\_d1 представляет результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии  $\beta_{4p}(\omega)$   $4p$  электронов в ПСФО.

**Рисунки 2.2\_Хе** содержат результаты вычислений для Хе.

Рис. 2.2\_Хе\_a1 представляет полное сечение Хе в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Здесь включены корреляции ПСФО во всех дипольных переходах:  $5p-n(\epsilon)d$ ,  $5p-n(\epsilon)s$ ,  $5s-n(\epsilon)p$ ,  $4d-n(\epsilon)f$ ,  $4d-n(\epsilon)p$ ,  $4p-n(\epsilon)d$ ,  $4p-n(\epsilon)s$ ,  $4s-n(\epsilon)p$ ,  $3d-n(\epsilon)f$  и  $3d-n(\epsilon)p$ . Рассмотренная область  $\omega$  не слишком широка, приблизительно до  $70 Ry$ . Роль  $5p-n(\epsilon)d$  перехода весьма внушительна при значениях  $\omega$ , сравнительно близких к порогу ионизации  $5p$ - подболочки. Влияние других переходов в этой области частоты мало. Сильные корреляции имеют место в диапазоне  $5-12 Ry$ , где виден мощный максимум, так называемый Гигантский резонанс.

Рис. 2.2\_Хе\_b1 представляет результаты расчёта для  $5p$  подболочки Хе в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Поправки ПСФО, главным образом влияние  $5p-n(\epsilon)d$  перехода, велики вплоть до  $\omega \leq 25Ry$ . Следствием влияния  $4d-n(\epsilon)f$  перехода является появление максимума при  $\omega \approx 7Ry$ , изображённого на врезке.

Рис. 2.2\_Хе\_b2 представляет результаты для  $5s$  подболочки, с учетом и без учёта влияния ряда переходов, которые даются на рисунке. Данные эксперимента взяты из [19, 20, 21].

Рис. 2.2\_Хе\_b3 изображает результаты расчёта  $4d$  подболочки в ХФ и ПСФО. Виден второй максимум при  $\omega \approx 22Ry$ . На врезке дано отношение сечений в ПСФО и ХФ. Видно, что роль корреляций заметна при всех рассмотренных  $\omega$ .

Рис. 2.2\_Хе\_b4 представляет результаты расчёта сечения фотоионизации  $4d$  подболочки в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО в окрестности Гигантского резонанса. Видно, что в ПСФО появляются дополнительный минимум при  $\omega \approx 15Ry$  и максимум при  $\omega \approx 20Ry$ . Во врезке показано отношение сечений в ПСФО и ХФ, которое особо сильно отличается от 1 для  $\omega \leq 40Ry$ .

Рис. 2.2\_Хе\_b5 изображает сечение однократной фотоионизации  $4d$  подболочки в



ПСФО и в ОПСФО в окрестности Гигантского резонанса в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Экспериментальные точки взяты из [22].

Рис. 2.2\_Хе\_b6 даёт результаты для  $4d$  подболочки в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО в широком диапазоне частот с учётом неупругого рассеяния фотоэлектрона на наружных оболочках иона-остатка. Эксперимент – из [23].

Рис. 2.2\_Хе\_b7 изображает сечение фотоионизации  $3d_{5/2}$  и  $3d_{3/2}$  уровней в рамках СП ПСФО [3]. Ясно виден второй максимум в сечении фотоионизации  $5/2$  электронов, вызванный воздействием на них электронов с уровня  $3/2$ , именуемый внутри-дублетным резонансом. Расчёт проведен на основе предположения, что  $5/2$  и  $3/2$  электроны могут рассматриваться как электроны «вверх» и «вниз» (см. Раздел 1.10). Сечение может рассчитываться по формулам (1.96 – 1.99), с тем, однако, уточнением, что к членам «вверх» в (1.93) добавляется множитель  $6/5$ , а к членам «вниз» - множитель  $4/5$ , учитывающие реальное число электронов на уровнях  $5/2$  и  $3/2$  - 6 и 4, соответственно [24]. Данные эксперимента – из [25].

Заметим, что различие между  $\sigma_{5p}^{RPAE}(\omega)$  и  $\sigma_{5p}^{HF}(\omega)$  сохраняется до весьма высоких  $\omega$ , а там наиболее важно влияние  $5s$  на  $5p$ . Существенно также, что с ростом  $\omega$  влияние взаимодействия между самими  $5p$ - электронами "затухает" весьма быстро.

Рис. 2.2\_Хе\_d1 изображает результаты для параметра угловой анизотропии  $\beta_{5p}(\omega)$  и  $\beta_{4d}(\omega)$  в довольно широкой области частоты. Оба представлены осцилляцией, которая для  $\beta_{4d}(\omega)$  несколько более сжата по энергии, чем  $\beta_{5p}(\omega)$ .

Рис. 2.2\_Хе\_d2 изображает параметр угловой анизотропии  $\beta_{5p}(\omega)$  в ХФ и ПСФО и демонстрирует значительнейшую роль ПСФО корреляций в околопороговой области (см. [26]). Зависимость параметра  $\beta_{5p}(\omega)$  от энергии фотона представлена осциллирующей кривой. ПСФО результаты хорошо согласуются с данными эксперимента из [27-30].

Рис. 2.2\_Хе\_d3 изображает дипольные параметры угловой анизотропии  $\beta_{3d_{5/2}}(\omega)$  и  $\beta_{3d_{3/2}}(\omega)$  в СП ПСФО (см. [3]). На фоне мощной вариации виден, в виде малого максимума на кривой  $\beta_{3d_{5/2}}(\omega)$ , след влияния внутри-дублетного взаимодействия (см. обсуждение Рис. 2.2\_Хе\_b7).

Рис. 2.2\_Хе\_e1 изображает магическую комбинацию недипольных параметров угловой анизотропии  $(\gamma^C + 3\delta^C)$   $5p$  электронов Хе в ХФ и ПСФО (см. [31]). Роль ПСФО корреляций велика, особенно при малых энергиях фотоэлектронов.

Рис. 2.2\_Хе\_e2 представляет недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma^C$   $5s$  электронов Хе в ХФ и ПСФО, вблизи порога ионизации. На врезке виден максимум, отражающий влияние  $4d$ -подболочки. Как и для  $5p$  электронов, роль ПСФО корреляций велика.

Рис. 2.2\_Хе\_e3 даёт недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma^C$   $5s$  электронов Хе в ХФ и ПСФО в значительном диапазоне частот фотонов. Существенно, что кривая в ПСФО хорошо согласуется с данными экспериментов [32], явно говоря в пользу точности ПСФО.

Рис. 2.2\_Хе\_e4 приводит недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma^C$ ,  $\delta^C$  и их магическую комбинацию для  $4d$  электронов Хе в ХФ и ПСФО. Роль ПСФО корреляций велика лишь при  $\omega > 80$  эВ.

Рис. 2.2\_Хе\_e5 представляет недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma^c$ ,  $\delta^c$  и их магические комбинации для  $3d_{5/2}$  и  $3d_{3/2}$  электронов Хе в ХФ и СП ПСФО (см. [33]). Виден след внутри-дублетного резонанса (см. Рис. 2.2\_Хе\_b7).

Рис. 2.2\_Хе\_f1 изображает параметры спиновой поляризации  $A^j(\omega)$ ,  $\zeta^j(\omega)$  и  $\xi^j(\omega)$   $4d$  электронов в ПСФО. Во всех зависимостях явно видны следы Гигантского резонанса и следующего за ним значительно меньшего в сечении максимума при  $12Ry$

Рис. 2.2\_Хе\_f2 представляет параметры спиновой поляризации  $A^j(\omega)$ ,  $\zeta^j(\omega)$  и  $\xi^j(\omega)$   $3d_{5/2}$  и  $3d_{3/2}$  электронов Хе в ХФ и СП ПСФО (см. обсуждение Рис. 2.2\_Хе\_b7) Роль внутри-дублетных корреляций невелика.

Рис. 2.2\_Хе\_g1 приводит сечение однократной фотоионизации в окрестности  $4d$  Гигантского резонанса Хе в ХФ и ПСФО (см. [34]). Точки – эксперимент [11]

Рис. 2.2\_Хе\_g2 изображает токи увлечения в Хе, в сопоставлении с токами увлечения в Аг и Не (см. [7]).

**Рисунки 2.2\_Хе<sup>+</sup>** содержат результаты расчетов для Хе<sup>+</sup>.

Рис. 2.2\_Хе<sup>+</sup>\_a1 представляет полное сечение фотоионизации иона Хе<sup>+</sup> (сплошная кривая 4 и вклады различных полных термов конечного состояния иона  $^2S-1$ ,  $^2P-2$ ,  $^2D-3$ ) в ХФ и ПСФО для незамкнутых оболочек - ПСФОН.

Рис. 2.2\_Хе<sup>+</sup>\_a2 приводит полное сечение однократной фотоионизации иона Хе<sup>+</sup> ПСФОН. Дается вклад термов конечного состояния  $^2D$ -пунктир,  $^2P$ -штрих-пунктир,  $^2S$ -штрих-штрих-пунктир и полное сечение – сплошная линия (см. [35]). Видно, что Гигантский резонанс существенно изменен «частоклом» квазисечений дискретных возбуждений

Рис. 2.2\_Хе<sup>+</sup>\_a3 приводит полное сечение однократной фотоионизации иона Хе<sup>+</sup> (см. [35]). Экспериментальные данные взяты из [36]

Рис. 2.2\_Хе<sup>+</sup>\_b1 даёт сечение фотоионизации  $5s$  электронов ХФ-д (пунктир), ХФ-с (штрих-пунктир) и ПСФОН (с учётом  $4d$  подоболочки). Заметно отличие от случая Хе Рис. 2.2\_Хе\_b2, проявляющееся в исчезновении интерференционного минимума и заметном усилении главного максимума.

Рис. 2.2\_Хе<sup>+</sup>\_b2 приводит сечение фотоионизации  $4d$  электронов ХФ-д (пунктир), ХФ-с (штрих-пунктир) и ПСФОН (сплошная линия). Заметна асимметрия Гигантского резонанса, отсутствующая в Хе (см. Рис. 2.2\_Хе\_b5)

**Рисунки 2.2\_Хе<sup>3+</sup>** содержат результаты расчетов для Хе<sup>3+</sup>.

Рис. 2.2\_Хе<sup>3+</sup>\_a1 изображает квази-сечение дискретных возбуждений иона и сечение фотоионизации Хе<sup>3+</sup> в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Видно, что Гигантский резонанс существенно меньше, чем в нейтральном атоме, но вполне заметен.

Рис. 2.2\_Хе<sup>3+</sup>\_a2 приводит квази-сечение возбуждения дискретных уровней иона Хе<sup>3+</sup> в области малых энергий фотона в диапазоне энергий от первого дискретного уровня до  $40eV$ .

Рис. 2.2\_Хе<sup>3+</sup>\_a3 приводит квази-сечение возбуждения дискретных уровней иона Хе<sup>3+</sup> в области малых энергий фотона в диапазоне энергий -  $40 - 55eV$ .

Рис. 2.2\_Хе<sup>3+</sup>\_d1 представляет дипольный параметр  $\beta(\omega)$  угловой анизотропии  $5p$  «вверх» электронов (сплошная линия) и  $4d$  «вверх» (пунктир) и  $4d$  «вниз» (штрих-пунктир) электронов Хе<sup>3+</sup>. Параметры представлены схожими по форме осциллирующими

функциями.

**Рисунки 2.2\_Хе<sup>5+</sup>** содержат результаты расчетов для Хе<sup>5+</sup>.

Рис. 2.2\_Хе<sup>5+</sup>\_a1 изображает полное сечение возбуждения дискретных уровней иона Хе<sup>5+</sup> в ХФ и ПСФОН. Видно, что Гиганский резонанс целиком «съеден» дискретными возбуждениями.

Рис. 2.2\_Хе<sup>5+</sup>\_a2 представляет квази-сечение возбуждения дискретных уровней иона Хе<sup>5+</sup> в ХФ и ПСФОН при  $\omega < 30 eV$ . На врезке приведены квази-сечения для  $35 < \omega < 75 eV$ .

Рис. 2.2\_Хе<sup>5+</sup>\_a3 приводит квази-сечение дискретных возбуждений иона Хе<sup>5+</sup> в ПСФОН при  $65 < \omega < 130 eV$ .

Рис. 2.2\_Хе<sup>5+</sup>\_d1 даёт дипольный параметр угловой анизотропии  $5p$  электронов (сплошная линия) и  $4d$  (пунктир) электронов. Влияние дискретных возбуждений велико.

**Рисунки 2.2\_Хе<sup>6+</sup>** содержат результаты расчетов для Хе<sup>6+</sup>.

Рис. 2.2\_Хе<sup>6+</sup>\_a1 изображает квази-сечения возбуждения дискретных возбуждений иона Хе<sup>6+</sup> в ПСФО.

Рис. 2.2\_Хе<sup>6+</sup>\_d1 приводит дипольный параметр угловой анизотропии  $4d$  электронов.

**Таблица 2.2** включает расчетные значения сил осцилляторов  $g_{if}$  в ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д-с (в некоторых случаях ОПСФО) нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения и каждой рассмотренной подоболочки атома этого раздела. В Таблице даются также значения расчетных энергий перехода  $\omega_{if}$ .

### 2.3. Атомы и некоторые ионы элементов I группы

В этом разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подоболочек атомов и некоторых ионов элементов первой группы периодической системы Менделеева, а именно Li ( $Z=3$ )  $1s^2, 2s^{\uparrow}$ ; Na ( $Z=11$ )  $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^{\uparrow}$ ; K ( $Z=19$ )  $2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^{\uparrow}$ ; Cu ( $Z=29$ )  $2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^{\uparrow}$ ; Rb ( $Z=37$ )  $3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 5s^{\uparrow}$ ; Ag ( $Z=47$ )  $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^{\uparrow}$ ; Cs ( $Z=55$ )  $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 6s^{\uparrow}$ ; Li<sup>+</sup>  $1s^2$ ; Li<sup>-</sup>  $1s^2, 2s^2, 2p^6$ ; K<sup>-</sup>  $2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2$ ; Cu<sup>+</sup>  $2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}$ ; Rb<sup>+</sup>  $3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6$ ; Rb<sup>-</sup>  $3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 5s^2$ ; Ag<sup>+</sup>  $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}$ ; Cs<sup>+</sup>  $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6$ ; Cs<sup>-</sup>  $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 6s^2$ . Здесь  $\uparrow$  обозначает «вверх» электроны для СП ПСФО (см Раздел 1.10).

Атомы элементов этой группы в качестве наружного имеют единственный  $s$  – электрон, т.е. полузаполненную подоболочку, а потому мы их рассматриваем в рамках СП ПСФО (см. Раздел 1.10)

Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов в Разделе 2.1.

**Рисунки 2.3\_Li** представляет данные по Li.

Рис. 2.3\_Li\_a1 изображает полное сечение фотоионизации  $\sigma(\omega)$  Li в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО для  $2s$  и  $1s$ -подоболочек.

Различия в формах ХФ-д и ХФ-с малы, в то время как небольшая роль корреляций отражена в сравнительно малом различии между результатами ХФ и СП ПСФО.

Рис. 2.3\_Li\_e1 изображает недипольные параметры  $\gamma_{1s}^C(\omega)$  и  $\gamma_{2s}^C(\omega)$  для Li в ХФ и ПСФО. На кривой  $\gamma_{2s}^C(\omega)$  виден небольшой максимум при 50 эв – след влияния  $1s$ -подоболочки. Эта кривая имеет и небольшой минимум около самого порога.

**Рисунки 2.3\_Li<sup>+</sup>** представляет данные по Li<sup>+</sup>.

Рис. 2.3\_Li<sup>+</sup>\_a1 изображает полное сечение фотоионизации Li<sup>+</sup> в ХФ-д, ХФ-с и

ПСФО. Роль корреляций мала и сечение очень быстро убывает от порога.

