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* 200*4* 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; *сателлитные* 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 сложных явлений 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, канальные 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 неисчезающего 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, канальные, 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 фотоионизациии 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. Schartner*, *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, ECAMP (*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.

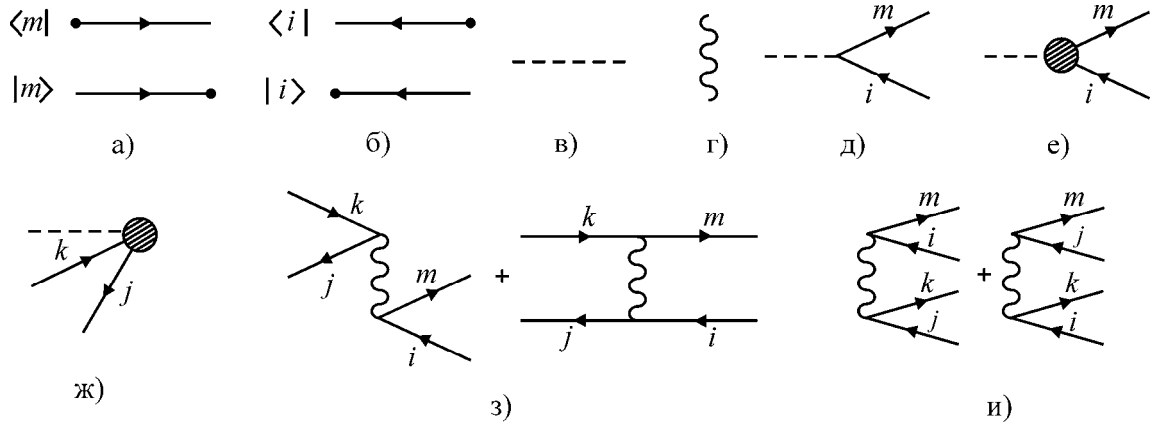


Рис. 1. Графические символы ТВ. а) – электрон; б) – дырка; в) – фотон;
г) кулоновское взаимодействие $v = |\vec{r} - \vec{r}'|^{-1}$;

д) $\langle m | -\frac{1}{c}\hat{\vec{p}}\hat{\vec{A}} | i \rangle$, либо $\langle m | \vec{E}(t)\vec{r} | i \rangle$; е) $\langle m | M(\omega) | i \rangle$; ж) $\langle j | M(\omega) | k \rangle$;

з) $\langle mj | u | ik \rangle = \langle mj | v | ik \rangle - \langle mj | v | ki \rangle$; и) $\langle mk | u | ij \rangle = \langle mk | v | ij \rangle - \langle mk | v | ji \rangle$

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 (h=m=e=1):

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

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

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

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

$$\sigma^{\nabla,r}(\omega)=\frac{4\pi^2}{\omega c}\int\left|M^{\nabla,r}_{i,f}\right|^2\delta(E_f-E_i-\omega)ds_f. \qquad (3)$$

Здесь $M^{\nabla}_{i,f}=\left\langle\Phi_f\left|(\vec{e},\vec{p})\right|\Phi_i\right\rangle$ есть амплитуда в форме “скорости”, а $M^{r}_{i,f}=\left\langle\Phi_f\left|(\vec{e},\vec{r})\right|\Phi_i\right\rangle$ - 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 $i_1i_2\to f_1f_2f_3+e_q$ 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, $\Psi=e^{iH_0t}\Phi$, $V(t)=\ e^{iH_0t}Ve^{-iH_0t}$, где вводится оператор эволюции

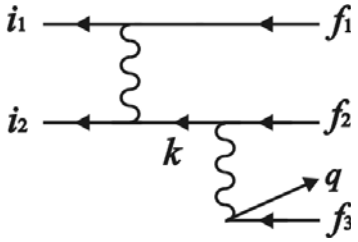
$$\hat{U}(t,t_0)=1+\sum_{n=1}^{\infty}\hat{U}^{(n)}(t,t_0),\quad \hat{U}^{(n)}(t,t_0)=\frac{(-i)^n}{n!}\int_{t_0}^{t}dt_n\int_{t_0}^{t}dt_{n-1}\ldots\int_{t_0}^{t}dt_1\hat{T}\{\hat{V}_\alpha(t_1)\hat{V}_\alpha(t_2)\ldots\hat{V}_\alpha(t_n)\}\,, \quad (5)$$

переводящий при адиабатическом включении возмущения ($\hat{V}_\alpha(t)=\hat{V}(t)e^{-\alpha|t|}$, $\alpha\to+0$) невозмущенную ВФ $\Phi^{(0)}=\Psi(t_0)$ некоторого стационарного состояния в точную ВФ $\Psi(t)$ того же стационарного состояния к моменту времени t, $\Psi(t)=\lim\limits_{\alpha\to0}\hat{U}(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle$. Тогда амплитуда $M=\lim\limits_{\alpha\to0}\langle\hat{U}(t,t_0)\Phi_{fq}^{(0)}(t_0)|\hat{V}|\hat{U}(t,t_0)\Phi_i^{(0)}(t_0)\rangle|_{t=0}$ перехода $i_1i_2\to f_1f_2f_3q$ в низшем неисчезающем порядке ТВ приобретает вид

$$M^{(1)}=\frac{-i}{4}N_iN_{fq}\sum_{klmnk_1l_1m_1n_1}\sum\langle kl|u|mn\rangle\langle k_1l_1|u|m_1n_1\rangle\times$$
$$\int_{-\infty}^{\infty}\langle\Phi_0|T\{a_{f_1}^+a_{f_2}^+a_{f_3}^+a_qa_k^+(t)a_l^+(t)a_n(t)a_m(t)a_{k_1}^+a_{l_1}^+a_{n_1}a_{m_1}a_{i_1}a_{i_2}\}|\Phi_0\rangle_{связн.}dt\,. \quad (6)$$

