

Alicija Kupliauskienė

**Atomo teorijos metodų taikymas poliarizacijos  
reiškiniams sklaidos teorijoje**

## Pratarmė

Iš kvantinės mechanikos, nagrinėjančios mikrodalelių ir jų sistemų savybes, žinome, kad elektronų, atomų, molekulių ir kitų mikrodalelių sistemų būsenos, aprašomos  $L$ ,  $S$ ,  $J$  kvantiniaisiais skaičiais, yra išsigimusios šių kvantinių skaičių projekcijų atžvilgiu. Išsigimimas išnyksta, kai mikrodalelės patalpinamos į elektrinį, magnetinį ar elektromagnetinį lauką, kuriame jų energijos lygmenys suskyla (Štarko ir Zėmano reiškiniai). Sklaidos procesus aprašantys dydžiai (tikimybės ir skerspjuviai) priklauso nuo juose dalyvaujančių dalelių poliarizacijos, t.y. nuo jų judėjimo kiekio momento vektoriaus orientacijos dalelių tarpusavio judėjimo krypties atžvilgiu. Jeigu nei taikinio, nei sklaidomosios dalelės judėjimo kiekio momento projekcijos į jokią kryptį nėra fiksuojamos, sklaidos procesą aprašantis diferencialinis skerspjuvis yra skaliarinis dydis, nepriklausantis nuo abiejų dalelių kartu pasukimo erdvėje.

Invariantiškoms erdvės sukimo atžvilgiu atomų ir jonų charakteristikoms teoriškai tirti buvo sukurtas matematinis aparatas, kuris remiasi neredukuotinais tenzoriniais operatoriais ir judėjimo kiekio momento grafine technika [1]. Jo galia ir grožis atsiskleidė taikymuose, skirtuose tirti sudėtingus atomus ir jonus su daugeliu atvirų sluoksnių [2, 3, 4]. Tačiau tas pats matematinis aparatas gali būti sėkmingai pritaikytas tirti atomų ir jonų sąveikos su fotonais, elektronais ir kitais krūvininkais dydžiams. Paremti sklaidos procesais metodai yra galingas įrankis tirti medžiagos sandarai, todėl svarbūs teoriniams ir praktiniams taikymams.

Šis darbas skirtas atomo teorijos metodų pritaikymui poliarizuotų dalelių sklaidai aprašyti. Sukurtasis metodas yra alternatyvus iki tol naudotam tankio matricos formalizmui [5, 6, 7, 8]. Galutiniai rezultatai abiem metodais gaunami tie patys, nes viename tankio matricos, o kitame skerspjuviai skleidžiami neredukuotinių tenzorių (sferinių funkcijų) skleidiniais dar vadinamais multipoliais. Skleidimas neredukuotinais tenzoriais pasirinktas todėl, kad jų transformacijos, sukant koordinacių sistemą, yra paprasčiausios.

Knyga susideda iš penkių skyrių. Pirmajame skyriuje supažindinama su judėjimo kiekio momento teorijos pagrindais, banginių funkcijų ir tenzorinių operatorių grafiniu vaizdavimu, veiksmais su tenzoriniais operatoriais ir jų matriciniais elementais. Daug dėmesio skiriama sferinėms funkcijoms ir baigtinių posūkių matricoms, skaliarinių ir vektorinių funkcijų bei operatorių skleidimui multipoliais, fotono sąvokai ir jo funkcijoms. Atskirai pateikiamas tenzorinių operatorių matricinių elementų sandaugos skleidimas multipoliais, kuris sudaro atomo teorijos metodų taikymo sklaidos uždaviniams esmę. Skyrius užbaigiamas poliarizacijos sąvokos paaiškinimu.

Antrasis skyrius skirtas atomo sąveikos su spinduliuote konkreitiems uždaviniams nagrinėti.

Taikant atomo teorijos metodus surastos poliarizuotų atomų fotosužadavimo ir fotojonizacijos diferencialinių skerspjūvių bendrosios išraiškos. Parodyta, kaip iš bendrųjų išraiškų išvesti paprastesniems atvejams tinkančias formules, kai visos ar dalis procese dalyvaujančių dalelių nepoliarizuotos.

Atomo sužadintos būsenos išnykimas, išspinduliuojant fotoną ar Auger elektroną, aprašytas trečiajame skyriuje. Čia jonas sukuriamas jonizuojant atomą fotonais. Ketvirtajame skyriuje nagrinėjami dažniausiai sutinkami plazmoje atomų ir jonų sąveikos su elektronais procesai. Išvestos atomų sužadavimo ir jonizacijos elektronais, fotorekombinacijos, dvielektronės ir tridalės rekombinacijų diferencialinių skerspjūvių bendrosios išraiškos.

Paskutiniajame penktame skyriuje pasakojama apie elektronais sužadintų ir jonizuotų atomų ir jonų spinduliuotės tyrimą. Atomo ar jono sužadintos būsenos nėra stabilios. Jos savaime išnyksta sužadintiems elektronams peršokant į žemesnius lygmenis. Išspinduliuojamas fotonas, kuris dar vadinamas fluorescencija. Tuo atveju, kai atome ar jone atsiranda vakansija vidiniajame sluoksnyje, galimas kitas savaiminis procesas, kurio metu išspinduliuojamas elektronas. Jis vadinamas Auger procesu, o išlėkęs elektronas – Auger elektronu. Jeigu galima prileisti, kad sužadavimo ar jonizacijos elektronais metu atsiradusi atomo ar jono sužadinta būsena gyvuoja pakankamai ilgai, tokį atomo sužadintos būsenos susidarymą ir išnykimą galima aprašyti dviejų stadijų artinyje. Šiame skyriuje išnagrinėti poliarizuotų atomų sužadavimo ir jonizacijos poliarizuotais elektronais fluorescencijos spinduliuotės ir Auger elektronų spinduliuavimas bei rezonansinė fotonų sklaida.

Šioje knygoje formulės numeruojamos eilės tvarka atskirai kiekviename skyriuje. Kai nurodoma formulė iš kito skyriaus, nurodoms skyriaus numeris ir formulės numeris tame skyriuje, pvz. (2.17).

Autorė dėkinga bendradarbiams dr. V.Tutliui, dr. K.Glemžai ir dr. N.Rakštikui, kurie stimuliavo domėjimąsi poliarizacijos reiškiniais atomų sąveikos su elektronais ir fotonais procesuose ir talkino juos tiriant. Taip pat dėkinga V.Tutliui ir K.Glemžai už kritines pastabas.

## TURINYS

	Išvadas	8
1	<b>Judėjimo kiekio momento teorijos pagrindai</b>	14
1.1	Būsenos banginė funkcija	14
1.2	Judėjimo kiekio ir sukinio momentų operatoriai	15
1.3	Klebšo ir Gordano koeficientas	17
1.4	Neredukuotiniai tenzoriniai operatoriai	19
1.5	Tenzorinių operatorių matriciniai elementai. Vignerio ir Ekarto teorema	20
1.6	Banginių funkcijų ir tenzorinių operatorių grafinis vaizdavimas	22
1.7	Veiksmai su tenzoriniais operatoriais	23
1.8	Sferinės funkcijos	27
1.9	Baigtinių posūkių matricos	29
1.10	Skaliarinių funkcijų ir operatorių skleidimas multipoliais	31
1.11	Vektorinių funkcijų skleidimas multipoliais	33
1.12	Fotono sąvoka. Spinduliuotės skleidimas multipoliais	35
1.13	Tenzorinių operatorių matricinių elementų sandauga	37
1.14	Poliarizacija	38
2	<b>Atomo sąveika su spinduliuote</b>	42
2.1	Atomo sužadinimas spinduliuote	42
2.1.1	Atomo sužadinimo skerspjūvis	42
2.1.2	Spinduliuotės poliarizacija	43
2.1.3	Atomo sužadinimo tikimybės išraiškos suradimas	44
2.1.4	Fotosužadinimas – pirmoji daugiapakopio proceso stadija	48
2.1.5	Nepoliarizuotų atomų sužadinimas	49
2.1.6	Poliarizuotų atomų sužadinimas nepoliarizuotais elektronais	51
2.2	Poliarizuoto atomo jonizacija poliarizuota spinduliuote	54
2.2.1	Fotojonizacijos skerspjūvio išraiškos suradimas	55
2.2.2	Pilnasis nepoliarizuoto atomo fotojonizacijos skerspjūvis	58
2.2.3	Submatriciniai elementai	59
2.2.4	Fotoelektronų iš nepoliarizuoto atomo kampinis pasiskirstymas	61
2.2.5	Fotojono poliarizacija	62
2.2.6	Poliarizuoto atomo pilnasis fotojonizacijos skerspjūvis	63
2.2.7	Fotoelektrono kampinis pasiskirstymas poliarizuotam atomui	64
2.2.8	Fotoelektronų sukinio poliarizacija	66
2.2.9	Skaičiavimo kompiuterinė programa ir kai kurie rezultatai	68

<b>3</b>	<b>Atomo sužadintos būsenos suirimas</b>	<b>81</b>
3.1	Radiaciniai šuoliai	81
3.1.1	Bendrosios išraiškos suradimas	82
3.1.2	Jono galinė būsena nestebima	84
3.1.3	Fluorescencijos kampinis pasiskirstymas ir poliarizacija nepoliarizuotiems atomams	85
3.1.4	Kampinė koreliacija tarp fotoelektrono ir fluorescencijos nepoliarizuotiems atomams	86
3.1.5	Fluorescencijos kampinis pasiskirstymas jonizuojant nepoliarizuotus atomus	88
3.1.6	Kampinė koreliacija tarp fotoelektrono ir fluorescencijos po poliarizuoto atomo fotojonizacijos	89
3.1.7	Kompiuterinė programa ir Na ir K atomų skaičiavimo rezultatai	90
3.2	Auger procesas	93
3.2.1	Bendroji išraiška	95
3.2.2	Auger proceso pilnutinė tikimybė po nepoliarizuoto atomo fotojonizacijos	99
3.2.3	Auger elektronų kampinis pasiskirstymas nepoliarizuotiems atomams	99
3.2.4	Auger elektronų sukinio poliarizacija nepoliarizuotiems atomams	100
3.2.5	Auger elektronų ir fotoelektronų kampinė koreliacija nepoliarizuotiems atomams	101
3.2.6	Auger elektronų kampinis pasiskirstymas poliarizuotiems atomams	102
3.2.7	Auger elektronų ir fotoelektronų kampinė koreliacija poliarizuotiems atomams	103
3.2.8	Kompiuterinė programa	104
3.2.9	Auger elektronų kampinis pasiskirstymas Mg atomams	104
<b>4</b>	<b>Atomų sąveika su elektronais</b>	<b>110</b>
4.1	Jono ir elektrono rekombinacija ir fluorescencija	110
4.1.1	Bendroji skerspjūvio išraiška	114
4.1.2	Nepoliarizuoto atomo ir nepoliarizuoto elektrono fotorekombinacija	115
4.1.3	Rekombinacijos ir fluorescencijos fotonų kampinė koreliacija nepoliarizuotiems jonams ir elektronams	117
4.1.4	Fluorescencijos spinduliuotės kampinis pasiskirstymas	118
4.1.5	Fotorekombinacijos spinduliuotės kampinis pasiskirstymas	119
4.1.6	Fluorescencijos kampinis pasiskirstymas poliarizuotiems atomams	119
4.1.7	Programa ir skaičiavimo pavyzdžiai	120
4.2	Atomų sužadinimas elektronais	122
4.2.1	Bendroji diferencialinio skerspjūvio išraiška	123
4.2.2	Atomų sužadinimo elektronais pilnutinis skerspjūvis	130