**Рисунки 2.3\_Li<sup>-</sup>** представляет данные по Li<sup>-</sup>.

Рис. 2.3\_Li\_a1 изображает полное сечение фотоионизации Li<sup>-</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Сечение на пороге фотоионизации атома обращается нуль, достигая своего максимума на расстоянии 0.1-0.2 эв за порогом.

Рис. 2.3\_Li\_b1 представляет сечение фотоионизации 1s электронов  $\sigma_{1s}(\omega)$  Li<sup>-</sup> в ОПСФО (сплошная линия) (см. [37], [АИЧЧ]). Наличие одного особо слабо связанного электрона делает учёт перестройки необходимым. Примечательно, что он оказывается и достаточным для достижения полуколичественного согласия с данными опыта. Эксперимент – пустые квадраты [38], чёрные ромбы - [39].

Рис. 2.3\_Li\_e1 представляет результаты расчёта недипольных параметров угловой анизотропии  $\gamma_{1s}^C$  и  $\gamma_{2s}^C$  1s и 2s электронов в Li<sup>-</sup> в ХФ и ПСФО. Особо примечательна сильная вариация в  $\gamma_{2s}^C$  у порога.

Рис. 2.3\_Li\_e2 приводит результаты расчёта недипольных параметров угловой анизотропии  $\gamma_{1s}^C$  и  $\gamma_{2s}^C$  1s и 2s электронов в Li<sup>-</sup> в ХФ и ОПСФО. Особо велика роль ПСФО в уменьшении параметра  $\gamma_{2s}^C$  вблизи резонанса, расположенного у порога.

Рис. 2.3\_Li\_e3 сопоставляет недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma_{1s}^C$  2s электронов Li<sup>-</sup> (в ХФ и ПСФО) и Li<sup>-</sup> в ХФ и с учётом перестройки – в ОПСФО.

Рис. 2.3\_Li\_e4 приводит недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma_{1s}^C$  1s электронов Li<sup>-</sup> (ХФ и ПСФО) и Li (ХФ и СП ПСФО). В Li имеется минимум у порога 1s.

Рис. 2.3\_Li\_e5 сравнивает недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma_{2s}^C$  2s электронов Li<sup>-</sup> (ХФ и ПСФО) и Li (ХФ и СП ПСФО). Отчётливо виден след порога 1s электронов.

Рис. 2.3\_Li\_e6 сравнивает недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma_{2s}^C$  2s электронов Li и Li<sup>-</sup> в ХФ, СП ПСФО для Li и ХФ и ПСФО для Li<sup>-</sup>.

**Рисунки 2.3\_Na** включают все результаты вычислений для Na.

Рис. 2.3\_Na\_a1 представляет полное сечение фотоионизации атома Na в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО.

Корреляции учтены во всех дипольных переходах  $3s - n(\epsilon)p$ ,  $2p - n(\epsilon)d$ ,  $2p - n(\epsilon)s$ ,  $2s - n(\epsilon)p$  и  $1s - n(\epsilon)p$ . Роль  $2p - n(\epsilon)d$  весьма значительна, но только при  $\omega \leq 25Ry$ . Влияние других переходов в этой области частот мало, за исключением проявлений серии резонансов  $2s - n(\epsilon)p$ .

Рис. 2.3\_Na\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{2p}(\omega)$  2p<sup>6</sup> электронов Na в СП ПСФО. У порога параметр имеет узкий максимум.

**Рисунки 2.3\_Na<sup>+</sup>** включают все результаты вычислений для Na<sup>+</sup>.

Рис. 2.3\_Na<sup>+</sup>\_a1 представляет полное сечение фотоионизации атома Na в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Отчётливо виден максимум, с которого начинается сечение фотоионизации 1s электронов.

Рис. 2.3\_Na<sup>+</sup>\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{2p}(\omega)$  2p<sup>6</sup> электронов иона Na<sup>+</sup> в СП ПСФО.

**Рисунки 2.3\_Na<sup>-</sup>** включают все результаты вычислений для Na<sup>-</sup>.

Рис. 2.3\_Na<sup>-</sup>\_a1 представляет полное сечение фотоионизации  $\sigma(\omega)$  Na<sup>-</sup> в ХФ-д, ХФ-с

и ПСФО. Роль электронных корреляций при малых энергиях фотона велика. Во врезке приведено и сечение фотоионизации  $1s$  электронов.

Рис. 2.3\_Na\_d1 представляет дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{2p}(\omega)$   $2p$  электронов иона  $\text{Na}^-$  в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. У порога имеется острый максимум с последующим глубоким минимумом.

**Рисунки 2.3\_K** включают все результаты вычислений для К.

Рис. 2.3\_K\_a1 представляет полное сечение  $\sigma(\omega)$  К в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Виден максимум в сечении фотоионизации  $3p$  электронов и во врезке – максимум при  $7 R_y$  от той же подболочки, которому предшествует минимум Купера, обусловленный тем, что амплитуда фотоионизации в одноэлектронном приближении проходит через нуль.

Рис. 2.3\_K\_a2 сравнивает результаты расчётов  $\sigma_{3p}(\omega)$  атома К, выполненные в трёх различных походах: ПСФО для незамкнутых оболочек (см. раздел 1.10) - сплошная линия, ПСФО – пунктир, СП ПСФО – штрих – пунктир. Согласие удовлетворительное.

Рис. 2.3\_KK<sup>+</sup>K<sup>+</sup>\_a3 сравнивает результаты расчётов сечений фотоионизации К (ХФ и СП ПСФО), К<sup>-</sup> и К<sup>+</sup> (ПСФО). Различия имеются и вблизи  $2p$  порога.

Рис. 2.3\_K<sup>+</sup>ArCl<sup>-</sup>\_a4 сравнивает результаты расчётов сечений фотоионизации К (ХФ и СП ПСФО), Ar и Cl<sup>-</sup> (ПСФО). Отличия очень велики от порога до примерно  $3.5 R_y$ , но сохраняются и далее.

Рис.2.3\_K\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $2p$ - и  $3p$ -электронов атома К.

Рис. 2.3\_KK<sup>-</sup>K<sup>+</sup>\_df1 сравнивает результаты расчётов дипольных параметров угловой анизотропии  $\beta_{3p}$  и спиновой поляризации  $A_{3p}, \alpha_{3p}, \xi_{3p}$  атомов и ионов К (СП ПСФО), К<sup>+</sup> и Ar (ПСФО).

**Рисунки 2.3\_K<sup>+</sup>** включают все результаты вычислений для К<sup>+</sup>.

Рис. 2.3\_K<sup>+</sup>\_a1 приводит полное сечение фотоионизации К<sup>+</sup> в ХФ-д, ХФ-с, ПСФО. Учтены ПСФО корреляции во всех дипольных переходах  $3p-n(\epsilon)d$ ,  $3p-n(\epsilon)s$ ,  $3s-n(\epsilon)p$ ,  $2p-n(\epsilon)d$ ,  $2p-n(\epsilon)s$ ,  $2s-n(\epsilon)p$ . Рассмотренная область  $\omega$  очень широка, приблизительно до  $350 R_y$ . Роль канала  $3p-n(\epsilon)d$  велика, но лишь для значений  $\omega$ , довольно близких к порогу  $3p$ -подболочки. Влияние других переходов в этой области частот мало.

Рис. 2.3\_K<sup>+</sup>a2 содержит результаты расчетов сечения фотоионизации иона К<sup>+</sup> в ПСФО. Данные эксперимента: пустые кружки [40] и зачернённые кружки - [41].

Рис. 2.3\_K<sup>+</sup>\_d1 представляет результаты для параметров угловой  $\beta_{2p,3p}$  анизотропии  $3p$ - и  $2p$  подболочек К в ПСФО. Сплошная линия -  $3p$  – подболочка, штрих – пунктир -  $2p$ . Параметр  $\beta_{3p}$  имеет у порога узкий и значительный максимум со следующим за ним глубоким минимумом. При  $300 \text{ эВ}$  параметр  $\beta_{3p}$  имеет максимум, обусловленный влиянием  $2p$  электронов.

**Рисунки 2.3\_K<sup>-</sup>** включают все результаты вычислений для иона К<sup>-</sup>.

Рис. 2.3\_K<sup>-</sup>\_a1 представляет полное сечение  $\sigma(\omega)$  иона К<sup>-</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Роль корреляций велика. Сечение на пороге обращается в нуль, но очень быстро достигает максимума.

Рис. 2.3\_K<sup>-</sup>\_d1 изображает параметры угловой  $\beta_{2p,3p}$  анизотропии  $3p$ - и  $2p$  подболочек К в ХФ и ПСФО. Сплошная линия -  $3p$  – подболочка, штрих – пунктир -  $2p$ . Оба параметра у своих порогов быстро достигают максимума и затем имеют



сравнительно узкий минимум.

**Рисунки 2.3\_Cu** включают все результаты вычислений для Cu.

Рис. 2.3\_Cu\_a1 даёт сечение фотоионизации атома Cu в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Видны проявления дискретных возбуждений внутренних подоболочек.

Рис. 2.3\_Cu\_d1 приводит параметры угловой анизотропии  $\beta_{3d,3p}$  для  $3d$  и  $3p$  электронов Cu в СП ПСФО.

**Рисунки 2.3\_Cu<sup>+</sup>** включают все результаты вычислений для Cu<sup>+</sup>.

Рис. 2.3\_Cu<sup>+</sup>\_a1 изображает полное сечение фотоионизации Cu<sup>+</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО.

Рис. 2.3\_Cu<sup>+</sup>\_d1 приводит параметры угловой анизотропии  $\beta_{2p,3p,3d}$  для  $2p$ ,  $3p$  и  $3d$  электронов Cu в СП ПСФО. Для  $\beta_{3p,3d}$  характерны минимумы сразу за порогом подболочки и сильная вариация вблизи  $2p$  порога.

**Рисунки 2.3\_Rb** включают все результаты вычислений для Rb.

Рис. 2.3\_Rb\_a1 представляет результаты расчёта сечения фотоионизации атома Rb в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. На врезке виден сильный широкий резонанс в сечении от  $3d^{10}$  электронов.

Рис. 2.3\_Rb\_d1 даёт результаты расчёта дипольных параметров угловой анизотропии  $\beta_{3d,4p}(\omega)$  в СП ПСФО.

**Рисунки 2.3\_Rb<sup>+</sup>** включают все результаты вычислений для Rb<sup>+</sup>.

Рис. 2.3\_Rb<sup>+</sup>\_a1 содержит результаты расчетов сечения фотоионизации иона Rb<sup>+</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Особо велико сечение на пороге  $4p$  подболочки.

Рис. 2.3\_Rb<sup>+</sup>\_d1 представляет результаты расчёта дипольных параметров угловой анизотропии  $\beta_{3p,3d,4p}(\omega)$ . Параметры  $\beta_{3d,4p}(\omega)$  имеют качественно подобные вариации около своих порогов – максимум с последующим минимумом.

**Рисунки 2.3\_Rb<sup>-</sup>** включают все результаты вычислений для Rb<sup>-</sup>.

Рис. 2.3\_Rb<sup>-</sup>\_a1 содержит результаты расчета полного сечения фотоионизации иона Rb<sup>-</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО.

Рис. 2.3\_Rb<sup>-</sup>\_d1 представляет результаты расчёта дипольных параметров угловой анизотропии  $\beta_{3p,4p}(\omega)$ . Параметр для наружной оболочки растёт до максимума, который сменяется минимумом. Параметр  $\beta_{3p}(\omega)$  от порога быстро убывает, достигая почти сразу минимума.

**Рисунки 2.3\_Ag** включают все результаты вычислений для Ag.

Рис. 2.3\_Ag\_a1 представляет полное сечение фотоионизации Ag в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Первый максимум – это сечение фотоионизации  $4d^{10}$  электронов. На его высокоэнергетическом склоне – набор узких максимумов – следы дискретных возбуждений  $4p^6$ . На врезке – второй, слабый, максимум, следующий за Куперовским минимумом.

Рис. 2.3\_Ag\_d1 представляет результаты расчёта дипольных параметров угловой анизотропии  $\beta_{4d,4p}(\omega)$  в СП ПСФО. Видно подобие кривых, причём  $\beta_{4p}(\omega)$  выглядит как  $\beta_{4d}(\omega)$ , начинающаяся лишь от порога с большей энергией.

**Рисунки 2.3\_Ag<sup>+</sup>** включают все результаты вычислений для Ag<sup>+</sup>.

Рис. 2.3\_Ag<sup>+</sup>\_a1 приводит результаты расчетов полного сечения фотоионизации иона Ag<sup>+</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО.

Рис. 2.3\_Ag<sup>+</sup>\_d1 представляет результаты расчёта дипольных параметров угловой анизотропии  $\beta_{4d,4p,3d}(\omega)$  для  $4d$ ,  $4p$ ,  $3d$  – подболочек в ХФ-д, ХФ-с и ОП ПСФО. Параметр  $\beta$

$4d(\omega)$  – особо сложная функция, с тремя максимумами и минимумами, первый из которых – у самого порога.

**Рисунки 2.3\_Cs** включают все результаты вычислений для атома Cs.

Рис. 2.3\_Cs\_a1 представляет полное сечение фотоионизации Cs в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Виден Гигантский резонанс с максимумом при  $7.5Ry$ , сечение в котором особо сильно меняется при учёте ПСФО корреляций.

Рис. 2.3\_Cs\_b1 изображает сечение фотоионизации  $4d$  подболочки Cs в ПСФО и ОПСФО. Видно, что отличие соответствующих кривых очень велико: при переходе к ОПСФО максимум смещается в сторону более высоких  $\omega$ , расширяется и уменьшается по высоте примерно в четыре раза.

Рис. 2.3\_Cs\_b2 изображает сечение фотоионизации  $3d_{5/2}$  и  $3d_{3/2}$  уровней в рамках ХФ и СП ОПСФО (см. [3]). Ясно виден второй максимум в сечении фотоионизации  $5/2$  электронов, вызванный воздействием на них электронов с уровня  $3/2$ , именуемый внутридублетным резонансом. Расчёт, как и для  $3d$  Хе, проведен на основе предположения, что  $5/2$  и  $3/2$  электроны могут рассматриваться как электроны двух сортов - «вверх» и «вниз» (см. Раздел 1.10). Сечение рассчитывается по формулам (1.96 – 1.99), с тем, однако, уточнением, что к членам «вверх» в (1.93) добавляется множитель  $6/5$ , а к членам «вниз» - множитель  $4/5$ , учитывающие реальное число электронов на уровнях  $5/2$  и  $3/2$  - 6 и 4, соответственно [24]. Видно значительное усиление максимума в  $\sigma_{3d5/2}$  по сравнению с аналогичным максимумом в Хе - см Рис. 2.2\_Хе\_b7.

Рис. 2.3\_Cs\_d1 приводит результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии  $\beta_{4d,5p}(\omega)$   $4d$ ,  $5p$  электронов в ПСФО, в широкой области частот  $\omega$ . Кривые  $\beta_{5p}(\omega)$  весьма сложные, с двумя максимумами и минимумами. Кривые  $\beta_{4d}(\omega)$  для «вверх» и «вниз» электронов заметно отличаются в пороговой области.

Рис. 2.3\_Cs\_d2 изображает результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии  $\beta_{4d}(\omega)$   $4d$  электронов в ПСФО и ОПСФО, в широкой области частот  $\omega$ .

Рис. 2.3\_Cs\_d3 представляет результаты расчёта дипольных параметров угловой анизотропии  $\beta_{3d5/2,3d3/2}(\omega)$   $3d_{5/2}$  и  $3d_{3/2}$  уровней в рамках ХФ и СП ПСФО., по той же методике, что и парциальных сечений (см. Рис. 2.3\_Cs\_b2) (см. [42]). По сравнению с  $3d$  Хе влияние  $3d_{3/2}$  на  $3d_{5/2}$  усиливается значительно, приводя к впечатляющему максимуму в  $\beta_{3d5/2}(\omega)$ , в отличие от случая Хе, изображённого на Рис. 2.2\_Хе\_d3.

