

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

Елена Владимировна Грызлова

**Векторные корреляции
в нелинейных процессах ионизации
атомов высокочастотным излучением**

Специальность 1.3.6. Оптика

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени доктора
физико-математических наук

Москва— 2024

Работа выполнена в отделе электромагнитных процессов и взаимодействия атомных ядер Научно-исследовательском институте ядерной физики имени Д.В. Скобельцына Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова

Научный **Грум-Гржимайло Алексей Николаевич**

консультант: доктор физико-математических наук

Официальные **Пальчиков Виталий Геннадьевич**

оппоненты: доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник
главный научный сотрудник Отдела № 77 "Перспективных исследований
и измерений времени и частоты" Главного метрологического центра
Государственной службы времени и частоты РФ Всероссийского научно-
исследовательского института физико-технических и радиотехнических
измерений

Фролов Михаил Владимирович,

доктор физико-математических наук, профессор
заведующий кафедрой теоретической физики физического факультета
Воронежского государственного университета

Кузаков Константин Алексеевич,

доктор физико-математических наук, доцент
профессор кафедры физики атомного ядра и квантовой теории
столкновений, физического факультета Московского государственного
университета имени М.В. Ломоносова

Защита диссертации состоится 18 марта 2025 года в 15:00 на заседании диссертационного совета МГУ.013.6 на физическом факультете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, аудитория 4-28.

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций Научной библиотеки Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова (119192, г. Москва, Ломоносовский проспект, д. 27) и в сети Интернет:
<https://dissovet.msu.ru/dissertation/3292>

Автореферат разослан « » января 2025 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета МГУ.013.6
доктор физико-математических наук,
доцент
kosareva@physics.msu.ru



О.Г. Косарева

Общая характеристика работы

Актуальность

Развитие техники генерации излучения вакуумного ультрафиолетового (ВУФ) и рентгеновского диапазонов открыло новое направление в физике взаимодействия излучения с квантовыми системами, а именно, изучение процессов нелинейной ионизации высокочастотным излучением. Создание лазеров на свободных электронах (ЛСЭ), синхротронных источников четвертого поколения, генерирующих излучение на несколько порядков более интенсивное, чем ранее, и прогресс лазеров на генерации высоких гармоник, позволившие получить уникальные для этого диапазона интенсивность и длительность импульсов (0.1 - 100 фс), привели к зарождению многих направлений в исследованиях элементарных фотопроцессов, ранее либо недоступных, либо доступных лишь в оптическом диапазоне. К этим направлениям относятся: нелинейные фотопроцессы с участием небольшого числа фотонов, фемто- и аттосекундные атомно-молекулярные процессы, исследования по фотоэлектронной спектроскопии положительно заряженных ионов в газовой фазе, физика состояний с двумя глубокими вакансиями и ряд других.

Наблюдение рассматриваемых в диссертации процессов стало возможным только с появлением последнего поколения лазеров на свободных электронах (2005 г.) и на генерации гармоник. По масштабности влияния ожидаемый прогресс в физике высокочастотного излучения, вызванный лазерами на свободных электронах, может даже превзойти прогресс в физике оптического и инфракрасного излучения, вызванный созданием оптических лазеров в 1960. Отличительной особенностью при взаимодействии атомов и молекул с излучением вакуумного ультрафиолетового и мягкого рентгеновского диапазонов является то, что доминирующим процессом является фотоэффект. Хотя последний был известен уже более 100 лет [1], до последнего времени теория фотоионизации атомов и молекул излучением ВУФ диапазона разрабатывалась для процессов, которые можно изучать экспериментально с помощью источников синхротронного излучения третьего поколения. Развитие же теории фотоионизации фемто- и аттосекундными импульсами

ВУФ и рентгеновского излучения с интенсивностью на 8-10 порядков больше, чем у синхротронных источников предыдущего поколения, находится в стадии становления. Это в первую очередь относится к процессам, которые принципиально невозможно было наблюдать в этом диапазоне без использования лазеров на свободных электронах и на генерации высоких гармоник: надпороговую ионизацию, включая ионизацию под совместным воздействием пучков ВУФ и оптического излучения, двух- и трехфотонную двойную ионизацию, проходящую через промежуточную стадию формирования однократно заряженного иона, и другие процессы с небольшими сечениями, требующие больших интенсивностей высокочастотного излучения.

Считанные единицы экспериментов по фотоионизации положительно заряженных ионов были доступны до появления ЛСЭ [2]. В полях ЛСЭ дважды или многократно заряженные ионы эффективно создаются последовательным поглощением нескольких фотонов. Необходимым условием является достаточно высокая интенсивность излучения, чтобы ионная мишень не успевала разлететься за счет кулоновского отталкивания, и акты фотоионизации происходили один за другим. Лазеры на свободных электронах предоставили возможность наблюдать многократно заряженные ионы и кластеры [3].

Развитие теории нелинейной фотоионизации короткими интенсивными импульсами ВУФ и рентгеновского излучения необходимо для принципиального понимания динамики фотопроцессов в малых квантовых объектах и более сложных явлений, например, визуализации отдельных биомолекул или их нанокристаллов; получения изображений из одиночных рентгеновских изображений [4], оптики сверхбыстрых процессов [5] и астрофизики [6]. Физика образования кратных ионов и химия из взаимодействия важна для понимания процессов в межзвездной среде [7] и во внешних слоях ионосферы планет солнечной системы [8].

Цели и задачи исследования

Диссертационное исследование посвящено созданию и развитию теоретического подхода для описания нелинейных процессов, вызываемых в атомах и атомарных ионах короткими интенсивными импульсами

излучения ультрафиолетового и рентгеновского диапазонов. Речь идет о когерентном излучении с интенсивностью $10^{12} - 10^{14}$ Вт/см², длительностью 10 – 100 фс, энергией 10 эВ - 5 КэВ, и определенной степенью круговой или линейной поляризации. Излучение с такими параметрами генерируется современными лазерами на свободных электронах (ЛСЭ) или будет достигнуто в ближайшее время.

Переход источников излучения на качественно новый уровень выдвинул совершенно новые требования к теории нелинейной ионизации, например, значительно возросла роль процессов в области непрерывного спектра квантовых систем или роль недипольных эффектов. Целью диссертационного исследования являлось создание теории поляризационных и корреляционных нелинейных явлений, происходящих в атомах под действием высокочастотного излучения или комбинации высокочастотного и оптического излучения. Полное описание многократной ионизации - важный шаг к пониманию нелинейного взаимодействия материи с интенсивным высокочастотным излучением.

(1) Задачей являлось получить аналитические выражения для векторных корреляций при кратной ионизации атомов, представленные в виде билинейных комбинаций амплитуд парциальных волн, выполнить расчеты с соответствующей современному уровню спектроскопической точностью. (2) На основании проведенных исследований выяснить границы применимости используемых теоретических методов. (3) При возможности, дать рекомендации для оптимального наблюдения предсказанных в диссертации эффектов или выполнить сравнение с имеющимися в литературе данными. (4) Наконец, сформулировать теоретическую модель для постановки *полного эксперимента* по кратной ионизации, то есть определения минимального набора наблюдаемых, необходимых для восстановления всех участвующих в процессе амплитуд.

Объект и предмет исследования

Динамика процессов, происходящих под действием высокочастотного излучения, отличается от динамики процессов под действием излучения оптического диапазона. Как правило, для ионизации атома оптическим полем необходимо поглощение пяти или более фотонов, что подразумевает

высокую плотность потока фотонов. При ионизации же высокочастотным полем достаточно 1-2 фотонов. Объектом исследования, являются процессы, недоступные ранее: последовательная кратная ионизация атомов (рис. 1a), двухфотонная резонансная ионизация ионов или замкнутых оболочек атомов (рис. 1b). Возможны также различные комбинации этих процессов.

Последовательная двойная ионизация (Two-photon double ionization - 2PDI) атомов является простейшим нелинейным процессом, возможным под действием излучения ВУФ диапазона. Она протекает в два этапа: неполяризованный атом ионизируется первым фотоном, причем фотоэлектрон получает энергию, достаточную, чтобы улететь, не взаимодействуя с полем. Будучи тяжелее, ион остается в поле действия излучения и, если энергия фотонов выше ионизационного порога иона, то он повторно ионизируется (рис. 1a). Промежуточный ион поляризован, то есть сохраняет память о первой ступени процесса, однако между поглощением первого и второго фотонов его состояние может значительно измениться (например, произойдет деполяризация). Следует отметить, что все акты ионизации идут при поглощении фотонов одного и того же импульса ЛСЭ, и соответственно частота и поляризация фотонов одинаковы.

Резонансная двухфотонная ионизация слабосвязанных оболочек щелочных элементов или молекул (рис. 1b) активно исследовалась, так как для ее реализации достаточно полей оптического или инфракрасного диапазонов. Однако для атомов или ионов инертных газов, и тем более для ионизации внутренних оболочек требуются фотоны большей энергии. Этот процесс может происходить как вариация второй ступени последовательной двойной двухфотонной ионизации, когда энергия фотона выше порога ионизации атома, но ниже порога ионизации однократного иона, и называется последовательная двойная трехфотонная ионизация (Three-photon double ionization - 3PDI).

Предметом исследования являются векторные характеристики, а именно, угловые распределения и угловые корреляционные функции фотоэлектронов, а также различного рода дихроизмы, в кратной фотоионизации атомов несколькими фотонами. Выбранные мишени и параметры излучения соответствуют реализации многофотонного режима ионизации, а не режима сильного поля. Особенностью многофотонной

ионизации в вакуумно-ультрафиолетовом диапазоне является то, что уже одного-двух фотонов достаточно, чтобы ионизовать атом, поэтому особенную роль приобретают процессы в непрерывном спектре. Поскольку первый акт фотоионизации служит триггером для запуска последующих актов фотоионизации и Оже-распадов, то органической частью изучения кратной ионизации атомов в поле лазеров на свободных электронах, является изучение ионизации положительно заряженных ионов.

Физика процессов, вызванных совместным полем высокочастотного и оптического источников излучения, еще богаче. Высокочастотный фотон может возбудить дискретное состояние с последующей ионизацией поляризованного возбужденного состояния оптическим фотоном, то есть произойдет резонансная (или дважды резонансная) ионизация (рис. 1b). Тот факт, что частоты и поляризации полей управляются независимо, открывает множество возможностей для исследования динамики фотопроцессов. Для этих процессов можно обсуждать такие важные параметры, как круговой (циркулярный) и линейный дихроизм, интегральные и дифференциальные по углу фотоэмиссии.

Перечисленные процессы являются самыми простыми, в некотором роде базовыми. При соответствующем выборе частоты фотонов, могут реализоваться различные их комбинации. В диссертации рассматриваются следующие возможности: трехфотонная последовательная тройная ионизация (ЗРТИ) - следующая ступень 2PDI, происходящая когда энергия фотона выше порога ионизации дважды заряженного иона; двойная трехфотонная дважды резонансная ионизация, идущая когда энергия фотона лежит между порогами ионизации атома и иона (фактически, комбинация а и b (рис. 1)).

Методология исследования

Нелинейные процессы, изучаемые в диссертации, происходят скорее в многофотонном режиме, чем в режиме сильного поля. Критерием служит величина *параметра Келдыша* [9], характерная для типичных условий, реализуемых сейчас на лазерах на свободных электронах. Взаимодействие поля и атома описывается в низшем исчезающем порядке теории

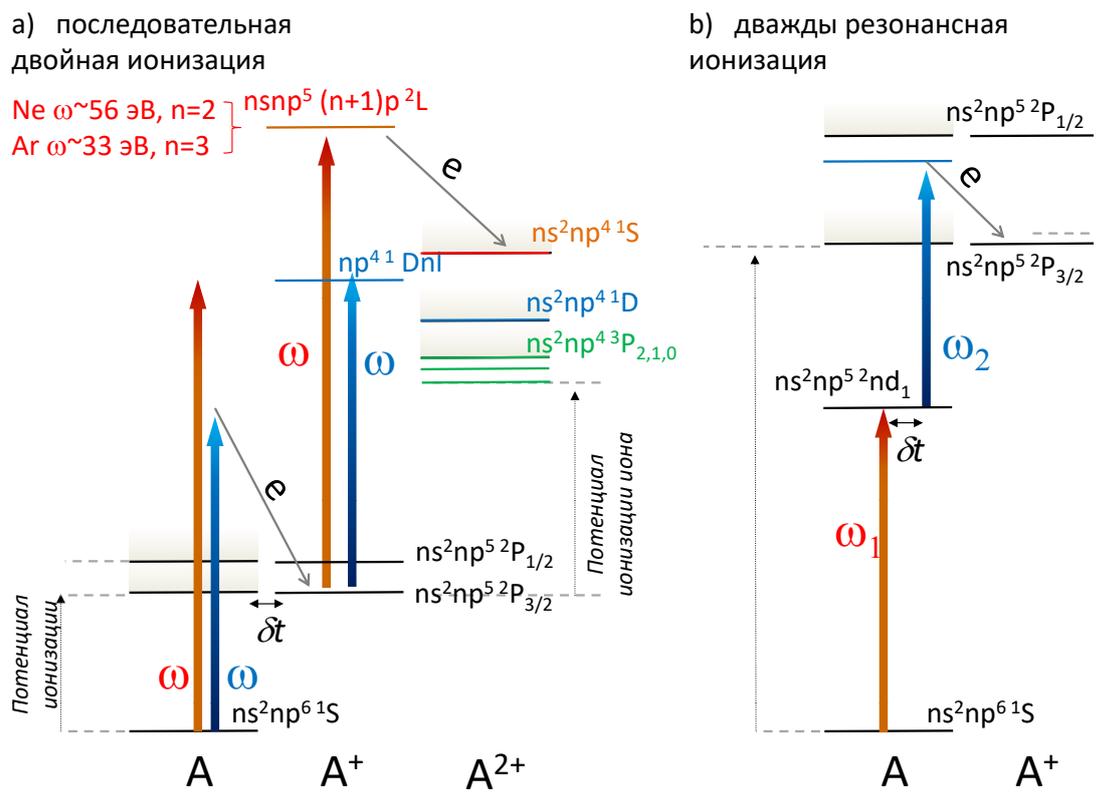


Рис. 1: Примеры простейших процессов, наблюдаемых в высокочастотном диапазоне. а) последовательная кратная ионизация атомов, б) двухфотонная резонансная ионизация замкнутых оболочек атомов (в оптическом диапазоне возможна только для слабо связанных оболочек щелочных элементов)

возмущения, как в дипольном приближении, так и с учетом первых недипольных поправок.

Для определения наблюдаемых величин, в диссертации используется подход, основанный на методе матрицы плотности [10] и статистических тензоров углового момента [11–13]. В этом подходе наблюдаемые величины, такие как угловые распределения и функции угловой корреляции фотоэлектронов, представляются в виде билинейных комбинаций амплитуд переходов в состояния с определенными значениями орбитального момента и его проекции, то есть в виде разложения по парциальным волнам. Метод статистических тензоров углового момента удобен для описания систем с различной поляризацией углового или спинового момента, в частности, для фотоионизации поляризованных систем поляризованными полями. Электромагнитное поле, распространяющееся в определенном направлении, и являющиеся когерентной суперпозицией состояний с определенной спиральностью $\lambda = \pm 1$ рассматривается в виде разложения в ряд по неприводимым тензорным операторам определенного ранга [14; 15].

Амплитуды переходов и фотоионизации, так же как автоионизационные ширины и энергии состояния, могут быть рассчитаны с необходимой степенью точности различными спектроскопическими методами. В диссертации, за небольшими исключениями (параграф 4.2, 4.3), используется метод самосогласованного поля Хартри-Фока с разложением по конфигурация, иногда с последующей диагонализацией по полному моменту с использованием релятивистского Гамильтониана Брейта-Паули [16]. Качество спектроскопических моделей, как правило, проверялось сравнением с экспериментальными данными по атомной ионизации, являющейся первой ступенью рассматриваемых в диссертации процессов [17–21].

Научная новизна

На основе формализма статистических тензоров развита теория процессов последовательной ионизации атомов небольшим числом фотонов диапазона вакуумного ультрафиолета или мягкого рентгена, применяемая для излучения средней интенсивности. Получены общие выражения, позволяющие определить дифференциальные и интегральные сечения

кратной ионизации, а также функцию угловой корреляции фотоэлектронов. Теоретический подход позволил определить критерии необходимости выхода за пределы дипольного приближения, и рассчитать соответствующие недипольные поправки.

(1) На основании развитого формализма были впервые получены параметры, характеризующие угловые распределения и угловые корреляционные функции фотоэлектронов в процессе двойной двухфотонной ионизации атомов инертных газов полями с линейной и круговой поляризацией. Продемонстрирована роль поляризации промежуточного ионного состояния, и его деполяризации за счет эволюции подуровней тонкой структуры между актами поглощения фотона.