4.2.3	Elektronų kampinis pasiskirstymas po nepoliarizuotų atomų sužadavimo nepoliarizuotais elektronais	130
4.2.4	Elektronų kampinis pasiskirstymas po poliarizuotų atomų sužadavimo nepoliarizuotais elektronais	131
4.2.5	Poliarizuotų atomų sužadavimo nepoliarizuotais elektronais pilnutinio skerspjūvio magnetinis dichroizmas	132
4.2.6	Elektronais sužadinto atomo rikiavimas	133
4.2.7	Išsklaidytų elektronų sukinio poliarizacija	134
4.3	Atomų sužadavimo nagrinėjimas Borno artinyje	135
4.3.1	Pilnutinis nepoliarizuotų atomų sužadavimo skerspjūvis	138
4.3.2	Pilnutinis poliarizuotų atomų sužadavimo skerspjūvis	138
4.3.4	Skaičiavimo programos ir pavyzdžiai	140
4.4	Dvielektronė rekombinacija	146
4.3.1	Dvielektronės rekombinacijos skerspjūvis	147
4.3.2	Dvielektronės rekombinacijos skerspjūvio atskiri atvejai	149
4.5	Atomų jonizacija elektronais	151
4.5.1	Diferencialinio skerspjūvio išraiška	151
4.5.2	Nepoliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais pilnutinis skerspjūvis	155
4.5.3	Elektronų po nepoliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais kampinis pasiskirstymas	156
4.5.4	Elektronų kampinis pasiskirstymas po poliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais	156
4.5.5	Kampinė koreliacija tarp dviejų išlekiančių elektronų po nepoliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais	157
4.5.6	Kampinė koreliacija tarp dviejų išlekiančių elektronų po poliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais	158
4.5.7	Magnetinis dichroizmas, jonizuojant poliarizuotus atomus	159
4.5.8	Magnetinis dichroizmas, jonizuojant poliarizuotus atomus poliarizuotais elektronais	160
4.6	Atomų jonizacijos nagrinėjimas Borno artinyje	163
4.6.1	Atomų jonizacijos skerspjūvio bendrosios išraiškos suradimas	163
4.6.2	Nepoliarizuotų atomų pilnutinis jonizacijos skerspjūvis	165
4.6.3	Lėtojo elektrono, atplėšto nuo nepoliarizuoto atomo, kampinis pasiskirstymas	166
4.6.4	Poliarizuotų atomų jonizacijos skerspjūvis	167
4.6.5	Elektrono po poliarizuoto atomo jonizacijos kampinis pasiskirstymas	168
4.6.6	Jonizuoto atomo rikiavimas	169

5	<b>Elektronais ir fotonais sužadintų atomų spinduliuotė</b>	171
5.1	Elektronais sužadintų atomų elektromagnetinė spinduliuotė	171
5.1.1	Atskiri atvejai sutrikdytų bangų artinyje	172
5.1.2	Atskiri atvejai Borno artinyje	175
5.1.3	Programos ir taikymo pavyzdžiai	176
5.2	Autojonizacijos ir Auger elektronai iš elektronais sužadintų atomų	179
5.3	Rezonansinė fotonų sklaida	180
5.4	Autojonizacijos ir Auger elektronai iš spinduliuote sužadintų atomų	184
5.5	Jonizuotų elektronais atomų elektromagnetinė spinduliuotė	186
5.5.1	Nepoliarizuotų atomų, jonizuotų nepoliarizuotais elektronais, elektromagnetinė spinduliuotė	187
5.5.2	Nepoliarizuotų atomų, jonizuotų nepoliarizuotais elektronais, elektromagnetinės spinduliuotės kampinis pasiskirstymas	187
5.5.3	Kampinė koreliacija tarp fluorescencijos spinduliuotės ir atplėštojo elektrono po nepoliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais	189
5.6	Greitais elektronais jonizuotų poliarizuotų atomų elektromagnetinė spinduliuotė	189
5.6.1	Greitais elektronais jonizuotų nepoliarizuotų atomų elektromagnetinė spinduliuotė	190
5.6.2	Greitais elektronais jonizuotų nepoliarizuotų atomų elektromagnetinės spinduliuotės kampinis pasiskirstymas	191
5.7	Jonizuotų elektronais atomų Auger elektronų spinduliavimas Literatūra	192

## Išvadas

Atomų sąveikos su fotonais, elektronais ir kitais krūvininkais panaudojimas yra galingas medžiagos ir sąveikų tyrimo įrankis, turintis teorinės ir praktinės reikšmės. Bet kokiam su atomais susijusiam procese, bet ypač susidūrimuose, tarp įvairių dalelių vyksta apsisikeitimas energija, judėjimo kiekiu ir judėjimo kiekio momentu. Visiems trims fizikiniam dydžiams galioja tvermės dėsniai. Klasikinėje teorijoje visos šių trijų dydžių apibrėžtos vertės galima išmatuoti vienu metu. Tačiau kvantinės būsenos negali vienu metu būti tikrinės ir judėjimo kiekiui, ir judėjimo kiekio momentui. Sklaidos eksperimentuose judėjimo kiekis būna gerai žinomas ir turi apibrėžtą vertę. Tuo tarpu judėjimo kiekio momento vertė nebūna žinoma. Suprantama, judėjimo kiekio momentas egzistuoja, bet šia informacija negalima tiesiogiai pasinaudoti. Geriausia, kuo galima pasinaudoti, yra judėjimo kiekio momento dedamųjų sandaugų vidutinės vertės, kurios proporcingos parametrui, aprašantiems poliarizaciją, t.y. orientaciją ir rikiavimą [9]. Būtent tik šie parametrai apibrėžia būsenas. Rikiavimo ir orientacijos parametrų išmatavimas leidžia sužinoti apie apsisikeitimą judėjimo kiekio momentu atomų susidūrimuose. Rikiavimo ir orientacijos parametrai iš esmės apibūdina atitinkamai elektrono skriejimą apie atomo elektrono kamieną, sužadinto elektrono debesėlio formą ir jo kryptį erdvėje. Tokiu būdu, orientacijos ir rikiavimo parametrai suteikia daugiau informacijos už sklaidos skerspjūvį. Palankiais atvejais jie gali pagelbėti išgauti iš eksperimento visų kvantmechaninių sklaidos amplitudžių ir fazių vertes. Šiuo atveju sakoma, kad padaromas pilnas eksperimentas [10].

Poliarizacijos reiškinių atomų sąveikos su krūvininkais ir spinduliuote nagrinėjimas stimuliuo plazmos ir jonizuotų dujų [11] bei kietųjų kūnų [12] naujų tyrimo metodų sukūrimą. Poliarizacinė plazmos spektroskopija [11] yra vienas iš jų, kadangi elektronų ir jonų sąveika laboratorinėje ir astrofizikinėje plazmoje yra pagrindinė spinduliuotės atsiradimo priežastis. Plazmos spektroskopinių charakteristikų poliarizacijos matavimai yra vienintelė galimybė dideliu tikslumu nustatyti elektronų ir jonų pasiskirstymo pagal greičius funkcijos nuokrypį nuo Maksvelo funkcijos. Plazmos pluoštelių buvimas gali suvaidinti esminį vaidmenį emisijos spektrų atsiradime [13]. Registruojant plazmos diskretinio ir tolydinio spektro poliarizaciją buvo tiesiogiai nustatyti elektronų pasiskirstymo pagal greičius funkcijos nuokrypiai nuo maksveliškojo lazerinėje [14], tokamako [15], vakuuminės kibirkšties [16] ir astrofizikinėje (Saulės vainiko) [17] plazmoje. Emisinių ir absorbcinių linijų poliarizacija yra atomų ir jonų poliarizacijos pasekmė, kai būsenos, aprašomos  $J$  pilnojo judėjimo kiekio momento  $M$  projekcijomis, užpildomos nevienodai arba judėjimo kiekio momentai plazmoje išrikiuojami. Šis rikiavimas atsiranda savaime



dėl plazmos šaltinių anizotropinių savybių, todėl vadinamas savirikiavimu [17].

Kitas orientacijos ir rikiavimo aspektas yra galimybė atsieti geometrinius parametrus nuo dinaminių. Iš klasikinės spinduliuotės teorijos seka, kad, kai stebima šviesa, matoma tiktai statmena žiūrėjimo kryptčiai objekto dalis. Norint nustatyti visą jo elektromagnetinę konfigūraciją, reikia apžiūrėti objektą įvairiais kampais, kitaip sakant iš visų pusių. Poliarizacijai aprašyti neredukuotiniai tenzoriai pasirinkti todėl, kad jų išraiškos paprasčiausios ir geriausiai aprašo koordinačių sistemos posūkius [18].

Ekspperimentai su laisvais poliarizuotais atomais atvėrė galimybę atpauzinti atominius dydžius nuo kietojo kūno efektų [12]. Daugelis atomų dėl savo magnetinių savybių plačiai tiriami, nes svarbūs paaiškinant labai plonų ir daugiasluoksnių feromagnetinių plėvelių savybes [12, 19]. Jos naudojamos tobulinant informacijos įrašymo ir apdorojimo įrenginius. Fotoelektronų spektroskopija, paremta tiesiniu ir apskritiminiu dichroizmu [20], įgalina gauti informacijos apie mažus specialiai parinktus paviršius [12, 19]. Magnetinių ir optinių reiškinių vienu metu nagrinėjimas vakuuminio ultravioleto ir minkštųjų Rentgeno bangų ilgių diapazone yra labai svarbus įrankis magnetinėms medžiagoms tirti [20].

Parametrų, tinkamų aprašyti poliarizaciją atomų fotojonizacijoje, išraiškoms surasti Fano [21] pasiūlė naudoti tankio matricos formalizmą [5], kuris beveik išimtinai plačiai naudojamas iki šiol [7, 8, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28]. Fano metode mikrodalelių poliarizacija aprašoma statistiniais tenzoriais (būsenų multipoliais), kurie ir sudaro bazę tankio matricos skleidiniui. Metodai, paremti tankio matricos formalizmu, tapo visuotinai pripažintais ir naudojamais. 1973 metais Fano ir Macek [29] suformulavo alternatyvų metodą šviesos išspinduliavimui, suyrant atomo stacionariai būsenai po atomo sužadavimo elektronais arba fotonais, aprašyti. Jame vietoje tankio matricos elementų naudojamas matuojamų dydžių vidutinių charakteristikų pilnas rinkinys. Matuojamiems vidutiniams dydžiams susieti su neredukuotiniais tenzoriais, sudarytais iš judėjimo kiekio momento matricinių elementų, naudojama Vignerio ir Ekarto teorema [1]. Taigi, šie vidutiniai dydžiai yra proporcingi būsenų multipoliams, todėl tankio matricos elementų nereikia.

Fano ir Macek metodas paskatino Kupliauskieneį ir kt. [30, 31] prieiti prie išvados, kad diferencialinį skerspjūvį galima užrašyti daugelio multipolių skleidinių sumomis, kuriose yra submatricinių elementų, invariantiškų koordinačių pasukimui, ir neredukuotinių tenzorinių operatorių, aprašančių koordinačių sistemos posūkius, sandaugos. Buvo sukurtas metodas, kuriame naudojami gerai išplėtoti įprastiniai atomo teorijos metodai [2, 3, 4] ir judėjimo kiekio momento grafinė technika [1, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38]. Iki tol šie metodai buvo naudojami

surasti tokioms atomų charakteristikoms, kurios invariantiškos erdvės sukimo atžvilgiu. Priklausomybės nuo judėjimo kiekio momento projekcijų buvo atsisakoma, pasinaudojant Vignerio ir Ekarto teorema, t.y. matricinius elementus užrašant submatricinio elemento ir Klebšo ir Gordano koeficiento sandaugos pavidalu.

Keletas bandymų apsieiti be tankio matricos buvo ir anksčiau, bet jie buvo skirti specialiams atvejams nagrinėti [39, 40, 41, 42]. Fano ir Dill [39] fotoelektrono kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametro išraišką užrašė judėjimo kiekio  $j_t$ , perduoto nepoliarizuotam atomui, indėlių nekoherentine suma. Išraiškos, aprašančios nepoliarizuotų Auger elektronų, jonizuojant atomus nepoliarizuotais elektronais ir protonais, kampinį pasiskirstymą, taip pat buvo surastos [40], nenaudojant tankio matricos. Taigi, alternatyvus tankio matriciai metodas, paremtas atomo teorijos metodais, yra suprantamesnis ir lengviau įsisavinamas dirbančiųjų atomo teorijos srityje.

Mūsų metodo tikslas buvo išvesti poliarizuotų atomų sąveikos su poliarizuota spinduliuote, elektronais ar kitais krūvininkais diferencialinių skerspjūvių bendrąsias išraiškas nereliatyvistiniame artinyje multipolinių skleidinių sferiniais tenzoriais sumų pavidalu. Kadangi išraiškos sudėtingos, tai integravimui kampinių ir sumavimui sukininių kintamųjų atžvilgiu naudojama judėjimo kiekio momento grafinė technika [1]. Visas išraiškas, surandamas grafinės technikos pagalba, galima gauti ir naudojant įprastinius algebrinius metodus, kadangi kiekvienai algebrinei operacijai egzistuoja grafinis atitikmuo. Tačiau grafinis metodas turi pranašumų, lyginant su algebriniu: a) visi žymėjimai yra kompaktiškesni, nes nereikia rašyti magnetinių kvantinių skaičių, kurių atžvilgiu sumuojama; b) supaprastinimai gali būti atliekami, supaprastinant geometrines diagramas.

Levinsono [32] pasiūlytą ir vėliau išplėtotą [1, 38, 43] grafinę techniką reikėjo papildyti sferinių funkcijų ir sukimo matricių grafiniais elementais [31, 44, 45], kad ji būtų tinkama surasti išraiškoms tikimybės, priklausančios nuo dalelių pilnutinio judėjimo kiekio momento tarpusavio orientacijos ar orientacijos atžvilgiu parinktos kvantavimo ašies.