Рис. 2.3\_Cs\_e1 изображает недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma^C$ ,  $\delta^C$  и их магическую комбинацию  $(\gamma^C + 3\delta^C)$   $4d$  уровней Cs в ХФ и СП ОПСФО. Видны значительные максимумы, отражающие влияние  $3/2$  электронов на  $5/2$  электронов.

Рис. 2.3\_Cs\_e2 изображает недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma^C$ ,  $\delta^C$  и их магическую комбинацию  $(\gamma^C + 3\delta^C)$   $3d_{5/2}$  и  $3d_{3/2}$  уровней Cs в ХФ и СП ОПСФО. Видны значительные максимумы, отражающие влияние  $3/2$  электронов на  $5/2$  электроны.

Рис. 2.3\_Cs\_f1 представляет параметры спиновой поляризации фотоэлектронов  $A^j(\omega)$ ,  $\zeta^j(\omega)$  и  $\xi^j(\omega)$   $3d_{5/2}$  и  $3d_{3/2}$  уровней Cs в ХФ и СП ПСФО (см. обсуждение Рис. 2.2\_Хе\_b7) (см [43]). Видно сильное проявление влияния  $3/2$  уровня на  $5/2$ .

**Рисунки 2.3\_Cs<sup>+</sup>** включают все результаты вычислений для атома Cs<sup>+</sup>.

Рис. 2.3\_Cs<sup>+</sup>\_a1 представляет полное сечение фотоионизации иона Cs<sup>+</sup> в ХФ-д, ХФ-с

и ПСФО. Виден Гигантский резонанс  $4d$  подоболочки, где влияние корреляций велико.

Рис. 2.3\_Cs<sup>+</sup>\_d1 представляет результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии  $\beta_{3d, 4p, 4d, 5p}(\omega)$   $3d, 4p, 4d, 4p$  – подоболочек в ПСФО, в широкой области частот  $\omega$ .

**Рисунки 2.3\_Cs<sup>-</sup>** включают все результаты вычислений для атома Cs<sup>-</sup>.

Рис. 2.3\_Cs<sup>-</sup>\_a1 представляет полное сечение фотоотрыва от иона Cs<sup>-</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Влияние ПСФО корреляций значительно.

Рис. 2.3\_Cs<sup>-</sup>\_d1 изображает результаты расчётов дипольных параметров угловой анизотропии  $\beta_{3d, 4p, 5p}(\omega)$   $3d, 4p, 5p$  – подоболочек в ПСФО, в широкой области частот  $\omega$ . Для  $5p$  и  $3d$  электронов характерен максимум вблизи порога, с последующим минимумом, тогда как для  $4p$  электронов параметр  $\beta$  начинает сразу убывать, достигая минимума вблизи порога.

Рис. 2.3\_Cs<sup>-</sup>\_d2 представляет результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии  $\beta_{4d}(\omega)$  в ПСФО и ОПСФО, в широкой области частот  $\omega$ . Отличие результатов ОПСФО и ПСФО велико.

**Таблица 2.3** включает расчетные значения сил осцилляторов  $g_{if}$  в ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д, -с (в некоторых случаях - ОПСФО) для нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения каждой рассмотренной подоболочки и всех атомов и ионов этого раздела. Таблица содержит также значения расчетных энергий перехода  $\omega_{if}$

## 2.4. Атомы и некоторые ионы элементов II группы

В этом разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подоболочек атомов и некоторых ионов элементов II группы периодической системы элементов Менделеева, а именно Be ( $Z=4$ )  $1s^2, 2s^2$ ; Mg ( $Z=12$ )  $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2$ ; Ca ( $Z=20$ )  $2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2$ ; Zn ( $Z=30$ )  $2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2$ ; Sr ( $Z=38$ )  $3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 5s^2$ ; Cd ( $Z=48$ )  $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2$ ; Ba ( $Z=56$ )  $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 6s^2$ ; Ca<sup>2+</sup>  $2p^6, 3s^2, 3p^6$ . Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов в Разделе 2.1.

**Рисунки 2.4\_Be** представляет данные по Be.

Рис. 2.4\_Be\_a1 изображает полное сечение фотоионизации  $\sigma(\omega)$  Be в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Максимумы соответствуют фотоионизации  $2s$  и  $1s$  подоболочек.

Различия в формах ХФ-д и ХФ-с малы, в то время как небольшая роль корреляций отражена в сравнительно малом различии между результатами ХФ и СП ПСФО.

**Рисунки 2.4\_Mg** содержат результаты вычислений для Mg

Рис. 2.4\_Mg\_a1 изображает полное сечение фотоионизации Mg в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. При  $\omega \approx 5Ry$  начинается вклад  $2p^6$  электронов, подобный наружной подоболочке Ne. Электронная конфигурация Mg есть  $[Ne]3s^2$ .

Рис. 2.4\_Mg\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{2p}(\omega)$   $2p^6$  электронов иона Mg в СП ПСФО. Обращает внимание максимум с последующим глубоким минимумом вблизи порога.

**Рисунки 2.4\_Ca** содержат результаты вычислений для Ca

Рис. 2.4\_Ca\_a1 изображает полное сечение фотоионизации Ca в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Доминирует мощный, изрезанный следом дискретных возбуждений, максимум,

описывающий фотоионизацию  $3p^6$  электронов.

Рис. 2.4\_Ca\_d1 представляет дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{3p}(\omega)$   $\beta_{2p}(\omega)$   $3p^6$  и  $2p^6$  электронов иона Ca в СП ПСФО. Сильны вариации параметра  $\beta_{3p}(\omega)$  вблизи своего порога и вблизи порога  $2p$  подболочки.

**Рисунки 2.4\_Ca<sup>2+</sup>** содержат результаты вычислений для Ca<sup>2+</sup>

Рис. 2.4\_Ca<sup>2+</sup>\_a1 изображает полное сечение фотоионизации Ca<sup>2+</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Расчёт в рамках другого подхода -  $R$ -матрицы - взят из [44].

Рис. 2.4\_Ca<sup>2+</sup>\_d1 даёт дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{3p}(\omega)$   $3p$  электронов иона Ca<sup>2+</sup> в СП ПСФО. Параметр быстро убывает за порогом и достигает глубокого минимума.

**Рисунки 2.4\_Zn** содержат результаты вычислений для Zn.

Рис. 2.4\_Zn\_a1 изображает полное сечение фотоионизации Zn в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. В сечении доминирует максимум от  $3d^{10}$  электронов. Электронная структура Zn  $[Ar]3d^{10}4s^2$

Рис. 2.4\_Zn\_d1 представляет дипольные параметры угловой анизотропии  $\beta_{2p,3p,3d}(\omega)$   $2p$ ,  $3p$  и  $3d$  электронов иона Zn в СП ПСФО. Особо сложна кривая -  $\beta_{3d}(\omega)$ .

Рис. 2.4\_Sr\_a1 приводит полное сечение фотоионизации Sr в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Обращает внимание максимум при  $20 eV$ , который есть следствие взаимодействия дискретных уровней возбуждения  $4p$  электронов со сплошным спектром ионизации  $5s$  электронов.

Рис. 2.4\_Sr\_d1 изображает дипольные параметры угловой анизотропии  $\beta_{4p,3d,3p}(\omega)$   $4p$ ,  $3d$ ,  $3p$  электронов Sr в ПСФО. Кривые  $\beta_{4p}(\omega)$  и  $\beta_{3d}(\omega)$  подобны, просто сжаты по  $\omega$ .

**Рисунки 2.4\_Cd** содержат результаты вычислений для Cd

Рис. 2.4\_Cd\_a1 изображает полное сечение фотоионизации Cd в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Виден мощный, сдвинутый за порог ионизации максимум в сечении  $4d$  электронов.

Рис. 2.4\_Cd\_d1 изображает дипольные параметры угловой анизотропии  $\beta_{4p,3d,3p}(\omega)$   $4p$ ,  $3d$ ,  $3p$  электронов Cd в СП ПСФО. Структура кривых подобна изображённой на Рис. 2.4\_Sr\_d1.

**Рисунки 2.4\_Ba** содержат результаты вычислений для Ba

Рис. 2.4\_Ba\_a1 приводит полное сечение фотоионизации Ba в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Выделяется мощный Гигантский резонанс при  $\omega \approx 8.3Ry$ .

Рис. 2.4\_Ba\_b1 изображает сечение фотоионизации  $4d$  электронов Ba в ПСФО и ОПСФО. Данная подболочка определяет Гигантский резонанс при  $\omega \approx 8.3Ry$ . Данные эксперимента взяты из [45].

Рис. 2.4\_Ba\_b2 изображает сечение фотоионизации  $3d_{5/2}$  и  $3d_{3/2}$  уровней в рамках ХФ и СП ОПСФО (см. [3]). Ясно виден второй максимум в сечении фотоионизации  $5/2$  электронов, вызванный воздействием на них электронов с уровня  $3/2$ , именуемый внутридублетным резонансом. По высоте он значительно больше аналогичного внутридублетного резонанса в Cs (Рис. 2.3\_Cs\_b2) и, тем более, в Xe (Рис. 2.2\_Xe\_b7). Расчёт, как и для  $3d$  Xe, проведен на основе предположения, что  $5/2$  и  $3/2$  электроны могут

рассматриваться как электроны «вверх» и «вниз» (см. Раздел 1.10). Сечение рассчитывается по формулам (1.96 – 1.99), с тем, однако, уточнением, что к членам «вверх» в (1.93) добавляется множитель 6/5, а к членам «вниз» - множитель 4/5, учитывающие реальное число электронов на уровнях 5/2 и 3/2 -6 и 4, соответственно [23].

Рис. 2.4\_Va\_d1 даёт дипольные параметры угловой анизотропии  $\beta(\omega)$  для  $5p, 4d, 4p, 3d$ - электронов Ва в СП ПСФО. Качественно, кривые напоминают Рис. 2.4\_Cd\_d1.

Рис. 2.4\_Va\_d2 приводит дипольные параметры угловой анизотропии  $\beta_{3d5/2, 3d3/2}(\omega)$  5/2 и 3/2 электронов Ва в ХФ и СП ПСФО. Видно сильное влияние 3/2 электронов на параметр угловой анизотропии 5.2 электронов (см. [42]).

Рис. 2.4\_Va\_e1 приводит недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma_{4d}^C(\omega)$  4d электронов Ва в ХФ и СП ПСФО. Влияние корреляций велико.

Рис. 2.4\_Va\_e2 изображает недипольный параметр угловой анизотропии  $\delta_{4d}^C(\omega)$  4d электронов Ва в ХФ и СП ПСФО. Видно сильное влияние корреляций.

Рис. 2.4\_Va\_e3 даёт магическую комбинацию недипольных параметров угловой анизотропии  $(\gamma_{4d}^C + 3\delta_{4d}^C)$  4d электронов Ва в ХФ и СП ПСФО. Влияние корреляций велико. В ПСФО появляется дополнительный максимум при  $\omega \approx 92$  эВ (см. [31]).

Рис. 2.4\_Va\_e4 представляет недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma_{3d5/2, 3d3/2}^C(\omega)$   $3d_{5/2}$  и  $3d_{3/2}$  электронов Ва в ХФ и СП ПСФО (см. [31]). Весьма заметно влияние 3/2 электронов на электроны 5/2.

Рис. 2.4\_Va\_e5 изображает недипольный параметр угловой анизотропии  $\delta_{3d5/2, 3d3/2}^C(\omega)$   $3d_{5/2}$  и  $3d_{3/2}$  электронов Ва в ХФ и СП ПСФО (см. [31]). Воздействие электронов 3/2 на 5/2 приводит к заметному максимуму.

Рис. 2.4\_Va\_e6 даёт магическую комбинацию недипольных параметров угловой анизотропии  $(\gamma_{4d}^C + 3\delta_{4d}^C)$   $3d_{5/2}$  и  $3d_{3/2}$  электронов Ва в ХФ и СП ПСФО (см. [31]). Влияние корреляций весьма велико.

Рис. 2.2\_Va\_f1 изображает параметры спиновой поляризации  $A^j(\omega)$ ,  $\zeta^j(\omega)$  и  $\xi^j(\omega)$   $3d_{5/2}$  и  $3d_{3/2}$  электронов в ПСФО (см. [43]). Всюду видно влияние 3/2 электронов на характеристики 5/2.

**Рисунки 2.4\_Va\*** содержат результаты вычислений для Ва\* с внешней подболочкой  $7s^2, 8s^2, 9s^2$ .

Рис. 2.4\_Va\*\_a1 приводит полное сечение фотоионизации Ва\* с заполненной внешней подболочкой  $7s^2, 8s^2, 9s^2$  в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Видно смещение Гигантского резонанса в сторону меньших  $\omega$  при переходе от  $7s^2$  к  $9s^2$  и значительное усиление дискретных переходов  $4d - 6p, 7p, 8p$ .

Рис. 2.4\_Va\*\_d1 изображает дипольные параметры угловой анизотропии  $\beta_{5p}(\omega)$  для возбуждённых состояний  $7s^2, 8s^2, 9s^2$  Ва\* в СП ПСФО. Все кривые близки друг к другу.

Рис. 2.4\_Va\*\_d2 приводит дипольные параметры угловой анизотропии  $\beta_{4d}(\omega)$  для возбуждённых состояний  $7s^2, 8s^2, 9s^2$  Ва\* в СП ПСФО. Все кривые близки друг к другу.

**Таблица 2.4** включает расчетные значения сил осцилляторов  $g_{if}$  в ХФ-д, ХФ-с,



ПСФО-д. с (в некоторых случаях ОПСФО) для нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения и всех рассмотренных подоболочек атомов этого раздела. Таблица содержит также значения расчетных энергий перехода  $\omega_{if}$ .

## 2.5. Ионы и некоторые атомы элементов III группы

В этом Разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подоболочках ионов и некоторых атомов элементов III группы. Мы сконцентрировались в основном на ионах, имеющих все заполненные или одну полузаполненную подоболочки, а именно В ( $Z=5$ )  $1s^2, 2s^2, 2p$ ; В\* ( $Z=5$ )  $1s \uparrow, 2s \uparrow, 2p^3 \uparrow$ , В<sup>+</sup> ( $Z=5$ )  $1s^2, 2s^2$ ; Al<sup>+</sup> ( $Z=13$ )  $2s^2, 2p^6, 3s^2$ ; Sc<sup>3+</sup> ( $Z=21$ )  $2p^6, 3s^2, 3p^6$ ; In<sup>+</sup> ( $Z=49$ )  $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2$ ; La ( $Z=57$ )  $4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 5d, 6s^2$ ; Eu ( $Z=63$ )  $3d^{10}, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 4f^7 \uparrow, 5d, 6s^2$ ; Eu<sup>+</sup>  $3d^{10}, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 4f^7 \uparrow, 6s^2$ ; Eu<sup>2+</sup>  $3d^{10}, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 4f^7 \uparrow, 6s$ . Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов и приведены в Разделе 2.1.

Здесь стрелка  $\uparrow$  обозначает «вверх» электроны для СП ПСФО (см Раздел 1.10).

**Рисунки 2.5\_V** представляет данные по В.

Рис. 2.5\_VB\*\_a1 сопоставляет полные сечения фотоионизации В и В\*, рассчитанные в ПСФОН и СП ПСФО. Интерес к данному возбужденному состоянию В\* обусловлен тем, что оно не может распадаться вследствие электронных переходов без переворота спина. Сохраняющие спин переходы запрещены принципом Паули.

**Рисунки 2.5\_V\*** представляют данные по В\*.

Рис. 2.5\_V\*\_a1 приводит полное сечение фотоионизации В\* в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Первый максимум относится к  $2p^3 \uparrow$  электронам, а второй – к электрону  $2s \uparrow$ .