(2) Впервые показана возможность реализации полного эксперимента при последовательной кратной ионизации атома.

(3) Обнаружена возможность наблюдения недипольных эффектов в процессе двойной двухфотонной ионизации, причем указанная возможность реализуется в области энергий много ниже, чем предполагалось ранее. Исследовано, как изменение поляризации меняет возможные каналы процесса двойной двухфотонной ионизации, и продемонстрировано, что значимость недипольных эффектов может быть значительно подчеркнута соответствующим выбором поляризации излучения.

(4) Исследована роль ридберговских и частично-дырочных автоионизационных состояний иона в процессе последовательной кратной ионизации. Впервые получены дифференциальные характеристики фотоэлектронов при ионизации ионов в окрестности автоионизационных состояний. Показано, как автоионизационные состояния одной из ступеней меняют дифференциальные характеристики электронов, испущенных на другой ступени.

(5) Развитый формализм применен для исследования процессов кратной ионизации большим числом фотонов. Впервые получены дифференциальные и интегральные спектры фотоэлектронов при тройной трехфотонной ионизации атома неона. Предсказано существование корреляций между вероятностями испускания фотоэлектронов на несмежных ступенях. Исследована возможность двойной трехфотонной ионизации, с резонансно усиленной ступенью ионизации иона. Открыт

новый тип автоионизационных состояний ионов инертных газов, и указана возможность реализации нового механизма двойной дважды резонансно усиленной трехфотонной ионизации.

(6) Получены общие выражения, описывающие угловые распределения фотоэлектронов при однократной ионизации атомов комбинированным полем двух источников с различной частотой и поляризацией, применимые как для резонансных процессов типа накачка-зондирование, так и для прямой ионизации. Подход применен для определения наблюдаемых при дважды резонансной ионизации атома ксенона для произвольных комбинаций поляризаций полей. Впервые показано, что измерение угловых распределений фотоэлектронов при двухчастотной ионизации может использоваться как метод определения параметров сверхтонкой структуры в условиях частичного перекрытия данных подуровней.

Теоретическая и практическая значимость

Полученные в результате диссертационного исследования аналитические выражения для наблюдаемых - угловых распределений и угловых корреляционных функций фотоэлектронов, интегральных и дифференциальных дихроизмов, - являются довольно общими и применимы для других оболочек или мишеней, или при отличных от рассмотренных условиях когерентности. При подстановке соответствующих амплитуд, рассчитанных каким-либо программным пакетом, они могут применяться к ионизации внутренних оболочек, позволяют учесть сильную связь каналов. Кроме того, сама по себе аналитическая форма наблюдаемых величин позволяет наложить определенные ограничения на максимальную или минимальную величину эффектов, оценить степень поляризации поля или деполяризации системы.

Чрезвычайная ресурсоемкость экспериментов с использованием лазеров на свободных электронах требует тщательного планирования постановки задачи еще на уровне подачи заявки на время на пучке. Поэтому потребность в расчетах, соответствующих реализованному или ожидаемому в ближайшем будущем условиям эксперимента, при учете спектроскопических особенностей реальных мишеней, чрезвычайно высока. Исследования

недипольных эффектов, возможности постановки полного эксперимента и роли автоионизационных состояний в кратной ионизации атомов уже послужили основой нескольких успешных экспериментов. Результаты, представленные в диссертации, могут использоваться для диагностики пучков, в первую очередь для определения степени круговой или линейной поляризации, и степени когерентности. Предложенный автором диссертации метод определения параметров сверхтонкого воздействия для частично перекрывающихся подуровней, реализованный на примере атома ксенона, уже применялся и другими авторами для атома криптона [1].

Положения, выносимые на защиту:

1 При последовательной двойной ионизации атомов инертных газов выстроенность промежуточного иона A^+ проявляется тем сильнее (коэффициент при поляризационном параметре выстроенности A_2 тем больше), чем более когерентно заселение подуровней его тонкой структуры, в предельном случае полностью когерентного заселения роль выстроенности в 3 раза выше, чем в предельном случае полностью некогерентного заселения. Утверждение справедливо для 2PDI как излучением линейной, так и круговой поляризации, как в дипольном приближении, так и с учетом первых поправок к дипольному приближению, для фотоэлектронов как первой, так и второй ступени.

2 При 2PDI атомов инертных газов вклад поляризации промежуточного состояния A^+ зависит от состояния конечного иона A^{2+} , и всегда имеет противоположный знак для термов $np^{41}S$ и $np^{43}P$. В пренебрежении зависимостью волновых функций непрерывного спектра от терма системы коэффициент при поляризационном параметре выстроенности A_2 относится как 1 : 1/10 : -1/2 для термов конечного иона $np^{41}S$, 1D и 3P , соответственно. Утверждение справедливо для 2PDI как излучением линейной, так и круговой поляризации, как в дипольном приближении, так и с учетом первых поправок к дипольному приближению, для фотоэлектронов как первой, так и второй ступени.

3 При 2PDI атомов инертных газов в области энергии, соответствующей бесструктурному непрерывному спектру, угловые распределения фотоэлектронов, испущенных на первой и второй ступени, подобны. Под

подобием подразумевается одинаковый знак параметров угловой анизотропии и одинаковая энергетическая зависимость. Это подобие сохраняется при 2PDI полем как линейной, так и круговой поляризации, при любой степени когерентности излучения, как в дипольном приближении, так и с учетом первых поправок к нему, для любого терма конечного дважды заряженного иона A^{2+} .

4 Для процесса 2PDI возможна реализация полного эксперимента, то есть извлечение всех комплексных амплитуд процесса из измеряемых величин. А именно, измерение параметров угловой анизотропии $\beta_{2,4}^{l,c}$ второго электрона в 2PDI полями линейной и круговой поляризации позволяет, в приближении независимых от терма состояний непрерывного спектра, извлечь все комплексные амплитуды ионизации второй ступени, и, в дополнение, определить модуль отношения амплитуд первой ступени. При дополнительном измерении какого либо из $\beta_{2,4}^{l,c}$ параметра угловой анизотропии первого электрона, возможно извлечь и фазу амплитуды первой ступени.

5 Зная какую-либо дифференциальную характеристику (линейный или круговой дихроизм, параметр угловой анизотропии фотоэлектронов $\beta_{2,4}$) процесса резонансной двухфотонной ионизации для изотопов с нулевым и отличным от нуля спином ядра, можно извлечь параметр сверхтонкой структуры промежуточного, резонансно возбуждаемого состояния, для подуровней, расстояние между которыми сопоставимо с их шириной, то есть когда уровни не могут быть разделены спектроскопически.

Достоверность

Достоверность результатов, представленных в диссертации, подтверждается тщательным анализом используемых приближений, проведением тестовых расчетов для сравнения с ранее исследованными системами, и, наконец, сопоставлением с имеющимися экспериментальными данными. Многие из результатов носили предсказательный характер и были верифицированы последующими экспериментами.

Апробация и экспериментальное подтверждение результатов, представленных в диссертации

Результаты, составившие основу диссертации, были представлены на российских и международных конференциях примерно в 50 докладах. Среди них приглашенные доклады на таких конференциях, как

International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces (Шанхай, 2024).

52nd International Conference of European Group on Atomic System (виртуальный, Загреб, 2022);

20th International Symposium on Correlation, Polarization and Ionization in Atomic and Molecular Collisions (Метц, 2019);

The 5th International Symposium on Intense Short Wavelength Processes in Atoms and Molecules (Париж, 2019);

The International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces (Будапешт, 2018);

The Third STEPS Symposium on Photon Science (Москва, 2018);

30th International Conference on Photonic Electronic and Atomic Collisions (Кернс, 2017);

International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces (Берлин, 2012);

International Conference of Electronic and Atomic Collisions (Белфаст, 2011);

International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces (Париж, 2008).

Исследования, результаты которых представлены в диссертации, проводились в тесном сотрудничестве с экспериментальными группами, работающими на ЛСЭ в Германии (FLASH и XFEL), Японии (SPring-8 и

SCSS), Италии (FERMI), а также синхротронном источнике SOLEIL (Франция) и имеют экспериментальное подтверждение. Частично результаты диссертации послужили основой реализованных заявок на время на пучке, частично расчеты были стимулированы результатами экспериментов.

Измерения угловых распределений фотоэлектронов при последовательной двойной двухфотонной ионизации инертных газов полем линейной поляризации в области предположительно бесструктурного непрерывного спектра проводились для неона, аргона и криптона ([22] и рис. 3.11 настоящей диссертации). Измерения были одним из первых экспериментов по фотоэлектронной спектроскопии, выполненных на FLASH. Энергия фотона была 38, 47.5, 52.3, 61.2, 89.9 и 91.1 эВ. Для неона согласие эксперимента и теории в пределах точности типичной для современных ЛСЭ. Для аргона и криптона при двойной ионизации в состоянии конечного иона $np^{43}P$ наблюдается значительное расхождение при энергии, соответствующих куперовскому минимуму. Причины расхождения обсуждаются в параграфе 3.2: именно для $np^{43}P$ терма конечного иона изменение схемы связи с LSJ (некогерентное заселение тонкой структуры промежуточного иона) на LS (когерентное заселение) превращает канал $|\varepsilon_1 s \varepsilon_2 s, \rangle$ из разрешенного в запрещенный. Так что наблюдаемое отклонение указывает на значительно более короткий импульс (или, точнее, на потерю временной когерентности). Надо отметить, что эта особенность не наблюдалась в более поздних измерениях на FERMI, где временная когерентность намного выше ([A8] и рисунок 3.7 настоящей диссертации). В [A8] представлены первые, и пока единственные, результаты измерений недипольных параметров угловой анизотропии в последовательной кратной ионизации. Измерения выполнены для двойной ионизации атома аргона линейно поляризованным излучением (рис. 3.7 диссертации).

Позднее, угловые распределения фотоэлектронов при двойной двухфотонной ионизации неона излучением как линейной, так и круговой поляризации, были проведены на FERMI [A4] со значительно более когерентным импульсом и высоким разрешением, для бесструктурного непрерывного спектра (рис. 6.1 диссертации) и в области

автоионизационных состояний (рис. 4). Там же была показана принципиальная возможность реализации полного эксперимента при последовательной двойной двухфотонной ионизации.

В [A19] представлены результаты измерений и расчетов угловых распределений фотоэлектронов при последовательной тройной трехфотонной ионизации неона фотонами с энергией 90 эВ. Несмотря на большое количество перекрывающихся линий, спектры фотоэлектронов, измеренных под различными углами, оказались в разумном согласии (рис. 3.21, 3.22 диссертации).

Измерения функции угловой корреляции фотоэлектронов требуют очень много времени и ресурсов, и для последовательной двойной ионизации были проведены всего дважды [A25], [A9]. В первой работе изучались угловые корреляции фотоэлектронов при двойной двухфотонной ионизации неона полем линейной поляризации. Работа [A25] была первой, и в течение десяти лет, единственной работой, и статистика была недостаточной для детального сравнения, однако общая форма функции угловой корреляции не противоречит имеющимся расчетам (рис. 3.20 диссертации). В [A9] изучались угловые корреляции электронов при ионизации аргона в области энергии фотонов, соответствующей ридберговской автоионизационной серии иона аргона. Расчеты автора диссертации воспроизвели параметры угловой анизотропии измеренных на совпадения электронов, объяснив, в частности инверсию знака β_4 вызванную АИС (параграф 4.2 диссертации).

Реализация механизма дважды резонансной трехфотонной ионизации была подтверждена измерениями спектров и угловых распределений фотоэлектронов, выполненных на SPring-8 для атома аргона при энергии около 22 эВ ([A24], [A21] и таблица 4.5 диссертации).

Исследование роли деполяризации в дважды резонансной ионизации ксенона было стимулировано первым в мире экспериментом по измерению угловых распределений, выполненного с разделением по изотопам [A17]. Измеренные и рассчитанные линейный и круговой дихроизм ([A17] и таблица 1) и параметры угловой анизотропии при ионизации полями линейной и круговой поляризации ([A12] и рис. 6) в хорошем согласии. Сравнение дифференциальных характеристик для различных изотопов позволило предложить и обосновать метод определения постоянной

сверхтонкой структуры для частично перекрывающихся подуровней, то есть когда состояния нельзя разрешить обычными спектроскопическими методами. Надо отметить, что позднее этот метод был применен другими авторами для исследования дважды резонансной ионизации криптона [1].

Публикации

Основные результаты диссертации изложены в 35 печатных работах, в том числе 29 статьях в рецензируемых научных журналах, удовлетворяющих «Положению о присуждении учёных степеней в МГУ имени М.В. Ломоносова», 3 статьях в других рецензируемых журналах, 2 публикациях в сборнике трудов конференции и одной публикации в сборнике выдающихся публикаций синхротронного источника Elettra (Elettra Highlights).

Личный вклад

В представленных в диссертации результатах личный вклад автора диссертации является определяющим. Автор лично выводила аналитические выражения для угловых распределений и функций угловой корреляции при последовательной кратной ионизации полями линейной и круговой поляризации, в том числе, при учете первых недипольных поправок, выполнила расчеты наблюдаемых при кратной ионизации неона, аргона и криптона.

Автором получены выражения описывающие прямую двухфотонную ионизацию атомов бихроматическим полем для различных экспериментально реализуемых комбинаций поляризаций (два поля круговой поляризации, два поля линейно поляризации, комбинация полей линейной и круговой поляризации).

Автором предложен и исследован механизм двойной дважды резонансной трехфотонной ионизации атомов и выполнены расчеты наблюдаемых характеристик при реализации такого механизма в атоме аргона.

Автору диссертации принадлежит идея извлечения параметров

сверхтонкого взаимодействия из измеренных угловых распределений фотоэлектронов при резонансной двухфотонной ионизации, и выполнены все расчеты данного процесса для экспериментально реализованной схемы в ксеноне.

Автору диссертации принадлежит формулировка постановки *полного эксперимента* для последовательной двойной ионизации, проведены соответствующие расчеты для атома неона и выполнено извлечение комплексных амплитуд из измеренных величин.

В работах [A5], [A6],[A12], [A13], [A14],[A16], [A23], [A33]. личный вклад составляет 0.8. В работах [A7],[A11], [A15], [A18], [A20], [A21],[A26], [A28], [A27] - 0.6. В работах [A2], [A1], [A3] личный вклад состоял в создании концепции и осуществлении работы аспирантами - 0.2.

В работах, совместных с экспериментальными группами, [A4], [A8],[A9], [A10],[A17],[A19], [A24] - 0.4, то есть 0.8 в теоретическую часть работы. Личный вклад в Nature physics [A4] явно обозначен в информации о публикации, как равный вкладу первого автора "These authors contributed equally: P. A. Carpeggiani, E. V. Gryzlova".

Структура и объём диссертации

Диссертация состоит из введения, описания современного состояния исследований по проблеме, пяти глав, заключения и библиографии. Общий объем работы составляет 187 страниц, включающих 54 рисунка, 9 таблиц и 1 приложение. Библиография включает 286 наименования на 28 страницах.

Краткое содержание диссертации

В главе 1 описывается современное состояние экспериментальных исследований по ионизации атомарных мишеней высокочастотным интенсивным излучением и описываются используемые ранее методы и подходы.

Глава 2 содержит общие положения используемого теоретического подхода, в главе 3 приведены аналитические выражения и численные расчеты наблюдаемых величин для последовательной ионизации в область бесструктурного непрерывного спектра, в главе 4 приведены результаты,

полученные для кратной ионизации в область автоионизационных состояний положительно заряженных ионов, в главе 5 приведены результаты для двухчастотной ионизации при учете эффектов сверхтонного расщепления. Наконец, в главе 6 сформулированы условия для реализации *полного эксперимента* по последовательной кратной ионизации.

В **глава 2** приводится формулировка основных положений теоретического метода.

Как уже говорилось, главное отличие фотопроцессов вызванных действием высокочастотного поля, состоит в том, что принципиально важную роль начинают играть переходы в области непрерывного спектра атома. Для описания различных дифференциальных характеристик фотопроцессов в диссертации используется метод статистических тензоров углового момента, давно и успешно применяемый в различных задачах атомной и ядерной физики. Наблюдаемые квантовомеханические величины представляются в виде аналитического выражения через приведенные матричные элементы неприводимых тензорных операторов. Одним из важных достоинств подхода является его гибкость, позволяющая выполнять расчеты амплитуд независимо, стационарными или зависящими от времени методами, с необходимой степенью детализации спектроскопических особенностей конкретной мишени.

