**Лагутин, Борис Михайлович.**

**Природа резонансного фотопоглощения субвалентных оболочек многоэлектронных систем в области вакуумного ультрафиолета и мягкого рентгеновского излучения : диссертация ... доктора физико-математических наук : 01.04.07. - Ростов-на-Дону, 2000. - 353 с. : ил.**

**Оглавление диссертациидоктор физико-математических наук Лагутин, Борис Михайлович**

**ВВЕДЕНИЕ.**

**ГЛАВА 1. СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФОТОИОНИЗАЦИИ**

**ВНЕШНИХ ОБОЛОЧЕК АТОМОВ.**

**1.1 Основные экспериментальные методы.**

**1.2 Основные теоретические соотношения, описывающие фотоионизацию.**

**1.3. Сложная структура уровней конечного состояния иона Rg II.**

**1.4. Проявление многоэлектронных эффектов в энергетической структуре молекул и твердых тел.**

**1.5. Сечения фотоионизации субвалентных пв2 оболочекатомов и угловое распределение фотоэлектронов.**

**1.5.1. Сечение фотоионизации Зб2 оболочки Аг.**

**1.5.2. Сечение фотоионизации 5з-оболочки Хе и параметр углового распределения фотоэлектронов.**

**1.6. Автоионизационные резонансы в сечениях фотоионизации ад-уровней атомов благородных газов в области порога**

**1.7. Сечение фотоионизации сателлитных уровней, соответствующих основному ив-уровню Rg.**

**1.8. Радиационный распад и время жизни субвалентных вакансий Rg атомов.**

**1.9. Заключительные замечания.**

**ГЛАВА 2. МЕТОД РАСЧЕТА ЭНЕРГИЙ И ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ОСТОВА В НАЧАЛЬНОМ И КОНЕЧНОМ СОСТОЯНИЯХ ПРОЦЕССА**

**ФОТОИОНИЗАЦИИ.**

**2.1. Приближение Хартри-Фока-Паули.**

**2.1.1. Алгоритм расчета релятивистских поправок и его компьютерная реализация.**

**2.1.2. Замечания вычислительного характера.**

**2.2. Метод расчета потенциалов ионизации однодырочных состояний.**

**2.2.1. Основные уравнения метода. 95 2.2.1.1. Секулярное уравнение.**

**2.2.2. Потенциалы ионизации однодырочных состояний (уровни первой группы).**

**2.2.2.1 Диагональные матричные элементы гамильтониана.**

**2.2.3. Выбор базисного набора и сходимость метода.**

**2.2.3.1. Размер базисного набора АО.**

**2.2.3.2. Параметры, используемые при расчете.**

**2.2.3.3. Особенности метода и его точность.**

**2.2.4. Расчеты потенциалов ионизации для однодырочных уровней.**

**2.2.4.1. Корреляционные энергии.**

**2.2.4.2. Результаты расчетов потенциалов ионизации для однодырочных уровней.**

**2.2.4.3. Потенциалы ионизации: одноэлектронное приближение.**

**2.2.4.4. Потенциалы ионизации: многоэлектронное приближение.**

**2.2.4.5. Заключительные замечания по расчету ИП однодырочных состояний.**

**2.3. Потенциалы ионизации субвалентной оболочки и соответствующих сателлитных уровней.**

**2.3.1. Диагональные матричные элементы дискретных базисных состояний «две дырки - одна частица».**

**2.3.2. Недиагональные матричные элементы в секулярном уравнении. Эффективное уменьшение кулоновского взаимодействия электронов.**

**2.3.2.1. Взаимодействие конфигураций nslnP6 и «s2np4m(d/s) ш**

**2.3.2.2. У чет состояний ns2np4ed непрерывного спектра в наборе сильновзаимодействующих конфигураций.**

**2.3.2.3. Взаимодействие между конфигурациями ns2np4m/ и ns2np4m7'.**

**2.3.2.4. Постоянные спин-орбитального взаимодействия для яр-электронов.**

**2.3.2.5. Корреляционное влияние слабовзаимодействующих конфигураций на радиальные части АО электронов в конфигурациях ns2tvp4ml.**

**2.3.3. Сводка величин, используемых при расчете матричных элементов секулярного уравнения.**

**2.4 Уровни ионов Aril, KrII и Xell в конечном состоянии процесса фотоионизации.**

**2.4.1. Численный расчет и идентификация состояний иона KrII.**

**2.4.2. Численный расчет состояний иона Aril.**

**2.4.3. Численный расчет состояний иона Xell**

**2.4.4. Заключительные замечания.**

**ГЛАВА 3. СЕЧЕНИЯ ИОНИЗАЦИИ И УГЛОВЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ**

**ФОТОЭЛЕКТРОНОВ ДЛЯ ОСНОВНОЙ ЛИНИИ И КОРРЕЛЯЦИОННЫХ САТЕЛЛИТОВ АТОМОВ БЛАГОРОДНЫХ ГАЗОВ.**

**3.1 Формульные выражения для сечений фотоионизации и параметров углового распределения фотоэлектронов.**

**3.1.1. Общие формулы для сечений и параметра анизотропии фотоэлектронов.**

**3.1.2. Четные конечные состояния иона с J' = 1 / 2.**

**3.1.3. Четные конечные состояния иона cJe >1/2.**

**3.1.4. Нечетные конечные состояния иона, J".**

**3.2 Методика расчета амплитуд переходов.**

**3.2.1. Атомные орбитали электронов остова и возбужденных состояний для расчета амплитуд переходов.**

**3.2.2. Расчет корреляционной амплитуды е) в схеме (3.2), содержащей интеграл вида (q>|<2|£'(d/s)).**

**3.2.3. Корреляционное уменьшение кулоновского взаимодействия электронов при расчете амплитуд переходов.**

**3.3 Результаты расчетов и их анализ.**

**3.3.1. Сечения фотоионизации для уровней Aril.**

**3.3.1.1. Зэ-основная линия.**

**3.3.1.2. Сечения фотоионизации, соответствующие «теневым», Зр4nl 2S, и несферическим, Зр4п/ 2Р и Зр4«/ 2D, сателлитным уровням иона**