Рис. 2.5\_V\*\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{2p}(\omega)$   $2p$  электронов иона В\* в ПСФО. Параметр быстро нарастает от порога и затем меняется мало.

**Рисунки 2.5\_V+** представляют данные по В<sup>+</sup>.

Рис. 2.5\_V+\_a1 приводит полное сечение фотоионизации В<sup>+</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Второй максимум изображает сечение для  $1s^2$  электронов.

**Рисунки 2.5\_Al+** представляют данные по Al<sup>+</sup>.

Рис. 2.5\_Al+\_a1 изображает полное сечение фотоионизации Al<sup>+</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Доминирует  $2p^6$  переход.

Рис. 2.5\_Al+\_d1 приводит дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{2p}(\omega)$   $2p$  электронов иона Al<sup>+</sup> в ПСФО. Параметр растёт от порога и быстро достигает насыщения.

**Рисунки 2.5\_Sc<sup>3+</sup>** представляют данные по Sc<sup>3+</sup>.

Рис. 2.5\_Sc<sup>3+</sup>\_a1 изображает полное сечение фотоионизации Sc<sup>3+</sup> в ПСФО. Изучена, в качестве примера, область автоионизационных резонансов. **Данные по расчёту методом R-матрицы взяты из [43].**

Рис. 2.5\_Sc<sup>3+</sup>Ca<sup>2+</sup>K<sup>+</sup>\_a2 сравнивает полные сечения фотоионизации Sc<sup>3+</sup>, Ca<sup>2+</sup> и K<sup>+</sup> в ПСФО. Начиная с  $\omega \approx 4.5$  Ry все сечения по величине близки. Сечение Sc<sup>3+</sup> отличается серией резонансов – следов дискретных возбуждений.

Рис. 2.5\_Sc<sup>3+</sup>Ca<sup>2+</sup>K<sup>+</sup>Ar\_b1 сопоставляет сечения фотоионизации 3s электронов Sc<sup>3+</sup>, Ca<sup>2+</sup>, K<sup>+</sup> и Ar в ПСФО. Кривые, начиная с 4.5 Ry, подобны.

Рис. 2.5\_Sc<sup>3+</sup>\_d1 приводит дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{3p}(\omega)$  3p электронов Sc<sup>3+</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Параметр быстро возрастает от порога и вскоре насыщается.

**Рисунки 2.5\_In<sup>+</sup>** содержат результаты вычислений для In<sup>+</sup>

Рис. 2.5\_In<sup>+</sup>\_a1 изображает полное сечение фотоионизации In<sup>+</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. В сечении доминирует Гигантский резонанс. Доминирует Гигантский резонанс 4d<sup>10</sup> подболочки.

Рис. 2.5\_In<sup>+</sup>\_d1 представляет дипольные параметры угловой анизотропии  $\beta_{4d,4p,3d}(\omega)$  4d,4p,3d электронов иона In<sup>+</sup> в ПСФО. Наиболее сложен  $\beta_{4d}(\omega)$  с его двумя глубокими минимумами и небольшим максимумом, обусловленным влиянием 3d электронов. Параметры  $\beta_{4d}(\omega)$  и  $\beta_{4p}(\omega)$  начиная со 100 эВ близки.

**Рисунки 2.5\_La** содержат результаты вычислений для La

Рис. 2.5\_La\_b1 изображает сечение фотоионизации 4d электронов La в ПСФО и ОПСФО (см. [46,47]). Данные эксперимента – из (см. [45])

**Рисунки 2.5\_Eu** содержат результаты вычислений для Eu

Рис. 2.5\_Eu\_b1 приводит сечения фотоионизации 4f «вверх» и 5p, «вверх» и «вниз» электронов Eu в СП ПСФО (см. [48, 49]). Данные эксперимента взяты из [50] и [51].

Важно заметить, что экспериментальные сечения фотопоглощения  $\sigma(\omega)$  на пути от La к Eu в области 4d- порога имеют большой и почти одинаковый максимум. Хотя по виду эти резонансы похожи, их природа в различных атомах полностью различна: в I, Cs, Ba - это Гигантский резонанс который "распадается", испуская электроны относительно низких энергий вследствие 4d → ef(εp) перехода. В Eu же - это *Гигантский автоионизационный резонанс*, созданный взаимодействием дискретного возбуждения 4d ↓ → 4f ↓ в полупустую 4f ↓ подболочку, которая распадается очень быстро в непрерывный спектр 4f ↑ → εg(εd) ↑, с эмиссией быстрых фотоэлектронов. Эта особенность была предсказана в [52, 2].

Матричный элемент взаимодействия дискретного возбуждения со сплошным спектром велик вследствие близости волновых функций занятого 4f «вверх» и свободного 4f «вниз» состояний. Сечение в окрестности резонанса описывается непосредственно формулами СП ПСФО, тогда как вблизи нормального автоионизационного резонанса сечение описывается (1.50).

Рис. 2.5\_Eu\_b2 приводит сечения фотоионизации 4f ↑ электронов Eu (см. [49]).

Рис. 2.5\_Eu\_b3 приводит сечения фотоионизации 5s «вверх» и «вниз» электронов Eu, Eu<sup>+</sup>, Eu<sup>2+</sup> в СП ПСФО (см. [49]).

Рис. 2.5\_Eu\_d1 изображает дипольные параметры угловой анизотропии  $\beta_{4d,4f,5p}(\omega)$  4d,4f,5p электронов иона Eu в ПСФО. Все кривые – осциллирующие.

Рис.2.5\_Eu\_e1 представляет недипольные параметры угловой анизотропии 6s-электронов атома Eu в ХФ и СП ПСФО.

Рис.2.5\_Eu\_f1 даёт дипольные параметры 4f-электронов Eu: а) угловой анизотропии

$\beta_{4f}(\omega)$  и b) спиновой поляризации  $A_{4f}^{7/2}(\omega)$ , c)  $\alpha_{4f}^{7/2}(\omega)$ , d)  $\xi_{4f}^{7/2}(\omega)$ .

**Рисунки 2.5\_Eu<sup>+</sup>** содержат результаты вычислений для Eu<sup>+</sup>

Рис.2.5\_Eu<sup>+</sup>\_a1 приводит полное сечение фотоионизации иона Eu<sup>+</sup> в СП ПСФО (см. [49]). Эксперимент - из [53].

Рис.2.5\_Eu<sup>+</sup>\_b1 изображает сечение фотоионизации 5p-электронов Eu<sup>+</sup> в СП ПСФО. Виден максимум, связанный с распадом дискретного возбуждения  $4d \uparrow \rightarrow 4f \uparrow$  в сплошной спектр ионизации 5p электронов.

Рис.2.5\_Eu\_b2 представляет сечение фотоионизации 4d-электронов Eu<sup>+</sup> в СП ПСФО-д и СП ПСФО-с. Сечение это весьма сложно по форме, но мало.

Рис.2.5\_Eu\_b3 даёт сечение фотоионизации 4f-электронов Eu<sup>+</sup> в СП ПСФО, которое мало отличается от аналогичного сечения нейтрального атома.

Рис.2.5\_Eu<sup>+</sup>\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии 5p «вверх» и «вниз»- и 4f «вверх»-электронов иона Eu<sup>+</sup> в СП ПСФО. Все кривые имеют максимумы на пороге, почти общий минимум, с последующим выходом на насыщение. Там, однако,  $\beta_{4d\uparrow}$  гораздо меньше двух других.

Рис.2.5\_Eu<sup>+</sup>\_d2 приводит дипольный параметр угловой анизотропии 4d «вверх» и «вниз»-электронов иона Eu<sup>+</sup> в СП ПСФО

**Рисунки 2.5\_Eu<sup>2+</sup>** содержат результаты вычислений для Eu<sup>2+</sup>

Рис.2.5\_Eu<sup>2+</sup>\_a1 изображает сечение фотоионизации иона Eu<sup>2+</sup> в окрестности 4d-оболочки в СП ПСФО-д и СП ПСФО-с. От нейтрального Eu отличие лишь в большей интенсивности дискретных переходов.

Рис.2.5\_Eu<sup>2+</sup>\_b1 представляет сечение фотоионизации 5s «вверх» и «вниз»-электронов иона Eu<sup>2+</sup> в СП ПСФО. Отличие от нейтрального атома, как и на предыдущем рисунке, невелико.

Рис.2.5\_Eu<sup>2+</sup>\_b2 приводит сечение фотоионизации 5p «вверх» и «вниз»-электронов иона Eu<sup>2+</sup> в СП ПСФО. Данное сечение близко к аналогичной величине для Eu<sup>+</sup>.

Рис.2.5\_Eu\_b3 представляет сечение фотоионизации 4d-электронов иона Eu<sup>2+</sup> в СП ПСФО. В нём доминируют дискретные возбуждения.

Рис.2.5\_Eu\_b4 изображает сечение фотоионизации 4f «вверх»-электронов иона Eu<sup>2+</sup> в СП ПСФО. Сравнение с Рис.2.5\_Eu<sup>2+</sup>\_a1 показывает, что ионизация 4f даёт главный вклад в полное сечение

Рис.2.5\_Eu<sup>2+</sup>\_d1 представляет дипольный параметр угловой анизотропии 4f «вверх»- и 5p «вверх» и «вниз»-электронов иона Eu<sup>2+</sup>. В основных чертах, да и по абсолютным величинам эти параметры близки к изображённым на Рис.2.5\_Eu<sup>+</sup>\_d1.

Рис.2.5\_Eu<sup>2+</sup>\_d1 приводит дипольный параметр угловой анизотропии 4d «вверх» и «вниз»-электронов иона Eu<sup>2+</sup>. Кривые весьма близки друг к другу, за исключением дополнительного максимума при 180 эВ в  $\beta_{4d\downarrow}$ .

**Таблица 2.5** включает расчетные значения сил осцилляторов  $g_{if}$  в ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д, с (в некоторых случаях - ОПСФО) для нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения всех рассмотренных подоболочек каждого атома и иона этого раздела. Таблица даёт также значения расчетных энергий перехода  $\omega_{if}$

## 2.6. Ионы и некоторые атомы элементов IV группы

В этом Разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных

подоболочках ионов и некоторых атомов элементов IV группы. Здесь мы сконцентрировались в основном на ионах, имеющих все заполненные или одну полузаполненную подоболочки, а именно  $C^* (Z=6) 1s^2, 2s^{\uparrow}, 2p^3^{\uparrow}$ ;  $C^- (Z=6) 1s^2, 2s^2, 2p^3^{\uparrow}$ ;  $Si^* (Z=14) 2s^2, 2p^6, 3s^{\uparrow}, 3p^3^{\uparrow}$ ;  $Si^- (Z=14) 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^3^{\uparrow}$ ;  $Ge^- (Z=32) 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^3^{\uparrow}$ . Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов и приведены в Разделе 2.1.

Здесь  $\uparrow$  обозначает «вверх» электроны для СП ПСФО (см Раздел 1.10).

**Рисунки 2.6\_C\*** содержат результаты вычислений для  $C^*$

Рис. 2.6\_C\*\_a1. представляет полное сечение фотоионизации атома C в возбужденном состоянии  $C^*$ .

Рис. 2.6\_C\*\_d1. даёт дипольный параметр угловой анизотропии 2p-электронов возбужденного атома иона  $C^*$  ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Роль корреляций невелика.

**Рисунки 2.6\_C-** содержат результаты вычислений для  $C^-$

Рис. 2.6\_C-\_a1 изображает полное сечение фотоотрыва иона  $C^-$  в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО.

Рис. 2.6\_C-\_d1 даёт дипольный параметр угловой анизотропии 2p-электронов иона  $C^-$  ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Параметр имеет минимум сразу за порогом и затем быстро выходит на почти постоянное значение.

**Рисунки 2.6\_Si\*** содержат результаты вычислений для  $Si^*$

Рис.2.6\_Si\*\_a1 изображает полное сечение фотоионизации иона  $Si^*$  в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Сечение быстро нарастает за порогом, и затем убывает до порога внутренней оболочки. На склонах видны квази-сечения дискретных возбуждений.

Рис.2.6\_Si\*\_d1 представляет дипольный параметр угловой анизотропии 3d-, 3p-электронов атома  $Si^*$  в возбужденном состоянии.

**Рисунки 2.6\_Si-** содержат результаты вычислений для  $Si^-$ .

Рис. 2.6\_Si-\_a1 представляет полное сечение фотоотрыва иона в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО

Рис. 2.6\_Si-\_b1 изображает сечение фотоотрыва 3p электронов  $Si^-$ . Сплошная линия – СП ПСФО с учетом влияния 3s [54, 55], пунктир - сечение 3p в СП ПСФО. Экспериментальные данные взяты из [56]. В отрицательных ионах нет дискретных возбуждений, однако картина сечения подобна имеющей место в окрестности автоионизационного резонанса (1.50) при малых  $q$ .

Рис. 2.6\_Si-\_d1 приводит дипольный параметр угловой анизотропии 3p, 2p-электронов иона  $Si^-$  в ПСФО. Как обычно, особенно сложна зависимость у наружной (3p) подоболочки, где у самого порога имеется чрезвычайно быстрая вариация. У самого порога  $\beta_{2p}$  имеет узкий и высокий максимум, а затем, достигнув минимума, начинает плавно расти.

Рис. 2.6\_SiP\_d2 сравнивает сечения фотоионизации и дипольные параметры угловой анизотропии иона  $Si^-$  и атома P. Электронные конфигурации у этих объектов одинаковы. Результаты для иона и атома, в особенности для  $\beta_{3p}$ , сходны.

Рис. 2.6\_Si\_e1 приводит недипольные параметры угловой анизотропии  $3\gamma^C s$ -электронов иона  $Si^-$  и атома P в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Как и на Рис. 2.6\_Si\_d2, результаты для иона и атома, близки. Примечательно, что ПСФО корреляции существенно сглаживают кривые.

Рис.2.6\_SiP\_e2 даёт недипольные параметры угловой анизотропии и их магическую комбинацию для 3p-электронов иона  $Si^-$  и атома P. Опять таки, ион и атом имеют близкие

характеристики.

**Рисунок 2.6**  $\text{Ge}^-$  содержат результаты вычислений для  $\text{Ge}^-$ . Он представляет сечение фотоотрыва  $3d$  электронов  $\text{Ge}^-$ . Сплошная линия изображает результаты ОПСФО.

**Таблица 2.6** включает расчетные значения сил осцилляторов  $g_{if}$  в ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д, с (в некоторых случаях - ОПСФО) нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения каждой рассмотренной подоболочки атома, приведенного в этом разделе. Таблица дает также значения расчетных энергий переходов  $\omega_{if}$

## 2.7. Атомы и некоторые ионы элементов V группы

В этом Разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подоболочек некоторых атомов и ионов элементов V группы. Здесь мы сконцентрировались в основном на атомах и ионах, имеющих все заполненные или одну полузаполненную подоболочки, а именно N ( $Z=7$ )  $1s^2, 2s^2, 2p^3 \uparrow$ ; P ( $Z=15$ )  $2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^3 \uparrow$ ; As ( $Z=33$ )  $3d^{10}, 4s^2, 4p^3 \uparrow$ ; Sb ( $Z=51$ )  $4d^{10}, 5s^2, 5p^3 \uparrow$ . Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов и приведены в Разделе 2.1.

Здесь  $\uparrow$  обозначает «вверх» электроны для СП ПСФО (см Раздел 1.10).

**Рисунки 2.7\_N** содержат результаты вычислений для N

Рис. 2.7\_N\_a1 представляет полное сечение фотоионизации атома N в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Роль корреляций вполне заметна. Основной вклад вносит сечение наружных  $2p^3$  электронов.

Рис. 2.7\_N\_d1 изображает дипольные параметры угловой анизотропии  $2p$ -электронов N в СП ПСФО-д и СП ПСФО-с.