Если состояние системы *смешанное*, то есть определяется элементами матрицы плотности на базисе функций $|\xi_0 J_0 M_0\rangle$, где J_0 полный угловой момент, M_0 его проекция и ξ_0 включает в себя все остальные квантовые числа, необходимые для описания состояния (как правило это энергия, орбитальный момент L_0 и спин S_0), тогда статистический тензор системы:

$$\begin{aligned} \rho_{k_0 q_0}(\xi_0 J_0; \xi'_0 J'_0) &= \sum_{M_0 M'_0} (-1)^{J'_0 - M'_0} (J_0 M_0, J'_0 M'_0 | k_0 q_0) \langle \xi_0 J_0 M_0 | \rho | \xi'_0 J'_0 M'_0 \rangle \\ &= \sum_{M_0 M'_0} (-1)^{J'_0 - M'_0} (J_0 M_0, J'_0 M'_0 | k_0 q_0) \rho_{J_0 M_0, J'_0 M'_0}. \end{aligned} \quad (1)$$

Представим возмущение системы электромагнитным полем частоты ω в виде разложения по неприводимым тензорным операторам, соответствующим различным мультипольностям с определенной спиральностью λ : $\hat{U} = \sum_{L\lambda} T_{\lambda}^L$. Соответствующие первым членам ряда

электрический дипольный и электрический квадрупольный операторы в нерелятивистском длинноволновом приближении:

$$\hat{T}_\lambda^{E1} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_n r_n Y_{1\lambda}(\theta_n, \phi_n), \quad (2)$$

$$\hat{T}_\lambda^{E2} = \frac{i\omega}{2\sqrt{3}c} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \sum_n r_n^2 Y_{2\lambda}(\theta_n, \phi_n), \quad (3)$$

здесь $c^{-1} = 1/137$ - постоянная тонкой структуры, r_n , θ_n и ϕ_n - координаты атомного электрона; суммирование проводится по всем электронам атома (иона).

Под действием возмущения, матрица плотности эволюционирует по закону $U\hat{\rho}U^*$ и на базисе конечных состояний $|\xi JM\rangle$ компоненты статистических тензоров углового момента

$$\begin{aligned} \rho_{kq}(\xi J; \xi' J') &= \frac{\pi\omega}{c} \sum_{k_0 q_0 K_\gamma q_\gamma} \hat{k}_0 \hat{k}_\gamma(k_0 q_0, k_\gamma q_\gamma | kq) \left\{ \begin{matrix} J_0 & L & J \\ J'_0 & L' & J' \\ k_0 & k_L & k \end{matrix} \right\} \rho_{k_0 q_0}(J_0, J'_0) \\ &\times \rho_{k_\gamma q_\gamma}(L, L') \langle \xi J || \hat{T}^L || \xi_0 J_0 \rangle \langle \xi' J' || \hat{T}^{L'} || \xi'_0 J'_0 \rangle^*. \end{aligned} \quad (4)$$

здесь введены стандартные обозначения nj -символов Вигнера, $\hat{a} = \sqrt{2a+1}$. Нормировочный коэффициент выбран таким образом чтобы для неполяризованного начального состояния тензор нулевого ранга давал сечение фотоионизации (фотовозбуждения). Размерность выражения (4) зависит от природы конечного состояния, принадлежит оно к дискретному или непрерывному спектру с соответствующей нормировкой. В дальнейшем будет использоваться сокращенное обозначение приведенных мультипольных амплитуд $T_{J_1, J_2}^L \equiv \langle \xi_2 J_2 || \hat{T}^L || \xi_1 J_1 \rangle$, связанных с полными амплитудами через теорему Вигнера-Эккарта:

$$\langle \xi_2 J_2 M_2 | \hat{T}_M^L | \xi_1 J_1 M_1 \rangle = (J_1 M_1, LM | J_2 M_2) \hat{J}_2^{-1} \langle \xi_2 J_2 || \hat{T}^L || \xi_1 J_1 \rangle. \quad (5)$$

Если рассматривать электромагнитное поле как возмущение, то статистический тензор любого следующего состояния получается последовательным применением соответствующее число раз формулы (4).

При фотоионизации, оператор эволюции в электромагнитном поле \hat{U} переводит состояние атома $|\xi_0 J_0 M_0\rangle$ в некоторое состояние непрерывного спектра $|\xi_f J_f M_f \mathbf{k} m_s\rangle$, где J_f , M_f полный момент образовавшегося иона и его проекция на ось квантования; ξ_f включает все остальные квантовые числа нужные для описания конкретной системы, а \mathbf{k} и m_s волновой вектор и проекция спина фотоэлектрона. Чтобы представить амплитуды перехода в состояния непрерывного спектра в виде суммы приведенных матричных элементов неприводимых тензорных операторов необходимо разложить волновую функцию фотоэлектрона, вылетевшего в направлении \mathbf{k} , с согласованием фаз, соответствующим сходящейся волне в ряд по орбитальному моменту (сферическим гармоникам):

$$|\mathbf{k} m_s\rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{\ell, j, m, m_j} (\ell m, 1/2 m_s | j m_j) Y_{\ell m}^*(\mathbf{k}/k) |\ell m 1/2 m_s : j m_j\rangle. \quad (6)$$

В представлении статистических тензоров углового момента, наблюдаемые величины, такие как угловые распределения фотоэлектронов и функция их угловой корреляции, угловые распределения ионов, спиновая поляризация фотоэлектронов и ионов получают сверткой (4) с соответствующим тензором эффективности детектора. Как правило, в современных экспериментах на ЛСЭ измеряют только первые две величины. Тензор эффективности детектора фотоэлектронов, вылетевших в некотором направлении (ϑ, φ) :

$$\varepsilon_{kq}(j, j') = (-1)^{J_f + J + k - 1/2} \hat{l} \hat{l}' \hat{j} \hat{j}' \hat{J} \hat{J}' (l 0, l' 0 | k 0) \times \left\{ \begin{matrix} k & J & J' \\ J_f & L' & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j & l & 1/2 \\ l' & j' & k \end{matrix} \right\} \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} Y_{kq}(\vartheta, \varphi). \quad (7)$$

l , j - орбитальный и полный момент фотоэлектрона, J_f - момент иона. В диссертации рассматриваются только процессы, когда эмиссия нескольких электронов происходит последовательно, поэтому фотоэлектроны испущенные на различных ступенях обладают различной энергией и их корреляционная функция определяется как прямое тензорное произведение выражения (7) примененного для каждого из фотоэлектронов. Как правило в диссертации обсуждаются параметры фотоэлектрона при ионизации в

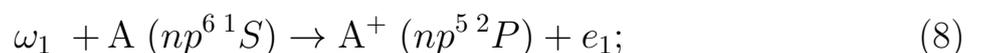
фиксированное конечное состояние - так называемые 'constant ionic state' (CIS) спектры. Это подразумевает, что разрешение по энергии позволяет отделить одно состояние иона от другого.

В теории, когда состояние изолировано, а эволюцией возмущения можно пренебречь, например, импульс уже закончился или предполагается слабый импульс бесконечной длительности, статистический тензор состояния (поляризация состояния) остается постоянным. На практике, при высокой плотности или температуре газовой мишени, в результате столкновений заселенности состояний с различными значениями магнитного квантового числа M со временем сравниваются а статистические тензора высоких рангов $\rho_{kq} \rightarrow 0$ ($k > 0$) (поляризация уменьшается). Последний эффект может быть устранен соответствующей постановкой эксперимента. Однако, может ли состояние рассматриваться как изолированное, существенно зависит от экспериментальных условий: очевидным критерием является сравнение разности энергий уровней с суммой их ширин и ширины импульса; помимо этого, имеет значение насколько быстро произойдет следующий акт взаимодействия. Если атом обладает ненулевым ядерным спином, то вследствие сверхтонкого расщепления возбуждение одиночного уровня становится затруднительным. Эти эффекты будут рассмотрены в соответствующих главах применительно к конкретным задачам.

Приведенные выражения носят общий характер и могут описать широкий класс явлений, далее будут конкретизированы для описания: двойной двухфотонной ионизации (2PDI) (глава 3), в том числе при учете структурных особенностей непрерывного спектра (глава 4); тройной трехфотонной ионизации (3PTI) (параграф 3.5), двойной трехфотонной ионизации (3PDI), также при учете резонансов в континууме (параграф 4.4), и дважды резонансной двухфотонной ионизации (глава 5).

В **главе 3** рассматривается последовательная кратная ионизация в области гладкого непрерывного спектра.

В этом параграфе рассматривается 2PDI атомов инертных газов. На первой ступени фотон ω_1 ионизирует атом, в результате чего возникает однократно заряженный ион $A^+(\xi_i J_i)$ и фотоэлектрон e_1



На второй ступени другой фотон ω_2 из того же импульса ионизирует ион, образуя конечный ион $A^{++}(\xi_f J_f)$ и второй фотоэлектрон e_2 ,

$$\omega_2 + A^+ (np^5 2P) \rightarrow A^{++} (np^4 3P, 1D, 1S) + e_2. \quad (9)$$

Таким образом при 2PDI матричные элементы в (4) имеют смысл амплитуд фотоионизации атома $T_{J_0, J_i l_1 j_1 J_1} = \langle \xi_i J_i l_1 j_1 J_1 || T || \xi_0 J_0 \rangle$ и иона $T_{J_1, J_f l_2 j_2 J_2} = \langle \xi_f J_f l_2 j_2 J_2 || T || \xi_i J_i \rangle$, где фотоэлектроны характеризуются орбитальным (l) и полным (j) угловыми моментами, промежуточный и конечный ионы - полными моментами J_i и J_f , соответственно.

Функция угловой корреляции фотоэлектронов получается сверткой статистического тензора конечного состояния с тензорами эффективности детектирования k -го фотоэлектрона.

$$\begin{aligned} W(J_f; \vartheta_1, \varphi_1, \vartheta_2, \varphi_2) &= \frac{\pi \omega_2}{c} \sum_{\substack{k_i q_i k_{\gamma_2} q_{\gamma_2} \\ J_i J_i'}} \hat{k}_i \hat{k}_{\gamma_2} (k_i q_i, k_{\gamma_2} q_{\gamma_2} | k_2 q_2) \rho_{k_i q_i} (J_i, J_i; \vartheta_1, \varphi_1) \\ &\times h_{k_i q_i} (J_i, J_i; t) \sum_{J_2 J_2' L^{(2)} L', (2)} \left\{ \begin{array}{c} J_i \quad L^{(2)} \quad J_2 \\ J_i' \quad L', (2) \quad J_2' \\ k_i \quad k_{\gamma_2} \quad k_2 \end{array} \right\} \rho_{k_{\gamma_2} q_{\gamma_2}} (L^{(2)}, L', (2)) \\ &\times T_{J_i, J_2}^{L_2} T_{J_i, J_2}^{L_2'} \varepsilon_{k_2 q_2}^* (j_2, j_2') \end{aligned} \quad (10)$$

с разложением статистического тензора промежуточного состояния J_1 на статистический тензор промежуточного иона J_i и первого фотоэлектрона j_1 :

$$\begin{aligned} \rho_{k_i q_i} (J_i, J_i'; \vartheta_1, \varphi_1) &= \frac{\pi \omega_1}{c \hat{J}_0^2} \sum_{L^{(1)} L', (1)} \hat{k}_i \hat{k}_1 (k_i q_i, k_1 q_1 | k_{\gamma_1} q_{\gamma_1}) \rho_{k_{\gamma_1} q_{\gamma_1}} (L^{(1)}, L', (1)) \\ &\times (-1)^{J_0 + k_{\gamma_1} + J_1 + L', (1)} \left\{ \begin{array}{c} L^{(1)} \quad J_1 \quad J_0 \\ J_1' \quad L', (1) \quad k_{\gamma_1} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} J_i \quad j_1 \quad J_1 \\ J_i \quad j_1' \quad J_1' \\ k_i \quad k_1 \quad k_{\gamma_1} \end{array} \right\} \\ &\times T_{J_0, J_1}^{L^{(1)}} T_{J_0, J_1'}^{L', (2)} \varepsilon_{k_1 q_1}^* (j_1, j_1'), \end{aligned} \quad (11)$$

Поляризация промежуточного иона зависит от поляризации излучения и, в зависимости от условий эксперимента, может измениться к моменту

поглощения второго фотона за счет деполяризации $h_{k_i q_i}(J_i, J_i; t)$. Интегрирование (10) по углам испускания одного из фотоэлектронов дает выражение для углового распределения другого.

Для 2PDI излучением круговой поляризации система сохраняет аксиальную симметрию относительно направления распространения поля, угловое распределение каждого фотоэлектрона в системе $\mathbf{k} \parallel \mathbf{z}$ описывается выражением:

$$\frac{d\sigma_i}{d\Omega_i} = \frac{\sigma_i}{4\pi} \left(1 + \sum_{n=1,5} \beta_n^{(i)} P_n(\cos \vartheta_i) \right). \quad (12)$$

σ_i - интегральное сечение двухфотонной двойной ионизации.

Для 2PDI излучением линейной поляризации аксиальная симметрия сохраняется только в дипольном приближении, а угловое распределение имеет самый простой вид в системе $\varepsilon \parallel \mathbf{z}$:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_i}{d\Omega_i} = \frac{\sigma_i}{4\pi} & \left(1 + \sum_{n=2,4} \beta_n^{(i)} P_n(\cos \vartheta_i) + \right. \\ & \left. + (\delta^{(i)} + \gamma_2^{(i)} \cos \vartheta_i^2 + \gamma_4^{(i)} \cos \vartheta_1^4) \cos \vartheta_i \cos \varphi_i \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Теория предсказывает, что угловое распределение фотоэлектронов первой ступени описывается более сложным выражением, чем при однократной ионизации неполяризованного атома. Это происходит потому, что в выражениях (12) - (13) подразумевается, что состояние конечного иона известно, то есть первый фотоэлектрон детектируется на совпадение с конечным ионом или вторым фотоэлектроном. При суммировании угловых распределений первого электрона по всем возможным термам конечного иона эта зависимость нивелируется.

На рисунках 2 - 3 представлены результаты расчетов параметров угловой асимметрии второй ступени последовательной двойной двухфотонной ионизации атомов инертных газов.

Расщепление за счет спин-орбитального взаимодействия в промежуточном ионе $Ne^+(2p^{5/2}P_{1/2;3/2})$, $Ar^+(2p^{5/2}P_{1/2;3/2})$, и $Kr^+(4p^{5/2}P_{1/2;3/2})$ составляет 0.097 eV, 0.177 eV, и 0.656 eV, соответственно. Соответствующие время прецессии: 42.74 fs для Ne^+ , 23.30 fs для Ar^+ , и 6.21

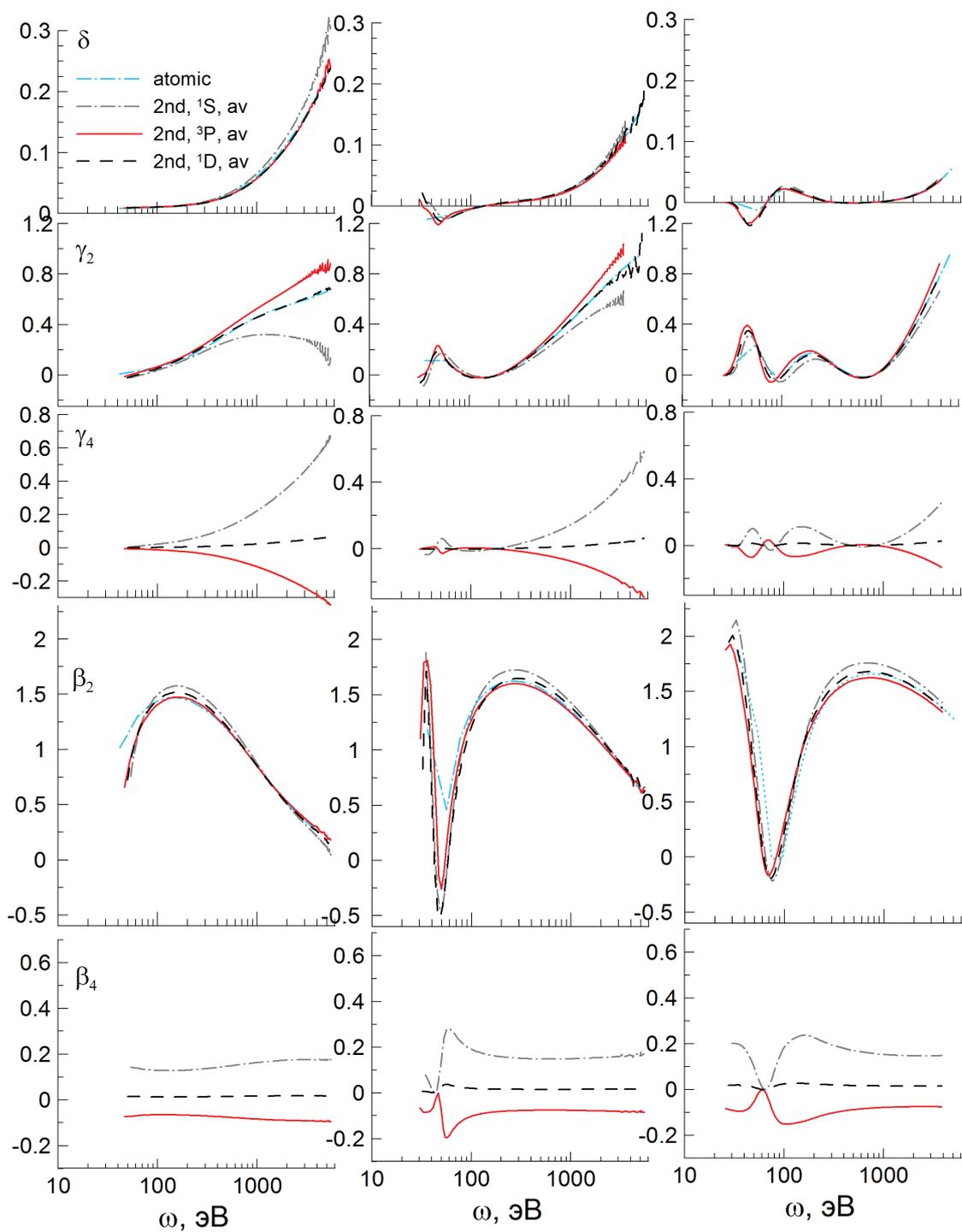


Рис. 2: Параметры асимметрии угловых распределений фотоэлектронов второй ступени 2PDI линейно поляризованным излучением неона (левый столбец), аргона (средний), криптона (правый) для различных термов конечного np^4 иона: 3P - красные сплошные линии, 1D - черные пунктирные, 1S - серые точечные.