и представима в виде суммы 9-ти парциальных слагаемых вида

$$M_1^{(1)}=\sum_k\langle kq|\hat{u}|f_2f_3\rangle\langle i_1i_2|\hat{u}|f_1k\rangle E_{kqf_2f_3}^{-1}\ =$$



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 ($k\le F$) и частичным ($k>F$) состояниям, подразумевая интегрирование по непрерывному спектру.

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

$$\Psi_i=N_i\hat{U}(t,-\infty)\left[a_{n_{i1}}^{l_{i1}1/2}\otimes a_{n_{i2}}^{l_{i2}1/2}\right]^{LS}|\Phi_0\rangle\,, \quad (7)$$

$$\Psi_{fq}=N_{fq}\hat{U}(t,+\infty)\left[\left[a_{n_{f1}}^{l_{f1}1/2}\otimes a_{n_{f2}}^{l_{f2}1/2}\right]^{L_1S_1}\otimes a_{n_{f3}}^{l_{f3}1/2}\right]^{L_2S_2}\otimes(a^+)_{n_{f3}}^{l_{f3}1/2}\Bigg]^{L'S'}|\Phi_0\rangle\,, \quad (8)$$

и соответствующие парциальные амплитуды вида

$$M_1^{(1)}=[L_1][L_2]\sum_{n_k}\sum_{l_1l_2l_k}(-1)^{L+L_1+l_{i1}+l_{f3}+l_2}\begin{Bmatrix}L & l_{f1} & l_k\\ l_1 & l_{i2} & l_{i1}\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}L & L_1 & l_2\\ l_{f3} & l_q & L_2\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}L & L_1 & l_2\\ l_{f2} & l_k & l_{f1}\end{Bmatrix}\delta_{LL'}\delta_{M_LM_{L'}}\times$$
$$\left(V_{kqf_2f_3}^{(l_2)}\left[A\cdot V_{l_1l_2f_1k}^{(l_1)}+(-1)^{-S}B\cdot W_{l_1l_2f_1k}^{(l_1)}\right]+W_{kqf_2f_3}^{(l_2)}\left[(-1)^{-S}A\cdot V_{l_1l_2f_1k}^{(l_1)}+B\cdot W_{l_1l_2f_1k}^{(l_1)}\right]\right)E_{kqf_2f_3}^{-1}\,, \quad (9)$$

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

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.