Рис. 2.7\_N\_d2,f1 приводит дипольные параметры  $2p$ -электронов N: а) угловой анизотропии  $\beta_{2p}(\omega)$ ; спиновой поляризации б)  $A_{2p}^{3/2}(\omega)$ , в)  $\alpha_{2p}^{3/2}(\omega)$ , г)  $\xi_{2p}^{3/2}(\omega)$ .

**Рисунки 2.7\_P** содержат результаты вычислений для P

Рис. 2.7\_P\_a1 изображает полное сечение фотоионизации атома P в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Роль корреляций малосущественна.

Рис. 2.7\_P\_d1 приводит дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta$   $3p$ -электронов P в СП ПСФО. Параметр имеет один узкий максимум вблизи порога и второй, широкий, в 10 эв от порога. Полмима минимума на пороге, параметр имеет ещё два минимума при более высоких энергиях.

Рис. 2.7\_P\_e1 сопоставляет недипольные параметры угловой анизотропии  $3s$ -«вниз» и «вверх» электронов P в ХФ и СП ПСФО. Имеется вполне значительная разница в околопороговых областях. Роль корреляций ПСФО велика.

Рис. 2.7\_P\_e2 изображает недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma^C$  и  $\delta^C$  их магическую комбинацию  $(\gamma^C + 3\delta^C)$  для  $3p$ -электронов P в ХФ и СП ПСФО-с. Роль корреляций ПСФО невелика.

Рис. 2.7\_P\_f1 представляет дипольные параметры  $3p$ «вниз»-электронов P: а) угловой анизотропии  $\beta_{3p}(\omega)$ ; спиновой поляризации б)  $A_{3p}^{3/2}(\omega)$ , в)  $\alpha_{3p}^{3/2}(\omega)$ , г)  $\xi_{3p}^{3/2}(\omega)$  в СП ПСФО.

**Рисунки 2.7\_As** содержат результаты вычислений для As

Рис. 2.7\_As\_a1 даёт полное сечение фотоионизации атома As в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Имея максимум на пороге, сечение довольно быстро убывает до нуля, а затем, при 10 Ry образует широкий максимум.



Рис. 2.7\_As\_d1 представляет дипольный параметр угловой анизотропии 4p «вверх»- и 3d «вверх» и «вниз» электронов атома As в СП ПСФО. Качественно, все кривые похожи, а  $\beta_{3d\uparrow}$  и  $\beta_{3d\downarrow}$  очень близки.

Рис. 2.7\_As\_f1 изображает дипольные параметры 4p-электронов As: а) угловой анизотропии  $\beta_{4p}(\omega)$ ; спиновой поляризации б)  $A_{4p}^{3/2}(\omega)$ , в)  $\alpha_{4p}^{3/2}(\omega)$ , г)  $\xi_{4p}^{3/2}(\omega)$  в СП ПСФО.

Рис. 2.7\_As\_f2 даёт дипольные параметры 3d-электронов As: а) угловой анизотропии  $\beta_{4p}(\omega)$ ; спиновой поляризации б)  $A_{4p}^{3/2}(\omega)$ , в)  $\alpha_{4p}^{3/2}(\omega)$ , г)  $\xi_{4p}^{3/2}(\omega)$  в СП ПСФО. Результаты для всех, кроме  $\beta_{4p}$  параметров сильно отличаются для 5/2 и 3/2 электронов.

**Рисунки 2.7\_Sb** содержат результаты вычислений для атома сурьмы Sb

Рис. 2.7\_Sb\_a1 представляет полное сечение фотоионизации атома Sb в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Видны Гигантский резонанс  $4d^{10}$  электронов и большая роль ПСФО корреляций. Примечательно и наличие второго максимума при  $20 R_y$ .

Рис. 2.7\_Sb\_d1 приводит дипольный параметр угловой анизотропии 5p «вверх»- и 4d «вверх» и «вниз» электронов атома Sb в СП ПСФО. Виден осциллирующий характер параметра  $\beta$ , качественное сходство всех кривых.

Рис. 2.7\_Sb\_f1 изображает дипольные параметры 5p-электронов Sb: а) угловой анизотропии  $\beta_{5p}(\omega)$ ; спиновой поляризации б)  $A_{4p}(\omega)$ , в)  $\alpha_{4p}(\omega)$ , г)  $\xi_{4p}(\omega)$  в СП ПСФО.

Рис. 2.7\_Sb\_f2 даёт дипольные параметры 4d-электронов Sb: а) угловой анизотропии  $\beta_{4d}(\omega)$ ; спиновой поляризации б)  $A_{4d}(\omega)$ , в)  $\alpha_{4d}(\omega)$ , г)  $\xi_{4d}(\omega)$  в СП ПСФО. Все, кроме  $\beta_{4d}$  параметра, буквально зеркально отличаются для 5/2 и 3/2 электронов.

**Таблица 2.7** включает расчетные значения сил осцилляторов  $g_{if}$  в ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д, с (в некоторых случаях - ОПСФО) нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения каждой рассмотренной подболочки атомов, приведенных в этом разделе. Таблица даёт также значения расчетных энергий перехода  $\omega_{if}$

## 2.8. Атомы и некоторые ионы элементов VI группы

В этом Разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подболочек ионов и некоторых атомов элементов VI группы. Здесь мы сконцентрировались в основном на ионах, имеющих все заполненные или полузаполненные подболочки, а именно  $O^+$  ( $Z=8$ )  $1s^2, 2s^2, 2p^3\uparrow$ ; Cr ( $Z=24$ )  $2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^5\uparrow 4s\uparrow$ ; Cr\* ( $Z=24$ )  $2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^5\uparrow 4s\downarrow$ ; Cr<sup>+</sup> ( $Z=24$ )  $2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^5\uparrow$ ; Mo ( $Z=42$ )  $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^5\uparrow, 5s\uparrow$ . Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов и приведены в Разделе 2.1.

Здесь  $\uparrow$  обозначает «вверх» электроны для СП ПСФО (см Раздел 1.10).

**Рисунки 2.8\_O<sup>+</sup>** содержат результаты вычислений для  $O^+$

Рис. 2.8\_O<sup>+</sup>\_a1 представляет полное сечение фотоионизации в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Роль корреляций мала. Сечения велики на порогах и быстро монотонно убывают с ростом  $\omega$ .

Рис. 2.8\_O<sup>+</sup>\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии 2p электронов  $O^+$  в СП ПСФО. Параметр быстро достигает максимума за порогом и далее монотонно убывает.

**Рисунки 2.8\_Cr** содержат результаты вычислений для Cr

Рис. 2.8\_Cr\_a1 приводит полное сечение фотоионизации атома Cr в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. При  $\omega \approx 3.5Ry$  виден, как и в Mn, Гигантский автоионизационный резонанс - максимум, возникающий вследствие сильного взаимодействия дискретного перехода  $3p \downarrow -3d \downarrow$  со сплошным спектром  $3d \uparrow -ef \uparrow$  (см [57])

Рис. 2.8\_Cr\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $3d$  «вверх» и  $3p$  «вверх» и «вниз» электронов атома Cr в СП ПСФО (см [58]). Обращает внимание качественное сходство кривых для  $3p$  «вверх» и «вниз» электронов.

Рис. 2.8\_Cr Cr\*<sub>e1</sub> представляет недипольные параметры  $\gamma^C$  угловой анизотропии  $4s$  «вверх» электрона атома Cr и  $4s$  «вниз» электрона атома Cr в возбуждённом состоянии Cr\* в ХФ и ПСФО (см. [59]). Отличие между кривыми – весьма велико. СП ПСФО корреляции существенны лишь для «вверх» электрона. Параметры для «вниз» электронов отличает осцилляция буквально на пороге.

Рис. 2.8\_Cr\_e2 изображает недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma^C$  и  $\delta^C$  и их магическую комбинацию  $(\gamma^C + 3\delta^C)$   $3d$ -электронов атома Cr в СП ПСФО (см. [59,60]).

Рис. 2.8\_Cr\_df1 даёт дипольные параметры  $3p$  «вверх» и «вниз» электронов атома Cr: а) угловой анизотропии  $\beta_{3p}(\omega)$ ; спиновой поляризации б)  $A_{3p}(\omega)$ , в)  $\alpha_{3p}(\omega)$ , д)  $\xi_{3p}(\omega)$

Рис. 2.8\_Cr\_df2 представляет дипольные параметры  $3d$ -электронов Cr and Cr\*: а) угловой анизотропии  $\beta_{3d}(\omega)$ ; спиновой поляризации б)  $A_{3d}^{5/2}(\omega)$ , в)  $\alpha_{3d}^{5/2}(\omega)$ , д)  $\xi_{3d}^{5/2}(\omega)$  (см. [60,61]). Рассмотренное возбуждение в общем мало сказывается на параметрах.

**Рисунки 2.8\_Cr<sup>+</sup>** содержат результаты вычислений для Cr<sup>+</sup>

Рис. 2.8\_Cr<sup>+</sup>\_a1. приводит полное сечение фотоионизации иона Cr<sup>+</sup>. Виден мощный максимум, связанный с возбуждением  $3p^3 \downarrow$  электронов.

Рис. 2.8\_Cr<sup>+</sup>\_d1. изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $3d$  «вверх»- и  $3p$  «вверх» и «вниз» электронов иона Cr<sup>+</sup>. У порогов вариации параметров очень сильны (см. [61]).

**Рисунки 2.8\_Mo** содержат результаты вычислений для Mo

Рис. 2.8\_Mo\_a1 приводит полное сечение фотоионизации атома Mo в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Роль ПСФО корреляций велика. Первый максимум – это сечение фотоионизации  $4d^5 \uparrow$  электронов, а второй - след автоионизационного резонанса  $4p \downarrow \rightarrow 4d \downarrow$ , распадающегося с удалением  $4d \uparrow$  электронов.

Рис. 2.8\_Mo\_b1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $4d$  «вверх» и  $4p$  «вверх и «вниз»-электронов атома Mo. Параметр  $\beta_{4d}$  отличает минимум сразу за порогом и небольшой максимум у порога  $4p$ . При больших энергиях все  $\beta$  близки.

Рис. 2.8\_Mo\_df1 представляет дипольные параметры  $4p$  «вверх и «вниз» электронов Mo: а) угловой анизотропии  $\beta_{4p}(\omega)$ ; и спиновой поляризации б)  $A_{4p}(\omega)$ , в)  $\alpha_{4p}(\omega)$ , д)  $\xi_{4p}(\omega)$  (см. [61]).

Рис. 2.8\_MoMo\*\_df2 приводит дипольные параметры  $4d$ -электронов Mo и Mo\*: а) угловой анизотропии  $\beta_{4d}(\omega)$ ; спиновой поляризации б)  $A_{4d}^{5/2}(\omega)$ , в)  $\alpha_{4d}^{5/2}(\omega)$ , д)  $\xi_{4d}^{5/2}(\omega)$  (см. [61]).

**Таблица 2.8** включает расчетные значения сил осцилляторов  $g_{if}$  в ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-

д, с (в некоторых случаях - ОПСФО) нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения каждой рассмотренной подоболочки атома, приведенного в этом разделе. Таблица дает также значения расчетных энергий перехода  $\omega_{if}$

## 2.9. Атомы и некоторые ионы элементов VII и VIII групп

В этом Разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подоболочек ионов и некоторых атомов элементов VII и VIII группы. Здесь мы сконцентрировались на атомах с незаполненной подоболочкой и на их ионах, имеющих все заполненные или полузаполненные подоболочки, а именно F (Z=9)  $1s^2, 2s^2, 2p^5$ ; **F\* (Z=9)  $1s^1, 2s^1, 2p^3, 3s^1, 3p^3$  все ↑**;  $F^{2+}$  (Z=9)  $1s^2, 2s^2, 2p^3 \uparrow$ ;  $F^-$  (Z=9)  $1s^2, 2s^2, 2p^6$ ; Cl (Z=17)  $2p^6, 3s^2, 3p^5$ ;  $Cl^-$  (Z=17)  $2p^6, 3s^2, 3p^6$ ; Mn (Z=25)  $3s^2, 3p^6, 3d^5 \uparrow, 4s^2$ ; **Mn+ (Z=25)  $3s^2, 3p^6, 3d^5 \uparrow, 4s \uparrow$** ; Br (Z=35)  $3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6$ ; Tc (Z=43)  $3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^5 \uparrow, 5s^2$ ; I (Z=53)  $4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^5$ ;  $I^+$  (Z=53)  $4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^4$ ;  $I^{2+}$  (Z=53)  $4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^3 \uparrow$ ;  $I^-$  (Z=53)  $4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6$ ; Pd (Z=46)  $3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}$ . Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов и приведены в Разделе 2.1.

Здесь ↑ обозначает «вверх» электроны для СП ПСФО (см Раздел 1.10)

**Рисунки 2.9\_F** содержат результаты вычислений для F

Рис. 2.9\_F\_a1 изображает полное сечение фотоионизации атома F в приближении .ПСФО для незаполненных оболочек (ПСФОН), с отдельными вкладами конечных состояний с термами  $^2S, ^2P, ^2D$  и их сумма.

**Рисунки 2.9\_F\*** содержат результаты вычислений для F\*

Рис.2.9\_F\*\_a1. представляет полное сечение фотоионизации атома F\* в XF-д, XF-с, СП ПСФО. При 1.7 Ry виден второй максимум сечения.

Рис.2.9\_F\*\_a2. сравнивает сечения фотоионизации атома F в основном и возбужденном F\* состоянии атома в СП ПСФО. Возбуждение атома формирует максимум в сплошном спектре при  $\omega \approx 8Ry$ .

Рис.2.9\_F\*\_d1. даёт недипольный параметр 3p- и 2p-электронов F\* в СП ПСФО. Обращает внимание максимум при 75eV, возникающий вследствие воздействия электронов 2p на 3p.

**Рисунки 2.9\_F<sup>2+</sup>** содержат результаты вычислений для F<sup>2+</sup>

Рис. 2.9\_F<sup>2+</sup>\_a1 приводит полное сечение фотоионизации иона F<sup>2+</sup> в приближении СП ПСФО.

Рис. 2.9\_F<sup>2+</sup>\_a2 даёт квази-сечения возбуждения дискретных уровней иона F<sup>2+</sup>.

Рис. 2.9\_F<sup>2+</sup>\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{2p}$  2p-электронов F<sup>2+</sup>.

**Рисунки 2.9\_F<sup>-</sup>** содержат результаты вычислений для F<sup>-</sup>

Рис. 2.9\_F<sup>-</sup>\_a1 приводит полное сечение фотоионизации иона F<sup>-</sup> в ПСФО. Обращает внимание быстрый, почти скачкообразный рост сечения внешней оболочки на пороге, что делает ситуацию подобной имеющий место в нейтральных атомах.

Рис. 2.9\_F<sup>-</sup>\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{2p}$  2p-электронов F<sup>-</sup>. За узким минимумом после порога параметр сначала быстро нарастает. Уже с 30 эв рост быстро замедляется.

**Рисунки 2.9\_C1** содержат результаты вычислений для C1

Рис. 2.9\_C1\_a1 изображает полное сечение фотоионизации атома C1 в ПСФОН, с отдельными вкладками конечных состояний, с термами  $^2S, ^2P, ^2D$ , и их сумму (см. [62]). В сечении доминирует широкий максимум при  $1.5 Ry$ .

Рис. 2.9\_C1\_b1 даёт сечение фотоионизации 3р-электронов атома C1. Эксперимент взят из [63]. Пороги ионизации взяты экспериментальными по термам  $^3P - I_{3p} = 0.959 Ry, ^1D - I_{1d} = 1.060 Ry, ^1S - I_{3p} = 1.207 Ry$ .

**Рисунки 2.9\_C1<sup>-</sup>** содержат результаты вычислений для C1<sup>-</sup>

Рис. 2.9\_C1<sup>-</sup>\_a1. приводит полное сечение фотоионизации иона C1<sup>-</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Сечение очень быстро растёт от порога, достигая максимума при  $1.25 Ry$ , после чего довольно быстро убывает.