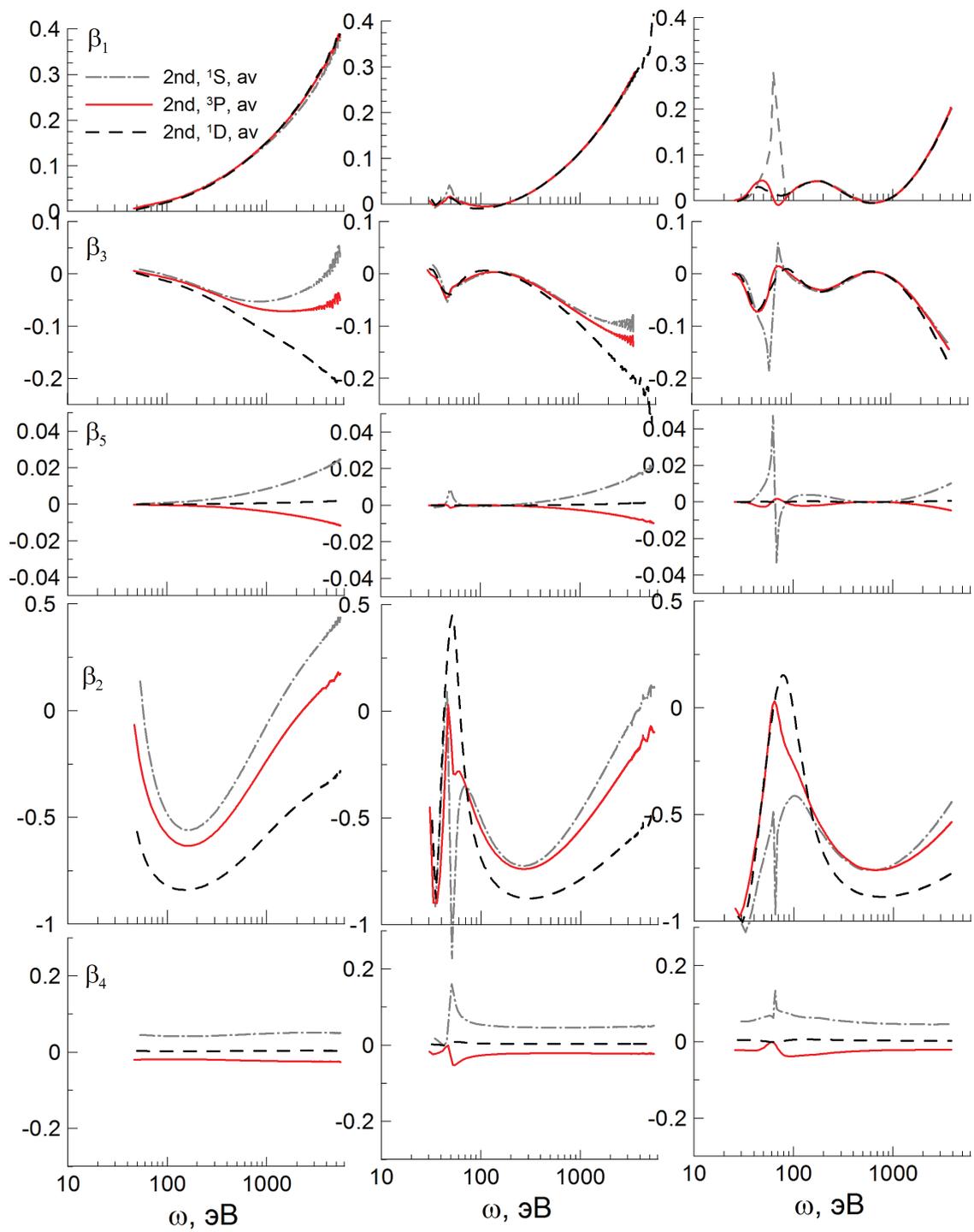


Рис. 3: Тоже, что на рис. 2 для 2PDI полем круговой поляризации

fs для Kr^+ . Таким образом, возбуждение спин-орбитального дублета промежуточного иона можно считать некогерентным для достигнутых в настоящее время параметров импульсов ЛСЭ, однако в диссертации также представлены результаты для когерентного возбуждения, поскольку развитие техники генерации ультракоротких ВУФ импульсов может привести к реализации подобных условий в ближайшее время.

Результаты расчетов, представленные на рисунках 2, 3 - это первые расчеты угловых распределений фотоэлектронов при 2PDI в мировой литературе, выполненные в приближении LSJ -схеме связи с выходом за пределы дипольного приближения. Возникновение параметров асимметрии высоких рангов (β_4, γ_4 для линейной поляризации или $\beta_{4,5}$ для круговой) является следствием нелинейной природы процесса. Влияние поляризации промежуточного иона на наблюдаемые величины имеет противоположный знак для $np^{43}P$ и $np^{41}S$ термов конечного иона, и практически отсутствует для $np^{41}D$ терма.

На основании проведенных расчетов можно утверждать что нелинейные недипольные эффекты могут наблюдаться в угловых распределениях 2PDI уже при энергии несколько десятков электрон-вольт. С экспериментальной точки зрения использование полей круговой поляризации может оказаться предпочтительнее, так как система сохраняет аксиальную симметрию, в то время как в поле линейной поляризации симметрия существует только в дипольном приближении. Наличие же аксиальной симметрии является крайне желательным при использовании широко распространенных сейчас velocity map imaging (VMI) детекторов.

Неожиданным явилось обнаружение резкой модуляции параметров угловой асимметрии при 2PDI полем круговой поляризации, особенно подчеркнутой для $np^{41}S$ состояния конечного иона, сохраняющейся в любой спектроскопической модели. Например, при энергии соответствующей Куперовскому минимуму первой ступени ионизации $\beta_2^{(2)} = -\frac{65}{56}$ и $\beta_4^{(2)} = \frac{9}{56}$, в то время как при энергии Куперовского минимума второй ступени $\beta_2^{(2)} = \beta_4^{(2)} = 0$.

В **Главе 4** исследуется роль автоионизационных состояний в последовательной кратной ионизации.

Если на первой и/или второй ступени последовательной кратной

ионизации возбуждается автоионизационное состояние, то выражения главы 2.1 (2.13 -2.25) остаются справедливыми, при условии, что приведенный матричный элемент теперь учитывает интерференцию квазидискретного состояния с сопряженным континуумом. Интерференция между автоионизационными амплитудами $\mathcal{A}_{\ell j J} = \langle \xi_f J_f \ell j J \| \hat{V} \| J \rangle$ и амплитудами прямой фотоионизации $D_{J_i, \ell j J} = \langle \xi_f J_f \ell j J \| \hat{D} \| \xi_i J_i \rangle$ учитывается заменой матричных элементов на

$$\mathcal{D}_{J_i, J_f \ell j J} = \left(\sum_{\ell' j' J'} D_{J_i, \ell' j' J'} \frac{\mathcal{A}_{\ell j J} \mathcal{A}_{\ell' j' J'}}{\sum_{\ell'' j'' J''} |\mathcal{A}_{\ell'' j'' J''}|^2} \frac{q - i}{\varepsilon + i} + D_{J_i, \ell j J} \right), \quad (14)$$

где q - параметр Фано, $\varepsilon = 2 \frac{E - E_r}{\Gamma_r}$ - отстройка энергии от резонансной, выраженная в единицах полуширины. Расчет амплитуд автоионизации и фотоионизации в подобных условиях является крайне нетривиальной задачей и требует смешивания большого числа конфигураций, индивидуальных в каждом конкретном случае. Вдали от резонанса амплитуда (14) переходит в амплитуду прямой ионизации ($\varepsilon \rightarrow \pm \infty$): $\mathcal{D}_{J_i, \ell j J} \rightarrow D_{J_i, \ell j J}$.

Присутствие автоионизационных состояний в процессе ионизации приводит к тому, что некоторые каналы усиливаются или подавляются, причем это изменение может происходить в очень узком диапазоне энергий. Приближение LS -связи и, тем более, модель Купера-Заре (параграфы 3.2 и 3.3), оказываются, таким образом, неприменимыми.

В однократных ионах инертных газов автоионизационные состояния группируются следующим образом: при энергии чуть выше (до нескольких эВ) нижнего порога ионизации иона $ns^2 np^4 {}^3P_2$ расположены ридберговские автоионизационные состояния вида $ns^2 np^4 {}^1Dnl$ и $ns^2 np^4 {}^1Snl$, распадающиеся за счет поворота спина электрона; далее, при энергиях на 10-20 эВ выше порога, расположены частично-дырочные состояния вида $ns^1 np^4 mp$ ($m > n$ рис. 1а), распадающиеся за счет заполнения внутренней оболочки одним из внешних электронов. Все остальные АИС, такие как дважды возбужденные или возбуждение глубоких оболочек, расположены выше по энергии и их рассмотрение выходит за пределы диссертации. Ниже будут рассмотрены две системы, для которых были успешно реализованы

измерения угловых распределений фотоэлектроном при 2PDI затрагивающей дипольные резонансы: частично-дырочные АИС в неоне в приближении LS -связи и ридберговские АИС в аргоне, для которых необходимо учитывать тонкое взаимодействие (LSJ -связь).

Последовательная двойная ионизация в окрестности частично-дырочных АИС ионов

Первый эксперимент по фотоэлектронной спектроскопии при ионизации ионов в области АИС был реализован как вторая ступень 2PDI неона (ω в диапазоне 50-60 эВ) на ЛСЭ FERMI. Расчеты энергий, ширин и амплитуд переходов проводились методом самосогласованного поля со смешиванием конфигураций, с последующим учетом релятивистских поправок (гамильтониан Брейта-Паули).

Для этой группы АИС в ионе неона роль спин-орбитального взаимодействия и смешивания по полному моменту оказалась невелика, и наблюдаемые хорошо воспроизводятся в LS -связи. Для расчета наблюдаемых справедливы выражения (3.8-3.14), а амплитуда (14) трансформируется следующим образом:

$$\mathcal{D}_{L_i, \xi_f J_f \ell L} = \left(\sum_{\ell' L'} D_{L_i, \ell' L'} \frac{\mathcal{A}_{\ell L} \mathcal{A}_{\ell' L'}}{\sum_{\ell'' L''} |\mathcal{A}_{\ell'' L''}|^2} \frac{q - i}{\varepsilon + i} + D_{L_i, \ell L} \right). \quad (15)$$

Профильные индексы Фано: $q_{2D} = -3.5$, $q_{2P} = -4.5$, $q_{2S} = 6$. В соответствии с длительностью импульсов ЛСЭ FERMI (≈ 50 fs), предполагалось некогерентное возбуждение тонкой структуры промежуточного иона $\text{Ne}^+(^2P_j)$ [A23].

На рисунке 4 представлены рассчитанные и измеренные отношения выхода ионов в $2p^{41}D$ и $2p^{43}P$ состояния (a,b) и параметры угловой анизотропии для различных термов конечного иона (c-f) при ионизации излучением линейной и круговой поляризации в окрестности АИС 56.55 эВ. В области гладкого континуума отношение выхода ионов близко к статистическому $5/9$, а в окрестности АИС приближается к 2 (рис. 4a). Подобное же поведение наблюдается и для ионизации полем круговой поляризации (рис. 4b), хотя для последней нечетные ранги поляризации (*ориентация*) приводит к большему отклонению от статистической величины в отсутствии резонансов ($\omega < 56.5$ эВ).

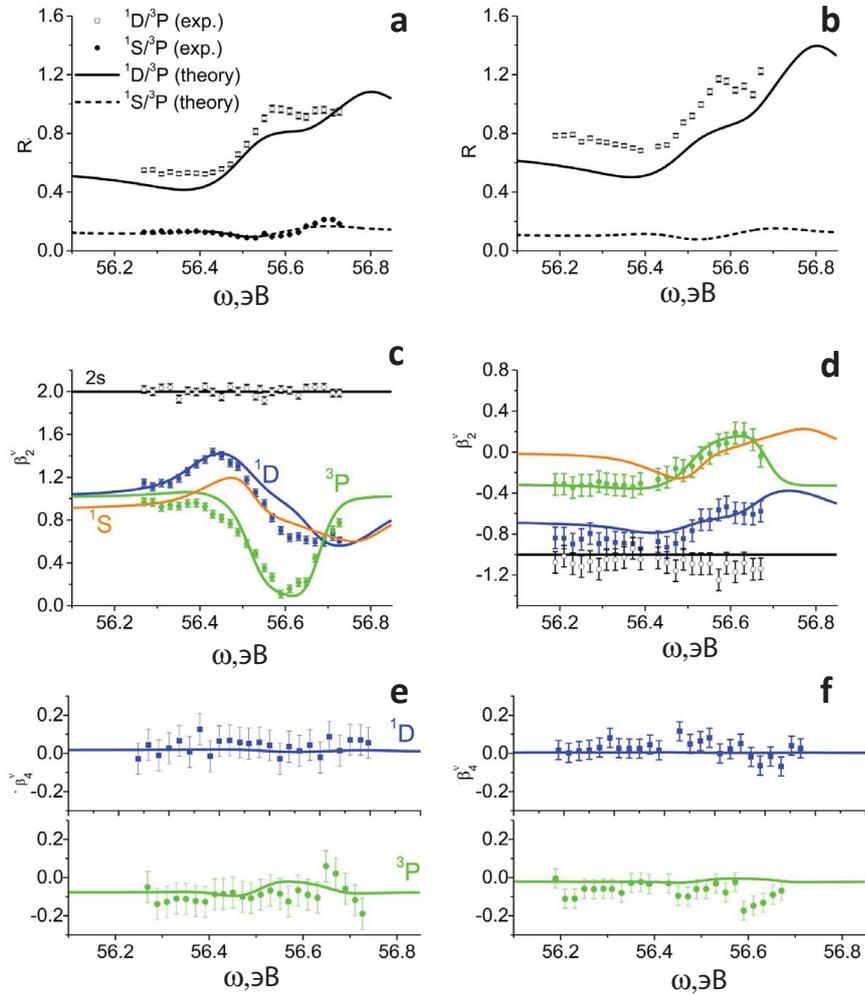


Рис. 4: Измеренные и рассчитанные отношения парциальных сечений (a,b), и параметры угловой анизотропии как функция энергии фотона при 2PDI неона полями линейной (левый столбец) и круговой (правый столбец) поляризации для различных термов конечного иона. Параметры атомной ионизации из 2s оболочки, используемые для калибровки, показаны черным.