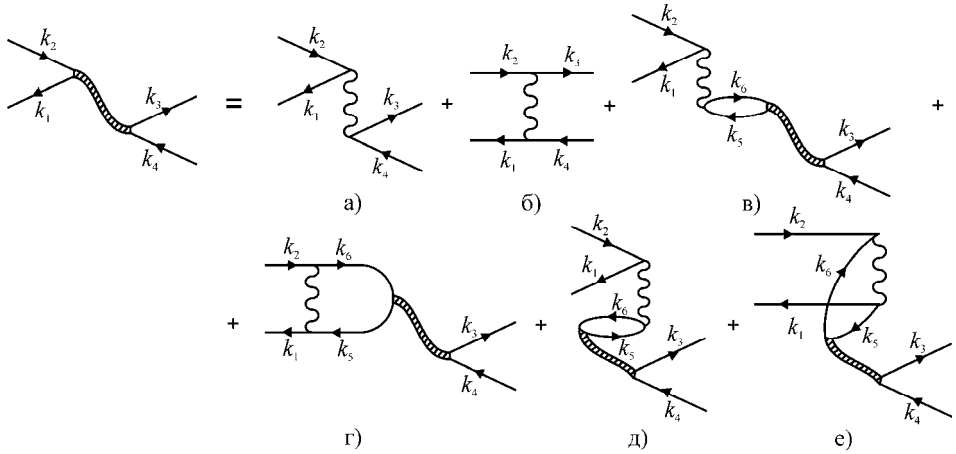
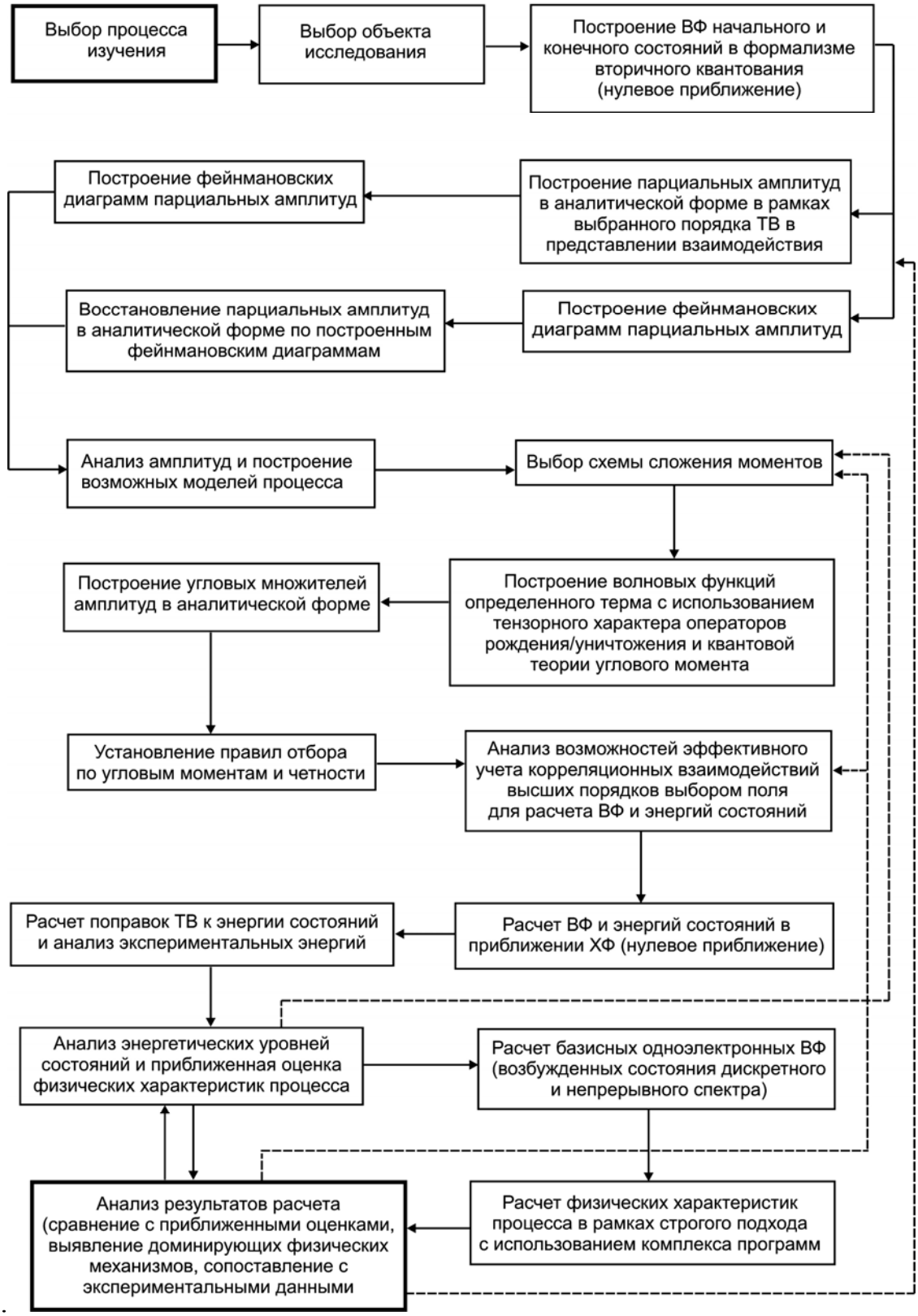


Рис.2. Графическое представление системы уравнений ПСФО для эффективного взаимодействия .

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 неисчезающего 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.

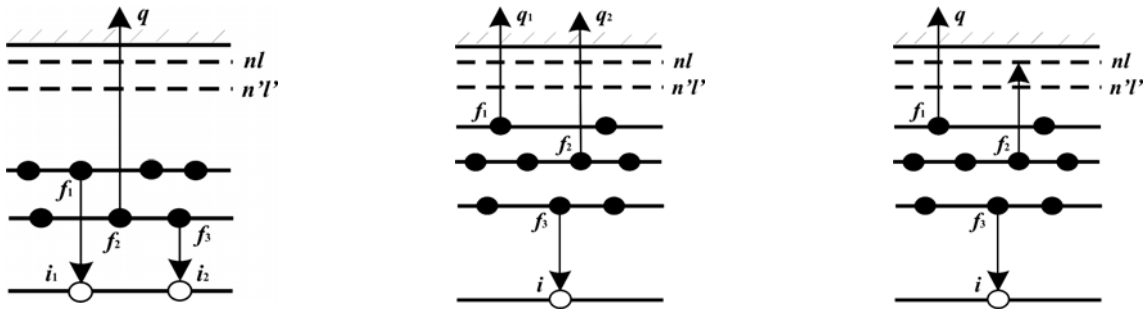


Рис. 3. Трехэлектронный и двойной Оже-эффект и сателлитный Оже-переход.

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 ~10^{-3}-10^{-5} эВ.

Для многоэлектронных атомов нами впервые построена теория ТЭО-переходов и выполнены расчеты всех возможных каналов ТЭО-распада двух 1*s*-вакансий в *Ne* и 2*s* вакансий в *Ar*. При энергии переходов ε~130 Ry полная ширина состояния $1s^{-2}$ в *Ne* относительно ТЭО-распада составляет Γ_A=1.684×10^{-4} эВ (~0.07 % полной ширины 0.23 эВ одиночной 1*s* вакансии), а $2s^{-2}$ в *Ar* - ~5.5×10^{-4} эВ при ε~45 Ry, что вполне удовлетворительно согласуется с оценками, полученными в экспериментах и оценках других авторов. В *Ar* рассмотрен также переход $2p^{-2}[^1S]\rightarrow 3s^{-2}3p^{-1}\ q_p$ (ε=34.246 Ry, Γ_A=0,371×10^{-4} эВ). Прямого сравнения теории и эксперимента сделать нельзя по отмеченным выше условиям эксперимента.

