

На правах рукописи

Килин Виктор Андреевич

**Корреляционные эффекты в процессах
множественной ионизации атомов**

01.04.02 - теоретическая физика

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Томск – 2004

Работа выполнена в Томском политехническом университете

Научный консультант: доктор физико-математических наук,
профессор **Амусья Мирон Янкелевич**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Шаповалов Александр Васильевич

доктор физико-математических наук, профессор
Сухоруков Виктор Львович

доктор физико-математических наук, профессор
Кистенев Юрий Владимирович

Ведущая организация: **Санкт-Петербургский**
политехнический университет

Защита состоится “ 16 ” декабря 2004 г. в 14 час. 30 мин.

на заседании диссертационного совета Д 212.267.07

в Томском государственном университете

по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина,36

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке

Томского государственного университета

Автореферат разослан “ _____ ” _____ 2004 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,

доктор физико-математических наук,

старший научный сотрудник

Ивонин И.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Информация об атомных спектрах, электронных и радиационных, широко используется для изучения внутренней структуры веществ и их физико-химических свойств. Совершенствование инструментальной базы и методик спектроскопических экспериментов не только существенно повысило точность и достоверность получаемых результатов, но и позволило проводить наблюдение качественно новых эффектов. К таковым можно отнести эксперименты, в которых продукты реакции - ионы, излучаемые электроны или фотоны - регистрируются одновременно. Синхронное излучение атомом нескольких частиц является, как правило, следствием многоэлектронных процессов, в которых два и более атомных электрона одновременно меняют свои состояния. Обнаружены и многоэлектронные процессы, приводящие к излучению лишь одной частицы (электрона, фотона). Вероятность тех и других процессов обычно мала, поэтому требуются источники интенсивных пучков возбуждающих частиц и долговременные наблюдения для получения достоверных экспериментальных результатов. Новые экспериментальные данные заставляют смотреть на физические процессы в атомах, как на коллективные, многоэлектронные явления, что гораздо шире рамок обычных до 60-70 годов одноэлектронных представлений. Это утверждение еще более справедливо относительно молекул, кластеров, твердых тел. Поэтому изучение многоэлектронных взаимодействий в атомах является, в определенном смысле, основой понимания и раскрытия новых физических свойств многоатомных образований.

Интерпретация современных экспериментов высокого разрешения, способных регистрировать проявление коллективных явлений в многоэлектронных системах, требует выхода за рамки одночастичных приближений, таких как приближение Хартри-Фока (ХФ). Например, прецизионные измерения обнаружили присутствие выраженных резонансных структур корреляционной природы в сечениях фотоионизации субвалентных оболочек атомов; обнаружены новые линии в электронных и радиационных спектрах, интерпретация которых возможна лишь при учете многоэлектронных эффектов; и пр. В ряде случаев более точные измерения последних лет выявили довольно значительные расхождения между экспериментальными данными и теоретическими результатами, например, для сечений двойной фотоионизации внешних оболочек атомов.

Таким образом, задача развития теории атома для описания новых классов наблюдаемых эффектов многоэлектронной природы и процессов кратной ионизации является **актуальной**.

Цель работы. Основной целью настоящей работы является развитие теории многоэлектронных эффектов в атомах, ее применение к расчету физических характеристик конкретных многоэлектронных переходов в атомах и выявлению их основных механизмов. Для достижения были сформулированы следующие основные задачи:

- разработка единого подхода к построению теории сложных атомных процессов по теории возмущений (ТВ) в формализме вторичного квантования и квантовой теории углового момента и его применение к расчету энергий, вероятностей, сечений переходов на основе имеющегося и вновь разработанного программного обеспечения;
- проведение поисковых исследований, направленных на выявление качественно новых многоэлектронных эффектов, и построение их теории;
- проведение расчетов физических характеристик многоэлектронных процессов в атомах для обоснования идентификации наблюдаемых линий и структур в электронных и радиационных спектрах;
- анализ применяемых подходов к расчету сечений двойной фотоионизации атомов с целью разработки метода, устраняющего имеющиеся расхождения с экспериментальными данными за счет адекватного учета корреляционных взаимодействий высших порядков ТВ; разработка программного обеспечения этого метода и проведение расчета сечений двойной фотоионизации внешних оболочек атомов благородных газов.

Предметом исследования являются процессы кратного возбуждения и ионизации многоэлектронных атомов и последующая трансформация возбужденных состояний. Эти процессы не могут быть точно описаны в рамках существующей теории и поэтому моделируются последовательностью более простых и трактуемых на одноэлектронном языке “элементарных” актов. В свою очередь, “элементарные” акты сами могут иметь существенно многоэлектронную природу и являться предметом отдельного изучения. В диссертации рассмотрены: *трехэлектронный Оже- и двойной Оже-эффекты; спутные Оже-переходы; двойная автоионизация резонансно возбужденных состояний; автоионизация двукратно возбужденных состояний; двухэлектронные и трехэлектронные радиационные переходы*. На основе изучения и результатов расчета физических характеристик этих процессов исследованы такие сложные явления как *двойная и тройная фотоионизация* атома, а также дается *идентификация* ряда новых структур, наблюдаемых в радиационных и электронных спектрах.

Научная новизна. На основе разработанного подхода впервые построена теория перечисленных выше корреляционных процессов, выраженная в виде строгих (в рамках низшего неисчезающего порядка ТВ) и приближенных формул для амплитуд и вероятностей переходов и формулируемых правил отбора.

Впервые предсказаны и теоретически описаны трехэлектронные Оже-переходы с “углублением” и “встречным движением” вакансий, двухэлектронные дипольные переходы вида $mp^{-3}nl \rightarrow ms^{-1}mp^{-2}$ и трехэлектронные дипольные переходы вида $ms^{-2}nl \rightarrow kp^{-2}n'l'$.

Впервые получены значения физических характеристик – квантовые числа состояний, энергии, вероятности, сечения – для перечисленных выше корреляционных процессов в атомах *Ne, Ar* и *Kr* (или существенно уточнены

имеющиеся в литературе). Выявлены на качественном и описаны на количественном уровне модельные физические механизмы этих процессов. Обоснована расчетом физических характеристик возможность экспериментального наблюдения предсказанных переходов.

Впервые дано теоретическое описание экспериментально наблюдаемого эффекта заселения и последующего флуоресцентного распада возбужденных состояний двукратных ионов при облучении атомов фотонами с энергией автоионизирующих резонансов нейтрального атома, подтвержденное численными расчетами сечений заселения и распада состояний типа $KrIII 4p^{-3}nl$ при хорошем согласии рассчитанных величин и экспериментальных данных. Установлена иерархия физических процессов, ответственных за двукратную ионизацию Kr с возбуждением третьего электрона на дискретный уровень при энергиях возбуждения в диапазоне 90-100 эВ.

Впервые построены компонентные, каналные и полные сечения (дифференциальные и абсолютные) двойной фотоионизации (ДФИ) внешних оболочек Ne с учетом широкого спектра фотоэлектронных компонент (e_1, e_2) при использовании ХФ потенциалов $V^{(N-1)}$ и $V^{(N-2)}$. Определены области энергии, где потенциалы $V^{(N-1)}$ и $V^{(N-2)}$ дают удовлетворительное согласие рассчитанных сечений с экспериментальными данными. В результате анализа относительного положения $V^{(N-1)}$ -, $V^{(N-2)}$ -сечений и экспериментальных данных сформулирована идея нового метода построения сечений ДФИ.

Разработан новый однопараметрический метод построения сечений ДФИ. Для определения значений параметра, ответственного за степень экранировки поля иона-остатка фотоэлектронами, сформулирован физически обоснованный вариационный критерий минимума разности форм сечений. В рамках нового метода построены сечения ДФИ внешних оболочек Ne и впервые достигнуто равенство форм длины скорости, указывающее на эффективный учет корреляций высших порядков, подобных учитываемым в приближении случайных фаз с обменом.

Достоверность полученных результатов обусловлена физической и математической корректностью поставленных задач, корректным применением общепринятых методов аналитических и численных расчетов, физической обоснованностью сделанных допущений. В основе представленных теоретических результатов лежат известные методы - нестационарная многочастичная ТВ в формализме вторичного квантования, квантовая теория углового момента - и приближения - Хартри-Фока, случайных фаз с обменом, LS -связи, “замороженного остова” (атомного или ионного). Расчет физических характеристик выполнен на основе признанного в мире пакета программ АТОМ и вошедших в него авторских программ при тщательном подборе параметров вычислений, соответствующем специфике решаемых задач.

Достоверность защищаемых научных положений общетеоретического и вычислительного характера обосновывается их непротиворечивостью

фундаментальным законам физики и подтверждается сопоставлением рассчитанных характеристик и экспериментальных данных.

Научная и практическая ценность. Полученная в работе совокупность результатов и их анализ позволил выявить новые формы проявлений корреляционных взаимодействий в атомах и необходимость их учета при описании процессов множественного возбуждения и ионизации многоэлектронных атомов. Проявление таких взаимодействий вполне возможно молекулах, кластерах, кристаллических структурах и в других многоатомных образованиях. На основе рассчитанных значений физических характеристик безызлучательных и радиационных переходов проведена идентификация новых наблюдаемых линий в спектрах. Разработанное программное обеспечение вошло в общепризнанный и доступный пакет программ АТОМ. Методология построения теории многоэлектронных процессов в атомах может быть включена, как самостоятельный курс, в образовательные программы магистерской подготовки по направлениям теоретической физики. Результаты работы использованы при выполнении госбюджетных и хоздоговорных НИР в Томском политехническом университете, выполнении международных проектов в кооперации с университетами гг. Кайзерслаутерн и Гиссен, Фритц-Хабер институтом, Берлин, ФРГ. Исследования поддержаны грантами Университеты России, РФФИ, ДААД, Немецкого исследовательского общества.

Научные положения, выносимые на защиту.

1. Разработан методологический подход к построению теории многоэлектронных переходов в атомах между состояниями сложных электронных конфигураций, включающий:
 - методику построения аналитических выражений для амплитуд, вероятностей и энергий переходов с учетом корреляционных взаимодействий по теории возмущений (ТВ) в формализме вторичного квантования и квантовой теории углового момента;
 - методику получения приближенных формул для количественной оценки вероятности процессов;
 - комплекс программ для аналитических и численных расчетов характеристик переходов указанных видов.
2. Развита теория многоэлектронных корреляционных процессов - трехэлектронного и двойного Оже-эффектов, сателлитных Оже-переходов, двойной автоионизации возбужденных состояний, автоионизации двукратно возбужденных состояний, двойной и тройной фотоионизации, а также впервые предсказанных трехэлектронных Оже-переходов с “углублением” и “встречным движением” вакансий, дипольных двухэлектронных $mp^{-3}nl \rightarrow ms^{-1}mp^{-2}$ и трехэлектронных $ms^{-2}nl \rightarrow kp^{-2}n'l'$ переходов, - выраженная в виде строгих (в рамках низшего исчезающего порядка ТВ) и приближенных формул для амплитуд и вероятностей переходов и формулируемых правил отбора.

3. Получены значения физических характеристик – квантовые числа состояний, энергии, вероятности, сечения – для перечисленных в п.2 корреляционных процессов в атомах *Ne*, *Ar* и *Kr*. Выявлены на качественном и описаны на количественном уровне модельные физические механизмы этих процессов. Обоснована расчетом физических характеристик возможность экспериментального наблюдения предсказанных переходов п.2.
4. Развита теория экспериментально наблюдаемого эффекта заселения и последующего флуоресцентного распада возбужденных состояний двукратных ионов при облучении атомов фотонами с энергией автоионизирующих резонансов нейтрального атома, подтвержденная численными расчетами сечений заселения и распада состояний типа $KrIII\ 4p^{-3}nl$ при хорошем согласии рассчитанных величин и экспериментальных данных. Установлена иерархия (временная и вероятностная) корреляционных физических процессов, ответственных за такого вида двукратную ионизацию *Kr* с возбуждением третьего электрона на дискретный уровень в зависимости от энергии фотовозбуждения.
5. Построены компонентные, каналные, полные дифференциальные и абсолютные сечения двойной фотоионизации (ДФИ) в формах длины и скорости для внешних оболочек *Ne* с использованием ХФ потенциалов $V^{(N-1)}$ и $V^{(N-2)}$. Установлен характер положения $V^{(N-1)}$ -и $V^{(N-2)}$ -сечений ДФИ в форме длины и скорости относительно друг друга и экспериментальных данных в зависимости от энергии ионизирующих фотонов, на основании чего определены области энергий, где применение упомянутых потенциалов приводит к удовлетворительному согласию с экспериментальными данными.
6. Разработан однопараметрический метод построения сечений ДФИ. Сформулирован вариационный критерий (в интегральном и дифференциальном виде) минимума разности сечений формы длины и формы скорости для определения значений параметра. Выявлен физический смысл параметра q в ХФ потенциале $V^{(N-q)}$ как величины, регулирующей экранировку поля иона-остатка фотоэлектронами. Показана выполнимость сформулированного критерия и найдены решения $q=q_{\min}$ вариационной задачи посредством численного итерационного решения вариационного уравнения.
7. Методом п.6 построены сечения ДФИ внешних оболочек *Ne*. Установлено существенное сближение форм сечений при наложении критерия интегрального вида и их совпадение - для критерия дифференциального вида, на основании чего указано, что разработанный параметрический метод эффективно учитывает класс корреляций высших порядков, подобный учитываемому в приближении случайных фаз с обменом. Отклонение построенных $V^{(N-q)}$ -сечений от измеренных не превосходит погрешности эксперимента.