Измеренные параметры угловой анизотропии, как для ионизации полем линейной (13), так и круговой (12) поляризации в разумном согласии с рассчитанными. Присутствие резонансных структур приводит к изменению роли отдельных каналов ионизации. Однако, если доминирует один канал, то даже в окрестности АИС параметры угловой анизотропии остаются гладкими. В данном случае параметры угловой анизотропии испытывают модуляцию для $2p^{41}D$ иона в окрестности 2D АИС, для $2p^{43}P$ иона в окрестности 2P АИС, поскольку ${}^2D \rightarrow 2p^{41}D\epsilon s/\epsilon d$ и ${}^2P \rightarrow 2p^{43}P\epsilon s/\epsilon d$, в то время как только по одному разрешенному каналу остается для распадов ${}^2D \rightarrow 2p^{43}P\epsilon d$ и ${}^2P \rightarrow 2p^{41}D\epsilon d$.

Подробнее эти результаты обсуждаются в главе 6 в контексте обсуждения *полного эксперимента*.

Последовательная двойная ионизация в окрестности серии ридберговских АИС ионов

Присутствие в спектре автоионизационных состояний, возбуждаемых на какой-либо ступени последовательной ионизации, может заметно повлиять на характеристики фотоэлектронов всех (других) ступеней, особенно, если электроны измерены на совпадения. Однако этот тип измерений требует очень много ресурсов, и для 2PDI в литературе представлены только два эксперимента: для неона при $\omega \sim 44$ эВ [A25] и аргона при $\omega \sim 28$ эВ [A9], оба выполнены на ЛСЭ FLASH, поэтому излучение было линейно поляризовано.

Схема последовательной 2PDI аргона при энергии, близкой к порогу ионизации иона, показана на рисунке 1А. В соответствии с (8-9), сперва атом Ar ионизируется, испуская первый фотоэлектрон e_1 и однократно заряженный ион $Ar^+(3p^5 {}^2P_{1/2,3/2})$, затем второй фотон ионизирует ион, производя второй фотоэлектрон e_2 и дважды заряженный ион Ar^{++} . Состояние иона ${}^2P_{3/2}$ *выстроено*, так как фотон линейно поляризован, в то время как ${}^2P_{1/2}$ изотропно. На первой ступени энергия фотона соответствует возбуждению $Ar^*(3s3p^6 5p, 6p)$ АИС, а на второй - возбуждению серии ридберговских АИС $Ar^{+*}(3p^4 {}^1D 6d, 7d, 8d)$. В области энергий между 27.5 эВ и 28.5 эВ автоионизационные состояния $Ar^+ 3p^4({}^1D) 6d {}^2D$; $3p^4({}^1D) 7d {}^2D$; $3p^4({}^1D) 8d {}^2D$ формируют серию резких резонансов, в то время как те же конфигурации с 2P термом $3p^4({}^1D) nd {}^2P$

образую гладкий фон. Серии АИС $3p^4(1D)nd^2S$ и $3p^4(1D)ns^2D$ отсутствуют в этой области энергии.

Для удобства обсуждения взаимного влияния двух ступеней 2PDI результаты расчетов собраны на рисунке 5. Верхняя строка рис. 5 представляет параметры однофотонной атомной ионизации: спектр фотоэлектронов (а), параметр угловой анизотропии β (b) и выстроенность иона Ar^+ (с). Серия резонансов $3s3p^6np$ в аргоне представляет собой окна прозрачности. Везде, кроме резонанса, доминирующим каналом является $Ar^+(3p^5^2P_{1/2,3/2})\epsilon d$. В резонансе относительный вклад ϵs -волны увеличивается, приводя к резкой модуляции параметра угловой анизотропии. Выстроенность промежуточного иона $Ar^+(3p^5^2P_{3/2})$ меняется от $\mathcal{A}_{20} \approx -0.15$ в области гладкого континуума до $\mathcal{A}_{20} = -1$ в резонансе.

Панели 5d,e,f показывают спектр и параметры угловой анизотропии второго электрона e_2 . Энергия фотоэлектронов, испущенных на второй ступени, не превышает 1 эВ, так как энергия фотона немногим выше порога ионизации $Ar^{++}(3p^4^3P_{2,1,0})$. Каждый резонанс расщепляется на три состояния, так как остаточный ион находится в триплетном состоянии. Отношение соответствующих сечений примерно $5 : 3 : 1$, то есть близко к статистическому весу конечного ионного состояния. Зависимости параметров угловой анизотропии $\beta_{2,4}^{(1)}$ и $\beta_{2,4}^{(2)}$ демонстрируют резкие выбросы, когда любая из амплитуд проходит 0 или максимум, поэтому теоретические данные на рис. 5e,f,h,i построены после свертки с гауссовской функцией разрешения высокоточного детектора (FWHM $5 \cdot 10^{-4}$ эВ). Панель 5f показывает ненулевой параметр $\beta_4^{(2)}$, как результат выстроенности промежуточного состояния. Модуляция выстроенности Ar^+ , вызванная АИС атома, приводит к модуляции $\beta_4^{(2)}$; соответствующая структура отмечена звездочкой на рис. 5f.

Рисунки 5g,h,i показывают характеристики первого фотоэлектрона в 2PDI, то есть в предположении, что регистрируется либо дважды заряженный ион, либо энергия второго фотоэлектрона. Вопреки интуитивным ожиданиям, спектр на рис. 5g выглядит скорее подобно спектру второго электрона (рис. 5d), чем спектру атомной ионизации (рис. 5a). Указание на АИС атома едва прослеживается и отмечено оранжевой звездочкой 5g. Напротив, параметр $\beta_2^{(1)}$ (рис. 5h) выглядит

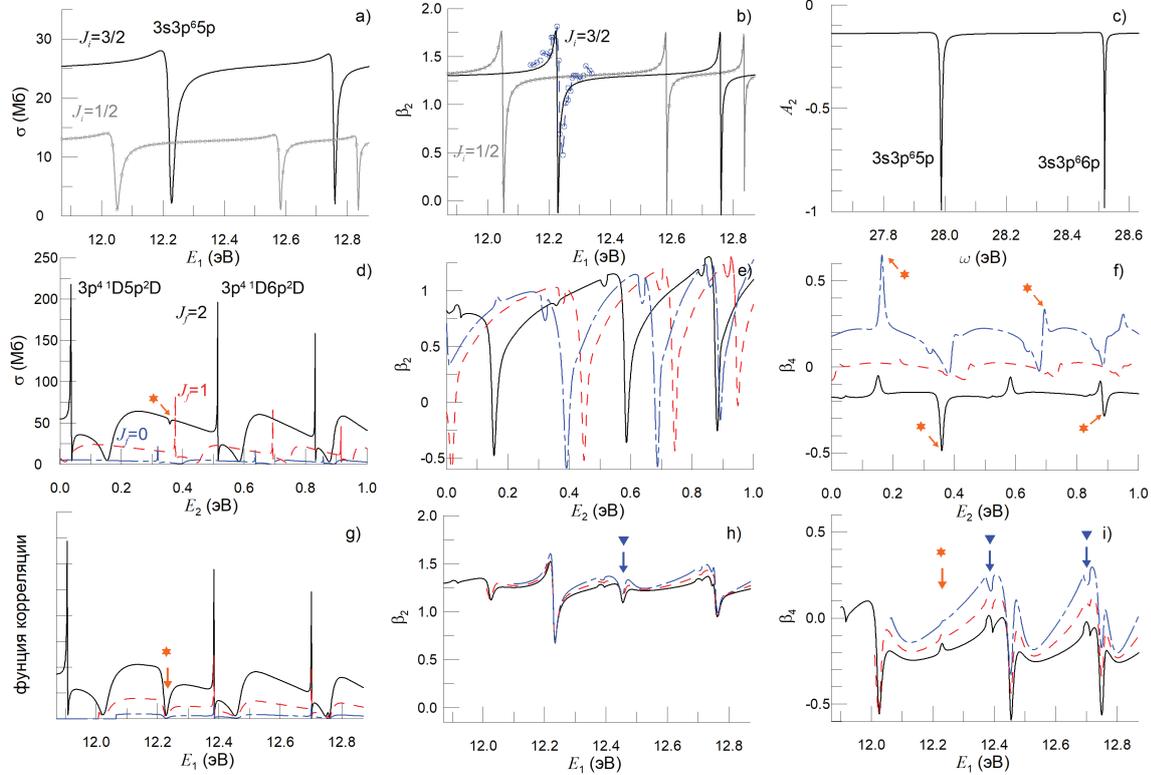


Рис. 5: Спектр фотоэлектрона (a), параметр угловой анизотропии β (b) и выстроенность \mathcal{A}_{20} иона $\text{Ar}^+(3p^5\ ^2P_{3/2})$ (c) в однофотонной атомной ионизации. Спектр второго фотоэлектрона e_2 (d) и соответствующие параметры анизотропии $\beta_2^{(2)}$ (e) и $\beta_4^{(2)}$ (f) в 2PDI. Спектр первого фотоэлектрона e_1 (g) и соответствующие параметры анизотропии $\beta_2^{(1)}$ (h) и $\beta_4^{(1)}$ (i) в 2PDI. Черные сплошные линии: $J_i = 3/2, J_f = 2$; красные пунктирные: $J_i = 3/2, J_f = 1$; синие точечные: $J_i = 3/2, J_f = 0$. Серые точечные линии на панелях (a) и (b) соответствуют промежуточному иону $\text{Ar}^+(3p^5\ ^2P_{1/2})$. Оранжевые стрелочки и звездочки отмечают проявление атомного $3s3p^65p$ АИС. Голубые треугольники отмечают проявление резонансов второй ступени в параметрах первого электрона. Расчеты выполнены в представлении скорости. Экспериментальные данные на панели (b) из [21].

подобно традиционной атомной ионизации (рис. 5b). Параметр четвертого ранга $\beta_4^{(1)}$ (рис. 5i) появляется только как результат корреляций с вторым фотоэлектроном [A28]. Примечательно, что резонансные структуры в $\beta_4^{(1)}$ первого электрона - это проявление ионных АИС, а не атомных. Энергии, соответствующие АИС в Ar^+ (рис. 5d) отмечены голубыми треугольниками. Усреднение $\beta_4^{(1)}$ для пучка с несущей частотой $\omega = 27.9$ эВ и шириной FWHM=0.5 эВ дает небольшую положительную величину, в соответствии с экспериментом [A9].

В диссертации в главе 4.2 также представлены результаты для дважды резонансной двойной трехфотонной ионизации, проходящей с участием АИС иона Ar^{++} отрицательной четности.

В **главе 5** рассматриваются эффекты, обусловленные деполяризацией ионизируемого состояния, вызванной *сверхтонким взаимодействием*. В отличие от глав 3 и 4, здесь полагается, что возбуждение и ионизация происходят под действием разных полей. Для изучения зависящих от времени явлений это практичнее, так как появляется возможность менять задержку между импульсами. Помимо этого, поляризация и направление распространения пучков могут изменяться независимо, что позволяет изучать различного рода дихроизм. Везде в этой главе используется дипольное приближение, поэтому для краткости введем обозначение дипольного статистического тензора $\rho_{k\gamma_i q\gamma_i}(E1, E1) \equiv \rho_{k_i q_i}^{(\gamma_i)}$.

Когда ядро обладает ненулевым спином, хорошо определенными квантовыми числами является полный момент системы - векторная сумма полного момента электронной оболочки и спина ядра $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$, и его проекция. Пусть неполяризованный атом возбуждается фотоном ω_1 из состояния с полным угловым моментом системы F_0 в состояние F_1 . Статистический тензор возбужденного состояния:

$$\rho_{k_1 q_1}(F_i; F'_i) = \hat{F}_0^{-1} (-1)^{F_0 + F_i + k_1 + 1} \hat{F}_i \hat{F}'_i \rho_{k_1 q_1}^{(\gamma_1)} \left\{ \begin{array}{ccc} 1 & F_i & F_0 \\ F'_i & 1 & k_1 \end{array} \right\} D_{F_0, F_i} D_{F_0, F'_i}^* \quad (16)$$

Приведенный дипольный матричный элемент $D_{F_0 F_i} = \langle \xi_i F_i || \hat{D} || \xi_0 F_0 \rangle$ определяется матричным элементом электронной оболочки $D_{J_0 J_i} \equiv \langle \xi_i J_i || \hat{D} || \xi_0 J_0 \rangle$ и множителем, учитывающем сверхтонковую

структуру:

$$D_{F_0 F_i} = \hat{F}_i \hat{F}_0 (-1)^{F_0 + J_i + I + 1} \begin{Bmatrix} F_0 & F_i & 1 \\ J_i & J_0 & I \end{Bmatrix} D_{J_0 J_i}. \quad (17)$$

Как следует из решения нестационарного уравнения Шредингера, каждое собственное состояние системы $|(JI)FM_F\rangle$ меняется со временем по закону $\exp(-iE_F t)$. Очевидно, что диагональные элементы матрицы плотности момента электронной оболочки уменьшаются со временем как $\rho_{FM_F, FM_F} \sim \exp(-\Gamma_F t)$, а недиагональные $\rho_{FM_F, F'M'_F} \sim \exp(i\omega_{FF'} t - \frac{1}{2}(\Gamma_F + \Gamma'_{F'})t)$ осциллируют на частоте $\omega_{FF'} = E_F - E_{F'}$, определяемой сверхтонким расщеплением.

а фФактор деполяризации если подуровни сверхтонкой структуры возбуждаются мгновенно и когерентно, а распад конечного состояния не меняет состояние ядра, для монохроматических полей постоянной амплитуды:

$$h_k(I) = \frac{1}{\hat{I}^2} \sum_{FF'} \hat{F}^2 \hat{F}'^2 \begin{Bmatrix} F & F' & k \\ J'_i & J_i & I \end{Bmatrix}^2 \left(1 + \frac{\omega_{FF'}^2}{\Gamma^2}\right)^{-1}. \quad (18)$$

суммирование производится по всем подуровням сверхтонкой структуры F, F' ; и ширина Γ полагается одинаковой для всех F, F' . Деполяризация зависит от спина ядра, углового момента электронной оболочки, энергии, времени и расщепления по энергии. Поляризация $A_{kq}(J_i, J'_i) \equiv \rho_{kq}(J_i, J'_i)/\rho_{00}(J_i, J_i)$ содержит как диагональные, так и недиагональные элементы матрицы плотности, с соответствующей временной эволюцией.

Для вырожденных состояний сверхтонкой структуры ($\omega_{FF'} = 0$), сумма в (18) находится аналитически и $h_k(I) = 1$. То есть для полностью перекрывающихся уровней деполяризации не возникает. Напротив, когда уровни сверхтонкой структуры хорошо разделены ($\omega_{FF'} \gg \Gamma$), сохраняются только диагональные члены $F = F'$.

Угловое распределение фотоэлектронов в двойной резонансной

фотоионизации в соответствии с (4) и (7) представляется в виде:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\pi\omega_2}{c} \sum_{\substack{k_1 k_1 q_1 \\ k_2 q_2}} \hat{k}_1 \hat{k}_2 (k_1 q_1, k_2 q_2 | kq) \rho_{k_2 q_2}^{(\gamma_2)} \rho_{k_1 q_1} (J_i, J'_i) \\ \times B[k_1, k_2, k] \frac{1}{\sqrt{4\pi} \hat{k}} Y_{kq}(\vartheta, \varphi), \quad (19)$$

Динамический параметр $B[k_1, k_2, k]$:

$$B[k_1, k_2, k] = \sum_{\substack{\ell' j j' \\ J J'}} (-1)^{J_f + J + k - 1/2} \hat{\ell} \hat{\ell}' \hat{j} \hat{j}' \hat{J} \hat{J}' (\ell 0, \ell' 0 | k 0) \\ \times \left\{ \begin{matrix} k & J & J' \\ J_f & L' & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j & \ell & 1/2 \\ \ell' & j' & k \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J_i & 1 & J \\ J'_i & 1 & J' \\ k_1 & k_2 & k \end{matrix} \right\} \mathcal{D}_{\ell j J} \mathcal{D}_{\ell' j' J'}^*. \quad (20)$$

индексы 1, 2 относятся к первому и второму фотону. Выражение (20) применимо как к резонансной, так и дважды резонансной ионизации, то есть конечное состояние может быть как состоянием гладкого континуума, так и автоионизационным. В последнем случае приведенный матричный элемент $\mathcal{D}_{J_0, J_f \ell j J}$ определяется в соответствии с (14), и учитывает интерференцию прямого и резонансного путей переходов в непрерывный спектр.