Наряду с исследованными ТЭО-переходами высокой энергии (типичная ширина ~10^{-4} эВ), теоретически *предсказаны* и изучены специфичные ТЭО-переходы с (а) “углублением” и (б) “встречным движением” вакансий, энергия которых сравнительно мала, а ширина ~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 3*s*-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 $3s^{-1}4p^{-1}\ [^{1,3}P]\rightarrow 4s^{-2}[^1S]\ 3d^{-1}[^2D]\ q_{p,f}[^{1,3}P]$ в *Kr* с энергиями ε=7.801 Ry и ε=7.764 Ry для синглета и триплета, соответственно, которые хорошо отделены от основных линий Оже-распада 3*s*-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} Ry$^{1/2}$)	***а***) l_q=1 $\varepsilon_q^{(1)}$=7.801 Ry	***б***) l_q=1 $\varepsilon_q^{(1)}$=7.764 Ry	***в***) l_q=3 $\varepsilon_q^{(1)}$=7.801 Ry	***г***) l_q=3 $\varepsilon_q^{(1)}$=7.764 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***5.912	-1.718 - ***i***3.100	1.838+ ***i***6.155	-0.252+ ***i***3.251
$M_5^{(1)}$	-3.555 - ***i***6.153	-1.852 - ***i***3.278	1.902+ ***i***6.060	-0.336+ ***i***3.221
$M_6^{(1)}$	0.075 - ***i***0.121	0.312 - ***i***0.008	0.843 - ***i***0.236	-0.222+ ***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***12.186	-12.321 - ***i***6.386	-7.348+ ***i***11.979	1.293+ ***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.

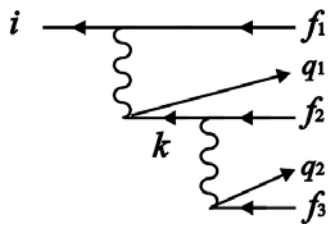


Рис. 5. Диаграмма ДО-перехода

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 $i\rightarrow f_1f_2+(q_1,q_2)$ есть интегральная характеристика

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

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

$$\gamma(\varepsilon)=2\pi\sum_{l_{q1}l_{q2}}\left|M_{i,fq}\right|^2\delta(E_i-E_f^{q_1q_2})=2\pi\sum_{l_{q1}l_{q2}}\left|\left\langle\Psi_f^{q_1q_2}\left|\hat{V}\right|\Psi_i\right\rangle\right|^2\delta(E_i-E_f^{q_1q_2})\,, \qquad (11)$$

при том, что Оже-электроны, согласно установленным правилам отбора, могут иметь произвольно большие значения орбитального момента l_{q1} и l_{q2}.

Представлены результаты расчета и оценки энергетического спектра $\gamma(\varepsilon)$ электронов и вероятности ДО-переходов $1s^{-1}[^2S]\rightarrow 2s^{-2}\,2p^{-1}[^2P]+(q_1q_2)$, $(l_{q_1},l_{q_2})=(l,\,l+1)$, $l=0,1,2,\ldots$, $E_{q_1q_2}=50.512$ 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 2*s*-оболочки, а q_p - из 2*p*. Суммарная ширина указанных ДО-переходов составляет $0{,}342\times10^{-2}$ эВ, или ~1.5% от полной ширины 1*s*-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 1*s*-вакансии приводит к конфигурациям $2s^{-1}2p^{-2}$ и $2p^{-3}$, полная ширина 1*s*-вакансии в *Ne* относительно ДО-распада составляет $1{,}8\times10^{-2}$ эВ (~7% полной ширины), что хорошо согласуется с экспериментальным значением ~8-10%.

Исследование двойного Оже-распада 3*d*-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 $4s^14p^4\rightarrow4s^24p^3$ в ионе Kr^{3+}, начальные состояния которых могут заселяться по двухступенчатой траектории тройной фотоионизации через ионизацию 3*d*-оболочки. Изучены пять каналов ДО-распада *3d*-вакансии в *Kr* в состояния: (**I**) $4s^24p^3[^2D]$, (**II**) $4s^24p^3[^2P]$, (**III**) $4s^24p^3[^4S]$, (**IV**) $4s^14p^4[^2D]$, (**V**) $4s^14p^4[^4P]$ 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 $4p^3\left[^4S\right]$ и

$4s^1 4p^4\left[^4P\right]$ с изменением моментов иона-остатка, из-за чего испускаются только триплетные пары Оже-электронов. Суммарная плотность вероятности $\gamma(\varepsilon)$, рис. 6, принимает наибольшее значение $\sim 13\times10^{-4}$ в низкоэнергетической части спектра, где суммируются симметричные U-образные плотности вероятности всех рассмотренных каналов.

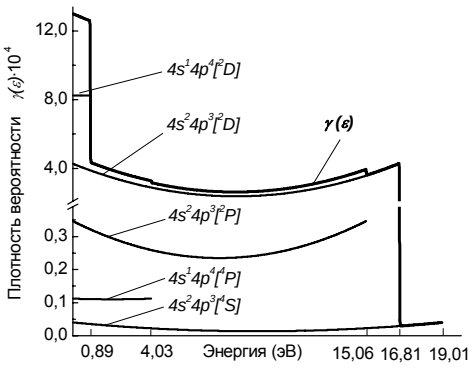


Рис. 6. *Kr*: Суммарная плотность вероятности $\gamma(\varepsilon)$ и ее составляющие.