**Ar II. Ill**

**3.3.1.3. Фотоэлектронные спектры Ar при различных энергиях возбуждения: сравнение теории и эксперимента.**

**3.3.2 Сечения фотоионизации и параметры углового распределения фотоэлектронов для уровней Xell.**

**3.3.2.1. Фотоэлектронный спектр Хе и идентификация его компонентов.**

**3.3.2.2. 5з-основная линия Хе.**

**3.3.2.3. Четныетеллитные уровни/ = 1 / 2.**

**3.3.2.4. Нечетные, , сателлитные уровни.**

**3.3.2.5. Четные сателлитные уровни с / > 1/2.**

**3.3.3 Сечения фотоионизации и параметры углового распределения фотоэлектронов для уровней KrII.**

**3.3.3.1. Фотоэлектронный спектр Кг и идентификация его компонентов.**

**3.3.3.2. 4з-основная линия Кг.**

**3.3.3.3. Сателлитные уровни.**

**3.4. Заключительные замечания и выводы.**

**ГЛАВА 4. ДЕСТРУКТИВНАЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ КАНАЛОВ РАДИАЦИОННОГО РАСПАДА, ОПРЕДЕЛЯЮЩАЯ ВРЕМЯ ЖИЗНИ СУБВАЛЕНТНОЙ ВАКАНСИИ АТОМОВ БЛАГОРОДНЫХ ГАЗОВ.**

**4.1 Расчет времен жизни ш-субвалентной вакансии.**

**4.1.1 Основные соотношения для расчета времен жизни.**

**4.1.2 Расчет прямых амплитуд переходов. Роль многоконфигурационного вида функции начального состояния перехода.**

**4.1.3 Влияние электронных корреляций на рассчитанные времена жизни и соотношения ветвления.**

**4.1.4. Сравнение результатов расчета с теоретическими и экспериментальными данными других авторов.**

**4.1.5. Заключительные замечания.**

**ГЛАВА 5. РЕЗОНАНСНЫЙ ХАРАКТЕР ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ**

**БЛАГОРОДНЫХ ГАЗОВ В ОБЛАСТИ ВБЛИЗИ ПОРОГА ИОНИЗАЦИИ**

**А/8-СУБВАЛЕНТНЫХ ОБОЛОЧЕК.**

**5.1. Расчет амплитуд переходов и парциальных сечений фотоионизации с учетом канала возбуждения и автоионизационного распада состояний двойного возбуждения.**

**5.1.1. Двухступенчатая модель.**

**5.2. Расчет энергий и волновых функций резонансных состояний двойного возбуждения атомов Аг1, Кг1 и Хе1.**

**5.2.1. Потенциалы ионизации состояний двойного возбуждения атомов Аг1, Кг1 и Хе1.**

**5.2.2. Корреляционное уменьшение кулоновского взаимодействия электронов в матрице секулярного уравнения для состояний двойного возбуждения Аг1, Кг1 и Хе1.**

**5.2.3. Решение секулярного уравнения и вид результирующих волновых функций состояний двойного возбуждения.**

**5.2.4. Итоговые выражения для расчета сечений фотоионизации | Е^ уровней.**

**5.3. Расчет сечений фотоионизации с учетом резонансного и нерезонансного каналов.**

**5.3.1. Расчет энергий и сил осцилляторов состояний двойного возбуждения в двухшаговой модели.**

**5.3.2. Интерференция резонансного и нерезонансного каналов фотоионизации.**

**5.3.2.1. 4з-основная линия.**

**5.3.2.2. Сечения фотоионизации, приводящей к заселению сателлитных уровней.**

**5.3.2.3. Двухступенчатая модель и анализ особенностей в зависимостях ст(<У).**

**5.3.2.4. Расчет резонансной структуры сечений фотоионизации для сателлитных уровней с учетом интерференции нерезонансного и резонансного каналов.**

**5.4 Угловое распределение флуоресцентного излучения сателлитных уровней**

**5.4.1. Эксперимент и теоретические соотношения.**

**5.4.2. Результаты расчета и их обсуждение.**

**5.5. Резонансная фотоионизация в начальной припороговой области со слабоперекрывающимися резонансами.**

**5.5.1. Экспериментальные и теоретические исследования сечений валентной и субвалентной оболочек с учетом автоионизационных резонансов.**

**5.5.2. Резонансная фотоионизация атома Аг и аргоноподобных ионов К+ и Са2+ в области ниже Зв-порога.**

**5.5.3. Резонансная фотоионизация атома Кг в области ниже 4з-порога.**

**5.5.4. Резонансные сечения фотоионизации яр-валентных и ив-субвалентных оболочек атомов.**

**5.5.4.1. Резонансы в 5з-припороговых сечениях атомаХе.**

**5.5.4.2. Резонансы в пв-припороговом сечении атома Аг.**

**5.5.4.3. Проявление сильно делокализованных п'С -состояний двойного возбуждения в сечениях фотоионизации Аг и Кг в области порога ионизации субвалентной пв-оболочки.**

**5.6. Заключительные замечания. 323 ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ.**