Главная поправка к энергии за счет сверхтонкого взаимодействия имеет вид $A(F(F+1) - I(I+1) - J(J+1))/2$ [10], где A - константа сверхтонкого взаимодействия, определяемая отдельно для каждого уровня. Для инертных газов момент промежуточного уровня может принимать только одно значение $J_i = 1$ и, например, для $I = 1/2, 3/2$ параметр

деполяризации:

$$h_1(1/2) = \frac{7}{9} + \frac{2}{9} \cdot \frac{1}{1 + 2.25\alpha} \rightarrow 7/9, \quad (21)$$

$$h_2(1/2) = \frac{1}{3} + \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{1 + 2.25\alpha} \rightarrow 1/3,$$

$$h_1(3/2) = \frac{19}{45} + \frac{5}{18} \cdot \frac{1}{1 + 2.25\alpha} + \frac{3}{10} \cdot \frac{1}{1 + 6.25\alpha} \rightarrow \frac{19}{45}, \quad (22)$$

$$h_2(3/2) = \frac{37}{150} + \frac{1}{30} \cdot \frac{1}{1 + 2.25\alpha} + \frac{3}{10} \cdot \frac{1}{1 + 16\alpha} + \frac{21}{50} \cdot \frac{1}{1 + 6.25\alpha} \rightarrow \frac{37}{150},$$

где введен параметр $\alpha = (A/\Gamma)^2$. Пределы в (21), (22) указаны для случая, когда энергетическое расщепление сверхтонкой структуры много больше, чем ширина Γ ($\alpha \gg 1$). Они указывают минимальную возможную величину параметра деполяризации, вызванного сверхтонкой структурой. Частичное перекрывание подуровней уменьшает роль деполяризации и увеличивает $h_k(I)$. Чем больше спин ядра, тем меньше предельная величина $h_k(I)$ и деполяризации оказывает большую роль.

Линейный дихроизм, определяемый как разность сечений для параллельных ($\phi = 0$) и перпендикулярных ($\phi = 90^\circ$) поляризаций, равен:

$$\text{LD} = \frac{\sigma^{\parallel} - \sigma^{\perp}}{\sigma^{\parallel} + \sigma^{\perp}} \quad (23)$$

Для интегрированного по углу испускания фотоэлектрона сечения (19):

$$\begin{aligned} \sigma^{\parallel(\perp)} = & \frac{\pi\omega_2}{c} \left(\left[1 + h_2 \frac{1 \pm 3}{20} \right] \sum_{\ell_j} |\mathcal{D}_{\ell_j J=2}|^2 + \right. \\ & \left. + \left[1 - h_2 \frac{1 \pm 3}{4} \right] \sum_{\ell_j} |\mathcal{D}_{\ell_j J=1}|^2 + \left[1 + h_2 \frac{1 \pm 3}{2} \right] \sum_{\ell_j} |\mathcal{D}_{\ell_j J=0}|^2 \right). \quad (24) \end{aligned}$$

Круговой (Циркулярный) магнитный дихроизм:

$$\text{CMD} = \frac{\sigma^{++} - \sigma^{+-}}{\sigma^{++} + \sigma^{+-}} \quad (25)$$

имеет место когда оба поля обладают круговой поляризацией, с одинаковыми

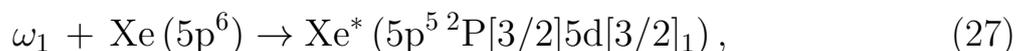
(++) или противоположными (+-) спиральностями, сечение:

$$\begin{aligned} \sigma^{+\pm} = & \frac{\pi\omega_2}{c} \left(\left[1 \pm \frac{3}{4}h_1 + \frac{h_2}{20} \right] \sum_{\ell_j} |\mathcal{D}_{\ell_j J=2}|^2 + \right. \\ & \left. + \left[1 \mp \frac{3}{4}h_1 - \frac{h_2}{4} \right] \sum_{\ell_j} |\mathcal{D}_{\ell_j J=1}|^2 + \left[1 \mp \frac{3}{2}h_1 + \frac{h_2}{2} \right] \sum_{\ell_j} |\mathcal{D}_{\ell_j J=0}|^2 \right) \end{aligned} \quad (26)$$

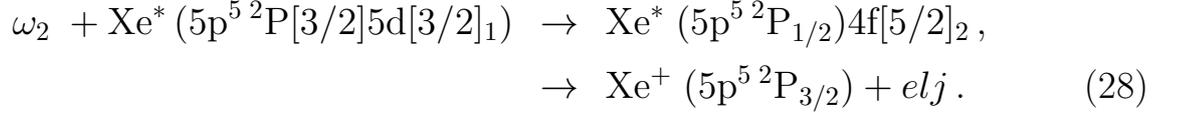
Выражения (23) и (25) позволяют определить предельные значения дихроизма. Предположим, что в конечном состоянии доминирует канал с определенным значением полного момента (например, в конечном состоянии АИС усиливает канал с определенным значением полного момента $J = J_a$). Любопытно отметить, что если для каналов с $J = 0, 2$ деполаризация уменьшает величину дихроизма, то для канала $J = 1$ ситуация не так однозначна. Объясняется это тем, что в отсутствие деполаризации этот канал запрещен для полей с линейной или круговой поляризацией. Если дихроизм оказывается больше, это указывает на то, что подуровни сверхтонкой структуры перекрываются.

Существуют две выделенные схемы поляризации полей: оба поля линейно поляризованы в одном направлении или оба обладают круговой поляризацией и распространяются в одном направлении. В этих случаях угловое распределение фотоэлектронов обладает аксиальной симметрией относительно вектора поляризации или направления распространения полей, соответственно, и определяется двумя параметрами угловой анизотропии β_2^{ν} и β_4^{ν} (12). Деполаризация уменьшает величину параметров анизотропии высших рангов (β_4).

Среди атомов инертных газов только Хе и Кг обладают стабильными изотопами с ненулевым спином. В диссертации рассматривается ксенон, применительно к схеме для которой было выполнено первое в мире измерение дифференциальных характеристик фотоионизации с разделением по изотопам [A17]. Схема резонансной ионизации ксенона представлена на рис. 1В. Первый фотон вызывает возбуждение дискретного состояния



а второй возбуждает атом в автоионизационное состояние с последующим распадом:



Естественная смесь изотопов ксенона содержит изотопы ^{129}Xe $I=1/2$ (26.4%) и ^{131}Xe $I=3/2$ (21.2%). Для расчетов амплитуд переходов использовался метод MCHF (см. главу 5).

Таблица 1: Теоретическое и экспериментальное значение линейного и кругового дихроизмов. Числа в скобках показывают погрешность измерений

$I \rightarrow$	Experiment			Theory		
	0	1/2	3/2	0	1/2	3/2
LD	0.11(2)	0.03(3)	0.04(3)	$\frac{1}{7} \approx 0.14$	$\frac{3}{61} \approx 0.05$	$\frac{111}{3037} \approx 0.037$
CMD	0.67(2)	0.54(4)	0.43(4)	$\frac{5}{7} \approx 0.71$	$\frac{35}{61} \approx 0.57$	$\frac{950}{3037} \approx 0.31$

В таблице 1 приведены рассчитанные и измеренные величины кругового и линейного дихроизма. Выбранный здесь резонанс $\text{Xe}^{**}(5p^5 \ (^2P_{1/2})4f[5/2]_2)$ довольно сильный, с профильным индексом Фано q от 4 до 10 в различных моделях [A12], так что сравнение полученных результатов с пороговыми значениями может быть конструктивным. Из таблицы 1 видно, что данные для CMD в хорошем согласии для изотопов с $I = 0, 1/2$. Примечательно, что измеренный дихроизм для изотопа ^{131}Xe ($I = 3/2$) заметно выше ожидаемой величины. Это означает, что подуровни тонкой структуры перекрываются, уменьшая роль деполяризации. Используя измеренную величину дихроизма, можно определить параметр сверхтонкой структуры A для частично перекрывающихся подуровней, которые не могут быть прямо разрешены. Используя (22) и измеренное значение CMD, получаем уравнение относительно α . В данном случае $A/\Gamma = 0.85 \pm 0.14$ и факторы деполяризации $h_1(3/2) = 0.58 \pm 0.04$ и $h_2(3/2) = 0.35 \pm 0.04$.

На рисунке (6a,d) представлены результаты расчетов и измерения параметров угловой анизотропии фотоэлектронов при ионизации основного состояния изотопа ксенона с $I = 0$ двумя линейно поляризованными в одном направлении полями в калибровке длины и скорости. Расчеты хорошо воспроизводят измеренные величины. Представлены также расчеты

в резонансной модели, когда учитывались только каналы с $J = 2$. Точный учет слабых каналов с $J = 0, 1$, выполненный в МСНФ [A12], дает немногим меньшую величину, чем резонансная модель. Резонансная и полная модели дают значения, хорошо согласующиеся в области резонанса, но сильно отличающиеся между собой на его краях. Надо отметить, что наблюдаемое совпадение резонансной модели с экспериментом не является универсальным, и справедливо для сильных резонансов (профильный индекс Фано $q > 1$). Для резонансов типа *окна прозрачности* ситуация будет совсем иной.

Расчеты атомной структуры не отличаются для различных изотопов, и параметры угловой анизотропии для $I = 1/3, 3/2$ должны воспроизводиться с той же точностью, как и для $I = 0$ при корректном учете деполяризации. Для изотопов $I = 1/2, I = 3/2$ расчеты представлены в предположении максимальной роли деполяризации ($\omega_{FF'} \gg \Gamma_F$). Деполяризация приводит к тому, что профили параметров анизотропии сглаживаются. Однако даже при максимальной роли деполяризации β_4 не исчезает полностью. Согласие измеренного значения с алгебраическим ожиданием для ^{129}Xe ($I = 1/2$) значит, что сверхтонкая структура для этого изотопа хорошо разделена и фактор деполяризации достигает минимального значения. Для изотопа $I = 3/2$ приведены также расчеты для параметра $\alpha = 0.85^2$ извлеченного из эксперимента в предположении, что подуровни сверхтонкой структуры частично перекрываются.

Сопоставление результатов измерения угловых распределений фотоэлектронов при ионизации атомов с различным ядерным спином, позволяет извлечь параметр деполяризации, из которого, в свою очередь, можно извлечь константу сверхтонкой структуры возбуждаемого дискретного состояния (21,22). Для извлечения параметров деполяризации достаточно одной дифференциальной характеристики, например циркулярного дихроизма. Соответственно, остальные дифференциальные характеристики, такие как параметры угловой асимметрии или линейный дихроизм, могут использоваться для верификации извлеченного параметра сверхтонкой структуры. Это принципиально новый метод, позволяющий определить параметры сверхтонкой структуры для частично перекрывающихся подуровней электронной оболочки атома.

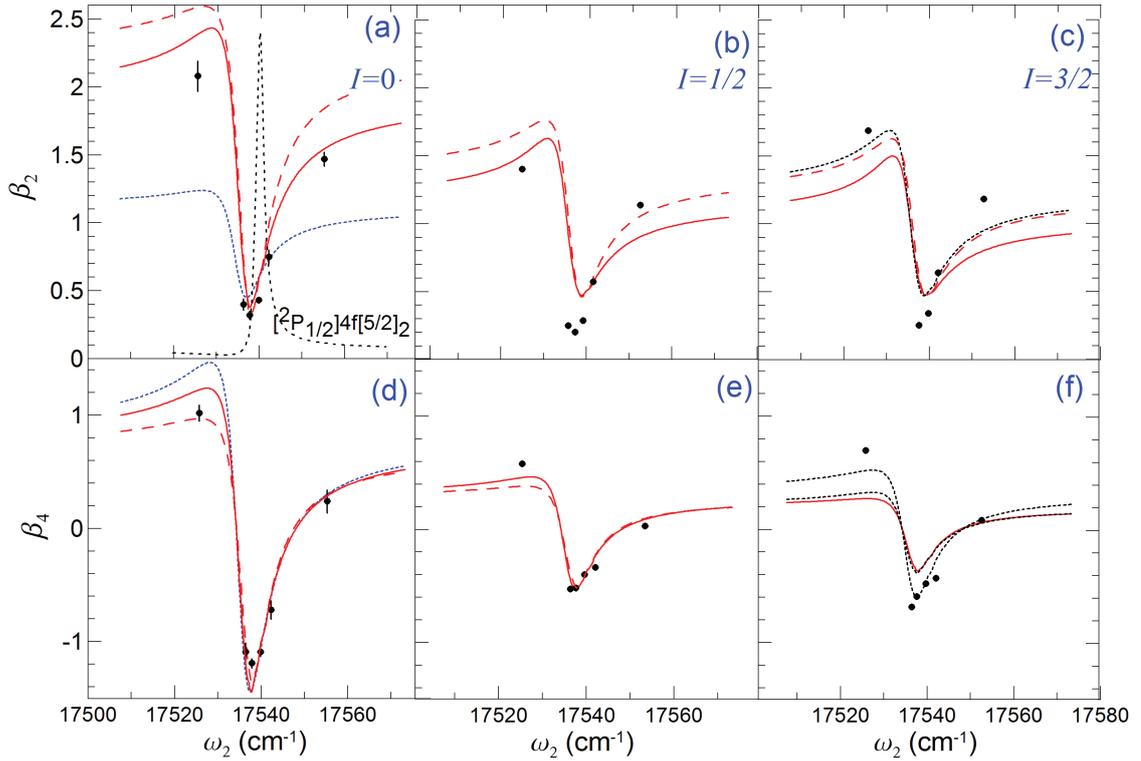


Рис. 6: Параметры угловой анизотропии при ионизации Хе двумя полями, линейно поляризованными в одном направлении. На панелях а,д приведены расчеты в представлении длины (красная сплошная линия), скорости (красная пунктирная линия). Синяя штриховая линия представляет расчеты в резонансной модели. Положение и профиль фотопоглощения обозначены на панели (а). Для изотопов $I = 1/2$, $I = 3/2$ расчеты представлены в предположении минимального фактора деполаризации ($\omega_{FF'} \gg \Gamma_F$). Для изотопа $I = 3/2$ также представлены результаты с извлеченным из эксперимента [A12] параметров α .

В главе 6 рассматривается полный эксперимент по последовательной двойной двухфотонной ионизации атомов инертных газов.

Под полным экспериментом понимают набор измерений, которые нужно провести, чтобы полностью восстановить все комплексные амплитуды некоторого процесса. Понятие полного эксперимента существует только в рамках того или иного теоретического подхода, который определяет, какие амплитуды участвуют в процессе.

На рис. 4 представлены измеренные и рассчитанные параметры угловой анизотропии при 2PDI атома неона полями линейной и круговой поляризации, а также отношение выхода ионов $2p^{4,1}D$ и $2p^{4,3}P$ [A4]. В диссертации идея полного эксперимента развивалась для энергий фотонов

54-58 эВ, где ни правомерность используемой модели, ни экспериментальные данные не вызывают вопросов.

Сперва рассмотрим полный эксперимент в модели Купера-Заре, то есть пренебрегая зависимостью от терма амплитуд фотоионизации. Интегрируя дипольную часть (2.21) по углам испускания первого и второго электрона с динамическим параметром в модели Купера-Заре, получаются выражения для параметров угловой анизотропии.

Как первая, так и вторая степень ионизации определяются двумя комплексными амплитудами $d_l^{(j)} = |d_l^{(j)}| \exp(i\varphi_l^{(j)})$ ($j = 1, 2, l = s, d$). Динамические параметры каждого шага определяются двумя параметрами: отношением модулей амплитуд $R_j = |d_s^{(j)}/d_d^{(j)}|$ и их относительной фазой $\varphi^{(j)} = \varphi_s^{(2)} - \varphi_d^{(2)}$. Только один параметр, отношение $R_1 = |d_s^{(1)}/d_d^{(1)}|$, определяет выстроенность и ориентацию промежуточного иона $\text{Ne}^+(2p^5\ ^2P)$.

Угловые распределения дают для трех термов конечного иона $2p^4\ ^3P, ^1D, ^1S$ двенадцать соотношений между $\beta_{2,4}^\nu$ ($\nu = L, C$) и параметрами $R_1 = |d_s^{(1)}/d_d^{(1)}|$, $R_2 = |d_s^{(2)}/d_d^{(2)}|$, $\cos \varphi = \text{Re}(d_s^{(2)}d_d^{(2)*})/|d_s^{(2)}d_d^{(2)}|$, $\sin \varphi = \text{Im}(d_s^{(2)}d_d^{(2)*})/|d_s^{(2)}d_d^{(2)}|$. Для извлечения комплексных амплитуд следует использовать наиболее надежные данные о β_k^ν .