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	$4{,}93\cdot10^{-3}$	80
IV	$4s^1 4p^4(^2D)$	0,89	$7{,}34\cdot10^{-4}$	12
II	$4s^2 4p^3(^2P)$	15,06	$4{,}02\cdot10^{-4}$	7
III	$4s^2 4p^3(^4S)$	19,01	$4{,}15\cdot10^{-5}$	<1
V	$4s^1 4p^4(^4P)$	4,03	$4{,}45\cdot10^{-5}$	<1
	$\Gamma=\sum_{L_{ic}S_{ic}}\Gamma^{L_{ic}S_{ic}}$		$6{,}15\cdot10^{-3}$	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 Ry) в *Ne* и $3d^{-1}\rightarrow 4s^{-1}4p^{-2}nl+q$ и $3d^{-1}\rightarrow 4p^{-3}nl+q$ (n=1,2,…,9; l=0,1,2,3; $\varepsilon\sim$2-35 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, $\varepsilon_q=E^{(\exp)}_{3d^{-1}}-E^{(\exp)}_{ic,nl}$, или оценена следующим образом: $\varepsilon_q=E^{(\exp)}_{3d^{-1}}-(E^{(HF)}_{ic,nl}+\Delta)$, где $E^{(HF)}_{ic,nl}$ - полная ХФ энергия конечного состояния, поправка $\Delta=I^{(\exp)}_{ic}-I^{(HF)}_{ic}$ есть разность экспериментального и ХФ потенциалов тройной ионизации или $\Delta=E^{(HF)}_{ic,n_0l_0}-E^{(\exp)}_{ic,n_0l_0}$ для серии сателлитов с одинаковым l. Установлено,

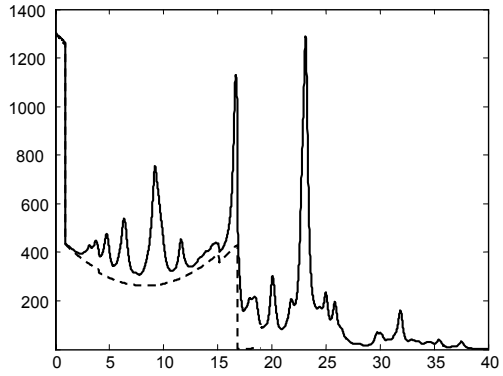


Рис. 7. Наложение дискретного спектра сателлитных Оже-переходов (рис. 3) и непрерывного спектра ДО-переходов (- -) при распаде *Kr* II $3d^{-1}$.

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

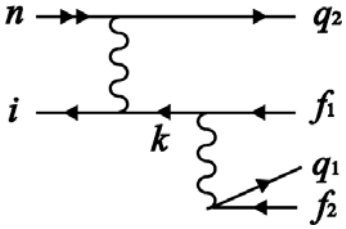


Рис. 8. Двойная автоионизация.

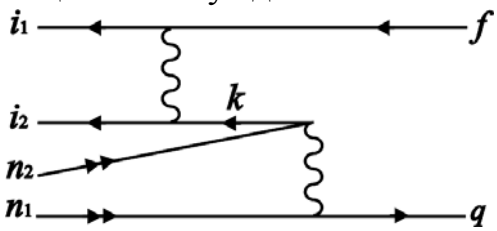


Рис. 9. Автоионизация двукратно возбужденного состояния

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**) $3d^{-1}5p[^1P]\rightarrow 4s^{-2}[^1S]+(q_1q_2)$, (**2**) $3d^{-1}5p[^1P]\rightarrow 4s^{-1}4p^{-1}[^1P]+(q_1q_2)$ и (**3**) $3d^{-1}5p[^1P]\rightarrow 4s^{-1}4p^{-1}[^3P]+(q_1q_2)$. 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 канальные и суммарный электронные спектры, рис. 10.

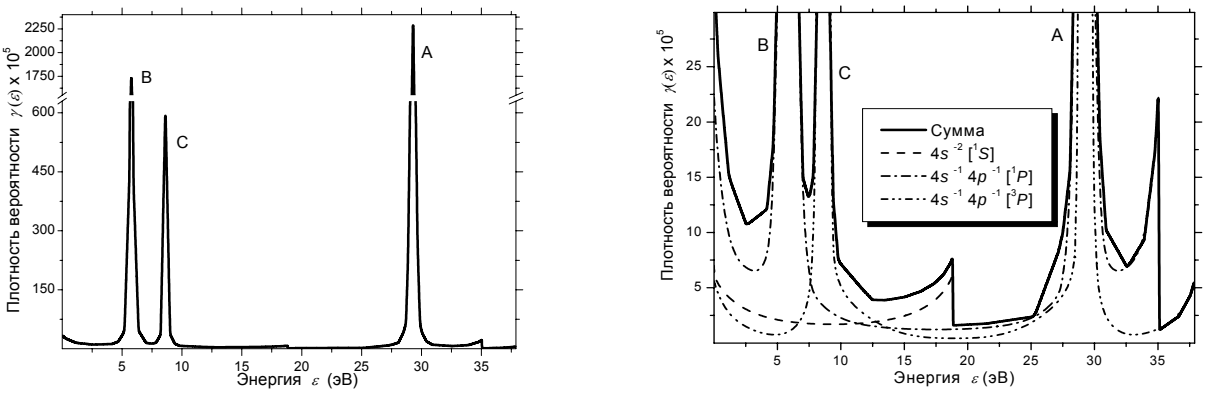


Рис. 10. Энергетический спектр электронов при двойной автоионизации резонанса $3d^{-1}\,5p[^1P]$ в *Kr*.