Poliarizuotų atomų sužadinimo ar jonizacijos poliarizuotais krūvininkais ar spinduliuote diferencialinių skerspjūvių ar tikimybių bendrosios išraiškos gali būti lengvai supaprastinamos, kad tiktų aprašyti eksperimentus, kuriuose dalis arba visos dalelės nėra poliarizuotos. Tyrėjai, naudojantys tankio matricos techniką, nagrinėjo paprastesnius atvejus, kiekvienam jų išvesdami išraiškas atskirai, t.y. nuo pat pradžių formuluodami problemą konkrečiam eksperimentui. Kadangi egzistuoja didelė atomų sąveikos su krūvininkais ar spinduliuote procesų įvairovė, iš šios srities paskelbta daug darbų. Apžvelgsime tik nedidelę dalį, mūsų požiūriu, pačių

svarbiausių.

Jacobs [22] surado poliarizuoto atomo fotojonizacijos poliarizuota spinduliuote diferencialinio skerspjūvio bendrąją išraišką, fotoelektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametro  $\beta$  ir fotoelektronų sukinio poliarizacijos parametrų  $\gamma$ ,  $\delta$  ir  $\xi$  išraiškas. Nuo pat pradžių buvo laikoma, kad fotojonai neregistruojami. Fotoelektronų iš nepoliarizuotų atomų kampinis pasiskirstymas buvo nagrinėtas [23, 24] darbuose. Cherepkov [46] išvedė formules fotoelektronų su fiksuota sukinio orientacija kampiniam pasiskirstymui, kai nepoliarizuoti atomai jonizuojami poliarizuota spinduliuote. Kabachnik ir Sazhina surado išraiškas, aprašančias fotoelektronų iš nepoliarizuotų atomų kampinį pasiskirstymą ir poliarizaciją autojonizacijos rezonansų srityje. Čia fotonai galėjo būti bet kokio multipoliškumo. Vėliau gautos skerspjūvių ir fotoelektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrų išraiškos daug bendresniam atvejui, kai poliarizuoti atomai apšviečiami poliarizuota spinduliuote rezonansų [47] ir nerezonansinėje [20, 24] srityse. Šios išraiškos buvo panaudotos fotoelektronų kampinio pasiskirstymo magnetiniam dichroizmui tirti [47]. Hemmers ir kt. [48] aptiko eksperimentiškai ir paaikšino teoriškai labai stiprią nedipolinių narių įtaką fotojonizuojant atomus artimos jonizacijos slenksčiui energijos spinduliuote.

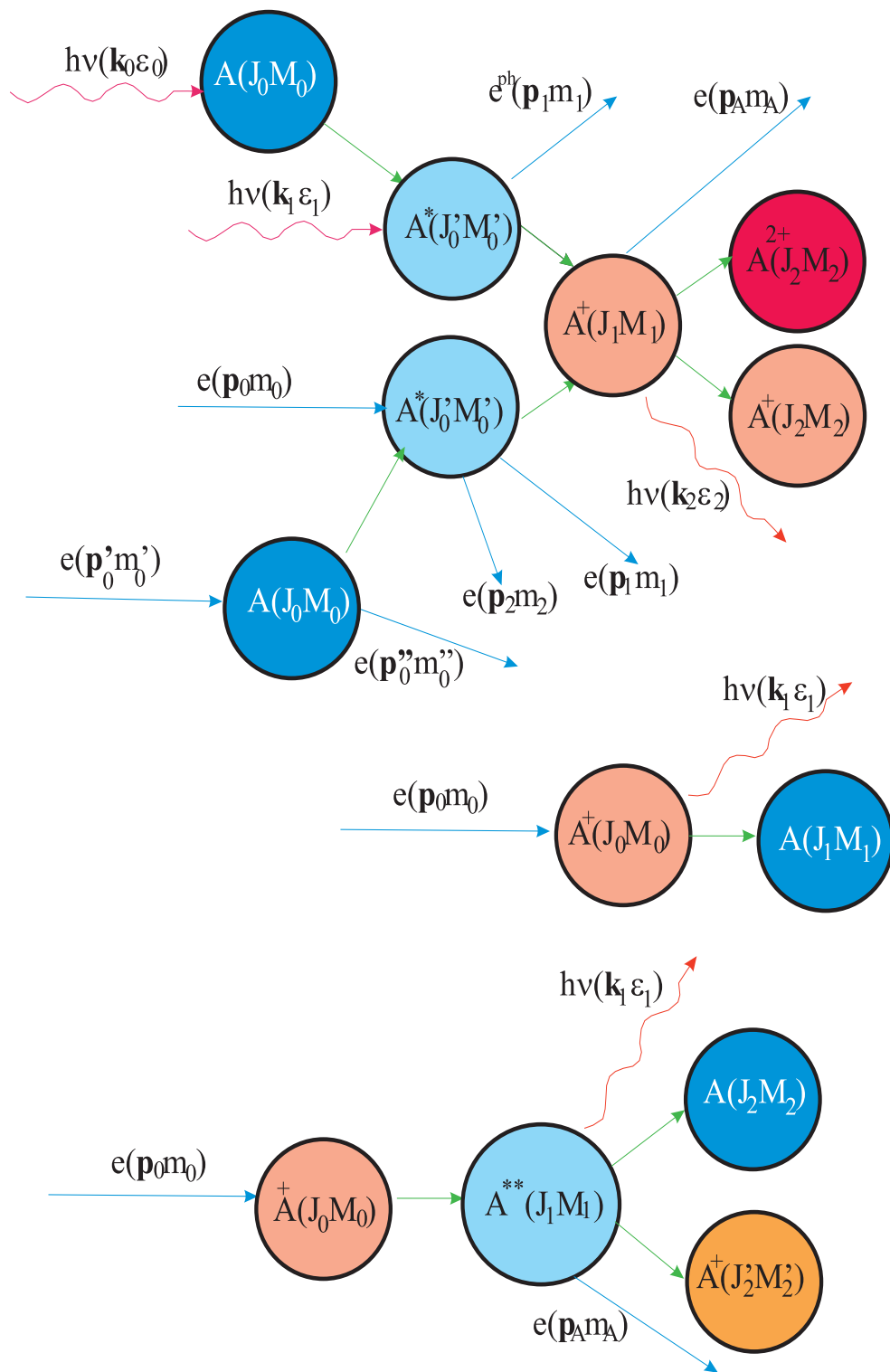
Daug daugiau darbų skirta atomų, jonizuotų elektronais ar fotonais, Auger elektronų ir fluorescencijos spinduliuotės spektrams tirti. 1972 ir 1974 metais buvo paskelbti trys straipsniai [40, 49, 50]. Charakteringosios spinduliuotės poliarizacija [49] ir po atomo fotojonizacijos išlekiančių Auger elektronų kampinis pasiskirstymas [40, 50] buvo aprašyti nenaudojant tankio matricos. Vėliau Kabachnik su bendraautorais [23, 51, 52, 53, 54, 55, 56], Lohman ir kt. [57, 58] bei Bartschat ir Grum-Grzhimailo [59] surado išraiškas, aprašančias Auger elektronų kampinį pasiskirstymą ir poliarizaciją įvairiomis eksperimento sąlygomis. Kadangi išraiškos buvo skirtos inertinėms dujoms nagrinėti, į atomų poliarizaciją nebuvo atsižvelgta, tačiau atomai galėjo būti jonizuojami poliarizuotais dipoliniais fotonais [52] ar nepoliarizuotais elektronais [53, 54, 55, 60]. Taip pat buvo tirtas Auger elektronų pasiskirstymas, kai elektronais jonizuojami lazerio spinduliuote sužadinti atomai [55] bei buvo pasiūlytas daugiapakopis artinys kampinėms koreliacijoms nagrinėti [51], kai suyra vidinių sluoksnių vakansijos, atsiradusios fotoabsorbcijos eksperimentuose. Pan ir Starace [61] nagrinėjo elektronų kampinį pasiskirstymą, o Streun ir kt. [62] – elektronų poliarizaciją atomų jonizacijos elektronais atveju.

Atomų ir jonų rikiavimas, kai jonas atima elektroną iš atomo ir išspinduliuoja fotoną, yra kita poliarizacijos pasireiškimo elektronų ir jonų sąveikoje sritis [63, 64, 65]. Rekombinavusio jono spinduliuotės kampinis pasiskirstymas gali suteikti naudingos informacijos apie tai, į kokias jono būsenas elektronas pagaunamas iš atomo [66, 67], molekulės ar kietojo kūno. Tuo

tarpu rezonansinio elektrono pagavimo iš atomo, sužadinant joną (RETE), parametrai panašūs į dvielektronės rekombinacijos parametrus. Kai kurie atskiri RETE atvejai tirti [67, 70] darbuose.

Šiame darbe nagrinėjamų atomų sąveikos su fotonais ir elektronais procesų įvairovė pavaizduota 1 pav. Atomai gali būti sužadunami fotonais ir elektronais. Po to juos gali jonizuoti kiti fotonai ar elektronai. Dažniausiai atsiradusių jonų būsenos būna nestabilios. Jos gali išnykti jonams išspinduliuojant fluorescencijos arba Auger elektronus. Laisvuosius elektronus gali pagauti jonai, t.y. įvykti jono ir elektrono rekombinacija, kurios metu atsiranda mažesnės jonizacijos jonai. Rekombinacija būna fotorekombinacija ir dvielektronė rekombinacija. Fotorekombinacijos metu išspinduliuotas fotonų spektras yra tolydinis, o dvielektronės rekombinacijos – diskretinis.

Knygoje naudojama atominė vienetų sistema, kurioje Planko konstanta, padalinta iš  $2\pi$ , elektrono krūvis  $e$  ir masė  $m$  prilyginami vienetui ( $\hbar = e = m = 1$ ). Tuomet šviesos greitis vakuume  $c = 137$ , ilgio vienetas yra pirmosios Boro orbitos vandenilio atome spindulys  $a_0$ , smulkiosios sandaros konstanta  $\alpha = e/(mc) = 1/137$ , atominis laiko vienetas lygus  $2,42 \cdot 10^{-17} s$ , atominis ploto vienetas –  $\pi a_0^2$ , atominis dažnio vienetas –  $4,1341 \cdot 10^{16} s^{-1}$ , atominis elektrinio potencialo vienetas –  $27,216 V$ , atominis elektrinio lauko stiprio vienetas –  $5,142 \cdot 10^{11} V/m$ . Jeigu bus naudojama kita vienetų sistema ar bendrumo dėlei, tuomet formulėse bus rašomos visos konstantos.



1 pav. Įvairūs procesai po atomų sąveikos su fotonais ir elektronais.

# 1 Judėjimo kiekio meomento teorijos pagrindai

## 1.1 Būsenos banginė funkcija

Kvantinės sistemos būseną pilnai aprašo jos būsenos vektorius arba funkcija  $|\psi\rangle$ . Jeigu galimos  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$  būsenos, šių būsenų funkcijų superpozicija

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n a_i |\psi_i\rangle \quad (1)$$

taip pat aprašo sistemos būseną. Amplitudės  $a_i$  yra kompleksiniai skaičiai. Superpozicijos principas (1) yra viena iš fundamentaliausių kvantinės mechanikos sąvokų. Iš jo seka tikimybės amplitudė ir kai kurių dydžių matavimo neapibrėžtumo principas. "Bra" funkcija  $\langle\psi|$  yra "ket" funkcijai  $|\psi\rangle$  kompleksiskai jungtinė

$$\langle\psi| = \sum_{i=1}^n a_i^* \langle\psi_i|. \quad (2)$$

Čia  $a_i^*$  yra  $a_i$  kompleksiskai jungtinės amplitudės. Kai integralas

$$\langle\psi|\psi'\rangle = 0, \quad (3)$$

sakoma, kad būsenos funkcijos yra ortogonalios. Tuo tarpu visada

$$\langle\psi|\psi\rangle > 0. \quad (4)$$

Jeigu  $|\psi_i\rangle$  funkcijos yra ortogonalios ir normuotos, galima surasti amplitudes

$$\langle\psi_i|\psi\rangle = a_i = \langle\psi|\psi_i\rangle^*. \quad (5)$$

Jeigu būsenos funkcija  $|\psi\rangle$  normuota, t.y.

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1, \quad (6)$$

tuomet

$$\sum_i |a_i|^2 = 1, \quad (7)$$

ir  $|a_i|^2$  galima interpretuoti kaip tikimybę būti sistemai būsenoje  $|\psi_i\rangle$ .