Рис. 2.9\_C1<sup>-</sup>\_b1. представляет сечение фотоионизации 2р-электронов иона C1<sup>-</sup> в ХФ, ПСФО, ОХФ и ОПСФО. Сечение очень быстро, практически скачком, растёт на пороге. В ХФ и ПСФО имеется очень высокий и узкий максимум, отсутствующий в ОПСФО.

Рис. 2.9\_C1<sup>-</sup>\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии 2р-, 3р-электронов иона C1<sup>-</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ОПСФО. Параметры  $\beta_{3p,2p}(\omega)$  имеют острый максимум у своих порогов. Заметно влияние 2р электронов на 3р вблизи порога 2р.

Рис. 2.9\_C1<sup>-</sup>\_d2 изображает дипольный параметр угловой анизотропии 2р- электронов иона C1<sup>-</sup> в ПСФО и ОПСФО. В ОПСФО исчезает узкий максимум вблизи порога, имеющийся в ПСФО.

**Рисунки 2.9\_Mn** содержат результаты вычислений для Mn

Рис. 2.9\_Mn\_a1 приводит полное сечение фотоионизации атома Mn в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Видна богатая резонансная структура.

Рис. 2.9\_Mn\_b1 даёт Гигантский автоионизационный резонанс в сечении фотоионизации 3d «вверх» электронов Mn [64]. Сплошная линия учитывает вклад дискретного возбуждения  $3p \downarrow - 3d \downarrow$ . Данные эксперимента взяты из [65, 66].

Рис. 2.9\_Mn\_d1 приводит дипольный параметр угловой анизотропии 3d «вверх» и 3р «вверх» и «вниз» электронов Mn (см. [58]). Параметр для 3р электронов имеет минимум вблизи порога, тогда как для 2р электронов у порогов имеется острый максимум. Начиная со 120-130 эв кривые довольно близки.

Рис. 2.9\_Mn\_e1 изображает недипольные параметры угловой анизотропии 4s «вверх» и «вниз» электронов Mn в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО (см. [59]). Роль корреляций невелика.

Рис. 2.9\_Mn\_e2 приводит недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma^C$  и  $\delta^C$  и их магическую комбинацию  $(\gamma^C + 3\delta^C)$  3d-электронов Mn в СП ПСФО. Параметры быстро нарастают от порога. Затем выходят на существенно более медленную линейную зависимость от  $\omega$  (см. [61]).

Рис. 2.9\_Mn\_f1 даёт дипольные параметры 3d «вверх» электронов Mn а) угловой анизотропии  $\beta_{3d}(\omega)$ ; спиновой поляризации б)  $A_{3d}^{5/2}(\omega)$ , в)  $\alpha_{3d}^{5/2}(\omega)$ , д)  $\xi_{3d}^{5/2}(\omega)$  в СП ПСФО (см. [60, 61]). В спиновой поляризации виден след влияния возбуждений 3р электронов.

Рис. 2.9\_Mn\_f2 изображает дипольный параметр 3р<sup>3</sup>-электронов Mn: а) угловой анизотропии  $\beta_{3p}(\omega)$ ; спиновой поляризации б)  $A_{3p}(\omega)$ , в)  $\alpha_{3p}(\omega)$ , д)  $\xi_{3p}(\omega)$  в СП ПСФО (см. [61]).

**Рисунки 2.9\_Mn<sup>+</sup>** содержат результаты вычислений для Mn<sup>+</sup>

Рис. 2.9\_Mn<sup>+</sup>\_a1 представляет полное сечение фотоионизации иона Mn<sup>+</sup> в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Гигантский автоионизационный резонанс расположен при энергии 4Ry. Ему предшествует (при энергии ≈ 2.3Ry) максимум в сечении 3p<sup>6</sup> электронов.

Рис. 2.9\_Mn<sup>+</sup>\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии 3d «вверх»-, 3p «вверх» и «вниз» электронов иона Mn<sup>+</sup>. Различие параметров 3p<sup>↑</sup> и 3p<sup>↓</sup> велико: β<sub>3p<sup>↓</sup></sub>(ω) имеет дополнительный, по сравнению с β<sub>3p<sup>↑</sup></sub>(ω), максимум за порогом. Резкие изменения в β<sub>3d<sup>↑</sup></sub>(ω) явно коррелируют с особенностями сечения фотоионизации Рис. 2.9\_Mn<sup>+</sup>\_a1.

Рис. 2.9\_Mn<sup>+</sup>\_d2 даёт дипольный параметр угловой анизотропии 3d-электронов Mn<sup>+</sup> в СП ПСФО (см. [67]). Видна мощная осцилляция, обусловленная влиянием 3p<sup>↓</sup> - 3d<sup>↓</sup>. Кривая более подробно представляет резкие изменения β<sub>3d<sup>↑</sup></sub>(ω) по сравнению с Рис. 2.9\_Mn<sup>+</sup>\_d1.

**Рисунки 2.9\_Br<sup>-</sup>** содержат результаты вычислений для Br<sup>-</sup>

Рис. 2.9\_Br<sup>-</sup>\_a1 изображает полное сечение фотоионизации иона Br<sup>-</sup> в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Видны два максимума – у порога, при 1Ry - от 4p<sup>6</sup> электронов, и при 15Ry. Влияние корреляций электронов вблизи порога велико.

Рис. 2.9\_Br<sup>-</sup>\_d1 представляет дипольный параметр угловой анизотропии 3p-, 4p-электронов иона Br<sup>-</sup>. Как в очень многих случаях, β отличается осцилляция, начинающаяся сразу за порогом ионизации.

**Рисунки 2.9\_Tc** содержат результаты вычислений для Tc

Рис. 2.9\_Tc\_a1 представляет полное сечение фотоионизации атома Tc в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Видно, что в СП ПСФО возникает как отражение дискретного возбуждения 4p<sup>↓</sup> → 4d<sup>↓</sup> Гигантский автоионизационный резонанс - глубокий минимум при 2.5Ry, за которым следует максимум при 3Ry. Ситуация подобна имеющей место в Mn (см. Рис. 2.9\_Mn\_a1).

Рис. 2.9\_Tc\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии 4d «вверх»-, 4p «вверх» и «вниз»-электронов атома Tc в СП ПСФО. Начиная с примерно 80 эв кривые подобны. Параметр β<sub>4d<sup>↑</sup></sub> имеет дополнительный минимум сразу за порогом.

Рис. 2.9\_Tc\_f1 даёт дипольные параметры 4d «вверх»-электронов атома Tc: а) угловой анизотропии β<sub>4d</sub>(ω); б) спиновой поляризации A<sub>4d</sub><sup>5/2</sup>(ω), в) α<sub>4d</sub><sup>5/2</sup>(ω), г) ξ<sub>4d</sub><sup>5/2</sup>(ω). За исключением β<sub>4d</sub>(ω), остальные параметры подобны аналогичным зависимостям в Mn – см. Рис. 2.9\_Mn\_f1; β<sub>4d</sub>(ω) имеет дополнительный максимум при 90 эв.

Рис. 2.9\_Tc\_f2 представляет дипольные параметры 4p «вверх» и «вниз»-электронов атома Tc: а) угловой анизотропии β<sub>4p</sub>(ω); б) спиновой поляризации A<sub>4p</sub>(ω), в) α<sub>4p</sub>(ω), г) ξ<sub>4p</sub>(ω) (см. [61]). Зависимости от энергии фотона качественно подобны аналогичным зависимостям в Mn – см. Рис. 2.9\_Mn\_f2.

**Рисунки 2.9\_I** содержат результаты вычислений для I

Рис. 2.9\_I\_a1 изображает полное сечение фотоионизации атома I в ПСФОН. Виден симметричный Гигантский резонанс и представлены формирующие его вклады термов <sup>2</sup>S, <sup>2</sup>P, <sup>2</sup>D и их сумма (см. [68]).

**Рисунки 2.9\_I<sup>+</sup>** содержат результаты вычислений для I<sup>+</sup>.

Рис.2.9\_I<sup>+</sup>\_a1 представляет полное сечение фотоионизации атома I<sup>+</sup> в ПСФОН и в ОПСФО (с учётом перестройки) (см. [68]). Экспериментальные данные взяты из [69]. Учёт перестройки заметно улучшает согласие с опытом.

Рис.2.9\_I<sup>+</sup>\_a2 изображает выход двукратных ионов при поглощении фотонов ионом I<sup>+</sup>, рассчитанный в ПСФОН (см. [68]). Экспериментальные данные взяты из [69]. Виден максимум при 80 eV, качественно подобный наблюдаемому в Хе (см. Рис. 2.2\_Хе\_b5).

Рис.2.9\_I<sup>+</sup>\_b1 даёт сечение фотоионизации 5s-электронов иона I<sup>+</sup> в окрестности интерференционного резонанса, рассчитанное в ХФ-д, ХФ-с и ПСФОН. Максимум качественно подобен тому, что имеет место в сечении фотоионизации 5s электронов Хе (Рис. 2.2\_Хе\_b2) и вызван, как и в Хе, воздействием 4d Гигантского резонанса.

Рис.2.9\_I<sup>+</sup>\_d1. приводит дипольный параметр угловой анизотропии 4d-, 5p-электронов атома I<sup>+</sup>. Кривые качественно похожи, но  $\beta_{5p}$  имеет дополнительный максимум при  $\approx 68$  эВ.

**Рисунки 2.9\_I<sup>2+</sup>** содержат результаты вычислений для I<sup>2+</sup>.

Рис.2.9\_I<sup>2+</sup>\_a1 изображает полное сечение фотоионизации иона I<sup>2+</sup> в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Виден сильно асимметричный Гигантский резонанс 4d подболочки, которому предшествуют дискретные уровни возбуждения с большой силой осцилляторов.

Рис.2.9\_I<sup>2+</sup>\_a2 представляет выход трехкратных ионов при поглощении фотонов ионом I<sup>2+</sup> в СП ПСФО. Экспериментальные данные взяты из [69]. Видно подобие ситуации для двукратного иона Рис.2.9\_I<sup>+</sup>\_a2.

Рис.2.9\_I<sup>2+</sup>\_b1. даёт сечение фотоионизации 4d-электронов иона I<sup>2+</sup> в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Примечательно, что корреляции устраняют максимум на пороге в ХФ, сдвигая его существенно за порог. Видно, что Гигантский резонанс в сплошном спектре – сильно асимметричен. Эта асимметрия усилена в сравнении с ситуацией в I<sup>+</sup>, изображённой на Рис.2.9\_I<sup>+</sup>\_a1.

Рис.2.9\_I<sup>2+</sup>\_d1. изображает дипольный параметр угловой анизотропии 4d-, 5p-электронов иона I<sup>2+</sup>.

**Рисунки 2.9\_I** содержат результаты вычислений для I

Рис.2.9\_I\_a1. приводит полное сечение фотоионизации иона I в ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Видны три максимума, при 1, 7 и 20 Ry. Максимум при 7 Ry есть Гигантский резонанс. (см. [70]).

Рис.2.9\_I\_a2. даёт Гигантский резонанс в полном сечении фотоионизации иона I в ПСФО (см. [70]). Экспериментальные данные взяты из [71].

Рис.2.9\_I\_a3. сравнивает полные сечения фотоионизации в окрестности 4d Гигантского резонанса иона I (ПСФО), атома I (ПСФОН) и иона I<sup>+</sup> (ПСФОН) (см. [68]). Видно увеличение вклада дискретных уровней с ростом степени ионности.

Рис.2.9\_I\_a4. сравнивает сечения фотоионизации иона I, атома Хе и иона Cs<sup>+</sup> в ПСФО. Видна систематическая деформация первого максимума и Гигантского резонанса с ростом заряда ядра.

Рис.2.9\_I\_c1. приводит сечение фотоотрыва электрона из 5p-оболочки иона I (см. [68]).

Рис.2.9\_I\_c2. даёт сечение фотоотрыва электрона из 5s<sup>2</sup>-оболочки иона I в ХФ-д (пунктир), ПСФО с учётом 4d – штрих – пунктир, ПСФО с учётом воздействия 4d и 5p электронов – сплошная линия. Происходит, как и для 5s<sup>2</sup> электронов Хе, их полная



«коллективизация» под влиянием «соседей» -  $5p^6$  и  $4d^{10}$  электронов.

Рис.2.9\_Г\_с3. представляет сечение фотоотрыва  $4d$ -электронов от иона  $\Gamma$  в ХФ (переход  $4d - \epsilon f$ ), ПСФО (переходы  $4d - \epsilon f, \epsilon p$  и их сумма) – Гигантский резонанс.

Рис.2.9\_Г\_д1. изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $4d$ -,  $5p$ - электронов атома  $\Gamma$ . Примечателен узкий глубокий минимум на пороге  $\beta_{5p}$ , тогда как  $\beta_{4d}$  имеет почти сразу на пороге максимум. Заметен небольшой максимум в  $\beta_{5p}$  при 67 эВ. Ионизационные потенциалы равны  $I_{\Gamma,4d} = 57.39eV$  и  $I_{\Gamma,5p} = 3.56eV$ .

Рис.2.9\_Г\_е1. даёт недипольные параметры угловой анизотропии  $5p$ - электронов иона  $\Gamma$  в околопороговой области в ХФ и ПСФО. Небольшая вариация быстро сменяется линейной зависимостью (см. [72]).

Рис.2.9\_Г\_е2. представляет недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma^C$  и  $\delta^C$  их магическая комбинация  $(\gamma^C + 3\delta^C)$   $5p$ - электронов иона  $\Gamma$  в сравнении с аналогичными данными Хе (см. [72]).

Рис.2.9\_Г\_е3. приводит недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma^C$   $5s$ - электронов иона  $\Gamma$  в околопороговой области в ХФ и ПСФО.

Рис.2.9\_Г\_е4 даёт недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma^C$   $5s$ - электронов иона  $\Gamma$  в сравнении с Хе (см. [72, 73]). Эксперимент по Хе взят из [73].

Рис.2.9\_Г\_е5. изображает недипольные параметры угловой анизотропии  $\gamma^C$  и  $\delta^C$  их магическая комбинация  $(\gamma^C + 3\delta^C)$   $4d$ - электронов иона  $\Gamma$  в сравнении с аналогичными данными по Хе (см. [72]).

Рис.2.9\_Г\_е6. представляет недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma^C$  и магическую комбинацию  $(\gamma^C + 3\delta^C)$  для  $4d$ - электронов иона  $\Gamma$  в околопороговой области энергий фотона.

Рис. 2.9\_Г\_е7 приводит недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma^C$  и магическая комбинация  $(\gamma^C + 3\delta^C)$   $4d$ - электронов иона  $\Gamma$  в околопороговой области энергий фотона.

**Рисунки 2.9\_Pd** содержат результаты вычислений для Pd

Рис. 2.9\_Pd\_a1 изображает полное сечение фотоионизации атома Pd в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Доминирует сечение наружной  $4d^{10}$  подболочки. Роль ПСФО корреляций велика.

Рис. 2.9\_Pd\_b1 приводит сечение фотоионизации  $4p$ - и  $4d$ -электронов Pd в ХФ-д и СП ПСФО. Видно, что сечение  $4d^{10}$  образует Гигантский резонанс, почти не уступающий по высоте Гигантскому  $4d$  резонансу в Хе.

Рис.2.9\_Pd\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $3d$ -,  $4d$ -,  $4p$ - электронов атома Pd.

Рис. 2.9\_Pd\_a1 даёт полное сечение фотоотрыва иона Pd<sup>-</sup> в ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО.