Совокупность полученных результатов и положений, выносимых на защиту, можно квалифицировать как **решение важных научных задач** в области теории

многоэлектронных эффектов в применении к процессам кратной фотоионизации и автоионизации атомов.

Личный вклад автора. Все основные теоретические результаты, представленные в диссертации, получены автором лично. Автором сформулированы цель и задачи исследования; разработана концепция методологического подхода к построению теории многоэлектронных процессов в атомах; построена теория и выполнен расчет физических характеристик перечисленных выше многоэлектронных переходов; предсказаны многоэлектронные переходы новых типов; сформулирована идея и разработан новый метода расчета сечений ДФИ атомов; теоретически обоснована идентификация новых наблюдаемых линий; разработан ряд алгоритмов и программ для автоматизации расчетов многоэлектронных переходов; проанализированы и обобщены представленные в диссертации материалы. Экспериментальная часть исследований цитируемых авторских работ выполнена немецкими коллегами при участии автора в планировании и обсуждении результатов экспериментов.

Благодарности. Автор считает своим приятным долгом выразить глубокую благодарность проф. *Амусье М.Я.*, проф. *Арефьеву К.П.*, проф. *Ли И.С.* и проф. *Зеличенко В.М.* за всесторонние обсуждения результатов исследований, а также *Prof.Dr. H. Schmoranzer, Prof.Dr. H-K. Scharner, Prof.Dr. U. Becker* и их сотрудникам за полезные научные дискуссии и соавторство в большинстве работ последних лет, а также за всестороннюю помощь во время рабочих визитов.

Апробация работы. Основные результаты и положения работы докладывались и обсуждались на национальных и международных конференциях и семинарах:

Всесоюзный семинар по автоионизационным явлениям в атомах (*Москва*, 1986), Всесоюзная школа-семинар по рентгеновским и электронным спектрам и химической связи (*Одесса*, 1986), Всесоюзная конференция по методам расчета структуры и физических свойств кристаллов (*Киев*, 1987), Всесоюзная конференция по теории атомов и атомной спектроскопии (*Минск*, 1983; *Рига*, 1984; *Ужгород*, 1985; *Тбилиси*, 1988; *Томск*, 1989; *Суздаль*, 1991), Международная конференция по вакуумному ультрафиолету, IC VUV (*Париж*, Франция, 1992), Европейская конференция по атомной и молекулярной физике, ЕСАМР (*Рига*, Латвия, 1992; *Сиена*, Италия, 1998), Германская конференция по атомной физике, масс-спектрометрии, молекулярной физике и квантовой оптике (*Берлин*, Германия, 1993), Всероссийский съезд по спектроскопии (*Москва*, 1995), Международная школа-семинар по автоионизационным явлениям в атомах (*Дубна*, 1995), Международная конференция по электронным и атомным столкновениям (*Вена*, Австрия, 1997), XVI Международная конференция “Фундаментальная Атомная Спектроскопия” (*Москва*, 1998), II Международная конференция KORUS по фундаментальным наукам и технологиям (*Томск*, 1998), Международная конференция по атомной

спектроскопии, EGAS (Уппсала, Швеция, 1990; Каен, Франция, 1993; Барселона, Испания, 1994; Грац, Австрия, 1996; Марсель, Франция, 1999).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 34 статьи в периодических изданиях и сборниках, представлено 33 тезиса докладов на национальных и международных научных конференциях.

Структура диссертации определена в соответствие с целью и задачами исследования и состоит из введения, 5 глав и заключения. Работа изложена на 258 страницах машинописного текста, включая 83 рисунка, 33 таблицы и библиографию из 264 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ.

Во **введении** обосновывается актуальность темы, формулируются основная цель, задачи и предмет исследования, характеризуется научная новизна, практическая ценность и достоверность полученных результатов, представлены положения, выносимые на защиту, отмечен личный вклад автора и перечислены конференции, где проведена апробация работ.

В **первой главе** кратко представлены методы и приближения современной теоретической атомной физики. Из множества существующих подходов выбраны те, на основе которых получены представленные в диссертации материалы.

В первую очередь, это приближение Хартри-Фока – наилучшее из существующих одночастичных приближений. Оно позволяет получить хорошее начальное приближение к энергии и вероятности различных переходов в атомах (и не только в атомах), а также базис волновых функций (ВФ) в том или ином приближении (релятивистском, замороженного атомного или ионного остова, и т.д.), используемый в расчетах за рамками приближения ХФ.

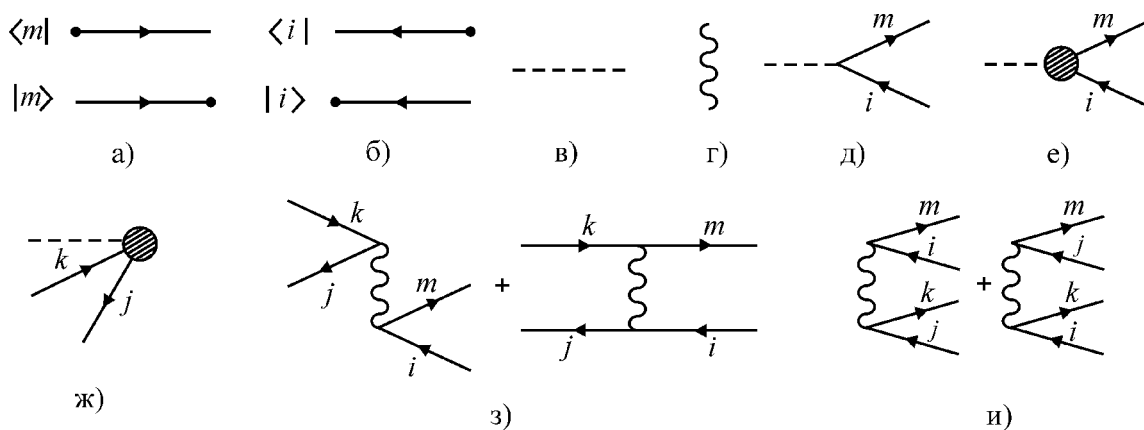


Рис. 1. Графические символы ТВ. а) – электрон; б) – дырка; в) – фотон; г) кулоновское взаимодействие $v = |\vec{r} - \vec{r}'|^{-1}$;

$$\begin{aligned} \text{д)} \quad & \langle m | -\frac{1}{c} \hat{p} \hat{A} | i \rangle, \text{ либо } \langle m | \vec{E}(t) \vec{r} | i \rangle; & \text{е)} \quad & \langle m | M(\omega) | i \rangle; & \text{ж)} \quad & \langle j | M(\omega) | k \rangle; \\ \text{з)} \quad & \langle mj | u | ik \rangle = \langle mj | v | ik \rangle - \langle mj | v | ki \rangle; & \text{и)} \quad & \langle mk | u | ij \rangle = \langle mk | v | ij \rangle - \langle mk | v | ji \rangle \end{aligned}$$

Далее кратко изложен метод нестационарной многочастичной ТВ в формализме вторичного квантования, использующий тензорный характер операторов рождения/уничтожения и квантовую теорию углового момента, а также диаграммную технику Фейнмана. Достоинствами ТВ являются исключение в явном виде ВФ всей многоэлектронной системы из расчета амплитуд и энергий переходов и однозначное графическое (диаграммное) представление сложных атомных процессов в виде последовательности элементарных актов. Элементы диаграмм наглядно трактуются как последовательность протекающих во времени элементарных физических процессов, рис 1.

Вероятность *безызлучательного* перехода между начальным Φ_i и конечным Φ_f состоянием с энергиями E_i и E_f в первом порядке ТВ по межэлектронному взаимодействию $\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} r_{ij}^{-1}$ определяется выражением ($\hbar=m=e=1$):

$$\Gamma_{i,f} = 2\pi |M_{if}|^2 \delta(E_i - E_f) = 2\pi \left| \langle \Phi_f | \hat{V} | \Phi_i \rangle \right|^2 \delta(E_i - E_f), \quad (1)$$

При взаимодействии атома с внешним электромагнитным полем $\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{k,\omega} \vec{e}_{\vec{k}} (c_{k\omega} e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} + c_{k\omega}^* e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})})$ малой интенсивности атом испускает или поглощает одиночный фотон. Поэтому для *радиационных* переходов в N -электронном атоме возмущением служит оператор

$$\hat{H}_{\text{int}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) = -\frac{1}{c} \sum_n \vec{A}_k(\vec{r}_n, t) \hat{p}_n \quad (2)$$

взаимодействия с поперечным электромагнитным полем, $(\vec{e}_{\vec{k}}, \vec{k}) = 0$, так что в длинноволновом приближении сечение перехода имеет вид

$$\sigma^{\nu,r}(\omega) = \frac{4\pi^2}{\omega c} \int |M_{i,f}^{\nu,r}|^2 \delta(E_f - E_i - \omega) ds_f. \quad (3)$$

Здесь $M_{i,f}^{\nu} = \langle \Phi_f | (\vec{e}, \vec{p}) | \Phi_i \rangle$ есть амплитуда в форме “скорости”, а $M_{i,f}^r = \langle \Phi_f | (\vec{e}, \vec{r}) | \Phi_i \rangle$ - в форме “длины”, s_f характеризует состояние многоэлектронной системы. Формы сечений равнозначны, если в расчете используются точные ВФ. Для приближенных ВФ равенство форм нарушается, а их разность может служить критерием справедливости используемых приближений. Это используется при построении нового метода расчета сечений двойной фотоионизации в главе 4 диссертации.

Методика построения теории многоэлектронных процессов показана на примере подробно рассматриваемого в главе 2 диссертации безызлучательного трехэлектронного Оже-перехода (ТЭО-перехода) вида $i_1 i_2 \rightarrow f_1 f_2 f_3 + e_q$ между начальным состоянием Φ_i с двумя вакансиями i_1 и i_2 и конечным Φ_{fq} с тремя вакансиями f_1, f_2, f_3 и электроном e_q в непрерывном спектре.

В представлении вторичного квантования оператор возмущения и невозмущенные ВФ $\Phi_i^{(0)}$ и $\Phi_{fq}^{(0)}$ имеют вид

$$\hat{V} = \hat{H} - \hat{H}^{HF} = \frac{1}{2} \sum_{klmn} \langle kl|u|nm \rangle a_k^+ a_l^+ a_m a_n, \quad \Phi_i^{(0)} = N_i a_{i_1} a_{i_2} \Phi_0, \quad \Phi_{fq}^{(0)} = N_{fq} a_{f_1} a_{f_2} a_{f_3} a_q^+ \Phi_0, \quad (4)$$

где N - нормировочные множители, a и a^+ - операторы рождения дырок и электронов, соответственно, а Φ_0 - вакуумная ВФ, в качестве которой удобно выбрать ВФ основного состояния атома в приближении ХФ, $\hat{H}^{HF}|\Phi_0\rangle = E_0|\Phi_0\rangle$.

Нестационарная ТВ использует представление взаимодействия, $\Psi = e^{iH_0 t} \Phi$, $V(t) = e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t}$, где вводится оператор эволюции

$$\hat{U}(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}^{(n)}(t, t_0), \quad \hat{U}^{(n)}(t, t_0) = \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{T} \{ \hat{V}_\alpha(t_1) \hat{V}_\alpha(t_2) \dots \hat{V}_\alpha(t_n) \}, \quad (5)$$

переводящий при адиабатическом включении возмущения ($\hat{V}_\alpha(t) = \hat{V}(t) e^{-\alpha|t|}$, $\alpha \rightarrow +0$) невозмущенную ВФ $\Phi^{(0)} = \Psi(t_0)$ некоторого стационарного состояния в точную ВФ $\Psi(t)$ того же стационарного состояния к моменту времени t , $\Psi(t) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$.

Тогда амплитуда $M = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \langle \hat{U}(t, t_0) \Phi_{fq}^{(0)}(t_0) | \hat{V} | \hat{U}(t, t_0) \Phi_i^{(0)}(t_0) \rangle_{t=0}$ перехода $i_1 i_2 \rightarrow f_1 f_2 f_3 q$ в низшем неисчезающем порядке ТВ приобретает вид

$$M^{(1)} = \frac{-i}{4} N_i N_{fq} \sum_{klmn} \sum_{k_1 l_1 m_1 n_1} \langle kl|u|mn \rangle \langle k_1 l_1 | u | m_1 n_1 \rangle \times \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Phi_0 | T \{ a_{f_1}^+ a_{f_2}^+ a_{f_3}^+ a_q a_k^+(t) a_l^+(t) a_n(t) a_m(t) a_{k_1}^+ a_{l_1}^+ a_{m_1} a_{n_1} a_{i_1} a_{i_2} \} | \Phi_0 \rangle_{связн.} dt. \quad (6)$$

и представима в виде суммы 9-ти парциальных слагаемых вида

$$M_1^{(1)} = \sum_k \langle kq|u|f_2 f_3 \rangle \langle i_1 i_2 | u | f_1 k \rangle E_{kqf_2 f_3}^{-1} =$$

где $E_{klmn} = \varepsilon_k + \varepsilon_l - \varepsilon_m - \varepsilon_n$, ε - одноэлектронные ХФ энергии, $\langle kl|\hat{u}|mn \rangle = \langle kl|r_{12}^{-1}|mn \rangle - \langle kl|r_{12}^{-1}|nm \rangle$ есть разность прямого и обменного кулоновских интегралов. Суммирование в $M_n^{(1)}$ проводится по всем дырочным ($k \leq F$) и частичным ($k > F$) состояниям, подразумевая интегрирование по непрерывному спектру.