## 1.2 Judėjimo kiekio ir sukininio momentų operatoriai

Klasikinėje mechanikoje dalelės judėjimą apskritimu aprašantis judėjimo kiekio momento vektorius  $\mathbf{l}$  apibrėžiamas  $\mathbf{r}$  atstumo nuo centro, kurio atžvilgiu skaičiuojamas momentas, ir judėjimo kiekio  $\mathbf{p}$  vektoringe sandauga

$$\mathbf{l} = [\mathbf{r}\mathbf{p}]. \quad (8)$$

Kvantinėje mechanikoje naudojamas judėjimo kiekio momento operatorius, kurio išraiška surandama vietoje  $\mathbf{r}$  ir  $\mathbf{p}$  įrašant juos atitinkančius operatorius

$$\mathbf{l} = -i\hbar[\mathbf{r}\nabla]. \quad (9)$$

kur  $i = \sqrt{-1}$  – menamas vienetas,  $\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  – Planko konstanta,  $\nabla$  – vektorinis operatorius ("nabla"), kurio išraišką Dekarto koordinatų sistemoje galima užrašyti jo dedamosiomis

$$\nabla_x = \frac{\partial}{\partial x}, \quad \nabla_y = \frac{\partial}{\partial y}, \quad \nabla_z = \frac{\partial}{\partial z}. \quad (10)$$

Radiuso vektoriaus (atstumo nuo koordinatų pradžios) operatorius –

$$r_x = x, \quad r_y = y, \quad r_z = z. \quad (11)$$

Judėjimui apskritimu aprašyti geriau tinka sferinė koordinatų sistema, kurioje  $x, y, z$  atitinka  $r$  atstumas nuo centro ir polinis  $\theta$  bei azimutinis  $\phi$  kampai. Sąryšis tarp Dekarto ir sferinės koordinatų sistemų yra:

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta. \quad (12)$$

Tuomet judėjimo kiekio momento operatoriaus dedamosios atitinkamai Dekarto ir sferinėje koordinatų sistemose yra:

$$\begin{aligned} l_x &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ l_y &= -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ l_z &= -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \end{aligned} \quad (13)$$

$$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} l_x &= i\hbar \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ l_y &= i\hbar \left( -\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \end{aligned}$$

$$l_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}, \quad (15)$$

$$l^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] = -\hbar^2 \Lambda, \quad (16)$$

kur  $\Lambda$  – Ležandro operatorius.

Kvantinėje mechanikoje judėjimo kiekio momento operatorių patogiu apibrėžti pasinaudojant komutavimo sąryšiais ir matuoti  $\hbar$  vienetais. Tuomet bendru atveju sistemos judėjimo kiekio momentas  $\mathbf{J}$  yra vektorinis dydis ir jam priskiriami trys ermitiniai operatoriai  $J_x, J_y, J_z$ , kurie yra  $\mathbf{J}$  projekcijos į koordinačių  $x, y, z$  ašis. Jie patenkina šiuos komutacijos sąryšius:

$$[J_x, J_y] = iJ_z, \quad [J_y, J_z] = iJ_x, \quad [J_z, J_x] = iJ_y, \quad (17)$$

arba bendra forma

$$[J_k, J_l] = i \sum_m \varepsilon_{klm} J_m. \quad (18)$$

$\varepsilon_{kli}$  – trečiojo rango antisimetrinis vienetinis tenzorius, kurio dedamoji  $\varepsilon_{123} = 1$ . Ji, panaudojant vektorinę sandaugą, galima užrašyti

$$[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]_p = \sum_{i,j} \varepsilon_{pij} a_i b_j.$$

Dažniausiai  $\mathbf{J}$  vadinamas pilnutiniu judėjimo kiekio momentu ir yra lygus orbitinio  $\mathbf{L}$  ir sukininio  $\mathbf{S}$  judėjimo kiekio momentų vektorinei sumai

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \quad (19)$$

Tuomet  $\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{l}_i$ ,  $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i$ , arba  $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ ,  $\mathbf{J} = \sum_i \mathbf{j}_i$ . Kartais vietoje  $J_x$  ir  $J_y$  naudojami operatoriai

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad J_- = J_x - iJ_y, \quad (20)$$

kurių komutacijos sąryšiai yra

$$[J_{\pm}, J_z] = \mp J_{\pm}, \quad [J_{\pm}, J_{\mp}] = \pm 2J_z.$$

Akivaizdu, kad  $J_+$  ir  $J_-$  operatoriai komutuoja su  $J^2$  kaip ir  $J_x, J_y$  ir  $J_z$ .

Elektrono sukinio operatorius  $s$  ( $s=1/2$ , t.y. atvejis, kai  $J = 1/2$ ) taip pat tenkina (18) komutacijos sąryšius, tiktai apibrėžiamas naudonjant Pauli matricas  $\sigma_i$ . Kai  $J = 1/2$ ,  $J_i = \sigma_i/2$ ,

o

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (21)$$



Pauli matricos yra ermitinės ( $\sigma_i = \sigma_i^*$ ), unitarinės ( $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I$ , kur  $I$  – vienetinė matrica), tarpusavyje antikomutuoja ( $\sigma_i\sigma_j = -\sigma_j\sigma_i$ ,  $i \neq j$ ) ir dviejų matricų sandauga lygi trečiajai ( $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$ ,  $\sigma_y\sigma_z = i\sigma_x$ ,  $\sigma_z\sigma_x = i\sigma_y$ ). Pauli matricoms taip pat galioja sąryšis, analogiškas (20):

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Sukininės funkcijos yra:

$$\begin{aligned} |s\mu\rangle = |1/2, 1/2\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |s-\mu\rangle = |1/2, -1/2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \langle 1/2, 1/2| &= (1, 0), \quad \langle 1/2, -1/2| = (0, 1). \end{aligned} \quad (23)$$

### 1.3 Klebšo ir Gordano koeficientas

Klebšo ir Gordano koeficientas atsiranda, kai reikia susieti du komutuojančius judėjimo kiekio momentus į vieną

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2. \quad (24)$$

Judėjimo kiekio momento  $\mathbf{j}_i$  kvadratas ir viena iš projekcijų tenkina tikrinių verčių lygtis

$$j_i^2 |j_i m_i\rangle = j_i(j_i + 1)\hbar^2 |j_i m_i\rangle, \quad (25)$$

$$j_{iz} |j_i m_i\rangle = m_i \hbar^2 |j_i m_i\rangle, \quad (26)$$

ir bendra nesusietų momentų funkcija yra:

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle. \quad (27)$$

(27) funkcija nėra tikrinė  $j^2$  funkcija, kadangi šio operatoriaus matrica  $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$  funkcijų bazėje nėra diagonali. Priežastis ta, kad

$$j^2 = j_1^2 + j_2^2 + 2(\mathbf{j}_1 \mathbf{j}_2) \quad (28)$$

nekomutuoja su  $j_{1z}$  ir  $j_{2z}$ , nors (27) funkcija yra tikrinė

$$j_z = j_{1z} + j_{2z} \quad (29)$$

funkcija. Norint surasti funkcijų, tikrinių (28) ir (29) operatoriams, bazę reikia (28) operatoriaus matricą (27) funkcijų bazėje diagonalizuoti. Po diagonalizavimo (28) tikrinė funkcija užrašoma (27) funkcijų tiesiniu skleidiniu

$$|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1, m_2} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{bmatrix} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle, \quad (30)$$

kurio skleidimo koeficientai yra Klebšo ir Gordano koeficientai. Naujoje funkcijų bazėje (28) ir (29) operatoriai tenkina tikrinių verčių lygtis

$$j^2|j_1 j_2 j m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j_1 j_2 j m\rangle, \quad (31)$$

$$j_z|j_1 j_2 j m\rangle = m\hbar|j_1 j_2 j m\rangle. \quad (32)$$

Fiksuotoms  $j_1$  ir  $j_2$  vertėms

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2. \quad (33)$$

$$m = m_1 + m_2. \quad (34)$$

Reikia atkreipti dėmesį į tai, kad Vignerio koeficientams galioja sąryšis tarp projekcijų:  $m_1 + m_2 + m = 0$ .

Labai paprastos išraiškos yra tų Klebšo ir Gordano koeficiento, kurių vienas iš momentų lygus nuliui [1]

$$\begin{bmatrix} j & 0 & j' \\ m & 0 & m' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & j & j' \\ 0 & m & m' \end{bmatrix} = \delta(jm, j'm'), \quad (35)$$

$$\begin{bmatrix} j & j' & 0 \\ m & m' & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} j' & j & 0 \\ -m' & -m & 0 \end{bmatrix} = (-1)^{j-m}(2j+1)^{-1/2}\delta(jm, j'-m'). \quad (36)$$

Kartais išraiškas, kuriose yra Klebšo ir Gordano koeficientų, pavyksta supaprastinti, pasinaudojant Klebšo ir Gordano koeficientų simetrijos savybėmis [1]:

$$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} j_2 & j_1 & j \\ -m_2 & -m_1 & -m \end{bmatrix} \quad (37)$$

$$= (-1)^{j_1+j_2-j} \left\{ \begin{bmatrix} j_2 & j_1 & j \\ m_2 & m_1 & m \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ -m_1 & -m_2 & -m \end{bmatrix} \right\} \quad (38)$$

$$= (-1)^{j_1-m_1} \left[ \frac{2j+1}{2j_2+1} \right]^{1/2} \left\{ \begin{bmatrix} j_1 & j & j_2 \\ m_1 & -m & -m_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} j & j_1 & j_2 \\ m & -m_1 & m_2 \end{bmatrix} \right\} \quad (39)$$

$$= (-1)^{j_2+m_2} \left[ \frac{2j+1}{2j_1+1} \right]^{1/2} \left\{ \begin{bmatrix} j & j_2 & j_1 \\ -m & m_2 & -m_1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} j_2 & j & j_1 \\ -m_2 & m & m_1 \end{bmatrix} \right\} \quad (40)$$

$$= (-1)^{j_2-j-m_1} \left[ \frac{2j+1}{2j_2+1} \right]^{1/2} \left\{ \begin{bmatrix} j & j_1 & j_2 \\ -m & m_1 & -m_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} j_1 & j & j_2 \\ -m_1 & m & m_2 \end{bmatrix} \right\} \quad (41)$$

$$= (-1)^{j_1-j+m_2} \left[ \frac{2j+1}{2j_1+1} \right]^{1/2} \left\{ \begin{bmatrix} j_2 & j & j_1 \\ m_2 & -m & -m_1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} j & j_2 & j_1 \\ m & -m_2 & m_1 \end{bmatrix} \right\}. \quad (42)$$

Naudinga žinoti, kad

$$\begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = 0, \quad (43)$$

jeigu  $l_1, l_2, l$  – sveiki skaičiai, o  $l_1 + l_2 + l =$  nelyginis skaičius.

Dažnai reikalingos šios sumos

$$\sum_{m_1, m_2} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ m_1 & m_2 & m' \end{bmatrix} = \delta(jm, j'm'), \quad (44)$$

$$\sum_{j, m} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m'_1 & m'_2 & m \end{bmatrix} = \delta(m_1 m_2, m'_1 m'_2). \quad (45)$$

## 1.4 Neredukuotiniai tenzoriniai operatoriai

Neredukuotiniu tenzoriniu operatoriumi ( sutrumpintai neredukuotiniu tenzoriumi)  $T_q^{(k)}$ , kurio rangas  $k$ , o projekcija į  $z$  ašį  $q$ , vadinama visuma  $(2k+1)$  operatorių, kurie, sukant koordinacių sistemą, transformuojasi taip pat, kaip būsenų funkcijos  $|jm\rangle$ . Transformacijos iš senosios į naująją koordinacių sistemą, pažymėtą vingele, dėsni galima užrašyti [8]:

$$\tilde{T}_q^{(k)} \equiv R(\omega) T_q^{(k)} R^{-1}(\omega) = \sum_{p=-k}^k D_{pq}^k(\alpha, \beta, \gamma) T_p^{(k)}, \quad (46)$$

$$|j\tilde{m}\rangle \equiv R(\omega) |jm\rangle = \sum_{m'=-j}^j D_{m'm}^j(\alpha, \beta, \gamma) |jm'\rangle. \quad (47)$$

Čia  $R(\omega)$  – posūkio operatorius, kuris transformuoja būsenos funkciją  $|jm\rangle$  į būsenos funkcijas  $|j\tilde{m}\rangle$ .  $R^{-1}(\omega) \equiv R(-\omega)$ ,  $\omega = (\alpha, \beta, \gamma)$  – Eulerio kampai,  $D_{m'm}^j$  – baigtinių posūkių matricos [18].

Sukant koordinacių sistemą sferinės funkcijos  $Y_{lm}(\hat{r})$  transformuojasi pagal (47), todėl jos yra neredukuotiniai tenzoriai. Kai jos naudojamos kaip operatoriai, jos apibrėžiamos šitaip:

$$C_q^{(k)}(\hat{r}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} Y_{kq}(\hat{r}). \quad (48)$$

$\hat{r}$  žymi  $\theta$  ir  $\phi$  kampus sferinėje koordinacių sistemoje.