**Таблица 2.9** включает расчетные значения сил осцилляторов  $g_{if}$  в ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д, с (в некоторых случаях - ОПСФО) нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения для каждой рассмотренной подболочки приведенного в данном Разделе атома. Таблица дает также значения расчетных энергий перехода  $\omega_{if}$

## 2.10. Эндоэдральные атомы A@C<sub>60</sub>

В этом Разделе мы представляем наши результаты для сечений фотоионизации, дипольного и недипольных параметров угловой анизотропии внешней и промежуточных подоболочек некоторых эндоэдральных атомов  $A@C_{60}$ . Данные приведены для следующих объектов  $Ne@C_{60}$   $2s^2, 2p^6$ ;  $Ar@C_{60}$   $3s^2, 3p^6$ ;  $Kr@C_{60}$   $4s^2, 4p^6$ ;  $Xe@C_{60}$   $3d^{10}, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6$ ;  $Cs@C_{60}$   $3d^{10}, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 6s$ . Формулы, с помощью которых получены эти результаты, упомянуты в начале этой Главы, в Разделе 2.1.

Для расчёта сечений эндоэдральных атомов и параметров анизотропии фотоэлектронов необходимо знание фактора усиления электромагнитного излучения фуллерена  $C_{60}$  -  $S_{C_{60}}(\omega) \equiv |G_{C_{60}}(\omega)|^2$ , и фазы  $G_{C_{60}}(\omega) - \arg G_{C_{60}}(\omega)$ , определённых в (1.117) и (1.118). Подробности, связанные с вычислением этих характеристик, можно найти в [74-76] и в списках литературы к этим работам. Результаты по  $np$  подоболочкам взяты из [74, 75], а по  $ns$  – из [76]. Данные по  $4d$  Xe взяты из [77, 78], по  $3d$  Xe взяты из [77],  $3d$  Xe, Cs, Ba из [78], а по Eu из [79].

**Рисунки 2.10\_С60** содержат результаты вычислений для  $C_{60}$ .

Рис2.10\_С60\_g1 представляет фактор усиления электромагнитного излучения электронной оболочки  $C_{60}$   $S(\omega) \equiv |G(\omega)|^2$ , абсолютное значение их амплитуды  $\tilde{G}^d(\omega) \equiv |G(\omega)|$  и фазы  $\eta^d \equiv \arg G(\omega)$ . Стрелки отмечают пороги соответствующих внешних  $np$  подоболочек. Энергетическая зависимость модуля фактора усиления и его фазы довольно сложны (см. [74]).

Рис2.10\_С60\_g2 изображает фактор усиления электромагнитного излучения электронной оболочки  $C_{60}$   $S(\omega) \equiv |G(\omega)|^2$ . Стрелки отмечают пороги соответствующих субвалентных  $ns$  подоболочек (см. [74]).

**Рисунки 2.10\_Ne@C60** содержат результаты вычислений для  $Ne@C_{60}$  Ne.

Рис. 2.10\_Ne@C60\_b1 даёт сечение фотоионизации  $2p$ -электронов  $Ne@C_{60}$  с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой  $C_{60}$ , что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Ne, и поляризации  $C_{60}$  оболочки, эти осцилляции многократно усиливающей.

На рисунках пунктиром изображена кривая для изолированного атома, штрих - пунктирная линия даёт результаты лишь с учётом отражения фотоэлектрона электронной оболочкой фуллерена, сплошная линия - ПСФО для эндоэдрального атома. Видно резкое увеличение сечения, в котором появляется три максимума, величина которых определяется поляризацией электронной оболочки фуллерена (см. Раздел 1.14).

Рис. 2.10\_Ne@C60\_b2 представляет сечение фотоионизации  $2s$ -электронов  $Ne@C_{60}$  с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой  $C_{60}$  и Ne. Учтены те же факторы, что и на Рис. 2.10\_Ne@C60\_b1. Роль фактора усиления электромагнитного излучения невелика.

Рис. 2.10\_Ne@C60\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{2p}$   $2p$ -электронов  $Ne@C_{60}$  и Ne. Видны осцилляции, обусловленные отражением фотоэлектрона оболочкой фуллерена. На дипольный параметр поляризация оболочки фуллерена не влияет.

Рис. 2.10\_Ne@C60\_e1 даёт недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma_{2p}^C$   $2p$ -электронов  $Ne@C_{60}$  и Ne. Роль отражения фотоэлектрона оболочкой фуллерена очень велика. **Влиянием поляризации фуллерена пренебрежено.**

Рис. 2.10\_Ne@C60\_e2 представляет недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma_{2s}^C$

2s -электронов Ne@C<sub>60</sub> и Ne. Осцилляции параметра особо сильны у порога, но быстро убывают с ростом  $\omega$ . Влиянием поляризации фуллерена пренебрежено.

Рис. 2.10\_Ne@C<sub>60</sub>\_e3 изображает недипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{1s}$  1s-электронов Ne@C<sub>60</sub> и Ne. Осцилляции параметра очень сильны у порога, и быстро убывают с ростом  $\omega$ . Влиянием поляризации фуллерена пренебрежено.

**Рисунки 2.10\_Ar@C<sub>60</sub>** содержат результаты вычислений для Ar@C<sub>60</sub> и Ar.

Рис. 2.10\_Ar@C<sub>60</sub>\_b1. изображает сечение фотоионизации 3p-электронов Ar и Ar@C<sub>60</sub>, с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой C<sub>60</sub>, что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Ar, и поляризации C<sub>60</sub> оболочки, многократно усиливающей эти осцилляции. Виден *Гигантский эндоэдральный резонанс* с силой осциллятора в 20 единиц, с основным максимумом при 21eV.

Рис. 2.10\_Ar@C<sub>60</sub>\_b2. даёт сечение фотоионизации 3s-электронов Ar и Ar@C<sub>60</sub>, с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой C<sub>60</sub>, что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Ar, и поляризации C<sub>60</sub> оболочки, заметно усиливающей эти осцилляции. В Ar@C<sub>60</sub> сечение 3s примерно в 400 раз меньше, чем 3p

Рис. 2.10\_Ar@C<sub>60</sub>\_d1. приводит дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{2p}$  2p-электронов Ar@C<sub>60</sub> и Ar. Роль отражения фотоэлектрона значительна на самом пороге и после 50 эв.

Рис. 2.10\_Ar@C<sub>60</sub>\_e1. представляет недипольный параметр угловой анизотропии 3p-электронов Ar@C<sub>60</sub> и Ar. Отражение фотоэлектрона приводит к умеренным осцилляциям.

Рис. 2.10\_Ar@C<sub>60</sub>\_e2. даёт недипольный параметр угловой анизотропии 3s-электронов Ar@C<sub>60</sub> и Ar. Влияние фуллерена ограничивается областью, близкой к порогу.

**Рисунки 2.10\_Kr@C<sub>60</sub>** содержат результаты вычислений для Kr@C<sub>60</sub>.

Рис. 2.10\_Kr@C<sub>60</sub>\_b1. изображает сечение фотоионизации 4p-электронов Kr и Kr@C<sub>60</sub> с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой C<sub>60</sub>, что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Kr, и к поляризации C<sub>60</sub> оболочки, эти осцилляции многократно усиливающей. Наиболее впечатляющий результат – появление, как и в Ar@C<sub>60</sub>, Гигантского эндоэдрального резонанса с силой осциллятора в 23 с максимумом при 19eV.

Рис. 2.10\_Kr@C<sub>60</sub>\_b2. представляет сечение фотоионизации 4s-электронов Kr и Kr@C<sub>60</sub>, с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой C<sub>60</sub>, что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Kr, и к поляризации C<sub>60</sub> оболочки, многократно усиливающей эти осцилляции. В Kr @C<sub>60</sub> сечение 4s примерно в 400 раз меньше, чем 4p, т.е. ситуация подобна имеющей место в Ar@C<sub>60</sub>. Имеется, помимо порогового, ещё и максимум при 47 эв.

Рис. 2.10\_Kr@C<sub>60</sub>\_d1 даёт дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{4p}$  4p-электронов Kr@C<sub>60</sub> и Kr. Осцилляции за счёт оболочки фуллерена не велики.

Рис. 2.10\_Kr@C<sub>60</sub>\_e1 представляет недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma^C$  4p-электронов Kr@C<sub>60</sub> и Kr. Влиянием поляризации фуллерена на недипольные параметры пренебрегается.

Рис. 2.10\_Kr@C<sub>60</sub>\_e2 даёт недипольный параметр угловой анизотропии 4s-электронов Kr@C<sub>60</sub> и Kr. Оболочка фуллерена существенно меняет параметр, у которого появляется резкий максимум на пороге ионизации.

**Рисунки 2.10\_He@C<sub>60</sub>** содержат результаты вычислений для He@C<sub>60</sub>

Рис. 2.10\_He@C<sub>60</sub>\_b1 даёт сечение фотоионизации 5p-электронов He и He@C<sub>60</sub>, с

учётom отражения фотоэлектрона оболочкой  $C_{60}$ , что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Хе, и к поляризации  $C_{60}$  оболочки, многократно усиливающей эти осцилляции. Как в Ne и Ar, наиболее яркий результат – появление Гигантского эндодрального резонанса с силой осциллятора в 25 с максимумом при  $17eV$  ..

Рис. 2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_b2 изображает сечение фотоионизации 5s-электронов Хе и Хе@С<sub>60</sub>, с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой  $C_{60}$ , что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Хе, и к поляризации  $C_{60}$  оболочки, многократно усиливающей эти осцилляции. Кг. Как в Ne и Ar, в Хе@С<sub>60</sub> сечение 5s примерно в 400 раз меньше, чем 5p, т.е. ситуация подобна имеющей место в Ar@С<sub>60</sub> и Кг@С<sub>60</sub>.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_b2 представляет сечение фотоионизации 5s-электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе. По сравнению с изолированным атомом появляется еще один максимум, при 47 эв.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_b3 даёт сечение фотоионизации 4d-электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе (см. [77,78]). Видно, что отражение фотоэлектрона приводит к полному разрушению Гигантского резонанса, вместо которого появляются 4 максимума.

Рис. 2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_b4 приводит сечение фотоионизации  $3d_{3/2}$ -электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе,  $3d - \epsilon f$  переход (см. [79,80]). Поляризация фуллереновой оболочки при таких энергиях фотона незначительна. Отражение фотоэлектрона приводит к сильным осцилляциям в сечении.

Рис. 2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_b5 даёт сечение фотоионизации  $3d_{5/2}$ -электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе,  $3d - \epsilon f$  переход (см. [79,80]). Поляризация фуллереновой оболочки при таких энергиях фотона незначительна. Отражение фотоэлектрона приводит к сильным осцилляциям в сечении, в значительной мере маскирующим дополнительный максимум, отражающий в изолированном атоме воздействие  $3/2$  электронов на  $5/2$ .

Рис. 2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_d1 представляет дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{5p}$  5p-электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе. Отражение фотоэлектронов приводит к заметным осцилляциям параметра  $\beta_{5p}$  (см. [79,80]). Примечателен дополнительный минимум сразу за порогом.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_d2 изображает дипольный параметр угловой анизотропии 4d-электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе (см. [77,78]). Отражение фотоэлектрона ведёт к дополнительному минимуму вблизи порога и осцилляции вдали от него.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_d3 даёт дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta$  для  $3d_{3/2}$ -электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе (см. [79,80]). Обращает внимание сложная структура с узкими минимумами и максимумом сразу за порогом.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_d4 представляет дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta$  для  $3d_{5/2}$ -электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе. У самого порога возник в Хе@С<sub>60</sub> дополнительный минимум и максимум.

Рис. 2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_e1 даёт недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma_{5p}^C$  5p-электронов Хе@С<sub>60</sub>. Роль отражения фотоэлектронов фуллереновой оболочкой велика.

Рис. 2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_e2 представляет недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma_{5s}^C$  5s-электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе. Отражение фотоэлектронов резко увеличивает амплитуду околопороговой осцилляции параметра.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_е3 изображает недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma_{4d}^C$  4d электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе (см.[78]). Отражение фотоэлектрона приводит к дополнительному минимуму при сравнительно при 85 эв и небольшим осцилляциям.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_е4. Недипольный параметр угловой анизотропии  $\delta^C$  4d электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе (см.[78]). Отражение фотоэлектрона оболочкой фуллерена приводит к вполне заметным осцилляциям.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_е5. изображает недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma^C$  для  $3d_{3/2}$ -электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе. Отражение фотоэлектронов создаёт «рябь» на кривой параметра.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_е6 приводит недипольный параметр угловой анизотропии  $\delta^C$  для  $3d_{3/2}$  электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе. Отражение фотоэлектрона приводит к значительному максимуму у самого порога.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_е7 даёт магическую комбинацию недипольных параметров угловой анизотропии ( $3\delta^C + \gamma^C$ ) для  $3d_{3/2}$ -электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе. Отражение фотоэлектрона заметно проявляется лишь у самого порога.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_е8. изображает недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma^C$  для  $3d_{5/2}$ -электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе. Отражение заметно проявляется на расстоянии в  $\approx 10$  эв за порогом.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_е9 приводит недипольный параметр угловой анизотропии  $\delta^C$  для  $3d_{5/2}$  электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе. Рисунок весьма похож на Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_е4.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_е10 предлагает магическую комбинацию недипольных параметров угловой анизотропии ( $3\delta^C + \gamma^C$ ) для  $3d_{5/2}$ -электронов Хе@С<sub>60</sub> и Хе. Влияние отражения фотоэлектронов особенно велико у самого порога.

Рис.2.10\_Хе@С<sub>60</sub>\_g1. Параметр отражения  $F_r(\omega)$  (1.107) фотоэлектронов из 4d уровня в Хе@С<sub>60</sub>. Именно его осцилляции определяют структуру сечения фотоионизации 4d подоболочки в Хе@С<sub>60</sub>.

**Рисунки 2.10\_Cs@С<sub>60</sub>** содержат результаты вычислений для Cs@С<sub>60</sub>

Рис.2.10\_Cs@С<sub>60</sub>\_b1 даёт сечение фотоионизации  $3d_{3/2}$  и  $3d_{5/2}$ --электронов Cs@С<sub>60</sub> и Cs (см.[80]). Видно множество максимумов, на фоне которых почти полностью маскируется влияние 3/2 электронов на 5/2 электроны.

Рис.2.10\_Cs@С<sub>60</sub>\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta$  для  $3d_{3/2,5/2}$ -электронов Cs@С<sub>60</sub> и Cs. Как и в сечениях, сложные вариации параметров затушевывают влияние 3/2 электронов на 5/2 электроны.

Рис.2.10\_Cs@С<sub>60</sub>\_e1 представляет недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma^C$  для  $3d_{3/2,5/2}$ -электронов Cs@С<sub>60</sub> и Cs. Подобно изображённому на Рис.2.10\_Cs@С<sub>60</sub>\_d1, сложные вариации параметров затушевывают влияние 3/2 электронов на 5/2 электроны.

**Рисунки 2.10\_Va@С<sub>60</sub>** содержат результаты вычислений для Va@С<sub>60</sub>

Рис.2.10\_Va@С<sub>60</sub>\_b1 даёт сечение фотоионизации  $3d_{3/2}$  и  $3d_{5/2}$ --электронов Va@С<sub>60</sub> и Va (см.[80]). Видно много максимумов, вызванных отражением фотоэлектрона оболочкой фуллерена.

Рис.2.10\_Va@C60\_d1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta$  для  $3d_{3/2;5/2}$ -электронов Va@C60 и Va. Отражение фотоэлектрона добавляет довольно резкие изменения в поведение параметров как функций  $\omega$ .

Рис.2.10\_Va@C60\_e1 представляет недипольный параметр угловой анизотропии  $\gamma^C$  для  $3d_{3/2;5/2}$ -электронов Va@C60 и Va. Дополнительные вариации существенно изменяют параметры.

Рис.2.10\_Va@C60\_e2 приводит недипольный параметр угловой анизотропии  $\delta^C$  для  $3d_{3/2;5/2}$ -электронов Va@C60 и Va. Отражение фотоэлектрона не только заметно усиливает максимум, обусловленный влиянием  $3/2$  электронов на электроны  $5/2$ , но и создаёт новые осцилляции.

