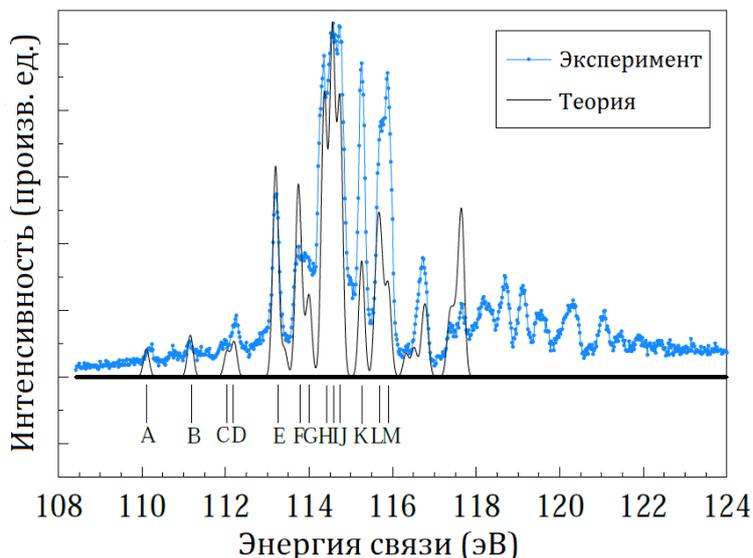


По проекту в отчетном периоде опубликовано 5 статей в рецензируемых журналах, из них 3 в топ-25 по версии WoS; сделано 7 докладов на конференциях, в том числе приглашенные доклады на международных конференциях (EGAS-52, Загреб <https://www.egas52.org/speakers>), 33rd MAX IV User Meeting 2021 (MAX IV in Focus, Лунд); подана заявка на регистрацию ПО. Молодые участники проекта приобрели уникальные навыки и выполнили значительную часть проекта, в том числе представили устные доклады на международных конференциях.

Проектом предусмотрены совместные теоретические и экспериментальные исследования некоторых базовых нелинейных процессов, в том числе, на аттосекундных масштабах, в ультрафиолетовом и рентгеновском диапазонах.

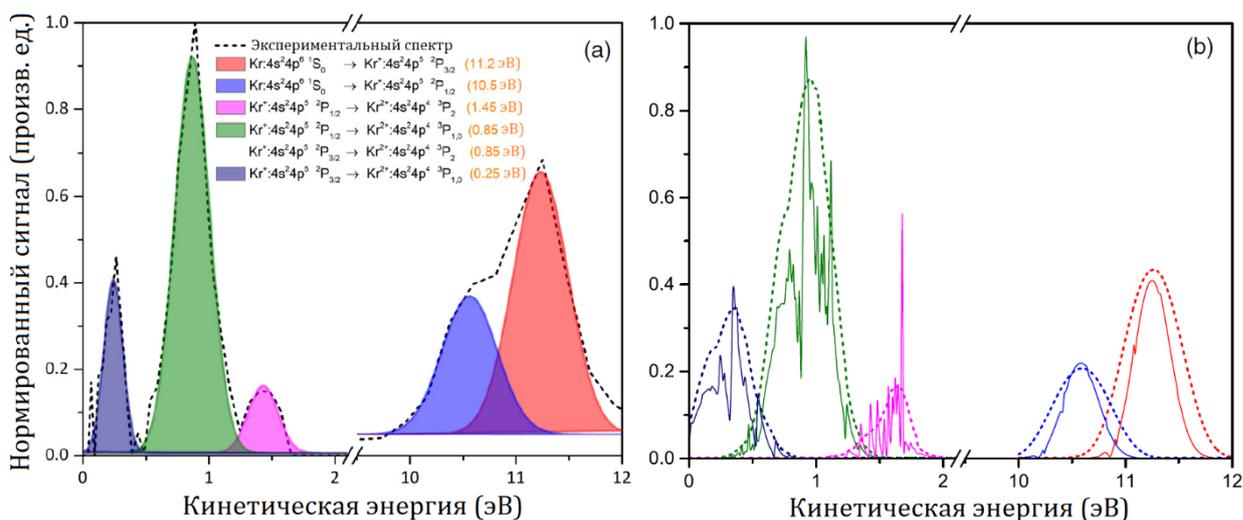
Проведены обширные расчёты методом R-матрицы в полурелятивистском подходе для полных сечений, парциальных сечений, а также амплитуд фотоионизации атома криптона в области энергий фотона 80-230 эВ, покрывающей припороговую и надпороговую области для 3d электронной оболочки. На основании полученных результатов смоделированы спектры и угловые распределения фотоэлектронов, образованных как при прямой ионизации внутренних оболочек атома криптона (основные линии спектра), так и при ионизации с одновременным встряхиванием валентного или субвалентного электрона на другие оболочки (спутниковые линии). В то время как основные линии, связанные с ионизацией 3d-оболочки криптона, достаточно хорошо изучены теоретически и экспериментально, для описания спутниковых линий $3d^{-1}4p^{-1}nl$ и $3d^{-1}4s^{-1}nl$ наблюдался существенный недостаток теоретических моделей; при этом, а учёт тонкого расщепления ранее вообще не производился. Настоящая работа была нацелена на восполнение этого пробела. Нами исследованы механизмы встряски: нормальной и сопряженной. Обнаружены состояния, образующиеся с доминирующим вкладом одного из механизмов, а также состояния, для которых вклады этих механизмов неразличимы в рамках используемого подхода. Результаты оказались в прекрасном согласии с данными первого в мире эксперимента в этом энергетическом диапазоне, проведённом на новейшем синхротронном источнике 4го поколения MAXIV (Лунд, Швеция). Произведена идентификация пиков в экспериментальном фотоэлектронном спектре в рамках используемой теоретической модели с учётом тонкого расщепления.