Norint bet kokiam operatoriumi  $F(\mathbf{r})$  suteikti tenzorinį pavidalą, jis skleidžiamas sferinių funkcijų eilute. Toks skleidinys vadinamas neredukuotinių tenzorinių operatorių skleidiniu.

Pateiksime daugiau neredukuotinių tenzorinių operatorių pavyzdžių. Kai  $k=0$ ,  $T_0^{(0)}$  turi vienintelę dedamąją, kuri sukant koordinacių sistemą nesikeičia. Taigi jis yra skaliaras, jeigu po koordinacių sistemos inversijos jo ženklas nesikeičia. Priešingu atveju, jis yra pseudoskaliaras.

Kai  $k=1$ , neredukuotinis tenzorinis operatorius susideda iš trijų dedamųjų  $T_{\pm 1,0}^{(1)}$ , kurios transformuojasi sukant koordinacių sistemą taip pat kaip ir sferinė funkcija  $Y_{1m}(\theta, \phi)$ . Tarp

vektoriaus arba psieudovektoriaus  $\mathbf{a}=(a_x, a_y, a_z)$  ir pirmojo rango neredukuotinio tenzoriaus komponentų Dekarto koordinatų sistemoje egzistuoja sąryšis:

$$T_1^{(1)} = -\frac{a_x + ia_y}{\sqrt{2}}, \quad T_0^{(1)} = a_z, \quad T_{-1}^{(1)} = \frac{a_x - ia_y}{\sqrt{2}}. \quad (49)$$

Kai  $k = 2$ , neredukuotinis tenzorius turi 5 dedamąsias  $q = \pm 2, \pm 1, 0$ . Jos susijusios su  $Y_{2m}(\theta, \phi)$  sferine funkcija

$$T_q^{(2)} = \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_{2q}(\theta, \phi), \quad (50)$$

ir su erdvine sferine funkcija  $Y_{kq}(\mathbf{r})$

$$T_q^{(2)} = \sqrt{\frac{4\pi}{5}} r^2 Y_{2q}(\theta, \phi). \quad (51)$$

Vektorinė ir skaliarinė dviejų neredukuotinių tenzorių sandauga taip pat yra neredukuotinis tenzorius.

## 1.5 Tenzorinių operatorių matriciniai elementai. Vignerio ir Ekarto teorema

Neredukuotiniams tenzoriams būdinga tokia pati simetrija koordinatų sistemos pasukimo atžvilgiu kaip ir judėjimo kiekio momento kvadrato bei jo dedamųjų tikrinėms funkcijoms. Dėl šios priežasties kvantinėje mechanikoje operatoriai užrašomi neredukuotinių tenzorių pavidalu, kas palengvina fizikinių dydžių operatorių matricinių elementų išraiškų suradimą.

Neredukuotinius tenzorinius operatorius ir judėjimo kiekio momento tikrines funkcijas galima pavadinti vienu neredukuotinių tenzorinių rinkinių vardu, nes, sukant koordinatų sistemą, jie transformuojasi vienodai. Judėjimo kiekio momento tikrinių funkcijų rango vaidmenį vaidina judėjimo kiekio momentas, todėl ieškant matricinių elementų kampinių dalių išraiškų su jais galima elgtis vienodai. Vienok, matriciniame elemente yra papildomų charakteristikų, kurios neredukuotiniam tenzoriniam operatoriui ir judėjimo kiekio momento tikrinėms funkcijoms nėra vienodos. Neredukuotinių tenzorinių operatorių atveju papildoma charakteristika yra jo matematinė išraiška ir fizikinis turinys. Judėjimo kiekio momento tikrinėms funkcijoms papildomos charakteristikos yra komutuojančių operatorių tikrinės vertės. Papildomi komutuojančys operatoriai kartu su judėjimo kiekio momento operatoriumi sudaro pilną tarpusavyje komutuojančių operatorių sistemą. Papildomos charakteristikos neredukuotiniams tenzoriniams rinkiniams pažymėti naudojamos tam, kad juos būtų galima atskirti.

Neredukuotinio tenzorinio operatoriaus  $T_q^{(k)}$  matricinis elementas yra

$$\langle \alpha j m | T_q^{(k)} | \alpha' j' m' \rangle, \quad (52)$$

kur  $|\alpha jm\rangle$  yra būsenų funkcijos. Panaudojant Vignerio ir Ekarto teorema, šį matricinį elementą galima padalinti į du narius:

$$\langle \alpha jm | T_q^{(k)} | \alpha' j' m' \rangle = \langle \alpha j | T^{(k)} | \alpha' j' \rangle \begin{bmatrix} j' & k & j \\ m' & q & m \end{bmatrix}. \quad (53)$$

Iš jų pirmasis vadinamas redukuotuoju arba submatriciniu elementu, ir yra invariantiškas koordinacių sistemos pasukimo atžvilgiu. Antrasis daugiklis (53) dešinėje pusėje yra Klebšo ir Gordano koeficientas [1, 18].

Dažnai naudojamas sumetriškesnis būsenų funkcijų perstatymo vietomis atžvilgiu submatricinis elementas, kuris susijęs su naudojamu (53) formulėje sąryšiu:

$$\langle \alpha j | T^{(k)} | \alpha' j' \rangle = (2j + 1)^{-1/2} \langle \alpha j | T^{(k)} | \alpha' j' \rangle. \quad (54)$$

Jis buvo įvestas Racach ir naudojamas Balašovo ir kt. [8] ir kitose knygose.

Submatricinio elemento būsenų funkcijų perstatymo vietomis savybės yra šitokios [1]:

$$\langle \alpha j | T^{(k)} | \alpha' j' \rangle = (-1)^{j' - j + k} \left[ \frac{2j' + 1}{2j + 1} \right]^{1/2} \langle \alpha' j' | T^{(k)} | \alpha j \rangle, \quad (55)$$

$$(\alpha j | T^{(k)} | \alpha' j' \rangle = (-1)^{j' - j + k} (\alpha' j' | T^{(k)} | \alpha j \rangle)^*. \quad (56)$$

Vignerio ir Ekarto teorema naudinga, kai skaičiuojami nepriklausantys nuo kvantinės sistemos orientacijos erdvėje dydžiai.

Kadangi (53) formulėje visa matricinio elemento priklausomybė nuo projekcijų persikelia į Klebšo ir Gordano koeficientą, galima įvairias kvantmechanines išraiškas susumuoti projekcijų  $m, m', q$  atžvilgiu algebriniu būdu. Pasinaudojama tiksliai Klebšo ir Gordano koeficientų ortonormavimo sąlygomis. Tokį sumavimą tenka padaryti, kai nagrinėjami nepoliarizuotų dalelių susidūrimai arba detektorius neįturtus registruojamų dalelių poliarizacijai. Tuomet proceso skerspjūvį arba šuolio tikimybę reikia vidurkinti pradinės būsenos ir sumuoti galinės būsenos projekcijų atžvilgiu. Tam tinka šios

$$\sum_{m,q} |\langle \alpha jm | T^{(k)} | \alpha' j' m' \rangle|^2 = |\langle \alpha j | T^{(k)} | \alpha' j' \rangle|^2, \quad (57)$$

$$\sum_{m,q} |\langle \alpha jm | T^{(k)} | \alpha' j' m' \rangle|^2 = \frac{1}{2j + 1} |\langle \alpha j | T^{(k)} | \alpha' j' \rangle|^2, \quad (58)$$

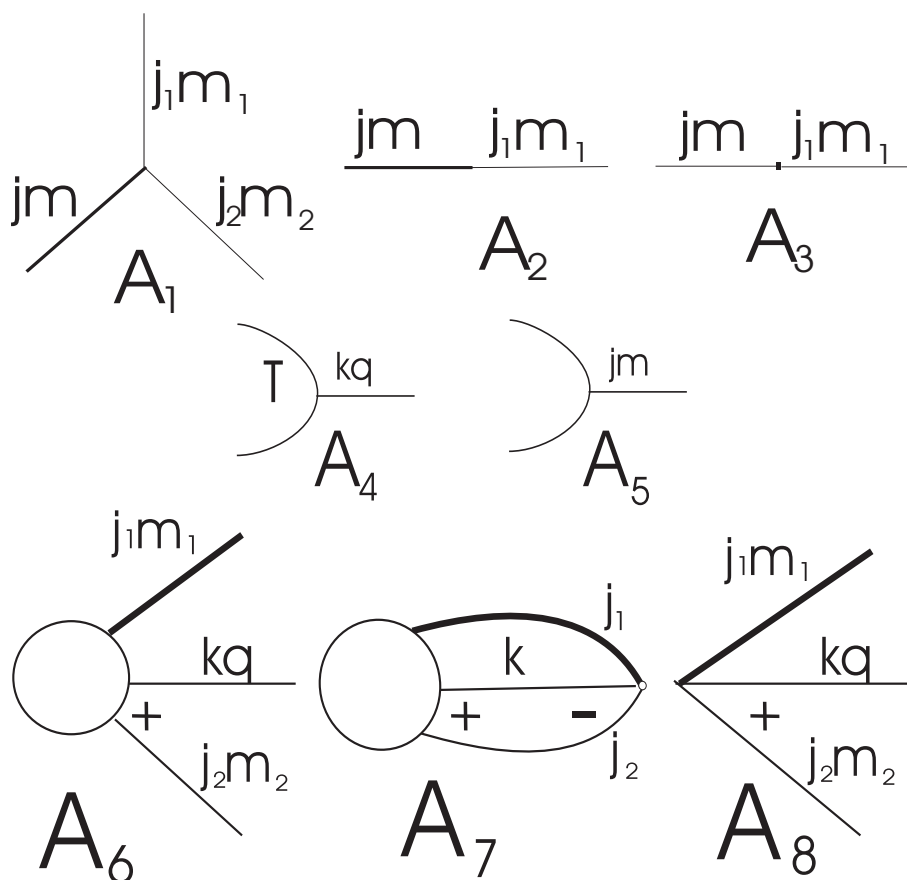
$$\sum_{m,m'} |\langle \alpha jm | T^{(k)} | \alpha' j' m' \rangle|^2 = \frac{2j' + 1}{2k + 1} |\langle \alpha j | T^{(k)} | \alpha' j' \rangle|^2, \quad (59)$$

$$\sum_{m,m'} |\langle \alpha jm | T^{(k)} | \alpha' j' m' \rangle|^2 = \frac{1}{2k + 1} |\langle \alpha j | T^{(k)} | \alpha' j' \rangle|^2 \quad (60)$$

ir panašios formulės [1, 8].

## 1.6 Banginių funkcijų ir tenzorinių operatorių grafinis vaizdavimas

Integravimą kampinių ir sumavimą sukininių kintamųjų atžvilgiu labai palengvina judėjimo kiekio momento grafinė technika [1]. Ji remiasi Klebšo ir Gordano koeficiento (30) grafiniu vaizdiniu  $A_1$ . Iš 2 pav. diagramos  $A_1$  matyti, kad Klebšo ir Gordano koeficientas vaizduojamas mazgu su trimis linijomis. Rezultatinį momentą  $j$  vaizduojanti linija yra pastorinta. Momento projekcijos galima ir nerašyti. Prie mazgo būna '+' arba '-' ženklas. Ženklas '+' rašomas tuomet, kai  $j_1$  liniją reikėtų sukti prieš laikrodžio rodyklę, kad ji sutaptų su  $j_2$  linija, nekertant rezultatinio  $j$  momento pastorintos linijos. Priešingu atveju prie mazgo rašomas '-' ženklas. Kai vienas iš momentų  $j_1$  ar  $j_2$  lygus 0, (35) Klebšo ir Gordano koeficientas vaizduojamas  $A_2$  diagrama (2 pav.). Jeigu rezultatinis judėjimo kiekio momentas lygus nuliui, (36) Klebšo ir Gordano koeficientas vaizduojamas  $A_3$  diagrama (2 pav.).



2 Pav. Banginių funkcijų ir tenzorinių operatorių grafinis vaizdavimas

Taikant grafinę judėjimo kiekio momento techniką, taip pat reikalingi operatorių ir banginių funkcijų grafiniai vaizdai. Kadangi, sukant koordinacių sistemą, tenzoriniai operatoriai ir

būsenų funkcijos transformuojasi vienodai, jiems vaizduoti naudojama ta pati grafinė diagrama  $A_4$  ir  $A_5$  (1 pav.). Norint operatorių atskirti nuo funkcijos, ties operatoriumi galima užrašyti jo vardą, pvz.  $T$ , kaip parodyta  $A_4$  diagramoje.