Основываясь на тензорных свойствах операторов рождения и уничтожения строятся ВФ определенного термина

$$\Psi_i = N_i \hat{U}(t, -\infty) [a_{n_{i_1}}^{l_{i_1} 1/2} \otimes a_{n_{i_2}}^{l_{i_2} 1/2}]^{L^S} |\Phi_0\rangle, \quad (7)$$

$$\Psi_{fq} = N_{fq} \hat{U}(t, +\infty) \left[\left[a_{n_{f_1}}^{l_{f_1} 1/2} \otimes a_{n_{f_2}}^{l_{f_2} 1/2} \right]^{L_{S_1}} \otimes a_{n_{f_3}}^{l_{f_3} 1/2} \right]^{L_{S_2}} \otimes (a^+)_{n_{f_3}}^{l_{f_3} 1/2} \Big]^{L_{S'}} |\Phi_0\rangle, \quad (8)$$

и соответствующие парциальные амплитуды вида

$$M_1^{(1)} = [L_1][L_2] \sum_{n_k} \sum_{l_1 l_2 l_k} (-1)^{L+L_1+l_{i_1}+l_{f_3}+l_2} \left\{ \begin{matrix} L & l_{f_1} & l_k \\ l_1 & l_{i_2} & l_{i_1} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & L_1 & l_2 \\ l_{f_3} & l_q & L_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & L_1 & l_2 \\ l_{f_2} & l_k & l_{f_1} \end{matrix} \right\} \delta_{LL'} \delta_{M_L M_L'} \times \\ \left(V_{kqf_2 f_3}^{(l_2)} [A \cdot V_{l_1 l_2 f_1 k}^{(l_1)} + (-1)^{-S} B \cdot W_{l_1 l_2 f_1 k}^{(l_1)}] + W_{kqf_2 f_3}^{(l_2)} [(-1)^{-S} A \cdot V_{l_1 l_2 f_1 k}^{(l_1)} + B \cdot W_{l_1 l_2 f_1 k}^{(l_1)}] \right) E_{kqf_2 f_3}^{-1}, \quad (9)$$

где радиальные интегралы V и W и угловые множители факторизованы. Условия, при которых последние отличны от нуля, задают правила отбора.

Изложена методика получения приближенных формул для сравнительно несложной оценки амплитуд и вероятностей многоэлектронных переходов в атомах на основе строгих /типа (10)/ выражений. Рассмотрены приближения

- *встряска*: $\Gamma \cong 2\pi \left| \langle i_1 i_2 | u | f_1 f_2 \rangle \right|^2 \left| \langle \tilde{q} | \tilde{f}_3 \rangle \right|^2$, где $\langle \tilde{q} | \tilde{f}_3 \rangle$ есть интеграл перекрывания ВФ \tilde{q} и \tilde{f}_3 , найденных в поле атома с вакансиями i_1, i_2 и f_1, f_2 , соответственно;
- *резонанс в непрерывном спектре*: $\Gamma \cong \Gamma_A^i \left| \pi \langle i_2 q | u | f_1 k_0 \rangle \right|^2$, где Γ_A^i - вероятность Оже-перехода $i_1 \rightarrow f_2 f_3 + k_0$,
- *резонанс в дискретном спектре*: $\Gamma \cong \Gamma_A^{\bar{k}} \left| \frac{\langle i_1 i_2 | u | f_1 \bar{k} \rangle}{\Delta \varepsilon + i \Gamma_{\bar{k}} / 2} \right|^2$, $\Delta \varepsilon$ - дефект резонанса, $\Gamma_A^{\bar{k}}$ - ширина промежуточного состояния \bar{k} относительно Оже-распада $\bar{k} \rightarrow f_2 f_3 + q$.
- *неортогональных орбиталей*: $\Gamma \cong \Gamma_A^{i_2} \left| \langle \tilde{i}_1 | \tilde{f}_1 \rangle \right|^2$, где $\Gamma_A^{i_2}$ - вероятность Оже-перехода $i_2 \rightarrow f_2 f_3 + e_q$, $\langle \tilde{i}_1 | \tilde{f}_1 \rangle$ - интеграл перекрывания ВФ \tilde{i}_1 и \tilde{f}_1 , рассчитанных в поле атома с вакансией i_2 и вакансиями f_2 и f_3 , соответственно;
- *кратной ионизации внешних оболочек*, $\Gamma^{l^n} = \frac{N-n}{N} (G_{L_{n+1} S_{n+1}}^{L_n S_n})^2 \Gamma$, для оценки вероятности вида перехода $s^{-2} l^n \rightarrow s^{-2} l^{n-1}$ в присутствии дополнительных n дырок во внешней подоболочке по вероятности Γ перехода $s^{-2} \rightarrow s^{-2} l^1$.

Приведена методика расчета энергии переходов, основанная на вычислении поправок ТВ к энергии состояний сложных конфигураций или на методе “перестройки”.

Обсуждается методика эффективного учета корреляций высших порядков, основанная на достижениях ПСФО при расчете сечений фотоионизации. Указано, выбором поля, в котором вычисляются базисные ХФ ВФ, можно учесть часть диаграмм ПСФО, формально оставаясь в рамках низшего порядка ТВ, рис.2.

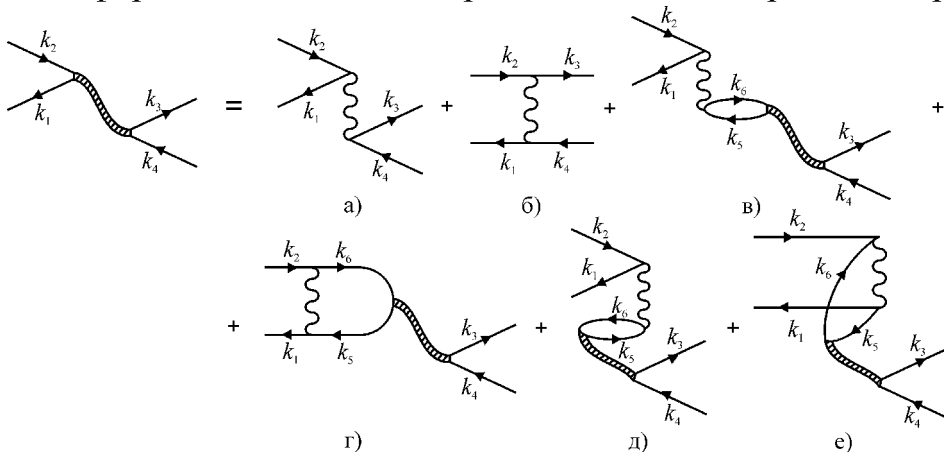
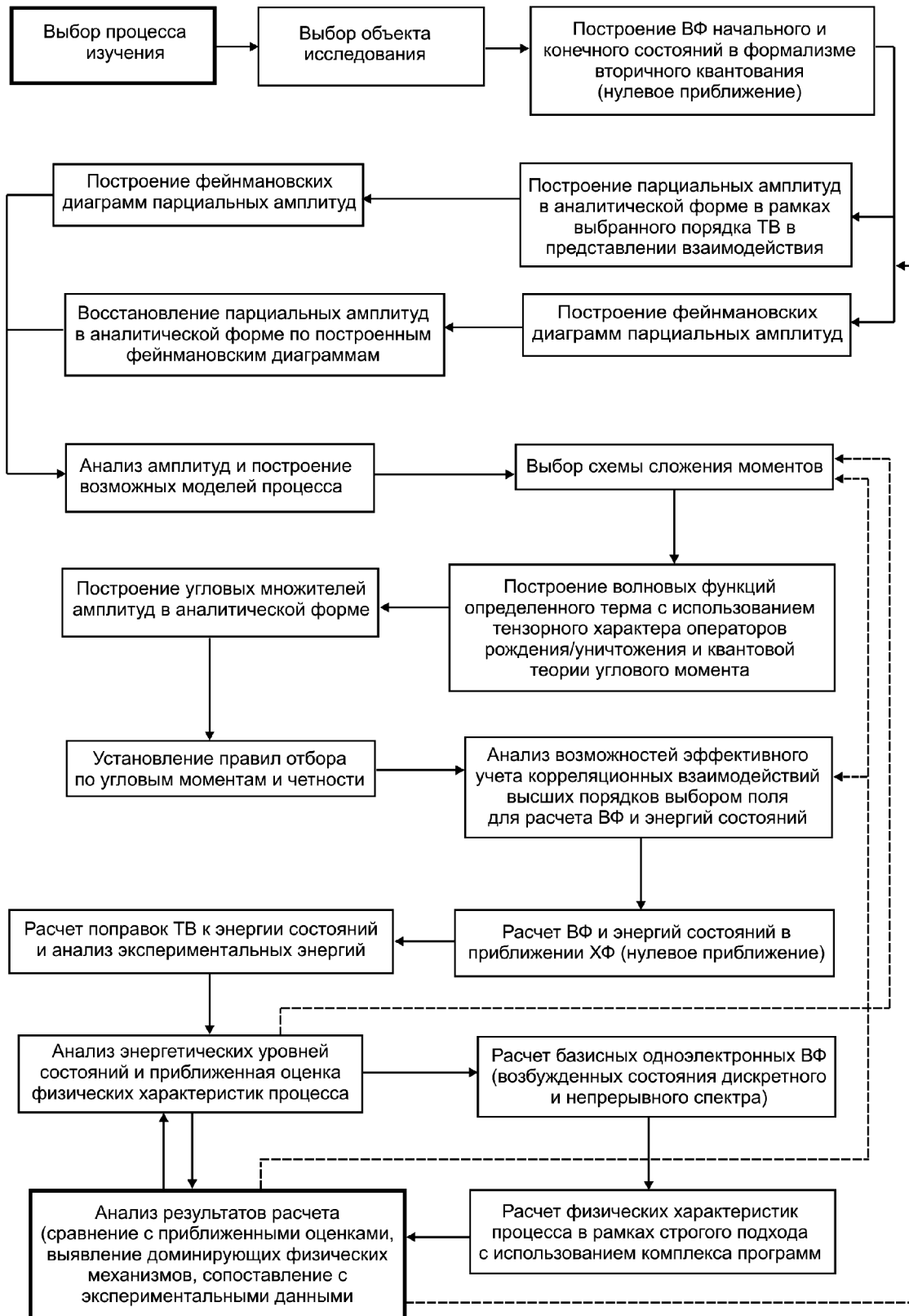


Рис.2. Графическое представление системы уравнений ПСФО для эффективного взаимодействия .

Структурно-функциональная схема теоретического описания многоэлектронных процессов



На основе перечисленных и других методов и приближений сформулирован методологический подход к построению теории многоэлектронных процессов в атомах с учетом корреляционных взаимодействий высших порядков. Применение подхода с использованием методов - построения строгих аналитических выражений для амплитуд переходов и поправок к энергии переходов между состояниями сложных электронных конфигураций; эффективного учета корреляций высших порядков выбором поля для расчета базисных ВФ и энергий; построения приближенных формул для количественной оценки вероятностей переходов и их качественного описания - позволяет единым образом решать широкий класс задач современной теоретической атомной физики. Реализация подхода обеспечена разработанным оригинальным комплексом программ для аналитических и численных расчетов характеристик многоэлектронных переходов.

В последующих главах под термином “построена теория” понимаются результаты, полученные в рамках методологического подхода главы 1 и выраженные в виде строгих, в рамках низшего исчезающего порядка ТВ, и приближенных формул для амплитуд и вероятности, сформулированных правил отбора и анализа физических механизмов изучаемого процесса. Расчет одноэлектронных энергий, ВФ и физических характеристик переходов выполнен с использованием пакета программ АТОМ и авторских программ.

Во второй главе представлены результаты теоретического исследования корреляционных безызлучательных процессов, сопровождаемых возбуждением на дискретные уровни или выбрасыванием электронов в непрерывный спектр.

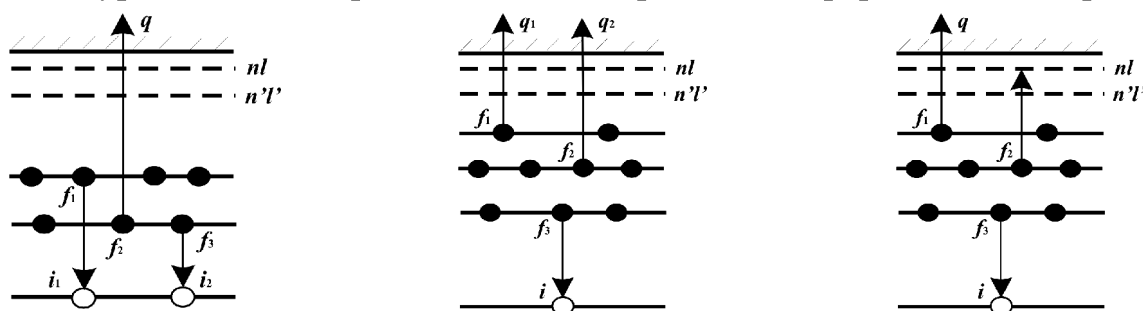


Рис. 3. Трехэлектронный и двойной Оже-эффект и сателлитный Оже-переход.