**Рисунки 2.10\_Eu@C60** содержат результаты вычислений для Eu@C60

Рис.2.10\_Eu@C60\_b1 приводит сечение фотоионизации  $5p$  “вниз” электронов Eu@C60 и Eu. Поляризация остова создаёт эндоэдральный резонанс при 2.7 Ry.

Рис.2.10\_Eu@C60\_b2 даёт сечение фотоионизации  $5p$  “вверх” электронов Eu@C60. и Eu. Поляризация остова создаёт, как и для  $5p$  “вниз” электронов, эндоэдральный резонанс при чуть большей энергии – 2.8 Ry. Отметим, что усиление сечения в Eu@C60 гораздо меньше, чем в наружных  $np$  подоболочках Ar@C60, Kr@C60 и Xe@C60.

Рис.2.10\_Eu@C60\_b3 представляет сечение фотоионизации  $5s$  “вниз” электронов Eu. Сечение изменилось в основном за счёт эффекта отражения фотоэлектронов оболочкой фуллерена.

Рис.2.10\_Eu@C60\_b4 изображает сечение фотоионизации  $5s$  “вверх” электронов Eu@C60. и Eu. Это сечение, как и для «вниз» электронов, изменилось в основном за счёт эффекта отражения фотоэлектронов оболочкой фуллерена.

Рис.2.10\_Eu@C60\_b5 приводит сечение фотоионизации  $4f$  “вверх” электронов Eu@C60. и Eu. В сечении резко усилен, более чем на порядок, резонанс при 2.1 Ry, достигающий 130 Мб.

Рис.2.10\_Eu@C60\_b6 даёт сечение фотоионизации  $4d$  “вниз” электронов Eu@C60. и Eu. Этот переход заметно усилен за счёт отражения фотоэлектрона, но вносит небольшой вклад в сечение фотоионизации.

Рис.2.10\_Eu@C60\_b7 представляет сечение фотоионизации  $4d$  “вверх” электронов Eu@C60. и Eu. Отражения фотоэлектрона создают несколько максимумов на кривой сечения в интервале энергий фотона в 12-16 Ry

Рис.2.10\_Eu@C60\_b8 приводит сечение фотоионизации в окрестности Гигантского автоионизационного резонанса Eu и Eu@C60. Видно, что оболочка фуллерена мало сказывается на Гигантском автоионизационном резонансе, расположенном при 10.5 Ry.

Рис.2.10\_Eu@C60\_c1 изображает дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{5p}(\omega)$   $5p$  электронов Eu@C60 и Eu. Влияние оболочки фуллерена невелико, и проявляется в относительно небольших осцилляциях  $\beta_{5p}(\omega)$ .

Рис.2.10\_Eu@C60\_c2 даёт дипольный параметр угловой анизотропии  $\beta_{4f}(\omega)$   $4f$  электронов Eu@C60 и Eu. Влияние оболочки фуллерена проявляется лишь в пределах первых 3.5 Ry от порога ионизации.

Рис.2.10\_Eu@C60\_g1 представляет параметр отражения  $F_r(\omega)$  (1.107) фотоэлектронов из  $4d$  подоболочки в Eu@C60. Именно его осцилляции определяют структуру сечения



фотоионизации  $4d$  подболочки в  $\text{Eu@C}_{60}$  и появления там Гигантского эндодрального резонанса (см. [81])

## 2.11. Литература к Главе 2

1. *Амусья М. Я., Иванов В. К. и Долматов В. К.* Письма в ЖТФ АН СССР. 1978. Т. **4**. № 21. С. 1305-1309.
2. Автоионизационные явления в атомах. Труды II научного семинара / *Амусья М.Я., Долматов В.К., Иванов В.К., Шефтель С.И.* М.: Изд. МГУ, 1981. С. 235-242.
3. *Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Manson S. T., Msezane A. Z., and Radojevich V.* Phys. Rev. Lett. 2002. V. **88**, N 9, 093002.
4. *Bizau J.M., Wuilleumier F.J.* Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 1995. V. **71**. N. 3. P. 205-224.
5. *Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z., and Nordgren J.*, Phys. Rev. A. 2001. V. **63**. 052512.
6. *Амусья М. Я., Черепков Н. А. и Шатице С. Г.* ЖЭТФ. 1972. Т. **63**. № 3(9). 889.
7. *Амусья М. Я., Балтенков А. С., Гринберг А. А., Шатице С. Г.* ЖЭТФ. 1975. Т. 68. С. 28-35.
8. *Dias E., Chakraborty H., Deshmukh P., Manson S., Hemmers O., Glans P., Hansen.D., Wang H., Whitfield S., Lindle D., Wehlits R., Levin J., Sellin I., Perera R.* Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78. P. 4553.
9. *Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L.V., Felfli Z. and Msezane A. Z.* Phys. Rev. A. 2001. V. **63**. 052506.
10. *Амусья М. Я., Черепков Н. А. и Чернышева Л. В.* ЖЭТФ. 1971. Т. **60**. № 1. С. 160-174.
11. *West J. B., Woodruff P. R., Codling K., Houlgate, R. G. J.* Phys. B: At. Mol. Phys. 1976. V. **9**. P. 407-410.
12. *Tan K. H., Brion C. E. J.*, Journal of Electron Spectr. Rel. Phenom. 1978. V. **13**. P. 77-82.
13. *Амусья М. Я.* Изв. АН СССР, сер. Физическая. 1981. Т. 45. № 12. С. 2242-2254.
14. *Амусья М. Я.* Изв. АН СССР, сер. Физическая. 1984. Т. 48. № 4. С. 642-650.
15. *Shnopper H. W.* Phys. Rev. 1963. V. 131. P. 2558-2560.
16. *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.
17. *Dehmer J.L., Chupka W.A., Berkowitz J., Jivery W.T.* Phys. Rev A. 1975. V. 12. P. 1966-1977.
18. *Амусья М. Я., Иванов В. К., Черепков Н. А. и Чернышева Л. В.* ЖЭТФ. 1974. Т. **66**. № 5. С. 1537-1549.
19. *West J.B., Woodruff P.R., Codling K., Houlgate R.G. J.* Phys. B: At. Mol. Phys. 1976. V. 9. P. 407-410.
20. *Samson J. A. R., Gardner J. L.* Phys. Rev. Lett. 1974. V. 33. P. 671-674.
21. *Adam M.Y., Wuilleumier F., Sandner N., Krummacher S., Schmidt V., Mehlhorn W.* Japan J. Appl. Phys. 1978. V. 17. P. 170-180.
22. *Haensel R., Keitel G., Kosuch N., Nielsen U., and Schreiber P. J.* De Physique 1971. V. 32-C4. P. 236-245.
23. *Kammerling B., Kossman H., Schmidt V. J.* Phys. B 1989. V. 22. P. 841-854.
24. *Amusia M. Ya.*, Radiation Physics and Chemistry. 2004. V. **70**. P. 237-251.

25. Kivimaki A., Hergenbahn U., Kempgens B., Hentges R., Piancastelli M. N., Maier K., Ruedel A, Tulkki J. J., Bradshaw A. M. Phys. Rev. A. 2000. V. **63**, 012716.
26. Amusia M. Ya. and V. K. Ivanov, Phys. Lett. A, **59**, 3, p. 194-196, 1976.
27. Lynch M.J., Gardner J.L., Codling K., Marr G.V. Phys. Lett. A. 1973. V. 43. P. 237-238.
28. Torop L., Morton J., West J.B. J. Phys. B. 1976. V. 9. P. 2035-2041
29. Krause M.O., Carlson T.A., Woodruff P.R. Phys. Rev. A. 1981. V. 24. P. 1374-1385.
30. 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.
31. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V., Felfli Z., Manson S. T., and Msezane A. Z. INFN Frascati Physics Series. 2003. V. **XXXII**. P. 3-8.
32. 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., Manson S. T. Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91(5). 053002.
33. Amusia M.Ya., Baltenkov A.S., Chernysheva L.V., Felfli Z., Manson S.T., Msezane A.Z. Phys. Rev. A. 2003. V. 67 (6). 060702
34. Amusia M. Ya., Ivanov V. K. and Chernysheva L. V., Phys. Lett. A. 1973. V. **43**. N 3. P. 243.
35. M. Ya. Amusia, N. A. Cherepkov, L. V. Chernysheva and S. T. Manson, J. of Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **33**, 1, L37-42, 2000
36. Koizumi K. et al 1997. Phys. Scr. V.73. P. 131- 142.
37. Иванов В. К., Ланкин К. В., Кулов М. А. Письма в ЖТФ, 2003. V. 29, N 15. P. 9-16.
38. Berrah N., Bozek J. D., Wills A. A., Turri G., Zhou H.-L., Manson S. T., Akerman G., Rude B., Gibson N. D., Walter C. W., VoKy L., Hibbert A., Ferguson S. M. Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87, N. 25. P. 253002-1/4.
39. Kjeldsen H., Andersen P., Folkmann F., Kristensen B., Andersen T. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2001. V. 34, N 10. P. L353-L357.
40. Kjeldsen H., Folkmann F., Knudsen H., Rasmussen M.S., West J. B. and Andersen T. J. of Phys.B: At. Mol. And Opt. Phys. 1999. V. 32. N. 18. P. 4457-4465.
41. van Kampen P., O'Sullivan G., Ivanov V. K., Ipatov A. N., Costello J. T., and Kennedy E. T. Phys. Rev. Lett. 1997, V. **78**. P. 3082.
42. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V., Felfli Z., Manson S. T., and Msezane A. Z. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2004. V. **37**. P. 937-944.
43. . Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Felfli Z., and Msezane A. Z. Phys. Rev. A. 2004. V. **70**. 062709.
44. Wilson N.J., Donnelly D., Bell K.L. and Hibbert A. J.of Phys.B: At. Mol. and Opt. Phys.1999 v.32. N 18. P. 4495-4508.
45. Rabe A., Radler K., Wolf H.-W. Vacuum Ultraviolet Radiation Physics, Pergamon & Vieweg, 1974. P. 247.
46. Amusia M. Ya., Ivanov V. K. and Kupchenko V. A. J. of Phys. B: At. Mol. Phys.1985. V. **18**. N 19. P. 3871-3879.
47. Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Ivanov V. K. and Kupchenko V. A. Zeitschrift für Physik D: Atoms, Molecules and Clusters. 1989. V. **14**. N. 3. P. 215-217.
48. Amusia M. Ya., Ivanov V. K. and Kupchenko V.A. Zeitschrift für Physik D: Atoms, Molecules and Clusters. 1989. V. **14**. N 3. P. 219-221.
49. Amusia M.Ya., Chernysheva L.V., Ivanov V.K. Radiation Physics and Chem. 2000. V. 59. P. 137-143.

50. *Becker U., Kerkhoff H. G., Lindle D. W., Kobrin P. H., Ferret T. A., Truesdale C. M., Shirley D.A.* Phys. Rev. A. 1986. V. 34. P. 2858-2864.
51. *Richter M., Meyer M., Pahler M., Raven E. V., Sonntag B.* Phys. Rev. A. 1989. V. 40. P. 7007-7019.
52. *Амусья М. Я., Чернышева Л. В. и Шефтель С. И.* ЖТФ. 1981. Т. **51**. № 11. С. 2411.
53. *Kojima T.M., Oura M., Itoh Y. et al.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1998. V. 31. P. 1463-1468.
54. *Amusia M. Ya., Gribakin G. F., Ivanov V. K., Chernysheva L. V.* J. Phys. B. 1990. V. 23. P. 385-391.
55. *Gribakin G. F., Gribakina A. A., Gultsev B. V., Ivanov V. K.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1992. V. 25. P. 1757-1772.
56. *Balling P., Kristensen P., Stapelfeldt H., Andersen T., Haugen H. K.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1993. V. 26, P. 3531-3539.
57. *Амусья М. Я., Долматов В. К., Иванов В. К.* ЖЭТФ. 1983. Т. **85**. № 1. С. 115-123.
58. *Amusia M. Ya., Dolmatov V. K., Ivanov V. K. and Shapiro S. G.* J. of Phys. B: At. Mol. Phys. 1983. V. **16**. N 24. P. L753-756.
59. *Амусья М. Я., Долматов В. К., Иванов В. К.* ЖТФ. 1986. Т. **56**. № 1. С. 8-15.
60. *Amusia M. Ya. V. K. Dolmatov and M. M. Mansurov,* 1990. J. of Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **23**, p. L491-494.
61. *Amusia M. Ya. and Chernysheva L. V.,* <http://arxiv.org/abs/physics/0701040>, 2007
62. *Черепков Н. А., Чернышева Л. В.* Изв. АН СССР, сер. физ. 1977. Т. **41**, N 12. С. 2518-2528.
63. *Samson J. A.R., Shefer Y., Angel G.C.* Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 2020-2024.
64. *Amusia M. Ya. Ivanov V. K. and Chernysheva L. V.* J. of Phys. B: At. Mol. Phys. 1981. V. **14**. P. L19-23.
65. *Bruhn R., Schmidt E., Schroder H., Sonntag B.* Phys. Lett. A. 1982. V. 90, P. 41-44.
66. *Kobrin P.H., Becker U., Truesdale C.M., Lindle D. W., Kerkhoff H.G., Shirley D.A.* J. Electr. Spectr. Rel. Phenom. 1984. V. 34. P. 129-139.
67. *Dolmatov V.K., Amusia M.Ya.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1994. V. 27. P. L281-L285.
68. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V. and Manson S.T.* Phys. Rev. A. 2000. V. **61**. P. R207-11.
69. *Kjeldsen H., Andersen P., Folkmann F., Knudsen H., Kristensen B., West J.B., Andersen T.* Phys. Rev. A. 2000. V. 62. 020702.
70. *Амусья М. Я., Грибакин Г. Ф., Иванов В. К. и Чернышева Л. В.,* Изв АН СССР, сер. Физ. 1986. Т. **50**. № 7. С. 1274-1278.
71. **Kjeldsen H,** <http://physics.nist.gov>
72. *Amusia M. Ya., A. S. Baltenkov, L. V. Chernysheva L. V., Felfli Z., and Msezane A. Z.* Phys. Rev. A. 2005. V. **72**. 032727.
73. *Hemmers O., Guillemin R., Kanter. E., Krässig B., Lindle D. W., Southworth S. H., Wehlitz R., Baker J., Hudson A., Lotrakul M., Rolles D., Stolte C., Tran C., Wolska A., Yu S. W., Amusia M. Ya., Cheng K. T., Chernysheva L. V., Johnson W. R., Manson S. T.,* Phys. Rev. Lett. 2003. M. **91**(5). 053002.
74. *Amusia M. Ya., Baltenkov A. S. and Chernysheva L. V.* JETP Letters. 2008. V. **87**. N. 4. P. 230-233.
75. *Amusia M. Ya., Baltenkov A. S. and Chernysheva L. V.* JETP. 2008. V. **134**. No 2 (8) . P. 221-230.

76. *Amusia M. Ya., Baltenkov A. S. and Chernysheva L. V.* J. Phys. B, At. Mol. Opt. Phys. 2008. V. 41. P. 165201
77. *Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V., Felfli Z., and Msezane A. Z.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2005. V. **38**. P. L169-73.
78. *Амусья М. Я., Балтенков А. С., Чернышева Л. В., Фелфли З., Мезане А. З.,* ЖЭТФ. 2006. V. **129**. N 1. P. 63-70.
79. *Amusia M. Ya., Baltenkov A. S. and Chernysheva L. V.* Phys. Rev. A. 2007. V. **75**, 043201.
80. *Amusia M. Ya., Baltenkov A. S. and Chernysheva L. V.,* Central European Journal of Physics. 2008. V. 6. No 1. P. 14 –25.
81. *Amusia M. Ya., Baltenkov A. S. and Chernysheva L. V.* JETP Letters. 2008. V. **89**. N. 6. P. 322 - 326.