На рисунке 7 проиллюстрирована процедура извлечения отношений амплитуд ионизации в процессе 2PDI неона в состояние $\text{Ne}^{++}2p^4\ ^3P$ с использованием экспериментальных данных рис. 4 [A4]. Измерение одного параметра анизотропии устанавливает связь между тремя величинами, определяющими амплитуды ($|R_1|, \Re[R_2], \Im[R_2]$), то есть образует поверхность; наличие погрешности превращает поверхность в трехмерную фигуру. Пересечение разрешенных объемов и есть реализация полного эксперимента. При уменьшении погрешности измерений разрешенный объем сжимается в две разрешенные точки, так как фаза между амплитудами определяется с точностью до замены $\varphi \rightarrow \pi - \varphi$. Так как модуль определяется $|R_1|$ из измерений второго фотоэлектрона, измерения одного параметра первого фотоэлектрона достаточно, чтобы также извлечь амплитуды первой степени.

Если зависимостью от терма нельзя пренебречь, то число каналов увеличивается. Например, для 2PDI в ион $2p^4\ ^3P$ существует три канала

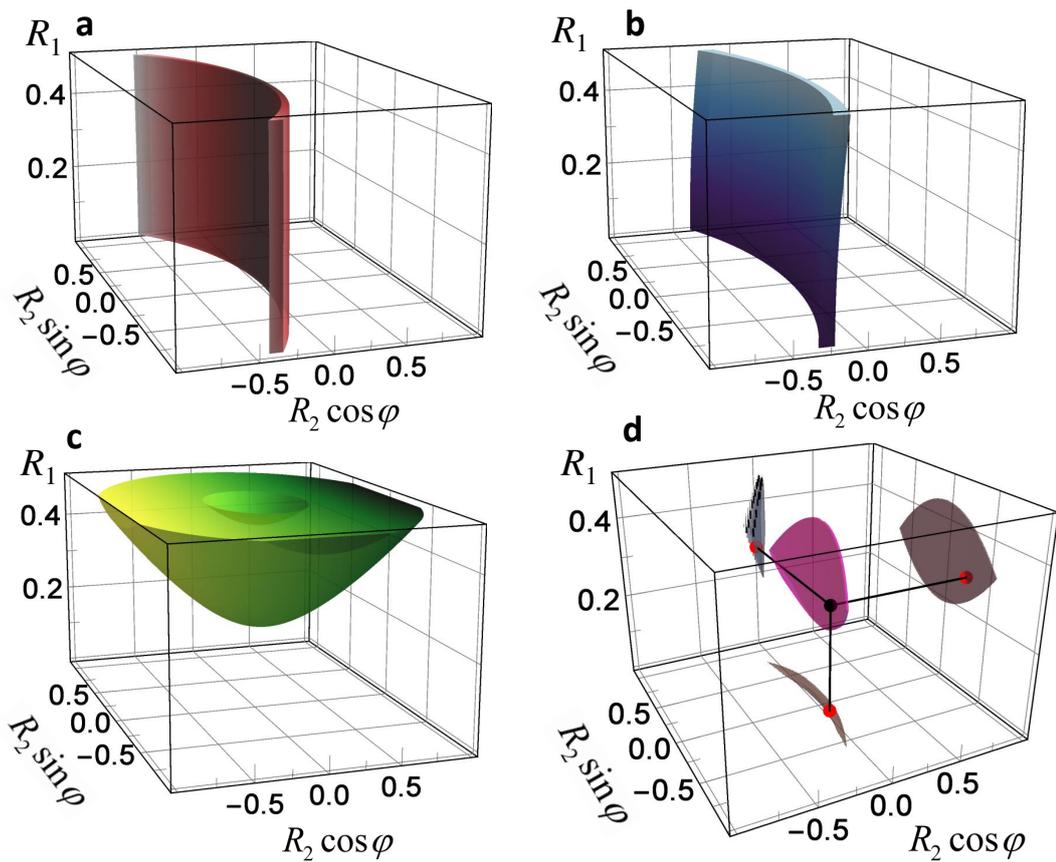


Рис. 7: Области, ограниченные измерением различных параметров угловой анизотропии второго фотоэлектрона: (a) β_2^{lin} , (b) β_2^{cir} , (c) β_4^{lin} , (d) - область перекрывания разрешенных объемов и ее проекции. Точкой отмечен результат теоретического моделирования

ks^2P , kd^2P , ks^2D :

$$\omega_2 + Ne^+(2s^22p^5\ ^2P) \rightarrow Ne^{2+}(2s^22p^4\ ^3P) + \begin{cases} e^-(ks) : \ ^2P; \\ e^-(kd) : \ ^2P; \\ e^-(kd) : \ ^2D. \end{cases} \quad (29)$$

В модели Купера-Заре две последние амплитуды пропорциональны: амплитуда ионизации в kd^2D канал относится к kd^2P как $\sqrt{3}$. Отклонения от этой модели возникают, если в непрерывном спектре иона присутствуют некоторые структурные особенности, например АИС (см. главу 4.1), тогда вторую ступень $2PD$ определяют два комплексных отношения. С имеющимся набором экспериментальных данных без дополнительных предположений выполнить полный эксперимент невозможно. В рассматриваемом случае такими дополнительными предположениями являются: предположение постоянности R_1 и фазы между ks^22P и kd^2P каналами в области нижнего АИС 2D . Это предположения представляются обоснованными, так как нет никакой структуры в спектре атома или иона, которые могли бы вызвать резкую модуляцию в пределах 0.5 эВ (см. рис. 8a).

В области 2P резонанса, отношения $\tilde{R}_2 = \left| \tilde{d}_{sP}^{(2)} / \tilde{d}_{dD}^{(2)} \right|$, $R_d = \left| \tilde{d}_{dP}^{(2)} / \tilde{d}_{dD}^{(2)} \right|$ и фаза $\tilde{\varphi} = \arg \left(\tilde{d}_{sP}^{(2)} / \tilde{d}_{dD}^{(2)} \right)$ могут быть выбраны как параметры, которые должны быть извлечены из эксперимента, предполагая, что R_1 и $\arg[\tilde{d}_{sP}^{(2)} / \tilde{d}_{dP}^{(2)}]$ определены при чуть более низкой энергии в модели Купера-Заре.

Рисунок 8 иллюстрирует процедуру извлечения амплитуд в окрестности АИС в приближении LS -связи. Панель (рис. 8b) показывает разрешенный объем в области гладкого непрерывного спектра. В окрестности 2D резонанса (рис. 8c) 2D канал становится сильнее, R_d уменьшается, и разрешенный объем прижимается к плоскости $R_d = 0$. В окрестности 2P резонанса 2D и 2P амплитуды уменьшаются и увеличиваются, соответственно, разрешенное пространство растягивается вдоль R_d оси и меняется фаза $\tilde{\varphi}$. Последнее изменение лучше видно на рис. 8d с дальнейшим ростом энергии, когда разрешенный объем поворачивается вокруг оси R_d . В диссертации (см рис. 6.4) иллюстрируется согласованность вышеописанных способов извлечения в области гладкого континуума.

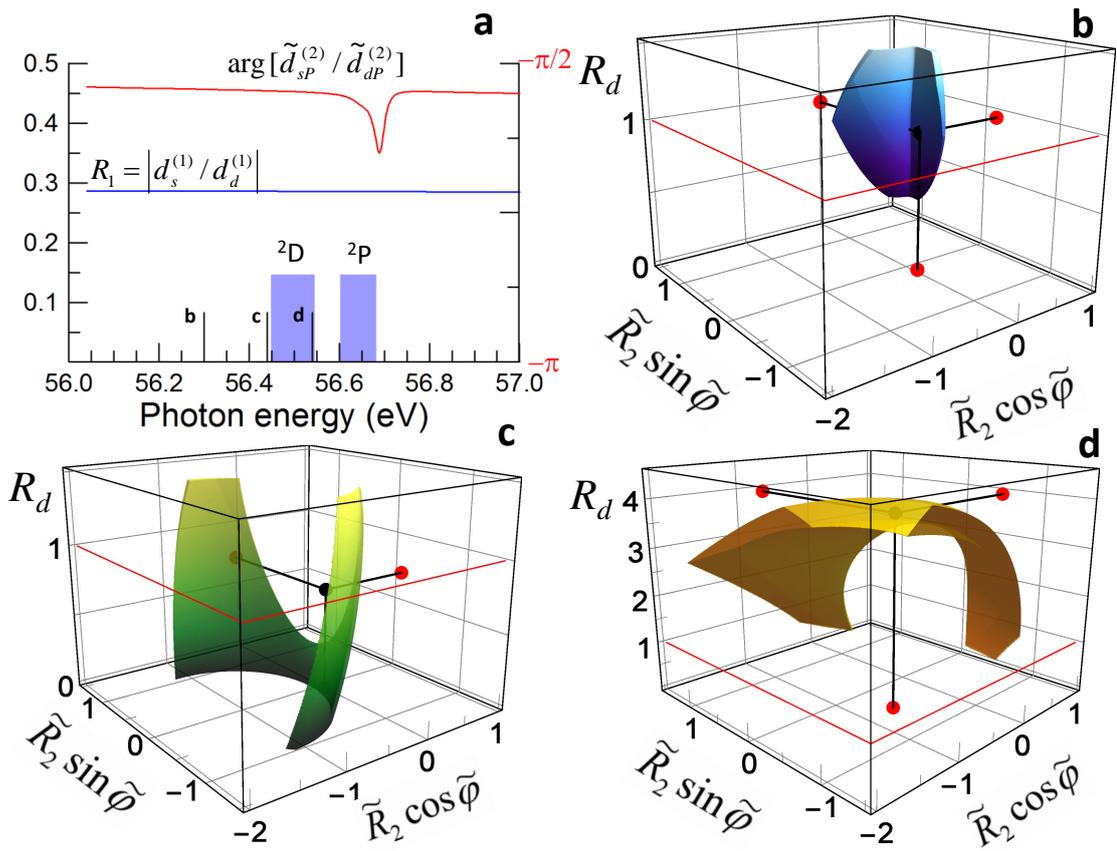


Рис. 8: Отношение R_1 и фаза между s^2P и d^2P каналами в области АИС (а). Разрешенные области отношения амплитуд и их относительной фазы для различных значений энергии фотона (b,c,d).

Заключение

Диссертация посвящена исследованию векторных корреляций, то есть угловых распределений, угловых корреляционных функций и различного рода дихроизмов в процессах последовательной кратной ионизации атомов инертных газов небольшим (2-3) числом фотонов. Наблюдение последовательной ионизации атомов стало возможным только с появлением высокоинтенсивных источников вакуумно-ультрафиолетового диапазона - лазеров на свободных электронах, стимулировав интерес к соответствующим теоретическим исследованиям. Корреляционные характеристики несут в себе значительно более детальную информацию, чем интегральные вероятности, так как сохраняют память об относительных фазах комплексных амплитуд процессов, поляризации состояний, деполяризации, вызванной сверхтонким взаимодействием, и реализовать так называемый полный эксперимент. Исследованы двойная двухфотонная, тройная трехфотонная, двойная трехфотонная ионизация, как в области гладкого континуума, так и в области структур, таких как автоионизационные состояния и Купервские минимумы. Конкретные расчеты выполнены для атомов инертных газов, так как это самая доступная на данный момент мишень в экспериментах с лазерами на свободных электронах.

Проведенные исследования позволили описать имеющиеся экспериментальные данные и сделать несколько предсказаний, составивших основу успешно реализованных экспериментов.

Список публикаций по теме работы

Публикации в рецензируемых научных журналах, удовлетворяющих Положению о присуждении учёных степеней в МГУ имени М.В. Ломоносова

- A1. **Gryzlova, E. V.**, Kiselev M. D., Popova M. M., Grum-Grzhimailo A. N. *Evolution of the ionic polarization in multiple sequential ionization: General equations and an illustrative example* // Physical Review A. —

2023. — Vol. 107, no. 1. — P. 013111. — **IF = 2,6 (WoS)**, общий объем статьи=0.7 п.л., личный вклад=0.1 п.л.
- A2. Popova M. M., Kiselev M. D., Burkov S. M., **Gryzlova, E. V.**, Grum-Grzhimailo A. N. *Spectroscopic Peculiarities at Ionization of Excited $2p5(2P\text{Jf})3s[K]0,1,2$ States of Ne: Cooper Minima and Autoionizing Resonances* // Atoms. — 2022. — Vol. 10, no. 4. — **IF = 1,7 (WoS)**, общий объем статьи=0.81 п.л., личный вклад=0.15 п.л.
- A3. Kiselev M. D., Carpeggiani P. A., **E V Gryzlova**, Burkov S. M., Reduzzi M., Dubrouil A., Facciala D., Negro M., Ueda K., Frassetto F., Stienkemeier F., Ovcharenko Y., Meyer M., Fraia M. D., Plekan O., Prince K. C., Callegari C., Sansone G., Grum-Grzhimailo A. N. *Photoelectron spectra and angular distribution in sequential two-photon double ionization in the region of autoionizing resonances of ArII and KrII* // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2020. — Nov. — Vol. 53, no. 24. — P. 244006. — **IF = 1,7 (WoS)**, общий объем статьи=0.7 п.л., личный вклад=0.1 п.л.
- A4. Carpeggiani P. A., **Gryzlova E. V.**, Reduzzi M., Dubrouil A., Faccialá D., Negro M., Ueda K., Burkov S. M., Frassetto F., Stienkemeier F., Ovcharenko Y., Meyer M., Plekan O., Finetti P., Prince K. C., Callegari C., Grum-Grzhimailo A. N., Sansone G. *Complete reconstruction of bound and unbound electronic wavefunctions in two-photon double ionization* // Nature physics. — 2019. — Vol. 15. — P. 170–177. — **IF = 19,684 (WoS)**, общий объем статьи=0.56 п.л., личный вклад=0.25 п.л.
- A5. **Gryzlova E. V.**, Grum-Grzhimailo A. N., Kiselev M. D., Burkov S. M. *Two-photon sequential double ionization of argon in the region of Rydberg autoionizing states of Ar^+* // European Physical Journal D. — 2019. — Vol. 73. — P. 93. — **IF = 1,45 (WoS)**, общий объем статьи=0.43 п.л., личный вклад=0.35 п.л.
- A6. **Gryzlova E.V.**, Grum-Grzhimailo A. N. *Effects of Hyperfine Interaction in Atomic Photoionization* // Progress in Photon Science: Recent Advances (eds. K. Yamanouchi, S. Tunic, V. Makarov). Vol. 119. — Switzerland : Springer Cham., 2019. — P. 243–261. —

- (Springer Series in Chemical Physics). — **SJR = 0,112 (Scopus)**, общий объем статьи=1.18 п.л., личный вклад=0.95 п.л.
- A7. Grum-Grzhimailo A. N., **Gryzlova E.V.** *New Trends in 'Complete' Experiment on Atomic Photoionization // Progress in Photon Science: Recent Advances* (eds. K. Yamanouchi, S. Tunic, V. Makarov). Vol. 119. — Switzerland : Springer Cham., 2019. — P. 263–282. — (Springer Series in Chemical Physics). — **SJR = 0,112 (Scopus)**, общий объем статьи=1.25 п.л., личный вклад=0.75 п.л.
- A8. Ilchen M., Hartmann G., **Gryzlova E. V.**, Achner A., Allaria E., Beckmann A., Braune M., Buck J., Callegari C., Coffee R. N., Cucini R., Danailov M., Fanis A. D., Demidovich A., Ferrari E., Finetti P., Glaser L., Knie A., Lindahl A. O., Plekan O., Mahne N., Mazza T., Raimondi L., Roussel E., Scholz F., Seltmann J., Shevchuk I., Svetina C., Walter P., Zangrando M., Viefhaus J., Grum-Grzhimailo A. N., Meyer M. *Symmetry breakdown of electron emission in extreme ultraviolet photoionization of argon // Nature Communications*. — 2018. — Vol. 9. — P. 4659. — **IF = 16,6 (WoS)**, общий объем статьи=0.5 п.л., личный вклад=0.2 п.л.
- A9. Augustin S., Schulz M., Schmid G., Schnorr K., **Gryzlova E. V.**, Lindenblatt H., Meister S., Liu Y. F., Trost F., Fechner L., Grum-Grzhimailo A. N., Burkov S. M., Braune M., Treusch R., Gisselbrecht M., Schröter C. D., Pfeifer T., Moshhammer R. *Signatures of autoionization in the angular electron distribution in two-photon double ionization of Ar // Physical Review A*. — 2018. — Vol. 98, no. 3. — P. 033408. — **IF = 2,6 (WoS)**, общий объем статьи=0.44 п.л., личный вклад=0.15 п.л.
- A10. Serkez S., Geloni G., Tomin S., Feng G., **Gryzlova E. V.**, Grum-Grzhimailo A. N., Meyer M. *Overview of options for generating high-brightness attosecond x-ray pulses at free-electron lasers and applications at the European XFEL // Journal of Optics*. — 2018. — Vol. 20, no. 2. — P. 024005. — **IF = 2,1 (WoS)**, общий объем статьи=0.81 п.л., личный вклад=0.32 п.л.