Рассмотрены *трехэлектронный* и *двойной* Оже-эффекты и *сателлитные* Оже-переходы. Эти процессы представляют интерес сами по себе, а также зачастую входят как второй или даже третий-четвертый “элементарный” этап множественной ионизации атома или ионизации в возбужденное состояние иона тем или иным возбуждающим полем, если справедлива каскадная модель ионизации/возбуждения.

Трехэлектронный Оже-эффект (ТЭО-эффект). В 60-е годы были обнаружены новые типы Оже-переходов, в которых принимают участие более двух электронов атома. Наблюдалось, что при столкновении ионов N^+ , N^{2+} , Ar^+ и Cl^+ с атомами Ar с высокой вероятностью образуются две $L_{2,3}$ ($2p$)- вакансии в Ar при дополнительной ионизации внешних оболочек. С подавляющей вероятностью эти две вакансии заполняются в результате двух обычных переходов $L - MM$, которым отвечают главные линии в области энергии ~ 180 эВ. Наряду с ними, были обнаружены пики

слабой интенсивности при энергии ~ 445 эВ, что примерно равно удвоенной энергии вакансии L . Единственная возможность объяснить появление этих линий в высокоэнергетической части спектра - предположить, что они обусловлены ТЭО-переходами вида LL - MMM . Измеренные отношения сечений $\sigma(LL - MMM)/\sigma(LL)$ лежат в интервале 10^{-3} - 10^{-4} , что дает оценку ширины ТЭО-переходов $\sim 10^{-3}$ - 10^{-5} эВ.

Для многоэлектронных атомов нами впервые построена теория ТЭО-переходов и выполнены расчеты всех возможных каналов ТЭО-распада двух $1s$ -вакансий в Ne и $2s$ вакансий в Ar . При энергии переходов $\varepsilon \sim 130$ Ry полная ширина состояния $1s^{-2}$ в Ne относительно ТЭО-распада составляет $\Gamma_A = 1.684 \times 10^{-4}$ эВ ($\sim 0.07\%$ полной ширины 0.23 эВ одиночной $1s$ вакансии), а $2s^{-2}$ в Ar - $\sim 5.5 \times 10^{-4}$ эВ при $\varepsilon \sim 45$ Ry, что вполне удовлетворительно согласуется с оценками, полученными в экспериментах и оценках других авторов. В Ar рассмотрен также переход $2p^{-2}[^1S] \rightarrow 3s^{-2}3p^{-1} q_p$ ($\varepsilon = 34.246$ Ry, $\Gamma_A = 0.371 \times 10^{-4}$ эВ). Прямого сравнения теории и эксперимента сделать нельзя по отмеченным выше условиям эксперимента.

Наряду с исследованными ТЭО-переходами высокой энергии (типичная ширина $\sim 10^{-4}$ эВ), теоретически *предсказаны* и изучены специфичные ТЭО-переходы с (а) “углублением” и (б) “встречным движением” вакансий, энергия которых сравнительно мала, а ширина $\sim 10^{-2}$ эВ сравнима с шириной Оже-переходов.



Рис. 4. ТЭО-переходы с “углублением” (а) и “встречным движением” (б) вакансий.

Представлены результаты изучения ТЭО-переходов $2p^{-2}[^1S, ^1D] \rightarrow 3s^{-2}[^1S] 2s^{-1}[^2S] + q_{s,d}$ в Ar с “углублением” вакансии, энергия и ширина которых составляют 9.626 Ry и 0.45×10^{-2} эВ для $[^1S]$ и 8.959 Ry 0.22×10^{-4} эВ для $[^1D]$. Установлено, что большая ширина первого из них обусловлена механизмом “встряски”, причем наиболее вероятно Оже-электрон “стряхивается” из внешней $3s$ -оболочки. Ширина перехода из состояния $2p^{-2}[^1D]$ мала из-за взаимной компенсации (интерференции) парциальных амплитуд - доминирующего механизма указать нельзя.

Механизм “встречного движения” вакансий изучен на примере 4-х переходов $3s^{-1}4p^{-1} [^1,3P] \rightarrow 4s^{-2}[^1S] 3d^{-1}[^2D] q_{p,d} [^1,3P]$ в Kr с энергиями $\varepsilon = 7.801$ Ry и $\varepsilon = 7.764$ Ry для синглета и триплета, соответственно, которые хорошо отделены от основных линий Оже-распада $3s$ -вакансии. Основные результаты расчета приведены в табл. 1, из которых видно “резонанс в континууме” является довольно хорошим приближением для оценки вероятности переходов (а), (в) и (г).

Таблица 1. Парциальные $M_\alpha^{(1)}$, полная амплитуда $M_{tot}^{(1)}$, вероятность Γ_A , энергия ε ТЭО-переходов в *Kr*. l_q - орбитальный момент Оже-электрона.

M_α ($10^{-3} \text{ Ry}^{1/2}$)	a)	б)	в)	г)
	$l_q=1$ $\varepsilon_q^{(1)}=7.801 \text{ Ry}$	$l_q=1$ $\varepsilon_q^{(1)}=7.764 \text{ Ry}$	$l_q=3$ $\varepsilon_q^{(1)}=7.801 \text{ Ry}$	$l_q=3$ $\varepsilon_q^{(1)}=7.764 \text{ Ry}$
$M_1^{(1)}$	0.656	-3.956	-2.209	0.575
$M_2^{(1)}$	0.711	-4.014	-2.350	0.601
$M_3^{(1)}$	-0.237	-0.082	-0.030	0.041
$M_4^{(1)}$	-3.416 - <i>i</i> 5.912	-1.718 - <i>i</i> 3.100	1.838+ <i>i</i> 6.155	-0.252+ <i>i</i> 3.251
$M_5^{(1)}$	-3.555 - <i>i</i> 6.153	-1.852 - <i>i</i> 3.278	1.902+ <i>i</i> 6.060	-0.336+ <i>i</i> 3.221
$M_6^{(1)}$	0.075 - <i>i</i> 0.121	0.312 - <i>i</i> 0.008	0.843 - <i>i</i> 0.236	-0.222+ <i>i</i> 0.069
$M_7^{(1)}$	0.796	1.127	-0.831	0.140
$M_8^{(1)}$	0.845	1.168	-0.849	0.162
$M_9^{(1)}$	-1.720	-3.337	-5.663	0.584
$M_{tot}^{(1)}$	-5.845 - <i>i</i> 12.186	-12.321 - <i>i</i> 6.386	-7.348+ <i>i</i> 11.979	1.293+ <i>i</i> 6.541
Γ_A (10^{-2} эВ)	1.562	1.646	1.694	0.380

Рассмотренные примеры ТЭО-переходов с “углублением” и “встречным движением” вакансий показывают, что распад возбужденных состояний ионов может происходить по нетривиальным траекториям. Установлено расчетами, что вероятность испускания низкоэнергетических электронов в ТЭО-переходах с “углублением” и “встречным движением” вакансий довольно велика (на порядок-два больше, чем в ТЭО-переходах со “всплыванием” вакансий) и сравнима с вероятностями обычных Оже-переходов. Вероятность ТЭО-переходов увеличивается с уменьшением энергии перехода, как это имеет место и при обычных Оже-распадах. Проанализированы вклады модельных приближений - резонанса в непрерывном и дискретном спектре, неортогональных орбиталей, встряски, на основании чего показано, что для некоторых ТЭО-переходов можно указать доминирующий физический механизм. Однако модельные приближения дают, в лучшем случае, лишь правильный порядок ширины перехода.

Двойной Оже-эффект (ДО-эффект). Процесс, в котором при распаде внутренней одиночной вакансии i испускаются совместно два электрона q_1 и q_2 , получил название ДО-эффекта. Таким образом, Оже-распад одной внутренней вакансии может привести к образованию трехкратного иона. Оценка ширины ДО-перехода в модели “встряски” дает лишь качественное согласие с экспериментом (заниженное количественно). Следует отметить, что ДО-эффект не является, вообще говоря, каскадом обычных Оже-переходов, в процессе которых внутренняя вакансия размножается и последовательно “всплывает” в наружные оболочки.

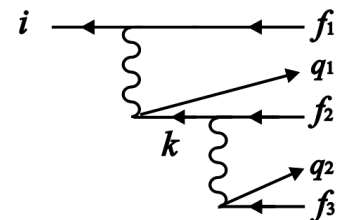


Рис. 5. Диаграмма ДО-перехода

В диссертации представлена построенная теория ДО-переходов и изучены конкретные переходы в *Ne* и *Kr*. Существенной особенностью ДО-переходов

является произвольное распределение энергии перехода $E_{q_1q_2} = E_i - E_f$ (E_i и E_f - энергии начального и конечного ионов) между двумя вылетающими электронами q_1 и q_2 . Поэтому ширина ДО-перехода $i \rightarrow f | f_2 + (q_1, q_2)$ есть интегральная характеристика

$$\Gamma = \int_0^{E_{q_1q_2}} \gamma(\varepsilon_{q_1}) d\varepsilon_{q_1} = \int_{E_{q_1q_2}}^0 \gamma(E_{q_1q_2} - \varepsilon_{q_2}) d\varepsilon_{q_2}, \quad (10)$$

где плотность вероятности $\gamma(\varepsilon)$ (функция распределения) равна

$$\gamma(\varepsilon) = 2\pi \sum_{l_{q_1} l_{q_2}} |M_{i,fq}|^2 \delta(E_i - E_f^{q_1q_2}) = 2\pi \sum_{l_{q_1} l_{q_2}} \left| \langle \Psi_f^{q_1q_2} | \hat{V} | \Psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_i - E_f^{q_1q_2}), \quad (11)$$

при том, что Оже-электроны, согласно установленным правилам отбора, могут иметь произвольно большие значения орбитального момента l_{q_1} и l_{q_2} .

Представлены результаты расчета и оценки энергетического спектра $\gamma(\varepsilon)$ электронов и вероятности ДО-переходов $1s^{-1}[^2S] \rightarrow 2s^{-2} 2p^{-1}[^2P] + (q_1q_2)$, $(l_{q_1}, l_{q_2}) = (l, l+1)$, $l=0,1,2,\dots$, $E_{q_1q_2} = 50.512$ Ry в Ne. ВФ Оже-электронов найдены в поле “замороженного” атомного остова $2s^{-2} 2p^{-1}[^2P]$. Каскадный механизм в этом переходе невозможен, поэтому $\gamma(\varepsilon)$ имеют характерный U-образный вид, свидетельствующий, что наиболее вероятным является такое распределение энергии перехода между двумя Оже-электронами, при котором один из них получает большую часть энергии, а другой оказывается медленным. Установлено, что в этом случае хорошим приближением является модель “встряски”, причем “стряхивание” медленного электрона q_s наиболее вероятно из $2s$ -оболочки, а q_p - из $2p$. Суммарная ширина указанных ДО-переходов составляет $0,342 \times 10^{-2}$ эВ, или $\sim 1.5\%$ от полной ширины $1s$ -вакансии (0.23 эВ). Модель “встряски” дает, как и для ТЭО-переходов, весьма заниженное (в ~ 3 раза) значение плотности вероятности по сравнению со строгим расчетом. Если примерно с той же вероятностью ДО-распад $1s$ -вакансии приводит к конфигурациям $2s^{-1}2p^{-2}$ и $2p^{-3}$, полная ширина $1s$ -вакансии в Ne относительно ДО-распада составляет $1,8 \times 10^{-2}$ эВ ($\sim 7\%$ полной ширины), что хорошо согласуется с экспериментальным значением $\sim 8-10\%$.

Исследование двойного Оже-распада $3d$ -вакансии в Kr мотивировано наблюдением новых флуоресцентных линий слабой интенсивности при облучении Kr фотонами с энергией 90-100 эВ (область возбуждения резонансов Kr I $3d^1 np$). Предположительно, линии связаны с переходами вида $4s^1 4p^4 \rightarrow 4s^2 4p^3$ в ионе Kr^{3+} , начальные состояния которых могут заселяться по двухступенчатой траектории тройной фотоионизации через ионизацию $3d$ -оболочки. Изучены пять каналов ДО-распада $3d$ -вакансии в Kr в состояния: (I) $4s^2 4p^3[^2D]$, (II) $4s^2 4p^3[^2P]$, (III) $4s^2 4p^3[^4S]$, (IV) $4s^1 4p^4[^2D]$, (V) $4s^1 4p^4[^4P]$ с довольно малыми энергиями переходов: $E_1 = 16.81$ эВ, $E_2 = 15.06$ эВ, $E_3 = 19.11$ эВ, $E_4 = 0.89$ эВ и $E_5 = 4.03$ эВ. Наиболее вероятными найдены каналы I и IV, в которых терм $[^2D]$ начального и конечного ионов совпадают, табл. 2. Далее идет II канал, в котором орбитальный момент иона-остатка изменяется на единицу, а спиновый момент сохраняется. Менее вероятны каналы III и V, приводящие к квартетным термам конечного иона $4p^3[^4S]$ и

$4s^1 4p^4 [^4P]$ с изменением моментов иона-остатка, из-за чего испускаются только триплетные пары Оже-электронов. Суммарная плотность вероятности $\gamma(\varepsilon)$, рис. 6, принимает наибольшее значение $\sim 13 \times 10^{-4}$ в низкоэнергетической части спектра, где суммируются симметричные U-образные плотности вероятности всех рассмотренных каналов.