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 $4s^{-2}[^1S]$, $4s^{-1}4p^{-1}[^{1,3}P]$ двукратного иона *Kr* после фотовозбуждения резонанса *Kr*I $3d^{-1}5p[^1P]$. 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. Впервые отмечено, что при автоионизационных распадах ДВС реализуется механизм предсказанного нами ранее “углубления” вакансии, если переход электронов n_1l_1 и n_2l_2 с дискретных уровней условно рассматривать как рождение соответствующих дырок во “внешних” оболочках.

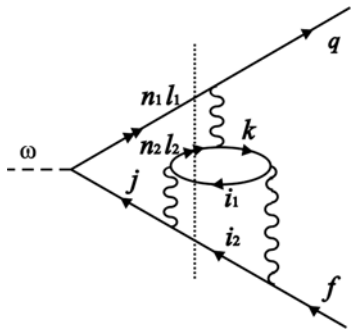


Рис. 11. Диаграмма автоионизации ДВС.

Представлены результаты теоретического изучения автоионизационных переходов $3p^{-2}[L_iS_i]n_1l_1[L_1S_1]n_2l_2[L_2S_2] \rightarrow 3s^{-1}+q$ в атоме *Ar*. Энергии переходов рассчитаны или оценены с привлечением экспериментальных данных и составляют ~0.5-9.0 эВ. Показано, что в каждой серии переходов наиболее вероятными (~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 $V^{(N\text{-}1)}$ и $V^{(N\text{-}2)}$ компонентные, канальные и полные сечения (дифференциальные и абсолютные) прямой ДФИ внешних оболочек атома *Ne* с учетом обоснованно широкого набора фотоэлектронных пар, рис.13. Установлен характер положения $V^{(N\text{-}1)}$-и $V^{(N\text{-}2)}$-сечений ДФИ в форме длины (σ_L^{++}) и скорости (σ_V^{++}) относительно друг друга и экспериментальных данных в зависимости от энергии ионизирующих фотонов. Определены области энергии фотона, где потенциалы дают удовлетворительное согласие с экспериментом.

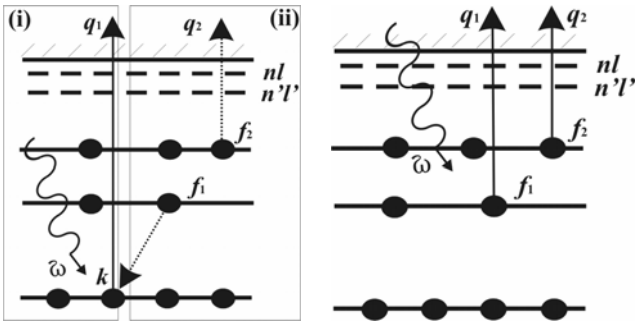


Рис. 12. Двухступенчатая (а) и прямая (б) ДФИ.