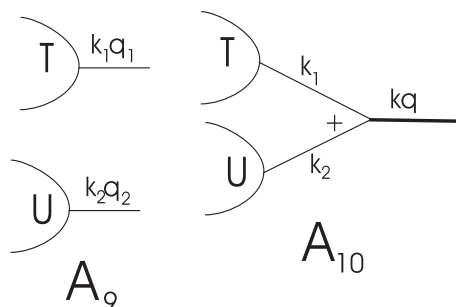
Tenzorinio operatoriaus matricinis elementas (52) vaizduojamas  $A_6$  diagrama, o Vignerio ir Ekarto teoremą (53) grafiškai vaizduoja  $A_6$ – $A_8$  diagramos, kur  $A_7$  yra submatricinis elementas (54), o  $A_8$  – Klebšo ir Gordano koeficientas.

## 1.7 Veiksmai su tenzoriais operatoriais

Dviejų tenzorinių operatorių tiesioginę sandaugą vaizduoja  $A_9$  diagrama 3 pav. Šią sandaugą galima redukuoti, pasinaudojant matrica, kurios matriciniai elementai yra Klebšo ir Gordano koeficientai. Dviejų tenzorinių operatorių tenzorinė sandauga

$$[T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]_q^{(k)} = \sum_{q_1, q_2} T_{q_1}^{(k_1)} U_{q_2}^{(k_2)} \begin{bmatrix} k_1 & k_2 & k \\ q_1 & q_2 & q \end{bmatrix} \quad (61)$$

vaizduojama 3 pav.  $A_{10}$  diagrama.



3 pav. Dviejų tenzorinių operatorių tenzorinės sandaugos (61) grafinis vaizdavimas

Kai  $k = 0$ , tenzorinė sandauga (61), kuri  $k = 1$  atveju atitinka vektorinę sandaugą, pavirsta dviejų tenzorinių operatorių skaliarine sandauga

$$[T^{(k)} \times U^{(k)}]_0^{(0)} = \sum_q (2k+1)^{-1/2} (-1)^{k-q} T_q^{(k)} U_{-q}^{(k)} = (2k+1)^{-1/2} (T^{(k)} \cdot U^{(k)}). \quad (62)$$

Daugiau negu dviejų tenzorinių operatorių tenzorinės sandaugos plačiau nagrinėjamos A.Jucio ir A.Bandzaičio monografijoje [1].

**Matriciniai ir submatriciniai elementai.** Parinkus standartinę fazių sistemą, sferinės funkcijos operatoriaus submatricinis elementas visada teigiamas ir simetriškas transponavimo atžvilgiu

$$(l||C^{(k)}||l') = (l'||C^{(k)}||l). \quad (63)$$

Jo išraiška yra

$$(l||C^{(k)}||l') = (-1)^{g-l}(2l+1)^{1/2} \begin{bmatrix} l' & k & l \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (64)$$

kur  $g = (l + l' + k)/2$ .

Dabar panagrinėsime neredukuotinių tenzorinių operatorių tenzorinių sandaugų matricinių ir submatricinių elementų išraiškų grafinį vaizdavimą. Kai abu operatoriai veikia tas pačias koordinates, jų tenzorinės sandaugos matricinis elementas sumuojamas papildomos linijos, jungiančios du skrituliukus, t.y. judėjimo kiekio momento  $j'$  ir jo projekcijos  $m'$  bei papildomų kvantinių skaičių  $\alpha'$  atžvilgiu. 4 pav.  $A_{11}$  diagrama vaizduoja

$$\begin{aligned} & \langle \alpha_1 j_1 m_1 || [T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]_{q_1 q_2} | \alpha_2 j_2 m_2 \rangle \\ &= \sum_{\alpha', j', m'} \langle \alpha_1 j_1 m_1 | T_{q_1}^{(k_1)} | \alpha' j' m' \rangle \langle \alpha' j' m' | U_{q_2}^{(k_2)} | \alpha_2 j_2 m_2 \rangle. \end{aligned} \quad (65)$$

Jeigu (65) suteiktume redukuotinį pavidalą, gautume išraišką, vaiduojamą  $A_{12}$  diagrama

$$\begin{aligned} & \langle \alpha_1 j_1 m_1 || [T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]_q^{(k)} | \alpha_2 j_2 m_2 \rangle \\ &= \sum_{q_1, q_2, \alpha', j', m'} \langle \alpha_1 j_1 m_1 | T_{q_1}^{(k_1)} | \alpha' j' m' \rangle \langle \alpha' j' m' | U_{q_2}^{(k_2)} | \alpha_2 j_2 m_2 \rangle \begin{bmatrix} k_1 & k_2 & k \\ q_1 & q_2 & q \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (66)$$

(66) pritaikius Vignerio ir Ekarto teorema, gauname  $A_{13}$  diagramą, padaugintą iš Klebšo ir Gordano koeficiento,

$$\begin{aligned} & \langle \alpha_1 j_1 m_1 || [T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]_q^{(k)} | \alpha_2 j_2 m_2 \rangle \\ &= \begin{bmatrix} j_2 & k & j_1 \\ m_2 & q & m_1 \end{bmatrix} \langle \alpha_1 j_1 || [T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]_q^{(k)} || \alpha_2 j_2 \rangle \end{aligned} \quad (67)$$

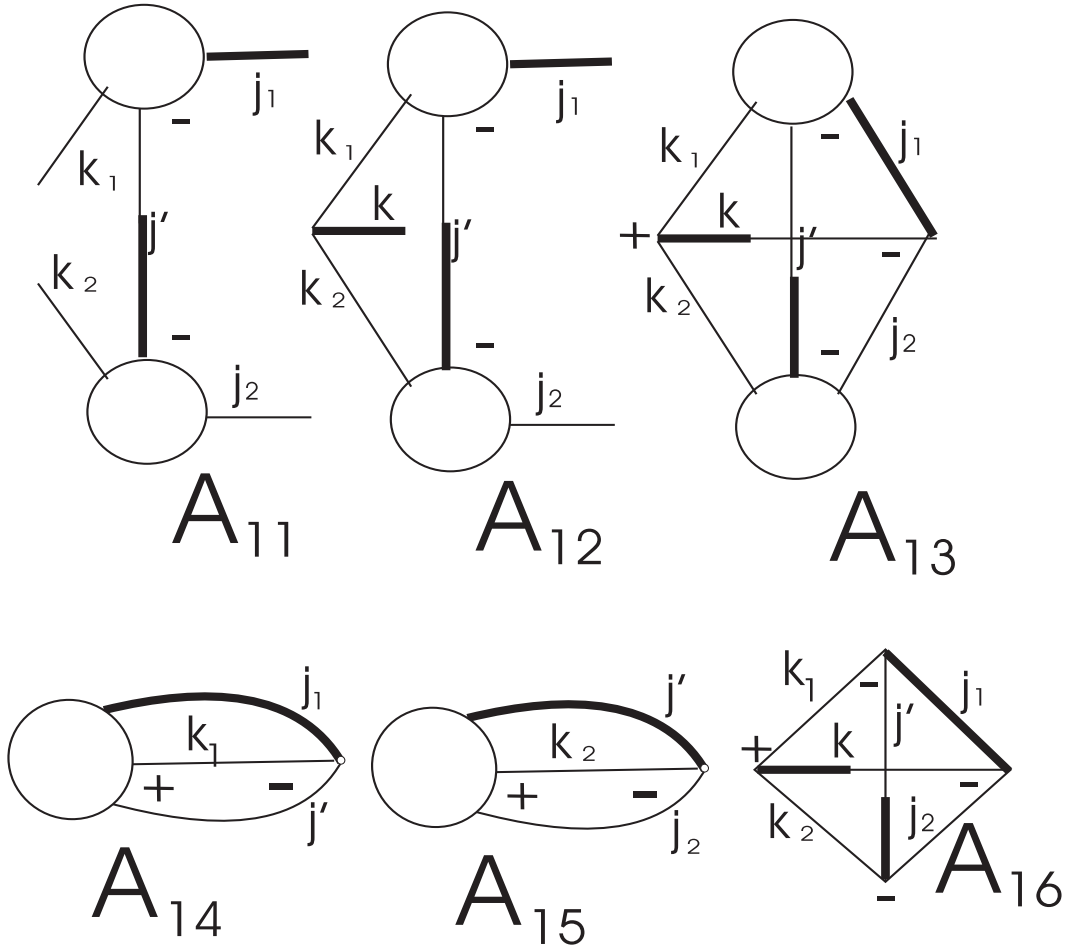
Pagal A.Jucio ir A.Bandzaičio [1] monografijos taisykles skrituliukus  $A_{13}$  diagramoje reikia išpjauti. Juos vaizduoja  $A_{14}$  ir  $A_{15}$  diagramos. Lieka  $6j$  koeficientas ( $A_{16}$  diagrama). Tada dviejų tenzorinių operatorių, veikiančių tas pačias koordinates, submatricinį elementą galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned} & \langle \alpha_1 j_1 || [T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]_q^{(k)} || \alpha_2 j_2 \rangle \\ &= (-1)^{j_1 + j_2 + k} \sum_{\alpha', j'} [(2k+1)(2j'+1)]^{1/2} \langle \alpha_1 j_1 || T^{(k_1)} || \alpha' j' \rangle \langle \alpha' j' || U^{(k_2)} || \alpha_2 j_2 \rangle \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k \\ j_1 & j_2 & j' \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (68)$$

Dabar surasime dviejų tenzorinių operatorių, veikiančių skirtingas koordinates, tenzorinės sandaugos matricinio elemento

$$\langle \alpha_1 j_1 m_1 \alpha_2 j_2 m_2 || [T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]_{q_1 q_2} | \alpha'_1 j'_1 m'_1 \alpha'_2 j'_2 m'_2 \rangle = \langle \alpha_1 j_1 m_1 | T_{q_1}^{(k_1)} | \alpha'_1 j'_1 m'_1 \rangle \langle \alpha_2 j_2 m_2 | U_{q_2}^{(k_2)} | \alpha'_2 j'_2 m'_2 \rangle \quad (69)$$





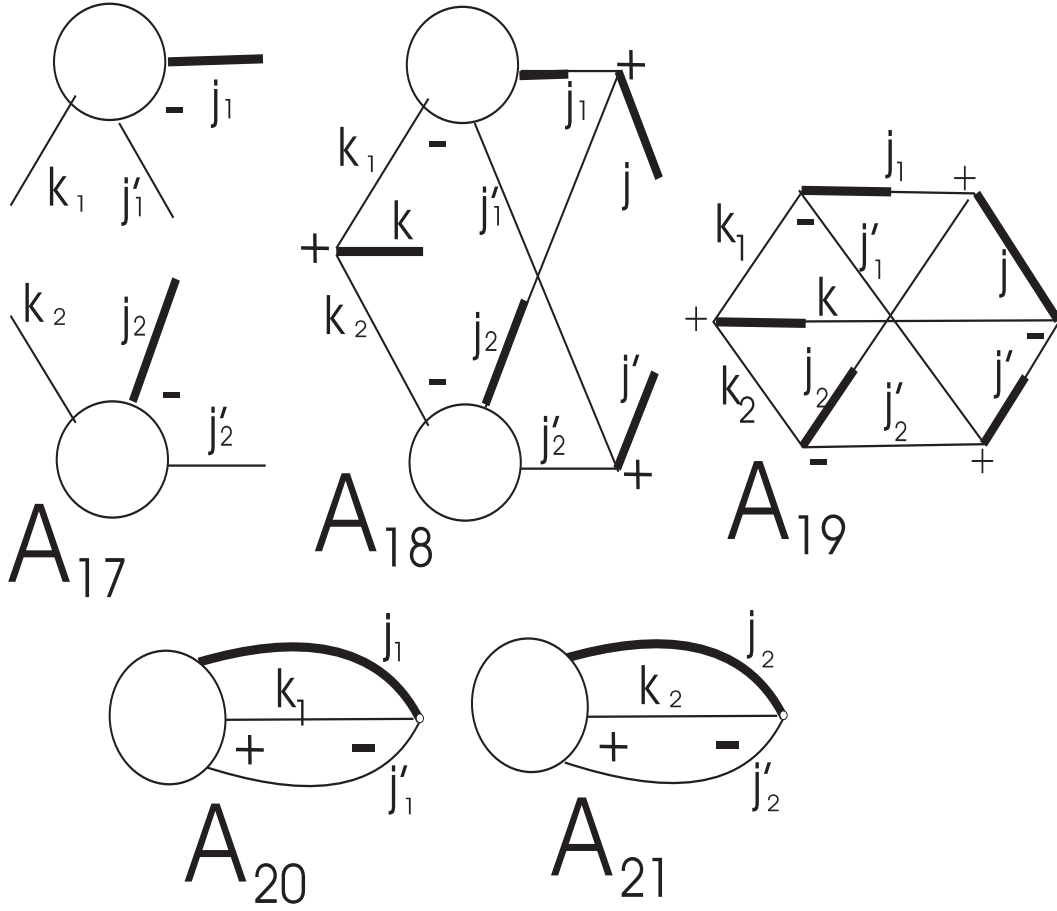
4 Pav. Dviejų neredukuotinių tenzorinių operatorių, veikiančių tas pačias koordinatas, tenzorinės sandaugos submatricinio elemento (68) išraiškos grafinis suradimas.

išraišką, kurios grafinis suradimas vaizduojamas 5 pav. Ją vaizduoja  $A_{17}$  diagrama.