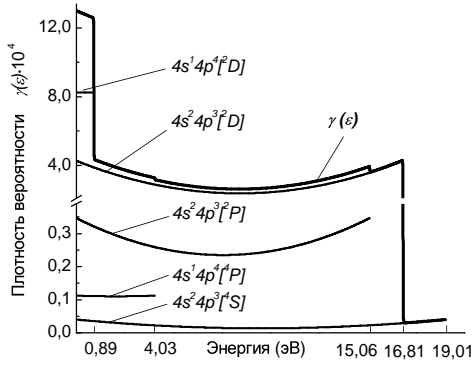


Рис. 6. *Kr*: Суммарная плотность вероятности $\gamma(\varepsilon)$ и ее составляющие.

Таблица 2. Энергия E и ширина $\Gamma^{L_{ic}S_{ic}}$ ДО-переходов в *Kr*.

	Конечный ион	E (эВ)	$\Gamma^{L_{ic}S_{ic}}$ (эВ)	η
I	$4s^2 4p^3 (^2D)$	16,81	$4,93 \cdot 10^{-3}$	80
IV	$4s^1 4p^4 (^2D)$	0,89	$7,34 \cdot 10^{-4}$	12
II	$4s^2 4p^3 (^2P)$	15,06	$4,02 \cdot 10^{-4}$	7
III	$4s^2 4p^3 (^4S)$	19,01	$4,15 \cdot 10^{-5}$	<1
V	$4s^1 4p^4 (^4P)$	4,03	$4,45 \cdot 10^{-5}$	<1
	$\Gamma = \sum_{L_{ic}S_{ic}} \Gamma^{L_{ic}S_{ic}}$		$6,15 \cdot 10^{-3}$	100

Сателлитные Оже-переходы схожи с ДО-переходами, однако в непрерывный спектр излучается лишь один электрон q , а второй возбуждается на дискретный уровень nl двукратного иона. Поскольку часть энергии перехода затрачивается на возбуждение электрона на уровень nl , кинетическая энергия Оже-электрона уменьшается на соответствующую величину, что приводит к появлению сателлитных линий в Оже-спектре. Здесь также возможно возбуждение/испускание электронов с неограниченно большими значениями орбитальных моментов l и l_q .

Изучены переходы $1s^{-1} \rightarrow 2s^{-2} 2p^{-1} nl + q$ ($nl=3s, 3p; \varepsilon \sim 52 \text{ Ry}$) в *Ne* и $3d^{-1} \rightarrow 4s^{-1} 4p^{-2} nl + q$ и $3d^{-1} \rightarrow 4p^{-3} nl + q$ ($n=1,2,\dots,9; l=0,1,2,3; \varepsilon \sim 2-35 \text{ эВ}$) в *Kr*.

Установлено, что вероятность переходов в *Ne* имеет порядок $10^{-4} - 10^{-5}$ эВ (как у ТЭО-распадов двух $1s$ -вакансий) и быстро убывает с ростом l и l_q . Доминирующим механизмом является “резонанс в непрерывном спектре” через Оже-распад $1s^{-1} \rightarrow 2s^{-2} k_0$ ($2s^{-1} 2p^{-1} k_0$) и последующее неупругое рассеяние промежуточного Оже-электрона k_0 на внешней оболочке с возбуждением второго электрона на дискретный уровень nl . Преобладание этого механизма уменьшается с ростом главного квантового числа n , так что при $n \rightarrow \infty$ доминирующей становится, как и в ДО-переходах, “встряска”.

Энергия указанных сателлитных переходов в *Kr* определена на основе экспериментальных данных, $\varepsilon_q = E_{3d^{-1}}^{(\text{exp})} - E_{ic,nl}^{(\text{exp})}$, или оценена следующим образом: $\varepsilon_q = E_{3d^{-1}}^{(\text{exp})} - (E_{ic,nl}^{(HF)} + \Delta)$, где $E_{ic,nl}^{(HF)}$ - полная ХФ энергия конечного состояния, поправка $\Delta = I_{ic}^{(\text{exp})} - I_{ic}^{(HF)}$ есть разность экспериментального и ХФ потенциалов тройной ионизации или $\Delta = E_{ic,n_0 l_0}^{(HF)} - E_{ic,n_0 l_0}^{(\text{exp})}$ для серии сателлитов с одинаковым l . Установлено,

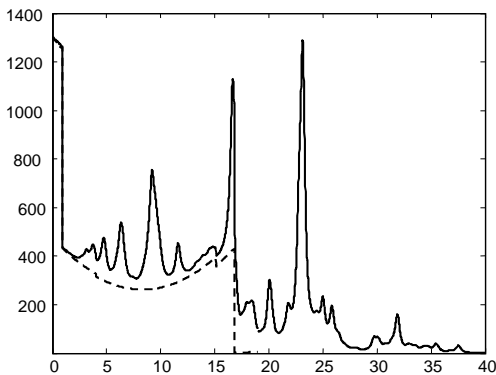


Рис. 7. Наложение дискретного спектра сателлитных Оже-переходов (рис. 3) и непрерывного спектра ДО-переходов (- -) при распаде $Kr II 3d^1$.

что, среди множества рассчитанных, наиболее вероятными являются переходы в состояния $4s^{-1}4p^{-2}[^2D] 4d[^1S]$ (462.430 мкэВ), $4p^{-3}[^2D] 4f[^1P]$ (785.580), $4p^{-3}[^2P] 4f[^1D]$ (131.121) и $4p^{-3}[^2D] 4f[^3P]$ (268.525).

На основе расчета ширины Γ_α и энергии ~ 450 сателлитных переходов и обсуждаемого выше ДО-распада $3d$ -вакансии в Kr построена модель низкоэнергетической части электронного спектра с использованием распределения Лоренца

$$\gamma_\alpha(\varepsilon) = \frac{2\Gamma_\alpha}{\pi} \frac{\sigma}{4(\varepsilon - \varepsilon_\alpha)^2 + \sigma^2}, \text{ рис. 7. Параметр } \sigma$$

может варьироваться в соответствии с разрешающей способностью эксперимента.

В третьей главе построена теория двойной автоионизации резонансно возбужденных состояний (рис. 8) и автоионизации двукратно возбужденных состояний (рис. 9). Автоионизационные процессы возможны при возбуждения дискретных резонансных состояний, лежащих выше порога однократной ионизации, а для двойной автоионизации требуется возбуждение резонансов выше порога двойной ионизации. Эти процессы представляют интерес сами по себе, а также зачастую входят как второй или даже третий-четвертый “элементарный” этап множественной ионизации атома или ионизации в возбужденное состояние иона.

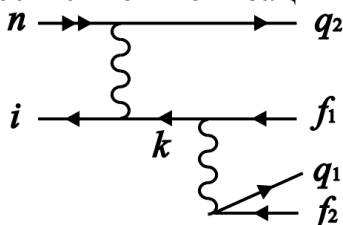


Рис. 8. Двойная автоионизация.

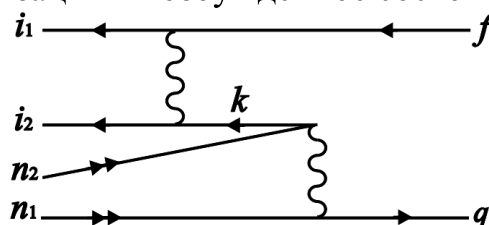


Рис. 9. Автоионизация двукратно возбужденного состояния

Двойная автоионизация резонансно возбужденных состояний по сути подобна ДО-переходам - испускаются два электрона, в принципе, с неограниченно большими значениями орбитальных моментов (l_1, l_2), энергия перехода произвольно распределяется между вылетающими электронами, а также имеет черты, характерные для “встречного движения” вакансий в ТЭО-переходах, если уничтожение электрона на дискретном уровне условно считать рождением дырки.

Представлены результаты изучения следующих каналов двойной автоионизации в Kr : (1) $3d^15p[^1P] \rightarrow 4s^{-2}[^1S] + (q_1q_2)$, (2) $3d^15p[^1P] \rightarrow 4s^{-1}4p^{-1}[^1P] + (q_1q_2)$ и (3) $3d^15p[^1P] \rightarrow 4s^{-1}4p^{-1}[^3P] + (q_1q_2)$. Показано, что переход (1) может быть только прямым и поэтому имеет исключительно корреляционную природу. Каналы (2) и (3) имеют, наряду с прямой, двухступенчатую траекторию через промежуточное состояние $4s^{-2}5p$. Выполнен строгий расчет ширины перечисленных каналов и построены каналные и суммарный электронные спектры, рис. 10.

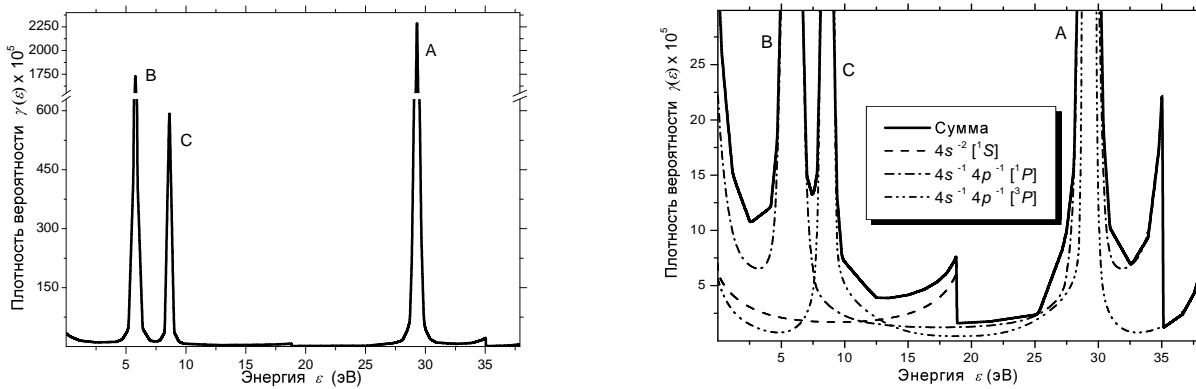


Рис. 10. Энергетический спектр электронов при двойной автоионизации резонанса $3d^1 5p[1P]$ в Kr .

Проанализированы вклады различных модельных механизмов переходов. Установлено, что даже при существовании каскадной траектории, вклад прямого механизма является существенным. Он не только заметно увеличивает ширину канала, но и меняет форму линий в электронном спектре благодаря интерференции амплитуд разных траекторий. Показана принципиальная возможность и достаточно большая вероятность заселения состояний $4s^{-2}[1S]$, $4s^{-1}4p^{-1}[1,3P]$ двукратного иона Kr после фотовозбуждения резонанса $KrI 3d^1 5p[1P]$. Результаты вычислений находятся в качественном и количественном согласии с экспериментальными данными.

Автоионизация двукратно возбужденных состояний (ДВС) может приводить к появлению структур в сечениях однократной ионизации. Энергии ДВС вполне

достаточно для ионизации субвалентной оболочки, что при резонансной энергии фотона открывает дополнительный (к традиционно рассматриваемому $A+\omega \rightarrow A^+ + e$) двухступенчатый канал $A+\omega \rightarrow A^{**} \rightarrow A^+ + e$ ее ФИ и приводит к появлению структур в припороговой области сечений ФИ, рис 11. Выявлена принципиальная возможность заселения таких состояний при энергии фотовозбуждения несколько выше порога ионизации субвалентной оболочки, так что автоионизация ДВС может рассматриваться как вторая и исключительно корреляционная ступень ФИ.

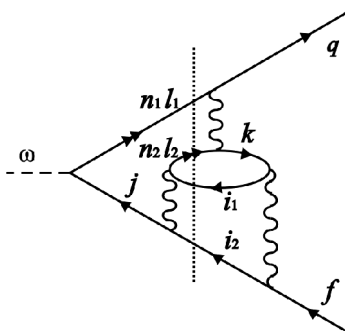


Рис. 11. Диаграмма автоионизации ДВС.

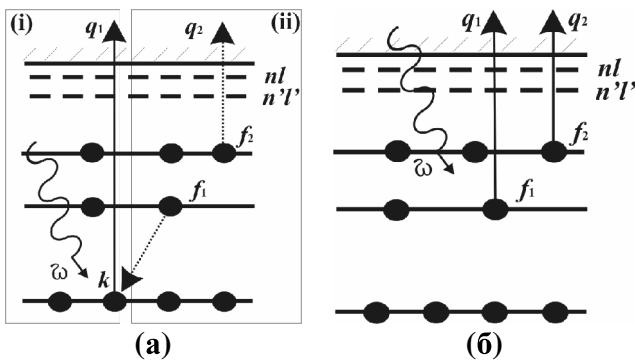
Впервые отмечено, что при автоионизационных распадах ДВС реализуется механизм предсказанного нами ранее “углубления” вакансии, если переход электронов $n_1 l_1$ и $n_2 l_2$ с дискретных уровней условно рассматривать как рождение соответствующих дырок во “внешних” оболочках.