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

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

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

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

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

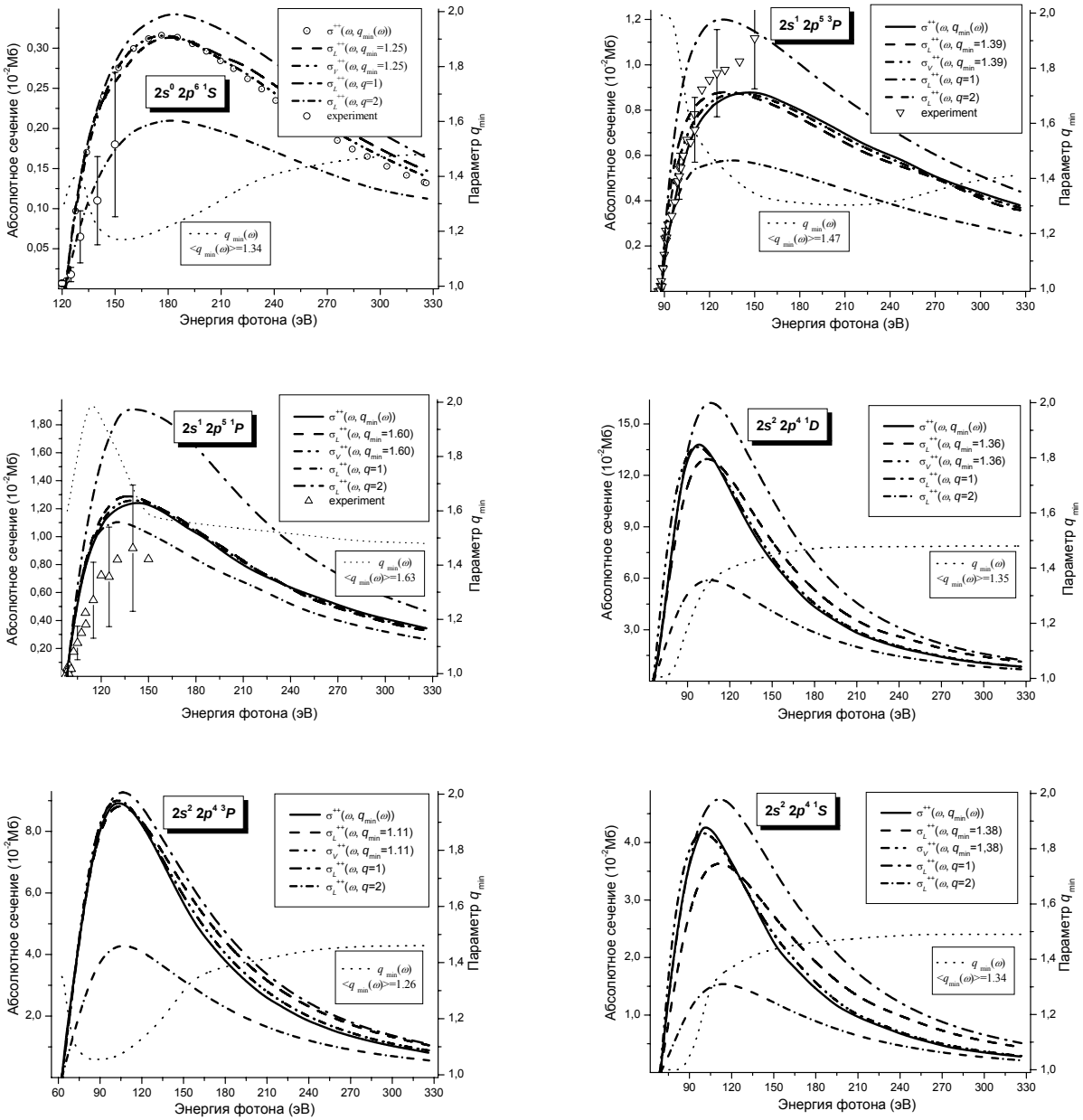


Рис. 13. Вычисленные и экспериментальные сечения ДФИ неона.

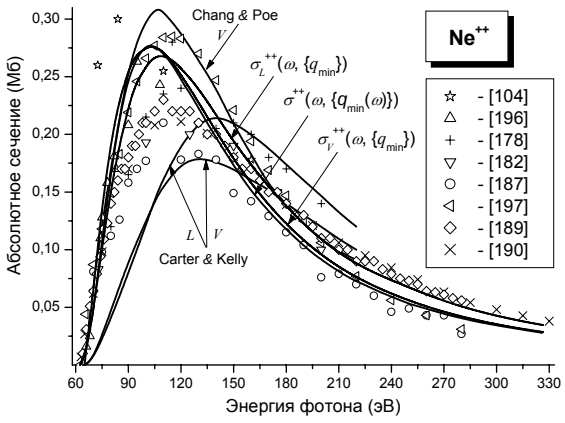
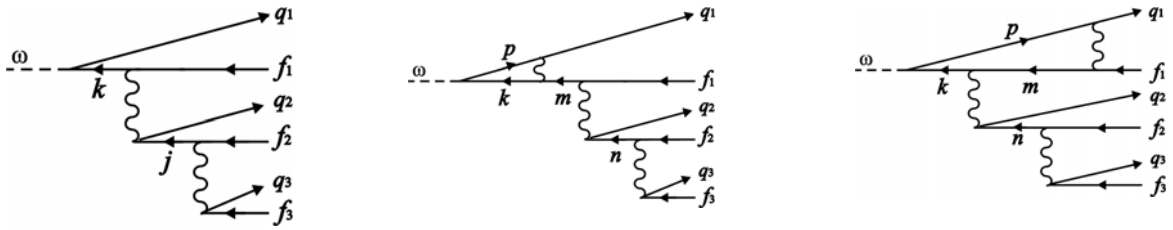


Рис. 14. Рассчитанные и экспериментальные полные сечения ДФИ неона.

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.



(**а**) (**б**) (**в**)

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:

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

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 3*d*-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:

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

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

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

Переход $4s^{-1}4p^{-2}\rightarrow 4p^{-3}$	λ (нм)	Сечение ТФИ (10^{-2}) Мб					
		ω=90 эВ		ω=94 эВ		ω=100 эВ	
		эксп.	теор.	эксп.	теор.	эксп.	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 *Kr*IV $4s^{-1}4p^{-2}$ [^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 *Kr*IV $4s^{-1}4p^{-2}$ [^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 *Kr*I $3d^{-1}$ *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 *Kr*III $4p^{-3}$ *nl* типа *Kr*I $+\omega \rightarrow$ *Kr*I $3d^{-1}$ *np*$\rightarrow$*Kr*III $4p^{-3}$ *np*$\rightarrow$*Kr*III $4p^{-3}$ *n*'*s*/*d*, включающие радиационные и безызлучательные переходы, рис. 16.