- A11. Grum-Grzhimailo A. N., **Gryzlova E. V.**, Fritzsche S., Kabachnik N. M. *Photoelectron angular distributions and correlations in sequential double and triple atomic ionization by free electron lasers* // Journal of Modern Optics. — 2016. — Vol. 63, no. 4. — P. 334–357. — **IF = 1,29 (WoS)**, общий объем статьи=1.5 п.л., личный вклад=0.9 п.л.
- A12. **Gryzlova E. V.**, O’Keeffe P., Cubaynes D., Garcia G. A., Nahon L., Grum-Grzhimailo A. N., Meyer M. *Isotope effects in resonant two-color photoionization of Xe in the region of the $5p^5(^2P_{1/2})4f[5/2]_2$ autoionizing state* // New Journal of Physics. — 2015. — Vol. 17, no. 4. — P. 043054. — **IF = 3,3 (WoS)**, общий объем статьи=0.81 п.л., личный вклад=0.65 п.л.
- A13. **Gryzlova E.V.**, Grum-Grzhimailo A., Staroselskaya E., Strakhova S. *Similarity between the angular distributions of the first- and second-step electrons in sequential two-photon atomic double ionization* // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. — 2015. — Vol. 204. — P. 277–283. — **IF = 1,9 (WoS)**, общий объем статьи=0.44 п.л., личный вклад=0.35 п.л.
- A14. **Gryzlova E.V.**, Grum-Grzhimailo A. N., Kuzmina E. I., Strakhova S. I. *Sequential two-photon double ionization of noble gases by circularly polarized XUV radiation* // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2014. — Vol. 47, no. 19. — P. 195601. — **IF = 1,7 (WoS)**, общий объем статьи=0.69 п.л., личный вклад=0.55 п.л.
- A15. Grum-Grzhimailo A. N., **Gryzlova E.V.** *Nondipole effects in the angular distribution of photoelectrons in two-photon two-color above-threshold atomic ionization* // Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics. — 2014. — Vol. 89, no. 4. — P. 043424. — **IF = 2,97 (WoS)**, общий объем статьи=0.75 п.л., личный вклад=0.45 п.л.
- A16. **Gryzlova E.V.**, Grum-Grzhimailo A. N., Strakhova S. I., Meyer M. *Non-dipole effects in the angular distribution of photoelectrons in sequential two-photon double ionization: argon and neon* // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2013. —

Vol. 46, no. 16. — P. 164014. — **IF = 1,7 (WoS)**, общий объем статьи=0.38 п.л., личный вклад=0.3 п.л.

- A17. O'Keeffe P., **Gryzlova E. V.**, Cubaynes D., Garcia G. A., Nahon L., Grum-Grzhimailo A. N., Meyer M. *Isotopically resolved photoelectron imaging unraveling complex atomic autoionization dynamics* // Physical Review Letters. — 2013. — Vol. 111, no. 24. — P. 243002. — **IF = 8,1 (WoS)**, общий объем статьи=0.31 п.л., личный вклад=0.12 п.л.
- A18. Grum-Grzhimailo A., **Gryzlova E.V.**, Meyer M. *Non-dipole effects in the angular distribution of photoelectrons in sequential two-photon atomic double ionization* // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2012. — Vol. 45, no. 21. — P. 215602. — **IF = 1,7 (WoS)**, общий объем статьи=0.56 п.л., личный вклад=0.34 п.л.
- A19. Rouzee A., Johnsson P., **Gryzlova E.V.**, Fukuzawa H., Yamada A., Siu W., Huisman Y., Louis E., Bijkerk F., Holland D. M. P., Grum-Grzhimailo A. N., Kabachnik N. M., Vrakking M. J. J., Ueda K. *Angle-resolved photoelectron spectroscopy of sequential three-photon triple ionization of neon at 90.5 eV photon energy* // Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics. — 2011. — Vol. 83, no. 3. — 031401(R). — **IF = 2,97 (WoS)**, общий объем статьи=0.25 п.л., личный вклад=0.1 п.л.
- A20. Fritzsche S., Grum-Grzhimailo A. N., **Gryzlova E. V.**, Kabachnik N. M. *Sequential two-photon double ionization of the 4d shell in xenon* // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2011. — Vol. 44, no. 17. — P. 175602. — **IF = 1,7 (WoS)**, общий объем статьи=0.63 п.л., личный вклад=0.38 п.л.
- A21. **Gryzlova E.V.**, Ma R., Fukuzawa H., Motomura K., Yamada A., K.Ueda, Grum-Grzhimailo A., Kabachnik N., Rouzée A., Hundermark A., Vrakking M., Johnsson P., Nagaya K., Yase S., Mizoguchi Y., Yao M., Nagasono M., Tono K., Togashi T., Y.Senba, Ohashi H., Yabashi M., Ishikawa T. *Doubly resonant three-photon double ionization of Ar atoms induced by an EUV free electron laser* // Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics. —

2011. — Vol. 84, no. 6. — P. 063405. — **IF = 2,97 (WoS)**, общий объем статьи=0.25 п.л., личный вклад=0.15 п.л.
- A22. Meyer M., Cubaynes D., Dardis J., Hayden P., Hough P., Richardson V., Kennedy E. T., Costello J. T., Dusterer S., Li W. B., Radcliffe P., Redlin H., Feldhaus J., Strakhova S. I., **Gryzlova E. V.**, Grum-Grzhimailo A. N., Taieb R., Maquet A. *Two-Color Experiments in the Gas Phase at FLASH* // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. — 2010. — Vol. 181, no. 2. — P. 111–115. — **IF = 1,9 (WoS)**, общий объем статьи=0.69 п.л., личный вклад=0.2 п.л.
- A23. **Gryzlova E. V.**, Grum-Grzhimailo A. N., Fritzsche S., Kabachnik N. M. *Angular correlations between two electrons emitted in the sequential two-photon double ionization of atoms* // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2010. — Vol. 43, no. 22. — P. 225602. — **IF = 1,7 (WoS)**, общий объем статьи=0.75 п.л., личный вклад=0.6 п.л.
- A24. Fukuzawa H., **Gryzlova E.V.**, Motomura K., Yamada A., Ueda K., Grum-Grzhimailo A., Strakhova S., Nagaya K., Sugishima A., Mizoguchi Y., Iwayama H., Yao M., Saito N., Piseri P., Mazza T., Devetta M., Coreno M., Nagasono M., Tono K., Yabashi M., Ishikawa T., Ohashi H., Kimura H., Togashi T., Senba Y. *Photoelectron spectroscopy of sequential three-photon double ionization of Ar irradiated by EUV free-electron laser pulses* // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2010. — Vol. 43, no. 11. — P. 111001. — **IF = 1,7 (WoS)**, общий объем статьи=0.25 п.л., личный вклад=0.1 п.л.
- A25. Kurka M., Rudenko A., Foucar L., Kühnel K., Jiang Y., Ergler T., Havermeier T., Smolarski M., Schossler S., Cole K., Schöffler M., Dörner R., Gensch M., Dusterer S., Treusch R., Fritzsche S., Grum-Grzhimailo A. N., **Gryzlova E. V.**, Kabachnik N. M., Schröter C. D., Moshhammer R., Ullrich J. *Two-photon double ionization of Ne by free-electron laser radiation: a kinematically complete experiment* // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and

- Optical Physics. — 2009. — Vol. 42, no. 14. — P. 141002. — **IF = 1,7 (WoS)**, общий объем статьи=0.31 п.л., личный вклад=0.1 п.л.
- A26. Fritzsche S., Grum-Grzhimailo A. N., **Gryzlova E. V.**, Kabachnik N. M. *Sequential two photon double ionization of Kr atoms* // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2009. — Vol. 42, no. 14. — P. 145602. — **IF = 1,7 (WoS)**, общий объем статьи=0.38 п.л., личный вклад=0.22 п.л.
- A27. Grum-Grzhimailo A. N., **Gryzlova E.V.**, Strakhova S. I., Kabachnik N. M., Fritzsche S. *Angular distributions and correlations in sequential two-photon atomic double ionization* // Journal of Physics: Conference Series. — 2009. — Vol. 194, no. 1. — P. 012004. — **SJR = 0,18 (Scopus)**, общий объем статьи=0.69 п.л., личный вклад=0.55 п.л.
- A28. Fritzsche S., Grum-Grzhimailo A. N., **Gryzlova E. V.**, Kabachnik N. M. *Angular distributions and angular correlations in sequential two-photon double ionization of atoms* // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2008. — Vol. 41, no. 16. — P. 199801. — **IF = 1,7 (WoS)**, общий объем статьи=0.75 п.л., личный вклад=0.45 п.л.
- A29. Meyer M., Cubaynes D., Glijer D., Dardis J., Hayden P., Hough P., Richardson V., Kennedy E., Costello J., Radcliffe P., Düsterer S., Li W., Azima A., Redlin H., Feldhaus J., Taïeb R., Maquet A., Grum-Grzhimailo A. N., **Gryzlova E. V.**, Strakhova S. I. *Polarization control in atomic two-color above threshold ionization* // Physical Review Letters. — 2008. — Vol. 101, no. 19. — P. 193002. — **IF = 8,1 (WoS)**, общий объем статьи=0.25 п.л., личный вклад=0.1 п.л.

Публикации в других рецензируемых изданиях

- A30. Четвёркина А. С., Грум-Гржимайло А. Н., **Грызлова Е. В.**, Страхова С. И. *Двойная трехфотонная ионизация атомов с формированием промежуточного поляризованного иона* // Вестник Ужгородского университета, серия 'физика'. — 2013. — т. 34. — с. 132–138. — общий объем статьи=0.44 п.л., личный вклад=0.26 п.л.

- A31. **Грызлова Е. В.**, Грум-Гржимайло А. Н., Кабачник Н. М., С.И.Страхова, Fritzsche S. *Угловые корреляции фотоэлектронов при последовательной двойной двухфотонной ионизации атома аргона* // Вестник Поморского университета, серия 'Естественные и точные науки'. — 2009. — т. 4. — с. 52—58. — общий объем статьи=0.44 п.л., личный вклад=0.35 п.л.
- A32. **Грызлова Е. В.**, Грум-Гржимайло А. Н., S. Fritzsche H. K. adn. *Угловые распределения электронов в последовательной двойной двухфотонной ионизации атомов излучением лазера на свободных электронах* // Вестник Ужгородского университета, серия 'физика'. — 2009. — т. 24. — с. 73—77. — общий объем статьи=0.31 п.л., личный вклад=0.25 п.л.

Публикация в сборнике трудов конференции

- A33. **Gryzlova E. V.**, Grum-Grzhimailo A. N., Kabachnik N. M., Fritzsche S. *Angular distributions and correlations in sequential three-photon triple atomic ionization* // Journal of Physics: Conference Series. — 2012. — Vol. 388, no. 1. — P. 012031.
- A34. **Грызлова Е.В.**, Грум-Гржимайло А., Кабачник Н., Страхова С. *Современное состояние теории и эксперимента по изучению последовательной двойной двухфотонной ионизации атомов излучением лазера на свободных электронах* // Труды 2-й Всероссийской школы для молодежи «Концентрированные потоки энергии в индустрии наносистем, материалов и живых систем». — Москва, Россия : Издательский дом МГУ, 2-6 ноября 2009.2009. — с. 145—152.

Другие публикации по теме диссертации

- A35. Carpeggiani P. A., **Gryzlova E. V.**, Reduzzi M., Dubrouil A., Faccialá D., Negro M., Ueda K., Burkov S. M., Frassetto F., Stienkemeier F., Ovcharenko Y., Meyer M., Plekan O., Finetti P., Prince K. C., Callegari C., Grum-Grzhimailo A. N., Sansone G.

Complete reconstruction of bound and unbound electronic wavefunctions in two-photon double ionization // Elettra Highlights 2018–2019. — 2020. — P. 98–99. — URL: <https://www.elettra.eu/science/highlights.html>.

Список литературы

1. Einstein A. *Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt / Concerning an Heuristic Point of View Toward the Emission and Transformation of Light* // Annalen der Physik. — 1905. — Vol. 322. — P. 132–148.
2. Bizau J. M., Cubaynes D., Richter M., Wuilleumier F. J., Obert J., Putaux J. C., Morgan T. J., Kallne E., Sorensen S., Damany A. *First Observation of Photoelectron Spectra Emitted in the Photoionization of a Singly Charged-Ion Beam with Synchrotron Radiation* // Phys Rev Lett. — 1991. — Vol. 267. — P. 576.
3. Wabnitz H., Bittner L., Castro A. R. B. de, Dóhrmann R., Güürtler P., Laarmann T., [et al.]. *Multiple ionization of atom clusters by intense soft X-rays from a free-electron laser* // Nature. — 2002. — Vol. 420. — P. 482–485.
4. Neutze R., Wouts R., Spoel D. van der, Weckert E., Hajdu J. *Potential for biomolecular imaging with femtosecond X-ray pulses* // Nature. — 2000. — Vol. 406. — P. 752.
5. Yoneda H., Inubushi Y., Tanaka T., Yamaguchi Y., Sato F., [et al.]. *Ultra-fast switching of light by absorption saturation in vacuum ultra-violet region* // Opt. Express. — 2009. — Vol. 17. — P. 23443.
6. Nagler B., Zastra U., Faustlin R. R., [et al.]. *Turning solid aluminium transparent by intense soft X-ray photoionization* // Nature Phys. — 2009. — Vol. 5. — P. 693.
7. Böhme D. K. *Multiply-charged ions and interstellar chemistry* // Phys. Chem. Chem. Phys. — 2011. — Vol. 13. — P. 18253–18263.

8. Thissen R., Witasse O., Dutuit O., Wedlund C. S., Gronoff G., Liliensten J. *Doubly-charged ions in the planetary ionosphere: a review* // Phys. Chem. Chem. Phys. — 2011. — Vol. 13. — P. 18264–18287.
9. Keldysh L. V. *Ionization in the field of a strong electromagnetic wave* // Sov. Phys. JETP. — 1965. — Vol. 20. — P. 1307–1314.
10. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. *Квантовая механика: нерелятивистская теория*. — М. ФИЗМАТЛИТ, 2004.
11. Balashov V. V., Grum-Grzhimailo A. N., Kabachnik . M. *Polarization and Correlation Phenomena in Atomic Collisions. A Practical Theory Course*. — Kluwer Plenum, New York, 2000.
12. Blum K. *Density Matrix Theory and Applications*. — Plenum, New York, 1996.
13. Варшалович Д., Москалев А. Н., Херсонский В. К. *Квантовая теория углового момента*. — Изд-во <Наука>, Ленингр. отд., Л., 1975.
14. Фергюсон А. *Методы угловых корреляций в гамма-спектроскопии*. — М. АТОМИЗДАТ, 1969. — 1981 (Russ. transl., Mir, Moscow, 1983).
15. Devanathan V. *Angular Momentum Techniques in Quantum Mechanics*. — Kluwer Academic, 2002.
16. Fischer C. F., Brage T., Johansson P. *Computational Atomic Structure. An MCHF Approach*. — IOP Publishing, Bristol, 1997.
17. Derevianko A., Johnson W., Cheng K. *Non-dipole effects in photoelectron angular distributions for rare gas atoms* // Atomic Data and Nuclear Data Tables. — 1999. — Vol. 73. — P. 153–211.
18. Derevianko A., Hemmers O., Oblad S., Glans P., Wang H., [et al.]. *Electric-Octupole and Pure-Electric-Quadrupole Effects in Soft-X-Ray Photoemission* // Phys. Rev. Lett. — 2000. — Vol. 84. — P. 2116.
19. Morgenstern R., Niehaus A., Zimmermann G. *Autoionizing states formed by electron capture in collisions of multiply charged Ne ions with He, H₂ and Xe*. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. — 1980. — Vol. 13. — P. 4811–4831.

20. Madden R. P., Codling K. *New autoionizing atomic energy levels in He, Ne, and Ar* // Phys. Rev. Lett. — 1963. — Vol. 10. — P. 516.
21. Berrah N., Langer B., Bozek J., Gorczyca T. W., Hemmers O., Lindle D. W., Toader O. *Angular-distribution parameters and R-matrix calculations of Ar $3s \rightarrow np$ resonances* // J. Phys. B. — 1996. — Vol. 29. — P. 5351.
22. Braune M., Hartmann G., Ilchen M., Knie A., Lischke T., Reinkoster A., Meissner A., Deinert S., Glaser L., Al-Dossary O., Ehresmann A., Kheifets A., Viefhaus J. *Electron angular distributions of noble gases in sequential two-photon double ionization.* // J. Mod. Opt. — 2016. — Vol. 63. — P. 324–333.