Представлены результаты теоретического изучения автоионизационных переходов $3p^{-2}[L_i S_i] n_1 l_1 [L_1 S_1] n_2 l_2 [L_2 S_2] \rightarrow 3s^{-1} + q$ в атоме Ar . Энергии переходов рассчитаны или оценены с привлечением экспериментальных данных и составляют $\sim 0.5-9.0$ эВ. Показано, что в каждой серии переходов наиболее вероятными ($\sim 10^{-2}$

эВ) являются переходы из ДВС с меньшими значениями главных квантовых чисел n_1 и n_2 и что вероятность автоионизационного распада триплетных двукратно возбужденных состояний значительно меньше, чем синглетных.

В четвертой главе развита теория двойной и тройной фотоионизации атома. Множественная ионизация атома одним фотоном является следствием межэлектронных взаимодействий. В случаях, когда фотон способен ионизовать субвалентную или внутреннюю оболочку атома, множественную фотоионизацию можно успешно моделировать многоступенчатым процессом, рис. 12а.

Двойная фотоионизация (ДФИ). Впервые построены с использованием ХФ потенциалов $V^{(N-1)}$ и $V^{(N-2)}$ компонентные, каналные и полные сечения



(дифференциальные и абсолютные) прямой ДФИ внешних оболочек атома Ne с учетом обоснованно широкого набора фотоэлектронных пар, рис.13. Установлен характер положения $V^{(N-1)}$ -и $V^{(N-2)}$ -сечений ДФИ в форме длины (σ_L^{++}) и скорости (σ_V^{++}) относительно друг

Рис. 12. Двухступенчатая (а) и прямая (б) ДФИ. друга и экспериментальных данных в зависимости от энергии ионизирующих фотонов. Определены области энергии фотона, где потенциалы дают удовлетворительное согласие с экспериментом.

На основе анализа полученных результатов предположено существование такого значения параметра q , $1 < q < 2$, что вычисленные с использованием модифицированного ХФ потенциала $V^{(N-q)}$ -сечения будут лучше соответствовать экспериментальным данным.

Разработан неэмпирический однопараметрический метод построения сечений ДФИ, приводящий к практическому равенству форм длины и скорости независимо от энергии ионизирующего излучения при удовлетворении сформулированному физически обоснованному вариационному (по параметру q в ХФ потенциале $V^{(N-q)}$) критерию минимума разности форм сечений. Построением $V^{(N-q)}$ -сечений ДФИ внешних оболочек Ne показана выполнимость сформулированного критерия и найдены решения $q=q_{min}$ вариационной задачи для каждой компоненты сечения.

Критерий интегрального вида

$$\delta_q F(ic, ee, q) = \delta_q \int_{I_{ic}^{++}}^{\omega_{max}} [\sigma_L^{++}(\omega, ic, ee, q) - \sigma_V^{++}(\omega, ic, ee, q)]^2 d\omega = 0 \quad (12)$$

привел к значительному сближению σ_L^{++} и σ_V^{++} , а дифференциального вида

$$\delta_q [\sigma_L^{++}(\omega, ic, ee, q(\omega)) - \sigma_V^{++}(\omega, ic, ee, q(\omega))]^2 = 0 \quad (13)$$

к практическому равенству $\sigma_L^{++} = \sigma_V^{++}$ при наилучшем из представленных в литературе согласии рассчитанных $V^{(N-q)}$ -сечений с экспериментальными данными, рис 14. Выявлен физический смысл параметра q_{min} как величины, регулирующей в расчете

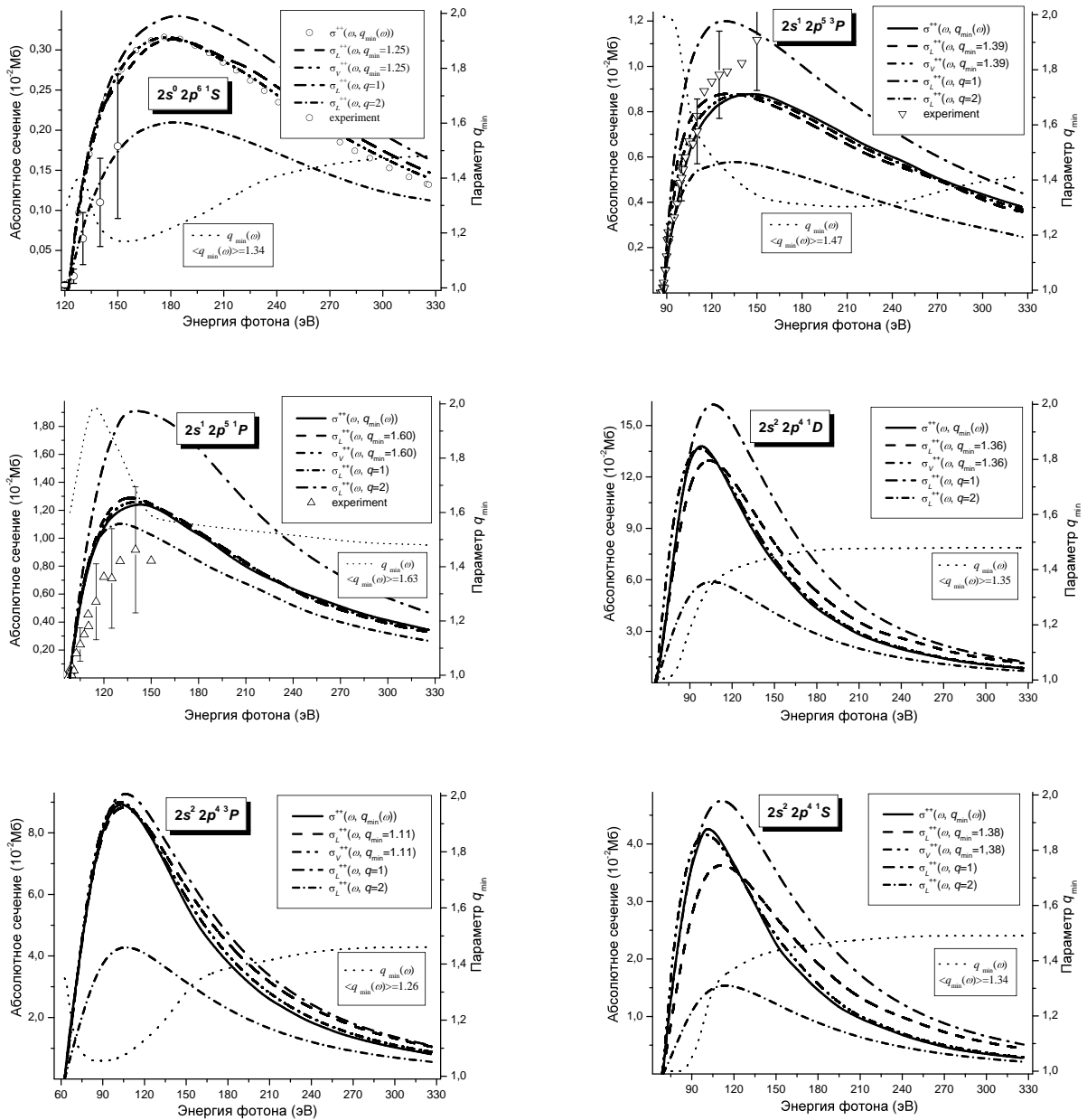


Рис. 13. Вычисленные и экспериментальные сечения ДФИ неона.

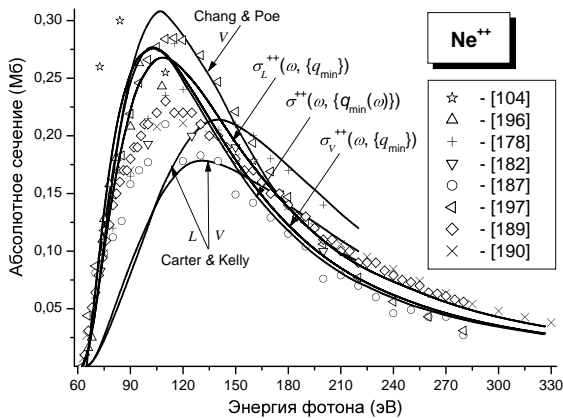


Рис. 14. Рассчитанные и экспериментальные полные сечения ЛФИ неона.

экранировку поля иона-остатка фотоэлектронами. Установлено его асимптотическое значение $q_{as} \approx 3/2$, соответствующее выводу о наиболее вероятном испускании одного медленного, а другого – быстрого электрона при прямой ДФИ. Достигнутое равенство форм сечений ДФИ указывает на эффективный учет корреляций высших порядков, подобных учитываемым при расчете сечений однократной ФИ в ПСФО.

Тройная фотоионизация (ТФИ). Непосредственная, или прямая ТФИ атома одним фотоном является довольно сложным корреляционным процессом, рис. 15.

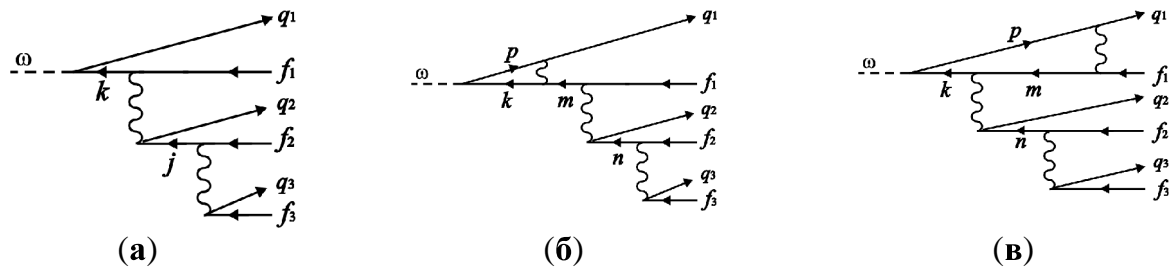


Рис. 15. Пример фейнмановских диаграмм (а) первого и (б), (в) второго неисчезающего порядков ТВ, описывающих ТФИ.

Энергия $\varepsilon_{123} = \omega - I^{3+}$ ТФИ-перехода распределяется непрерывно между тремя вылетающими электронами q_1 , q_2 и q_3 , которые могут иметь произвольно большие орбитальные моменты. Абсолютное сечение ТФИ есть тройной интеграл вида:

$$\sigma^{3+}(\omega) = \frac{4\pi^2}{\omega c} \int \sum |M(\tau, \omega, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3)|^2 \delta(\omega - I^{3+} - \varepsilon_{123}) d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 d\varepsilon_3 \quad (14)$$

Вычисление вкладов всех диаграмм вида рис. 15 является достаточно трудной и не решенной до сих пор задачей. В диссертации представлено изучение частного случая ТФИ, когда процесс может рассматриваться, на основе методики гл. 1, как двухступенчатый. Такая ситуация возможна, например в Kr , при энергии фотонов в области порога ионизации $3d$ -оболочки (90-100 эВ). Именно в этом случае наблюдались флуоресцентные линии, предположительно соответствующие переходам между конфигурациями $4s^{-1}4p^{-2}$ и $4p^{-3}$ в Kr^{3+} . При справедливости двухступенчатой модели один из трех фотоэлектронов имеет фиксированную энергию $\varepsilon_1 = \omega - I_{3d}$, а оставшаяся энергия $\varepsilon_{23} = I_{3d} - I_{4s4p^2} = 4.032$ эВ распределяется между другими двумя произвольным образом в ДО-переходе $3d^1 \rightarrow 4s^{-1}4p^{-2} + (q_1, q_2)$. Для такого случая на основе (14) и методики гл. 1 получена оценка абсолютного сечения ТФИ в виде:

$$\sigma_{4s^{-1}4p^{-2}}^{3+}(\omega) \cong \sigma_{3d^{-1}}^+(\omega) \frac{\Gamma_{3d}^{(ДО)}}{\Gamma_{3d}}, \quad (15)$$

где $\sigma_{3d^{-1}}^+(\omega)$ есть сечение ФИ $3d$ -оболочки, а $\Gamma_{3d}^{(ДО)}$ - ширина ДО-перехода $3d^1 \rightarrow 4s^{-1}4p^{-2} + (q_1, q_2)$.

Таблица 4. Оценка $\sigma_{4s^{-1}4p^{-2}}^{3+}(\omega)$ при различных энергиях возбуждающего фотона.