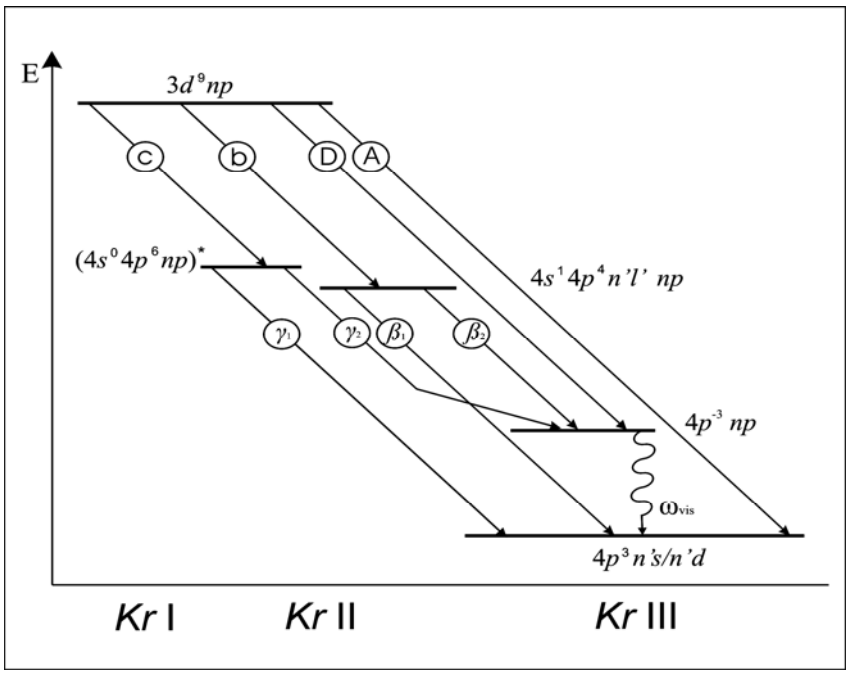


Рис. 16. Каналы заселения состояний *Kr*III $4p^{-3}$ *nl*.

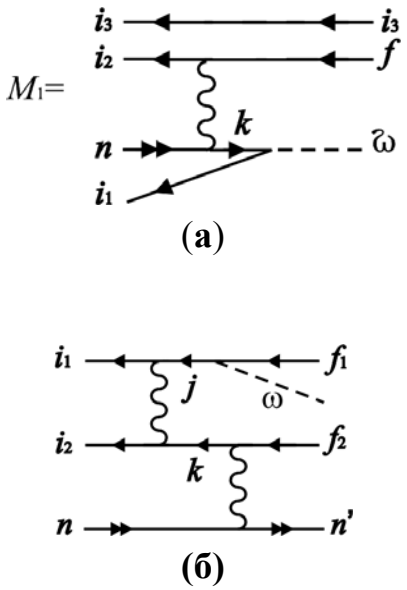


Рис. 17. Двухэлектронные (**а**) и трехэлектронные (**б**) радиационные переходы.

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

Трехэлектронные радиационные (ТЭР) *переходы*. Построена теория корреляционных ТЭР-переходов вида m$s^{-2}nl$→kp^{-2} *n*'*l*', в которых непосредственное участие возбужденного электрона разрешает близкие по энергии запрещенные переходы вида ms^{-2} *nl*→kp^{-2} *nl* или ms^{-2}→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 $4s^{-2}np$→$4p^{-2}n'l'$ 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*→$4p^{-2}$*n's/d* в *Kr*.

$4p^{-2}[L_fS_f]$ *n'l'*[*LS*]	$4s^{-2}$ 5*p*		$4s^{-2}$ 6*p*	
	ω (эВ)	$\Gamma_{ТЭР}$ (10^{-7} эВ)	ω (эВ)	$\Gamma_{ТЭР}$ (10^{-7} эВ)
[^1S] 5*s* [^2S]	30.07	0.57	37.72	0.07
6*s* [^2S]	27.76	0.07	31.41	0.09
4*d* [^2D]	26.82	0.49	30.48	0.06
5*d* [^2D]	23.05	0.12	26.50	0.04
[^1D] 5*s* [^2D]	32.32	3.45	35.96	0.51
6*s* [^2D]	26.22	0.37	30.65	0.71
4*d* [^2S]	29.30	0.58	32.95	0.08
4*d* [^2P]	29.30	0.91	32.95	0.10
4*d* [^2D]	29.30	1.17	33.21	0.13
5*d* [^2S]	26.15	0.21	29.85	0.07
5*d* [^2P]	26.15	0.24	29.85	0.13
5*d* [^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 $4s^{-2}$ 6*p* примерно на порядок меньше, чем из $4s^{-2}$ 5*p*, хотя наиболее вероятные из них вполне конкурируют с некоторыми из группы $4s^{-2}$ 5*p*. 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 *Kr*III $4p^{-3}n'l'$ после возбуждения *Kr*I $+\gamma \rightarrow$ *Kr*I $3d^{-1}np$ 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:

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

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

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

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 непрямых 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 *Kr*III $4p^{-3}$ *n'l'* из *Kr*I $3d^{-1}np$ 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 *Kr*III новые линии идентифицированы с переходами вида *Kr*III $4p^{-3}6s/5d \rightarrow$ *Kr*III $4p^{-2}$ 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 неисчезающего 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 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 при энергиях фотовозбуждения в диапазоне 90 - 100 эВ.
6. Впервые построены компонентные, канальные 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.

8. 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 наихудшего согласия.

Основные результаты работы изложены в публикациях

1. Амусья М.Я., Килин В.А., Ли И.С. Сдвоенный Оже-распад двух К-вакансий в Ne // ЖТФ. – 1984. - Т. 54. - С. 990–992.
2. 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.
3. Амусья М.Я., Килин В.А., Ли И.С. Трехэлектронный Оже-распад в атомах // Оптика и спектроскопия. – 1985. - Т. 59. - С. 261–264.
4. ЧернышеваЛ.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.
5. 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.
6. 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.
7. 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.
8. Килин В.А., Ли И.С. Двойной Оже-распад в рамках МТВ // Известия ВУЗов. Физика. – 1989. - Т. 7 - С. 78–82.
9. Килин В.А., Ли И.С., Ли О.В. Угловое распределение электронов при двойном Оже-распаде // ЖТФ. – 1991. – Т. 61. - № 2. - С. 40–45.
10. 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 ВИНИТИ. – 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. Assingment 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 - 5^{th} 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., Vollveiler 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. Assingnment 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.