Toliau susiejame rangus  $k_1$  ir  $k_2$  į  $k$  bei momentus  $j_1$  ir  $j_2$  į  $j$  ir  $j'_1$  ir  $j'_2$  į  $j'$ . Gauname  $A_{18}$  diagramą. Toliau išpjauname atskirų operatorių submatricinius elementus, vaizduojamus  $A_{20}$  ir  $A_{21}$  diagramomis, o pasilikusią digramą uždarome Klebšo ir Gordano koeficientu. Gauname  $9j$  koeficientą, vaizduojamą  $A_{19}$  diagrama. Belieka užrašyti galutinę submatricinio elemento išraišką:

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha_1 j_1 \alpha_2 j_2 j | + [T^{(k_1)} \times U^{(k_2)}]^k | \alpha'_1 j'_1 \alpha'_2 j'_2 j' \rangle &= [(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2j' + 1)(2k + 1)]^{1/2} \\
 &\times \langle \alpha_1 j_1 | T^{(k_1)} | \alpha'_1 j'_1 \rangle \langle \alpha_2 j_2 | U^{(k_2)} | \alpha'_2 j'_2 \rangle \left\{ \begin{array}{ccc} j'_1 & j'_2 & j' \\ k_1 & k_2 & k \\ j_1 & j_2 & j \end{array} \right\}. \quad (70)
 \end{aligned}$$

Kartu su (70) ateina dar ir Klebšo ir Gordano koeficientas, taikant Vignerio ir Ekarto teoremą. Judėjimo kiekio momento grafinės technikos pagalba galima surasti bet kokio skaičiaus tenzorinių



5 pav. Dviejų tenzorinių operatorių, veikiančių skirtingas koordinates, tenzorinės sandaugos matricinio elemento (70) išraiškos grafinis suradimas.

operatorių sandaugų submatricinių elementų išraiškas. Jeigu rezultatinis  $k = 0$ , turime tenzorinių operatorių skaliarinę sandaugą, kurios submatricinį elementą galime surasti, įrašydami į (68) ir (70)  $k = 0$  ir supaprastindami  $6j$  arba  $9j$  išraiškas. Reikalingos formulės yra šios:

$$\left\{ \begin{array}{ccc} a & b & e \\ d & c & 0 \end{array} \right\} = (-1)^{a+b+e} \frac{\delta(a, c)\delta(b, d)\delta(abe)}{[(2a+1)(2b+1)]^{1/2}}, \quad (71)$$

$$\left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \\ k_1 & k_2 & 0 \end{array} \right\} = \delta(j_3, l_3)\delta(k_1, k_2) \\ \times (-1)^{j_2+j_3+l_1+k_1} [(2j_3+1)(2k_1+1)]^{-1/2} \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_2 & l_1 & k_1 \end{array} \right\}, \quad (72)$$

$$\left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & k_2 & 0 \end{array} \right\} = \delta(j_1, l_1)\delta(j_2, l_2)\delta(j_3, l_3)\delta(k_2, 0)$$

$$\times \delta(j_1 j_2 j_3) [(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2j_3 + 1)]^{-1/2}, \quad (73)$$

$$\left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & 0 & l_3 \\ k_1 & k_2 & 0 \end{array} \right\} = \delta(j_2, k_2) \delta(j_3, l_3) \delta(l_1, l_3) \delta(k_1, k_2) \\ \times \delta(j_1 j_2 j_3) (-1)^{j_1 - j_2 - j_3} [(2j_2 + 1)(2j_3 + 1)]^{-1}. \quad (74)$$

Tas pačias išraiškas gautume ir grafiškai, tiktai, prieš nutrinant nulines linijas, reikia perkelti pastorinimus [1].

## 1.8 Sferinės funkcijos

Orbitinio judėjimo kiekio momento kvadrato  $l^2$  ir jo projekcijos į  $z$  ašį  $l_z$  tikrinės funkcijos yra sferinės funkcijos  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  ( $-l \leq m \leq l$ ,  $l$  - sveiki skaičiai ir nulis). Sferinė funkcija yra Laplaso lygties  $\Delta \mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{r})=0$  sprendinio kampinė dalis, kur

$$\mathcal{Y}_{lm}(\theta, \phi) = r^l Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (75)$$

Mokslinėje literatūroje sferinės funkcijos įvairiai apibrėžiamos. Šiame darbe naudojamos šitaip apibrėžtos sferinės funkcijos:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi), \quad (76)$$

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^m \left[ \frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta), \quad m \geq 0, \quad (77)$$

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \quad (78)$$

Čia  $P_l^m(\cos \theta)$  – prijungtinis Ležandro polinomas [18],  $\Theta_{l-|m|}(\theta) = (-1)^m \Theta_{l|m|}(\theta)$ .

Naudingi sferinių funkcijų sąryšiai.

1. Sferinių funkcijų sandauga:

$$Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2 m_2}(\theta, \phi) = \sum_L \left[ \frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2L+1)} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} Y_{L0}(\theta, \phi). \quad (79)$$

2. Sferinių funkcijų integralai:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{4\pi} \delta(l, 0) \delta(m, 0), \quad (80)$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2 m_2}^*(\theta, \phi) = \delta(l_1, l_2) \delta(m_1, m_2), \quad (81)$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2 m_2}(\theta, \phi) = (-1)^{m_2} \delta(l_1, l_2) \delta(-m_1, m_2), \quad (82)$$

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{l_1 m_1}^*(\theta, \phi) Y_{l_2 m_2}(\theta, \phi) = \frac{1}{2\pi} \delta(l_1, l_2), \quad (83)$$

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2 m_2}(\theta, \phi) Y_{l, m}^*(\theta, \phi) \\ &= \left[ \frac{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)}{4\pi(2l + 1)} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l \\ m_1 & m_2 & m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (84)$$

3. Sferinės funkcijos skleidimas sferinėmis funkcijomis:

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\theta, \phi) &= \left[ \frac{4\pi(2l + 1)}{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^{-1} \\ &\times \sum_{m_1, m_2} \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l \\ m_1 & m_2 & m \end{bmatrix} Y_{l_1 m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2 m_2}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (85)$$

4. Atskiri sferinių funkcijų atvejai:

$$Y_{lm}(0, 0) = \sqrt{\frac{2l + 1}{4\pi}} \delta(m, 0), \quad (86)$$

$$Y_{lm}^*(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{l, -m}(\theta, \phi) = Y_{lm}(\theta, -\phi), \quad (87)$$

$$Y_{lm}(0, \phi) = \delta(m, 0) \sqrt{\frac{2l + 1}{4\pi}}, \quad (88)$$

$$Y_{l0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l + 1}{4\pi}} P_l(\cos \theta). \quad (89)$$

5. Ležandro polinomo rekurentinė išraiška:

$$P_{N+1}(x) = \frac{2N + 1}{N + 1} x P_N(x) - \frac{N}{N + 1} P_{N-1}(x), \quad (90)$$

$$x = \cos \theta, P_0(x) = 1, P_1(x) = x.$$

6. Sferinių funkcijų, kai  $l \leq 3$ , išraiškos [18]

$$\begin{aligned} Y_{00}(\theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_{1\pm 1}(\theta, \phi) &= \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\ Y_{10}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_{2\pm 2}(\theta, \phi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3 \cdot 5}{8\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm i2\phi} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{3 \cdot 5}{8\pi}} (1 - \cos 2\theta) e^{\pm i2\phi} \\ Y_{2\pm 1}(\theta, \phi) &= \mp \sqrt{\frac{3 \cdot 5}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\phi} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3 \cdot 5}{8\pi}} \sin 2\theta e^{\pm i\phi} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Y_{20}(\theta, \phi) &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}(3\cos^2\theta - 1) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}(1 + 3\cos 2\theta) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(1 - \frac{3}{2}\sin^2\theta\right) \\
Y_{3\pm 3}(\theta, \phi) &= \mp \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5\cdot 7}{4\pi}}\sin^3\theta e^{\pm i3\phi} = \mp \frac{1}{16}\sqrt{\frac{5\cdot 7}{4\pi}}(3\sin\theta - \sin 3\theta)e^{\pm i3\phi} \\
Y_{3\pm 2}(\theta, \phi) &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3\cdot 5\cdot 7}{8\pi}}\cos\theta\sin^2\theta e^{\pm i2\phi} = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{3\cdot 5\cdot 7}{8\pi}}(\cos\theta - \cos 3\theta)e^{\pm i2\phi} \\
Y_{3\pm 1}(\theta, \phi) &= \mp \frac{1}{4}\sqrt{\frac{3\cdot 7}{4\pi}}(5\cos^2\theta - 1)\sin\theta e^{\pm i\phi} = \mp \frac{1}{16}\sqrt{\frac{3\cdot 7}{4\pi}}(\sin\theta + 5\sin 3\theta)e^{\pm i\phi} \\
Y_{30}(\theta, \phi) &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{7}{4\pi}}(5\cos^2\theta - 3)\cos\theta = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{7}{4\pi}}(3\cos\theta + 5\cos 3\theta)
\end{aligned}$$

Naudingos išraiškos

$$e^{i\phi} = \cos\phi + i\sin\phi,$$

$$e^{i\phi/2} = i.$$

## 1.9 Baigtinių posūkių matricos

Būsenos funkcija  $|jm\rangle$ , kur  $m$  – judėjimo kiekio momento projekcija į pradinės koordinatų sistemos  $S$   $z$  ašį, transformuojasi į funkciją  $|j\tilde{m}\rangle$ , kur  $\tilde{m}$  –  $j$  projekcija į pasuktos koordinatų sistemos  $\tilde{S}$   $\tilde{z}$  ašį, šitaip [18]:

$$|j\tilde{m}\rangle = \sum_m D_{m\tilde{m}}^j(\alpha, \beta, \gamma)|jm\rangle. \quad (91)$$

Čia  $D_{m\tilde{m}}^j(\alpha, \beta, \gamma)$  – Vignerio posūkių matrica, kurią trumpumo sumetimais vadinsime  $D$  funkcija,  $\alpha, \beta, \gamma$  – Eulerio kampai, kuriais pasukant pereinama nuo koordinatų sistemos  $S$  prie  $\tilde{S}$  [18]. Jų kitimo ribos yra:  $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ ,  $0 \leq \beta \leq \pi$  ir  $0 \leq \gamma \leq 2\pi$ .  $D_{m\tilde{m}}^j(\alpha, \beta, \gamma)$  aprašo posūkių fiksuotomis  $\alpha, \beta, \gamma$  kampų vertėmis. Ji taip pat yra hamiltoniano, aprašančio kietojo kūno su vienodais inercijos momentais išilgai pagrindinių ašių (simetrinis vilkelis), tikrinė funkcija.