Переход	λ (нм)	Сечение ТФИ (10^{-2}) Мб					
		$\omega=90$ эВ		$\omega=94$ эВ		$\omega=100$ эВ	
$4s^{-1}4p^{-2} \rightarrow 4p^{-3}$		эсп.	теор.	эсп.	теор.	эсп.	теор.
${}^4P_{5/2} \rightarrow {}^4S_{3/2}$	84.204	0.038	-	0.24	0.018	0.33	0.025
${}^4P_{3/2} \rightarrow {}^4S_{3/2}$	81.682	0.0	0.0	0.16	0.012	0.23	0.017
${}^4P_{1/2} \rightarrow {}^4S_{3/2}$	80.572	-	0.0	-	0.006	-	0.008
${}^2D_{3/2} \rightarrow {}^2D_{3/2}$	77.678	0.0	-	0.10	-	0.27	-
${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$	69.974	0.0	-	0.0	-	0.0	-

Показано, что сечение ТФИ-перехода в состояние $KrIV\ 4s^{-1}4p^{-2}\ [^4P]$, оцененное в рамках указанной модели, табл. 4, недостаточно велико, чтобы объяснить наблюдаемые методом ФИФС интенсивности новых линий. Это не означает, однако, что заселение состояний $KrIV\ 4s^{-1}4p^{-2}\ [^4P]$ не может происходить посредством ТФИ, включая и рассмотренный канал. Напротив, этот факт скорее свидетельствует о необходимости более полно, чем в представленной модели, учитывать корреляционные взаимодействия в сложных многоэлектронных процессах, поскольку роль корреляционных взаимодействий *высших порядков* ТВ при множественной ионизации атома является значительной, если не определяющей, даже в присутствии промежуточных состояний, обеспечивающих каскадный механизм процесса.

В пятой главе представлено теоретическое обоснование идентификации новых линий, наблюдаемых во флуоресцентных спектрах после облучения нейтрального атома фотонами с энергией возбуждения резонансов $KrI\ 3d^1\ np$ (90-100 эВ). Анализ интенсивности и энергетического положения линий привел к предположению о соответствии этих линий переходам $4p^{-3}\ 5d/6s \rightarrow 4p^{-2}$ в Kr^{++} . Однако известно, что сечение прямой ДФИ атома с возбуждением 3-го электрона на дискретный уровень nl крайне мало.

Нами были выявлены нетривиальные многоступенчатые каналы заселения состояний $KrIII\ 4p^{-3}\ nl$ типа $KrI + \omega \rightarrow KrI\ 3d^1\ np \rightarrow KrIII\ 4p^{-3}\ np \rightarrow KrIII\ 4p^{-3}\ n's/d$, включающие радиационные и безызлучательные переходы, рис. 16.

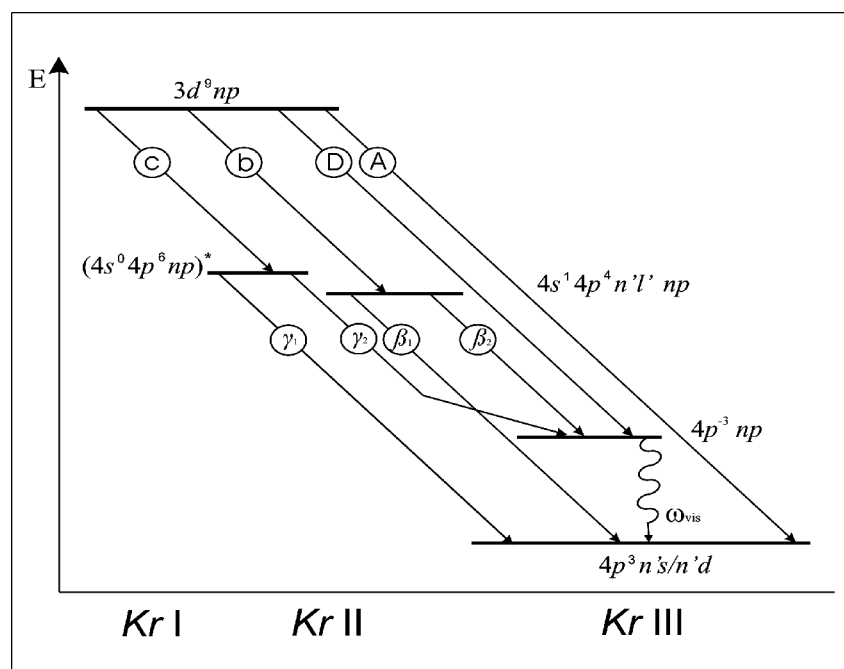


Рис. 16. Каналы заселения состояний $KrIII\ 4p^{-3}\ nl$.

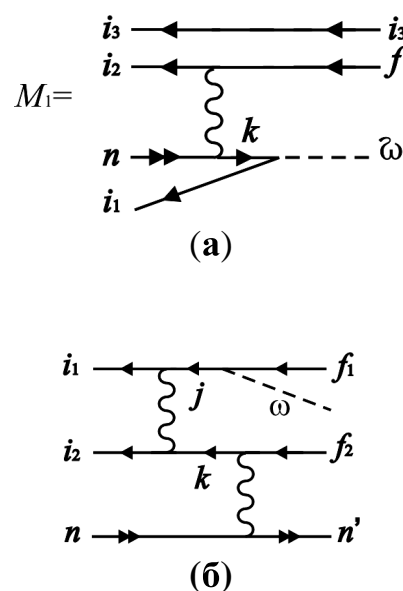


Рис. 17. Двухэлектронные (а) и трехэлектронные (б) радиационные переходы.

При их теоретическом исследовании впервые *предсказаны двухэлектронные и трехэлектронные* (рис. 17а,б) радиационные переходы между возбужденными ионными состояниями, построена их теория и рассчитаны физические характеристики или сделана их оценка.

Двухэлектронные радиационные переходы. Показано, что при расчете полной радиационной ширины состояний типа $KrIII\ 4p^{-3}\ nl$ должны быть приняты во внимание, наряду с переходами $KrIII\ 4p^{-3}\ nl \rightarrow KrIII\ 4p^{-3}\ n'l'$ и $KrIII\ 4p^{-3}\ nl \rightarrow KrIII\ 4p^{-2}$, нетривиальные корреляционные переходы типа $KrIII\ 4p^{-3}\ nl \rightarrow KrIII\ 4s^{-1}4p^{-1}$, в которых реализуется предсказанный нами ранее механизм “углубления” вакансий. Построена теория корреляционных переходов и рассчитаны указанные переходы с $nl=5p, 6p$ и $n'l'=5s, 6s, 4d, 5d$ между состояниями всех возможных термов. Установлено, что (i) относительная ширина корреляционного перехода $KrIII\ 4p^{-3}\ np \rightarrow KrIII\ 4s^{-1}4p^{-1}$ может, в отдельных случаях, достигать $\sim 50\%$ от полной радиационной ширины начального состояния; (ii) ширина корреляционных переходов $4p^{-3}\ 6p \rightarrow 4s^{-1}4p^{-1}$ больше ширины переходов из $4p^{-3}\ 5p$, в основном, из-за больших энергий фотона.

Трехэлектронные радиационные (ТЭР) переходы. Построена теория корреляционных ТЭР-переходов вида $ms^{-2}nl \rightarrow kp^{-2}\ n'l'$, в которых непосредственное участие возбужденного электрона разрешает близкие по энергии запрещенные переходы вида $ms^{-2}\ nl \rightarrow kp^{-2}\ nl$ или $ms^{-2} \rightarrow kp^{-2}$. Поскольку полный расчет амплитуды такого процесса (рис. 14б, одна из диаграмм) представляет значительные трудности, выполнена только оценка вероятности переходов такого типа, а именно, ТЭР-переходов $4s^{-2}np \rightarrow 4p^{-2}n'l'$ в Kr ($n'l' = n's, n'd$, включая случай $n=n'$), табл. 5, на основе приближений гл. 1 диссертации.

Таблица 5. Энергия ω (эВ) и ширина ТЭР-переходов $4s^{-2}\ np \rightarrow 4p^{-2}\ n's/d$ в Kr .

$4p^{-2}[L_f S_f] n'l'[LS]$	$4s^{-2}\ 5p$		$4s^{-2}\ 6p$	
	ω (эВ)	$\Gamma_{ТЭР}$ (10^{-7} эВ)	ω (эВ)	$\Gamma_{ТЭР}$ (10^{-7} эВ)
$[^1S] 5s\ [^2S]$	30.07	0.57	37.72	0.07
$6s\ [^2S]$	27.76	0.07	31.41	0.09
$4d\ [^2D]$	26.82	0.49	30.48	0.06
$5d\ [^2D]$	23.05	0.12	26.50	0.04
$[^1D] 5s\ [^2D]$	32.32	3.45	35.96	0.51
$6s\ [^2D]$	26.22	0.37	30.65	0.71
$4d\ [^2S]$	29.30	0.58	32.95	0.08
$4d\ [^2P]$	29.30	0.91	32.95	0.10
$4d\ [^2D]$	29.30	1.17	33.21	0.13
$5d\ [^2S]$	26.15	0.21	29.85	0.07
$5d\ [^2P]$	26.15	0.24	29.85	0.13
$5d\ [^2D]$	26.15	0.33	29.85	0.09

Установлено, что наиболее вероятными переходами являются те, в которых возбужденный электрон не меняет своего главного квантового числа, но уменьшает свой орбитальный момент; или в которых главное квантовое число уменьшается, а орбитальный момент увеличивается. Вероятность переходов в конечные состояния терма $[^2D]$ больше благодаря их большему статистическому весу. Вероятность переходов из состояния $4s^{-2}\ 6p$ примерно на порядок меньше, чем из $4s^{-2}\ 5p$, хотя наиболее вероятные из них вполне конкурируют с некоторыми из группы $4s^{-2}\ 5p$. Ширина ТЭР-переходов того же порядка величины, что и у исследованных нами

ранее и наблюдаемых радиационных сателлитных переходов и однофотонных распадов двухдырочных состояний. Поэтому их экспериментальное наблюдение ТЭР-переходов вполне возможно.

Обоснование идентификации новых линий выполнено на основе общего анализа возможных каналов заселения флуоресцентных состояний конфигурации $KrIII\ 4p^{-3}\ n'l'$ после возбуждения $KrI + \gamma \rightarrow KrI\ 3d^1np$ резонансов и расчета их ширины. Установлено, что заселение проходит по двум видам многоступенчатых траекторий: (1) посредством последовательности безызлучательных переходов и (2) по двухступенчатым траекториям, объединяющим безызлучательные и радиационные переходы, рис 13, описание которых представлено в главах 2, 3 и 5 диссертации.

На основе методики гл. 1 диссертации получены приближенные формулы для оценки ширины выявленных каналов:

$$\Gamma(b + \beta_1) = \Gamma^{(b)} \frac{\Gamma^{(\beta_1)}}{\Gamma_{tot}}, \quad (16)$$

$$\Gamma(b + \beta_2) = \Gamma^{(b)} \frac{\Gamma^{(\beta_2)}}{\Gamma_{tot}} \cong \Gamma^{(b)} \frac{\Gamma_{tot} - \Gamma^{(\beta_1)}}{\Gamma_{tot}}, \quad (17)$$

$$\Gamma(c + \gamma_2) = \Gamma^{(c)} \frac{\Gamma^{(\gamma_2)}}{\Gamma_{tot}}, \quad (18)$$

где $\Gamma^{(b)}$, $\Gamma^{(c)}$ и $\Gamma^{(\beta)}$ – парциальная ширина переходов (b), (c) и (β), соответственно, Γ_{tot} есть полная ширина промежуточного состояния.

Расчетами установлено, что ширина не прямых безызлучательных каналов примерно одного порядка величины. В зависимости от квантовых чисел np и $n'l'$, а также от LS -терма конечного состояния, ширина переходов составляет от 10^{-4} эВ до 10^{-6} эВ. Дополнительно установлено, что при заселении флуоресцентных состояний $KrIII\ 4p^{-3}\ n'l'$ из $KrI\ 3d^1np$ резонансов по двухступенчатым “траекториям” происходит излучение фотонов в видимом диапазоне длин волн и испускание низкоэнергетических электронов, возможное экспериментальное наблюдение которых обосновано расчетом ширины соответствующих переходов.

На основании проведенного теоретического исследования, а также имеющихся литературных данных по сечениям возбуждения, полной ширине промежуточных состояний и энергиям уровней в $KrIII$ новые линии идентифицированы с переходами вида $KrIII\ 4p^{-3}6s/5d \rightarrow KrIII\ 4p^{-2}$ при хорошем согласии рассчитанных характеристик и экспериментальных данных, табл. 5.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработан методологический подход к построению теории многоэлектронных переходов в атомах между состояниями сложных электронных конфигураций, включающий:

- методику построения аналитических выражений для амплитуд, вероятностей и энергий переходов с учетом корреляционных взаимодействий по теории возмущений в формализме вторичного квантования и квантовой теории углового момента;
- методику эффективного учета корреляционных взаимодействий высших порядков;
- методику получения приближенных формул для количественной оценки вероятности процессов, способствующих выявлению физических механизмов многоэлектронных переходов;
- разработанный оригинальный комплекс программ для аналитических и численных расчетов характеристик переходов указанных видов.

В подходе применяются известные теоретические методы и приближения, набор и оптимальное взаимное согласование которых обусловлены спецификой и классом решаемых задач.

2. В рамках разработанного методологического подхода построена теория следующих многоэлектронных корреляционных процессов:

- трехэлектронного Оже-эффекта;
- двойного Оже-эффекта;
- сателлитных Оже-переходов;
- двойной автоионизации возбужденных состояний;
- автоионизации двукратно возбужденных состояний;
- двухэлектронных радиационных переходов;
- трехэлектронных радиационных переходов;
- двойной фотоионизации;
- тройной фотоионизации,

выраженная в виде строгих (в рамках низшего исчезающего порядка ТВ) и приближенных формул для амплитуд и вероятностей переходов и формулируемых правил отбора.