Обозначение пика	Идентификация
A	$3d^9 4s^2 4p^5 ({}^3D) 5s [{}^2D_{3/2}]$
B	$3d^9 4s^2 4p^5 ({}^3P) 5s [{}^2P_{3/2}]$
C	$3d^9 4s^2 4p^5 ({}^1P) 5s [{}^2P_{1/2}]$
D	$3d^9 4s^2 4p^5 ({}^3D) 5p [{}^2D_{5/2}]$
E	$3d^9 4s^2 4p^5 ({}^3D) 5p [{}^2F_{5/2}]$
F	$3d^9 4s^2 4p^5 ({}^3P) 5p [{}^2P_{3/2}]$
G	$3d^9 4s^2 4p^5 ({}^3F) 5p [{}^2F_{5/2}]$
H	$3d^9 4s^2 4p^5 ({}^3F) 4d [{}^2P_{3/2}]$
I	$3d^9 4s^2 4p^5 ({}^1F) 5p [{}^2D_{5/2}]$
J	$3d^9 4s^2 4p^5 ({}^1P) 5p [{}^2D_{3/2}]$
K	$3d^9 4s^2 4p^5 ({}^1D) 6p [{}^2D_{5/2}]$
L	$3d^9 4s^2 4p^5 ({}^3D) 6p [{}^2D_{5/2}]$
M	$3d^9 4s^2 4p^5 ({}^1P) 5p [{}^2P_{3/2}]$

Измеренный и рассчитанный спектр фотоэлектронов, испущенных при ионизации атома криптона с одновременной встряской валентного электрона на другие оболочки, вместе с идентификацией согласно развитой теоретической модели.

Изучены спектры, угловые распределения и угловые корреляции в электронной эмиссии при последовательной кратной ионизации криптона в области автоионизационных состояний атома ($4s^{-1}np$) и положительно заряженного иона ($4p^{-2}[{}^1D]ns/nd$). Результаты оказались в согласии с проведенным экспериментом: удалось корректно воспроизвести положение и относительные интенсивности фотоэлектронных линий в спектре, а также дать интерпретацию механизму их образования, и представлены в совместной публикации с данными первого в мире измерения этих параметров на лазере на свободных электронах FLASH (Гамбург, Германия) [Phys. Rev. A **103**, 022832 (2021)]. Анализ угловых корреляций первого и второго фотоэлектронов позволил с уверенностью подтвердить существенную роль ридберговских автоионизационных состояний ионов криптона в процессе последовательной двойной двухфотонной ионизации атома криптона.



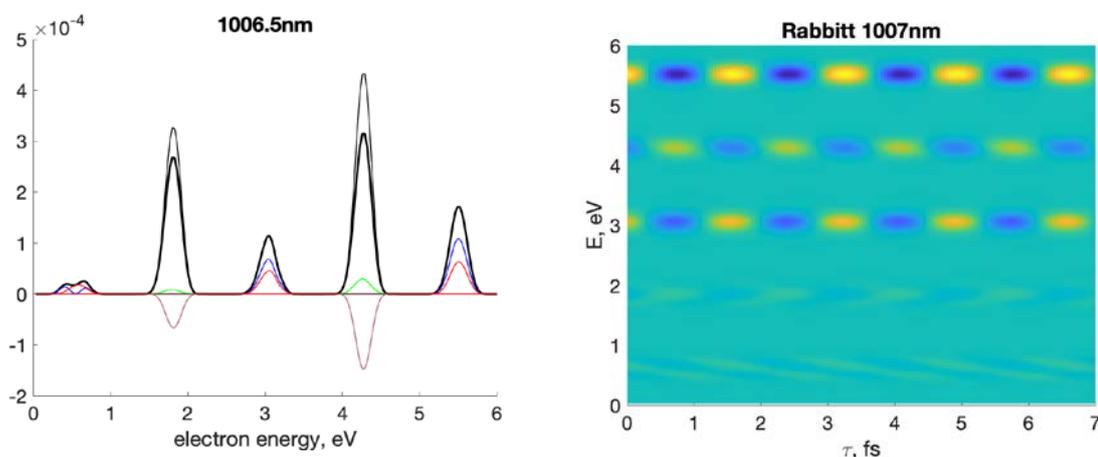
Измеренный (а) и рассчитанный (б) спектр фотоэлектронов, испущенных при двойной