3. Предсказаны и теоретически описаны:

- трехэлектронные Оже-переходы, в которых реализуются нетривиальные механизмы “углубления” и “встречного движения” вакансий. Показано, что энергия таких переходов существенно меньше, а вероятность - существенно больше соответствующих параметров традиционно рассматриваемых переходов со “всплыванием вакансий”. Существование переходов с “углублением” и “встречным движением” вакансий подтверждено экспериментально,

- двухэлектронные дипольные переходы вида $mp^{-3}nl \rightarrow ms^{-1}mp^{-2}$, в которых реализуется корреляционный механизм “углубления” вакансии (соответствующие линии наблюдаются экспериментально),
 - трехэлектронные дипольные переходы вида $ms^{-2}nl \rightarrow kp^{-2}n'l'$, в которых непосредственное участие возбужденного электрона разрешает близкие по энергии запрещенные переходы вида $ms^{-2}nl \rightarrow kp^{-2}nl$ или $ms^{-2} \rightarrow kp^{-2}$.
4. На основе построенной теории получены значения физических характеристик – квантовые числа состояний, энергии, вероятности, сечения – для перечисленных в п.2 корреляционных процессов в атомах *Ne*, *Ar* и *Kr*. Выявлены на качественном и описаны на количественном уровне модельные физические механизмы этих процессов. Обоснована расчетом физических характеристик возможность экспериментального наблюдения предсказанных переходов п.3. Показана значимость учета корреляционных взаимодействий для корректного качественного и количественного описания многоэлектронных процессов в атомах.
 5. Дано теоретическое описание экспериментально наблюдаемого эффекта заселения и последующего флуоресцентного распада возбужденных состояний двукратных ионов при облучении атомов фотонами с энергией автоионизирующих резонансов нейтрального атома, подтвержденное численными расчетами сечений заселения и распада состояний типа *Kr*III $4p^{-3}nl$ при хорошем согласии рассчитанных величин и экспериментальных данных. Установлена иерархия (временная и вероятностная) корреляционных физических процессов, ответственных за такого вида двукратную ионизацию *Kr* с возбуждением третьего электрона на дискретный уровень при энергиях фотовозбуждения в диапазоне 90 - 100 эВ.
 6. Впервые построены компонентные, каналные и полные сечения (дифференциальные и абсолютные) двойной фотоионизации (ДФИ) внешних оболочек *Ne* с учетом обоснованно широкого спектра фотоэлектронных компонент (e_1, e_2) с использованием ХФ потенциалов $V^{(N-1)}$ и $V^{(N-2)}$. Установлен характер положения $V^{(N-1)}$ -и $V^{(N-2)}$ -сечений ДФИ в форме длины и скорости относительно друг друга и экспериментальных данных в зависимости от энергии ионизирующих фотонов. А именно - $V^{(N-1)}$ -сечения практически вдвое больше $V^{(N-2)}$ -сечений в области их максимумов; сечения в форме скорости расположены между сечениями в форме длины; все вычисленные сечения лишь качественно соответствуют экспериментальными данным. Определены области удовлетворительной применимости упомянутых потенциалов.
 7. Разработан неэмпирический однопараметрический метод построения сечений ДФИ, равных в форме длины и скорости независимо от энергии ионизирующего излучения. Сформулирован физически обоснованный вариационный (по параметру q в ХФ потенциале $V^{(N-q)}$) критерий минимума разности форм сечений в интегральном и дифференциальном виде. Выявлен

физический смысл параметра q как величины, регулирующей экранировку поля иона-остатка фотоэлектронами.

- Итерационным построением $V^{(N-q)}$ -сечений ДФИ внешних оболочек Ne показана выполнимость сформулированного критерия и найдены решения $q=q_{\min}$ вариационной задачи для каждой компоненты сечения. Установлено существенное сближение форм сечений при наложении критерия интегрального вида и их практическое равенство для критерия дифференциального вида. На основании достигнутого равенства предположено, но не показано строго, что в разработанном методе эффективно учитывается класс корреляций высших порядков, подобный учитываемому в приближении случайных фаз с обменом при расчете сечений однократной ФИ. Отклонение построенных $V^{(N-q)}$ -сечений от экспериментальных не превосходит 20% в области наилучшего согласия.

Основные результаты работы изложены в публикациях

- Амусья М.Я., Килин В.А., Ли И.С. Сдвоенный Оже-распад двух К-вакансий в Ne // ЖТФ. – 1984. - Т. 54. - С. 990–992.
- Амусья М.Я., Килин В.А., Ли И.С., Колесникова А.Н. Углубление вакансии в корреляционных распадах двухдырочных состояний атомов // Письма в ЖТФ. – 1984. - Т. 10. - С. 1029–1033.
- Амусья М.Я., Килин В.А., Ли И.С. Трехэлектронный Оже-распад в атомах // Оптика и спектроскопия. – 1985. - Т. 59. - С. 261–264.
- Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Килин В.А., Ли И.С. Программа вычисления вероятности сдвоенного Оже-распада. // Препринт ЛФТИ им. А.Ф. Иоффе. – 1985. - Ленинград. – 26 с.
- Амусья М.Я., Килин В.А., Ли И.С., Колесникова А.Н. Встречное движение вакансий при корреляционных распадах двухдырочных состояний // Письма в ЖТФ – 1985. - Т. 11. - С. 343–346.
- Амусья М.Я., Килин В.А., Ли И.С., Колесникова А.Н. Низкоэнергетические корреляционные сателлиты в атомах с двумя вакансиями // ЖТФ. – 1987. – Т. 57. - С. 1246–1254.
- Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Килин В.А., Ли И.С., Колесникова А.Н. Программа вычисления вероятности однофотонного распада двухдырочных состояний // Препринт ЛФТИ им. А.Ф. Иоффе. – 1986. – Ленинград. – 30 с.
- Килин В.А., Ли И.С. Двойной Оже-распад в рамках МТВ // Известия ВУЗов. Физика. – 1989. - Т. 7 - С. 78–82.
- Килин В.А., Ли И.С., Ли О.В. Угловое распределение электронов при двойном Оже-распаде // ЖТФ. – 1991. – Т. 61. - № 2. - С. 40–45.
- Лазарев Д.А., Лазарев Дм.А., Килин В.А., Зеличенко В.М. Автоматизация работы с объектами квантовой теории углового момента // Вестник ТГПУ. – 1998. - № 6. – С. 34–40.

11. Килин В.А. Зависимость вероятности сдвоенного Оже-эффекта от степени ионизации внешних оболочек // Деп. в ВИНТИ. – 1998. - 01.04.98. № 974–В98.
12. Зеличенко В.М., Килин В.А., Конев В.В., Корюкина Е.В. Сравнение аналитического и численного методов в приложении к расчету возбужденных состояний атомов // Известия ВУЗов. Физика. – 1998. – № 7. – С. 120–128.
13. Килин В.А. Методика расчета амплитуд и вероятностей переходов в атомах с учетом корреляций в рамках многочастичной нестационарной теории возмущений // Известия Томского политехнического университета. – 2004. – Т. 307. - № 6. – С. 5–12.
14. Килин В.А., Килин Р.Ю. Оценка амплитуд и вероятностей многоэлектронных переходов в атомах на основе многочастичной теории возмущений // Известия Томского политехнического университета. – 2004. – Т. 307. - № 7. – С. 7–15.
15. Amusia M.Ya., Lee I.S. and Kilin V.A. Double Auger decay in atoms: Probability and angular distribution // Phys. Rev. A. – 1992. – V. 45. – P. 4576–4587.
16. Amusia M.Ya., Lee I.S. and Kilin V.A. Decay of an electron-vacancy excitation in the presence of another vacancy // J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. – 1992. – V. 25. - P. 657–656.
17. Amusia M.Ya., Kilin V.A., Ehresmann A., Schmoranzer H. and Schartner K.-H. Double-autoionization decay of resonantly excited single-electron state // J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. – 1993. – V. 26. – P. 1281–1300.
18. Kilin V.A., Ehresmann A., Schmoranzer H., Schartner K.-H. Indirect observation of new three electron Auger transitions by PIFS // Proceedings IV ECAMP, Riga, Latvia, 1992. – P. 167–170.
19. Ehresmann A., Kilin V.A., Schmoranzer H., Schartner K.-H. and Amusia M.Ya. Assignment of new fluorescence lines from KrIII $4p^3\ 6s/5d$ states observed after excitation of the KrI $3d^9_{5/2}\ 5p$ - resonance // J. Phys. B.: Atom. Mol. Opt. Phys. – 1995. – V. 28. – P. 965–977.
20. Kilin V.A. Theoretical analysis of decay pathways of resonantly excited KrI $3d^9\ np$ states to different KrII and KrIII states // Invited Talks - 5th International Workshop Autoionization Phenomena in Atoms, Russia, Dubna, 1995. – P. 199–203.
21. Kilin V.A., Lee I.S., Participator-spectator-vacancy satellites in Auger spectra. Probabilities and angular distribution // Proceedings XXII EGAS, Sweden, Uppsala, 1990. - P. 629–631.
22. Kilin V.A., Lee I.S., Angular distribution of electrons in the double Auger decay // Proceedings XXII EGAS, Sweden, Uppsala, 1990. - P. 632–633.
23. Ehresmann A., Kilin V.A., Vollweiler f., Schartner K.-H. and Schmoranzer H. Perturbation theory study of triple photoionization. I. Two-step approximations in triple photoionization of Kr in the exciting photon energy region of KrI $3d^9\ np$ resonances (90 eV-100 eV) // J. Phys. B.: Atom. Mol. Opt. Phys. – 1997. – V. 30. – P. 5715–5727.
24. Kilin V.A., Lee I.S., Ehresmann A., Schmoranzer H., Schartner K.-H. One-step correlative Auger decay of the Kr $3d^{-1}\ 5p$ state to Kr 2^+ // Proceedings IV ECAMP, Latvia, Riga, 1992. - P. 166–167.

25. Kilin V.A., Ehresmann A., Schmoranzer H., Schartner K.-H., Vollweiler F., Mentzel G. Assignment of fluorescence transitions from highly excited Kr III states // Invited Talks 25 EGAS IC, France, Caen, 1993. - P. B2–02.
26. Ehresmann A., Kilin V.A., Chernysheva L.V., Schmoranzer H., Amusia M.Ya., and Schartner K-H. Three-electron radiative transitions // J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. – 1993. – V. 26. – P. L97–L102.
27. Kilin V.A., Ehresmann A., Schmoranzer H., Schartner K.-H., Mentzel. Population pathways of highly excited Kr III states after excitation of KrI $3d^9$ np resonances // Invited Talks 26 EGAS IC Spain, Barcelona, 1994. - P. 47–48.
28. Ehresmann A., Kilin V.A., Schmoranzer H., Schartner K.-H., Mentzel, Vollweiler F. Cascade population of the Kr II $4s^1 4p^6 \ ^2S_{5/2}$ state after excitation of KrI $3d^9_{5/2}$ 5p resonance // Invited Talks 26 EGAS IC, Spain, Barcelona. – 1994. - P. 130.
29. Kilin V.A., Kharlova A.N., Ehresmann A., Schmoranzer H., Schartner K.-H. Competition between non-correlative visible and correlative fluorescence transitions in KrIII // J. Phys. B.: Atom. Mol. Opt. Phys. – 1995. –V. 28. – P. 4723–4732.
30. Kilin V.A., Lazarev D.A., Lazarev Dm.A., Zelichenko V.M., Ehresmann A., Vollweiler F., Schmoranzer H., and Schartner K-H. Auger decay of 3d-vacancy in Kr with resonant excitation of electron // Contributed Papers VI ECAMP, Italy, Siena, 1998. – P. 168–169.
31. Kilin V.A., Lazarev D.A., Zelichenko V.M., Ehresmann A., Vollweiler F., Schmoranzer H., and Schartner K-H. Perturbation theory study of double Auger decay channels of 3d-vacancy in Kr // Contributed Papers VI ECAMP, Italy, Siena, 1998. – P. 170–171.
32. Kilin V.A., Lazarev D.A., Zelichenko V.M., Amusia M.Ya., and H. Schmoranzer. The single-photon double-ionization of Ne valence shells // Vestnik TGPU. – 1998. - V.6. - P. 26–34.
33. Kilin V.A., Lazarev D.A., Lazarev Dm.A., Amusia M.Ya., Schartner K-H., Ehresmann A., and Schmoranzer H. State-selective single-photon double ionization of Ne indicating singlet-triplet mixing of doubly excited LS states // J. Phys. B.: Atom. Mol. Opt. Phys. – 2000. – V. 33. – P. 4989–5005.
34. Kilin V.A., Lazarev D.A., Lazarev Dm.A., Zelichenko V.M., Amusia M.Ya., Schartner K-H., Ehresmann A., and Schmoranzer H. // Test of a q-fractional $V^{(N-q)}$ Hartree-Fock potential for the calculation of double photoionization cross sections of neon // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2001. - V. 34.– P. 3993–4001.

This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.