двухфотонной ионизации атома криптона в области автоионизационных состояний атома и иона.

Прогресс в методике генерации аттосекундных импульсов на лазерах на свободных электронах позволил получать воспроизводимые, программируемые сигналы ВУФ диапазона высокой интенсивности. В нашей работе был осуществлен подробный анализ теоретической модели, лежащей в основе нестационарного описания последовательностей аттосекундных импульсов, недавно сгенерированных на лазере на свободных электронах FERMI. Результаты были доложены на конференции «Концентрированные потоки — 2021».

Первое направление исследований в этой области — моделирование угловых распределений и интенсивностей фотоэлектронных линий от перекрывающихся боковых частот, построенных на генерируемых FEL смежных когерентных гармониках с добавлением IR излучения. Изучена зависимость угловых распределений фотоэлектронов и интенсивностей в боковых пиках от времени задержки между IR и XUV импульсами.

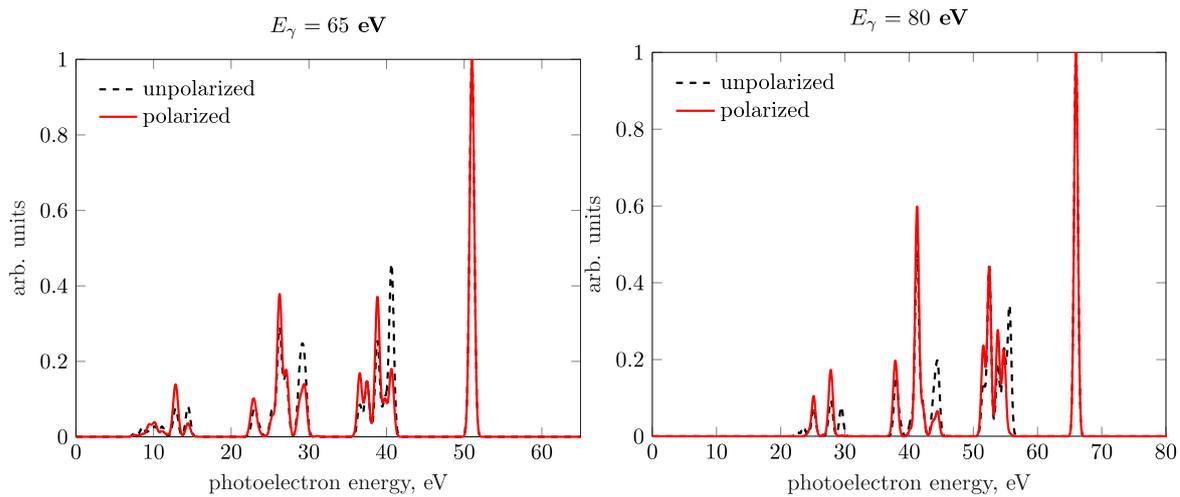
Моделирование проводилось в рамках нестационарной теории возмущений по третий порядок включительно и численного решения уравнений заселенности. Матричные элементы переходов между двумя дискретными состояниями и между дискретными состояниями и состояниями континуума проводилось методом R-матрицы, а между двумя состояниями континуума — с помощью волновых функций, полученных в MCHF, по методу, описанному в [Phys. Rev. A, 50, 5, 4109 (1994)] и аналитической формулы Гордона [Ann. Phys. 2, 1031 (1929)].



Пример усредненного времени задержки между IR и XUV импульсов фотоэлектронного спектра при ионизации неона с обозначением вкладов от различных порядков теории возмущений и его осцилляции в зависимости от него для длины волны 1006.5нм.

Следующее направление исследований — моделирование фотоэлектронных спектров, получаемых в результате последовательной ионизации атомов с учетом поляризации излучения. Был разработан подход, основанный на расчетах спектроскопических величин методом R-матрицы, и последующего решения уравнений заселенности развитым

программным обеспечением. Для учета поляризации излучения был применен формализм статистических тензоров, позволяющий существенно сократить число уравнений в системе по сравнению с традиционными методами.



Смоделированные фотоэлектронные спектры для ионизации криптона.