*Svarbiausios  $D$  funkcijos savybės.*

1)  $D$  funkcija yra unitarinės matricos elementas, nes

$$\sum_m D_{m\mu'}^{*j}(\alpha, \beta, \gamma)D_{m\mu}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \delta(\mu, \mu'). \quad (92)$$

2)  $D$  funkcijos yra ortomormuotos:

$$\int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi d\beta \sin\beta \int_0^{2\pi} d\gamma \sum_m D_{m\mu}^{*j}(\alpha, \beta, \gamma)D_{m'\mu'}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{8\pi^2}{2j+1}\delta(j, j')\delta(m, m')\delta(\mu, \mu'). \quad (93)$$

3)  $D$  funkcijų sandauga:

$$D_{m_1\mu_1}^{j_1}(\alpha, \beta, \gamma)D_{m_2\mu_2}^{j_2}(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{j,m,\mu} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu \end{bmatrix} D_{m\mu}^j(\alpha, \beta, \gamma). \quad (94)$$

4) Vienos  $D$  funkcijos skleidimas  $D$  funkcijomis:

$$D_{m\mu}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{m_1,\mu_1,m_2,\mu_2} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu \end{bmatrix} D_{m_1\mu_1}^{j_1}(\alpha, \beta, \gamma)D_{m_2\mu_2}^{j_2}(\alpha, \beta, \gamma). \quad (95)$$

5)  $D$  funkcijos fiksuotoms  $\alpha$ ,  $\beta$  ir  $\gamma$  vertėms:

$$D_{m\mu}^j(0, 0, 0) = \delta(m, \mu), \quad (96)$$

$$D_{m\mu}^j(0, \pi, 0) = (-1)^{j+m}\delta(m, -\mu). \quad (97)$$

6)  $D$  funkcijos fiksuotoms  $m$  ir  $\mu$  vertėms ( $j = l -$  sveiki skaičiai):

$$D_{00}^l(\alpha, \beta, \gamma) = P_l(\cos \theta), \quad (98)$$

$$D_{m0}^l(\alpha, \beta, \gamma) = (-1)^m \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l-m}(\beta, \alpha) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm}^*(\beta, \alpha), \quad (99)$$

$$D_{0\mu}^l(\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l-m}(\beta, \gamma) = (-1)^\mu \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l\mu}^*(\beta, \gamma). \quad (100)$$

7)  $D$  funkcijų kompleksinio jungtinumo sąryšis:

$$D_{m\mu}^{*j}(\alpha, \beta, \gamma) = (-1)^{m-\mu} D_{-m-\mu}^j(\alpha, \beta, \gamma). \quad (101)$$

8)  $D$  funkcijų integralai:

$$\int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi \sin \beta d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma D_{m\mu}^j(\alpha, \beta, \gamma) = 8\pi^2 \delta(j, 0)\delta(m, 0)\delta(\mu, 0), \quad (j - \text{sveikas skaičius}). \quad (102)$$

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi \sin \beta d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma D_{m_1\mu_1}^{j_1}(\alpha, \beta, \gamma)D_{m_2\mu_2}^{j_2}(\alpha, \beta, \gamma) \\ &= (-1)^{m_1-\mu_1} 8\pi^2 \delta(j_1, j_2)\delta(m_1, m_2)\delta(\mu_1, \mu_2), \quad (j - \text{sveikas skaičius}). \end{aligned} \quad (103)$$

$$\begin{aligned} & \int D_{m\mu}^{*j}(\alpha, \beta, \gamma)D_{m_1\mu_1}^{j_1}(\alpha, \beta, \gamma)D_{m_2\mu_2}^{j_2}(\alpha, \beta, \gamma) \sin \beta d\beta d\alpha d\gamma \\ &= \frac{8\pi^2}{2j+1} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (104)$$

9. Kai pasukama  $w_1 = \alpha_1\beta_1\gamma_1$ , o po to  $w_2 = \alpha_2\beta_2\gamma_2$  kampais, tuomet

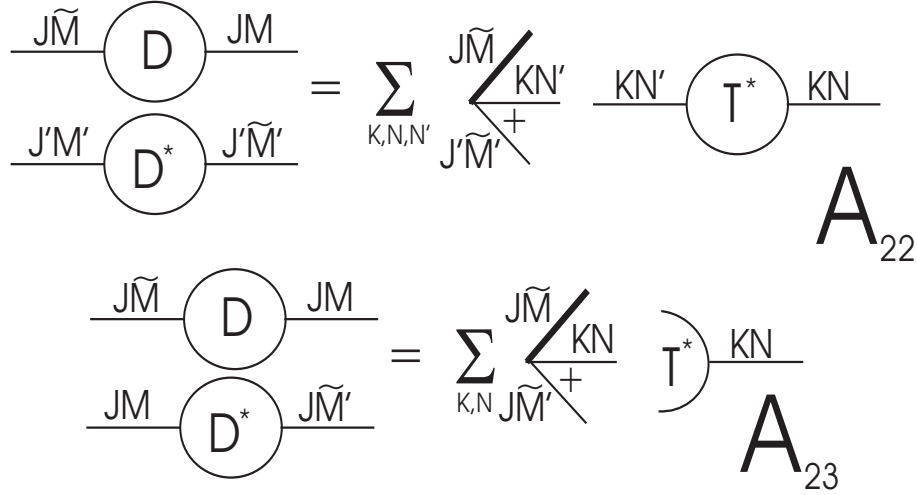
$$D_{m\mu}^j(w_2 \cdot w_1) = \sum_{m''=-j}^{m''=j} D_{mm''}^j(w_2)D_{m''\mu}^j(w_1). \quad (105)$$

$D$  funkcijos išraiškas galima rasti [1, 8, 18] ir kitose knygose.

Dviejų  $D$  funkcijų sandaugą (94) galima užrašyti pavidalu, kuris bus naudojamas ieškant poliarizuotų atomų sąveikos su poliarizuotais fotonais ar elektronais diferencialinių skerspjūvių išraiškų. Jų grafiniai vaizdai pateikti 6 pav.

$$D_{\tilde{M}M}^J(\alpha, \beta, \gamma) D_{\tilde{M}'M'}^{*J'}(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{K, N, N'} \begin{bmatrix} J' & K & J \\ \tilde{M}' & N' & \tilde{M} \end{bmatrix} T_{N'N}^K(J, J', M, M' | \alpha, \beta, \gamma). \quad (106)$$

Šį skleidinį grafiškai vaizduoja  $A_{22}$  diagrama.



6 pav. Dviejų Vignerio baigtinių posūkių matricų sandaugos (105) ir (106).

Kai  $J = J'$  ir  $M = M'$ , (106) supaprastėja

$$D_{\tilde{M}M}^J(\alpha, \beta, \gamma) D_{\tilde{M}'M}^{*J}(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{K, N} \begin{bmatrix} J & K & J \\ \tilde{M}' & N & \tilde{M} \end{bmatrix} T_N^{K*}(J, J, M | \beta, \gamma). \quad (107)$$

(107) grafinis atitikmuo yra  $A_{23}$  diagrama.

(106) ir (107) išraiškose esančių tenzorių pavidalas yra šitoks:

$$T_{N'N}^K(J, J', M, M' | \alpha, \beta, \gamma) = (-1)^{J'-M'} \left[ \frac{2K+1}{2J+1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} J & J' & K \\ M & M' & N \end{bmatrix} D_{N'N}^K(\alpha, \beta, \gamma), \quad (108)$$

$$T_N^K(J, J, M | \beta, \gamma) = (-1)^{J-M} \left[ \frac{4\pi}{2J+1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} J & J & K \\ M & -M & 0 \end{bmatrix} Y_{KN}(\beta, \gamma). \quad (109)$$

Tenzoriai  $T_{N'N}^K$  ir  $T_N^K$  grafiškai pavaizduoti 7 pav.  $A_{24}$  ir  $A_{25}$  diagramose.

### 1.10 Skaliarinių funkcijų ir operatorių skleidimas multipoliais

Procesuose, kur dalyvauja atomai, skaliarinę funkciją patogiau naudoti pavaizduotą sferinių funkcijų tiesiniu dariniu. Dažniausiai sutinkamos skaliarinės funkcijos yra plokščia banga ir

$$\begin{aligned}
\text{KN}' \text{---} \textcircled{\text{T}} \text{---} \text{KN} &= (-1)^{J'-M'} \left[ \frac{2K+1}{2J+1} \right]^{1/2} \begin{array}{c} \text{JM} \\ \text{---} \text{KN} \\ \text{J}'\text{M}' \end{array} \text{---} \textcircled{\text{D}} \text{---} \text{KN} \\
&\quad \text{A}_{24} \\
\textcircled{\text{T}} \text{---} \text{KN} &= (-1)^{J-M} \left[ \frac{4\pi}{2J+1} \right]^{1/2} \begin{array}{c} \text{JM} \\ \text{---} \text{KO} \\ \text{J-M} \end{array} \text{---} \textcircled{\text{Y}} \text{---} \text{KN} \\
&\quad \text{A}_{25}
\end{aligned}$$

7 pav. Tenzorių (108) ir (109) grafiniai vaizdai.

dviejų krūvininkų elektrostatinės sąveikos energija.

Plokščios bangos, kurios banginis vektorius  $\mathbf{q}$ , sklaidinys sferinėmis funkcijomis yra:

$$\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(qr) Y_{lm}^*(\mathbf{n}_q) Y_{lm}(\mathbf{n}_r), \quad (110)$$

kur  $\mathbf{n}_q$  ir  $\mathbf{n}_r$  yra atitinkamai banginio vektoriaus ir trimatės erdvės  $\mathbf{r}$  kintamojo  $\theta$  ir  $\phi$  kampai,  $j_l(qr)$  – sferinė Beselio funkcija.

Dviejų krūvininkų, kurių krūviai  $e_1$  ir  $e_2$ , elektrostatinės sąveikos energijos išraiška yra:

$$\frac{e_1 e_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = 4\pi e_1 e_2 \sum_{lm} (2l+1)^{-1} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_{lm}^*(\mathbf{r}_1) Y_{lm}(\mathbf{r}_2), \quad (111)$$

kur  $\mathbf{r}_1$  ir  $\mathbf{r}_2$  yra trimatės erdvės kintamųjų  $\theta$  ir  $\phi$  kampai,  $r_{>}$  ir  $r_{<}$  – didesniojo ir mažesniojo  $\mathbf{r}_1$  ir  $\mathbf{r}_2$  vertės.

Operatorius taip pat galima išskleisti multipoliais. Toks sklaidymas vadinamas operatoriaus vaizdavimu neredukuotinių tenzorinių operatorių suma. Pavyzdžiu parinkime operatorių

$$F(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) T_q^{(k)}, \quad (112)$$

kur  $\varphi(\mathbf{r})$  –  $\mathbf{r}$  kintamojo skaliarinė funkcija, o  $T_q^{(k)}$  –  $k$  rango neredukuotinis tenzorinis operatorius.

Pradžioje skaliarinę funkciją išskleisime sferinių funkcijų eilute

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{LM} a_{LM}(r) Y_{LM}(\theta, \phi), \quad (113)$$

kur  $a_{LM}(r)$  priklauso nuo skaliarinės funkcijos išraiškos. Įrašome (113) į (112), Klebšo ir Gordanio koeficiento pagalba susiejame  $L$  su  $k$  ir  $J$  ir užrašome ieškomą (112) multipolinį sklaidinį:

$$F(\mathbf{r}) = \sum_{LJM_j} A_{JM_j}^{Lkq}(r) Q_{JM_j}^{Lk}. \quad (114)$$



Čia

$$Q_{JM_J}^{Lk} = \sum_{M,q} \begin{bmatrix} L & k & J \\ M & q & M_J \end{bmatrix} Y_{LM}(\theta, \phi) T_q^{(k)}, \quad (115)$$

$$A_{JM_J}^{Lkq}(r) = \sum_M \begin{bmatrix} L & k & J \\ M & q & M_J \end{bmatrix} a_{LM}(r). \quad (116)$$

(115) formule apibrėžiamas dydis yra  $J$  rango tenzorinis operatorius.

Atskiru atveju, kai  $k = 1$ , turime vektorinį operatorių  $V_q = T_q^{(1)}$ ,  $q = 0, \pm 1$  ir

$$Q_{JM_J}^{L1} = (\mathbf{Y}_{JM_J}^L(\theta, \phi) \cdot \mathbf{V}), \quad (117)$$

o  $\mathbf{Y}_{JM_J}^L(\theta, \phi)$  – vektorinė sferinė funkcija, kuri bus aptariama sekančiame skirsnyje.

### 1.11 Vektorinių funkcijų skleidimas multipoliais

Prieš skleidami vektorinį operatorių vektorinių funkcijų eilute, susipažinsime su vektorinėmis funkcijomis ir jų savybėmis. Sukant koordinatų sistemą, vektorinė sferinė funkcija transformuojasi lygiai taip pat, kaip dalelės, kurios sukiny  $s = 1$ , banginė funkcija. Todėl galime pasirinkti pilnutinio judėjimo kiekio momento kvadrato  $\mathbf{J}^2$  ir jo projekcijos į  $z$  ašį  $J_z$  funkcijų bazę, kurioje bet koks posūkių grupės atvaizdavimas užrašomas neredukuotiniais atvaizdavimais. Kadangi banginės funkcijos  $|LSJM\rangle$  sudaromos iš  $|LM_L\rangle$  ir  $|SM_S\rangle$  pagal žinomą procedūrą, vektorinių funkcijų skleidimo bazę galime užrašyti:

$$|LSJM\rangle = \sum_{M_L, M_S} \begin{bmatrix} L & S & J \\ M_L & M_S & M \end{bmatrix} |LM_L\rangle |SM_S\rangle. \quad (118)$$

Vietoje  $|SM_S\rangle$  funkcijų bazės galima pasirinkti ciklinės bazės ortus [8]:

$$\xi_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 \pm i\mathbf{e}_2), \quad \xi_0 = \mathbf{e}_3, \quad (119)$$

arba

$$\xi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \xi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \xi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (120)$$

Dabar galime užrašyti vektorinės sferinės funkcijos išraišką:

$$\mathbf{Y}_{JM}^L(\theta, \phi) = \sum_{m,q} \begin{bmatrix} L & 1 & J \\ m & q & M \end{bmatrix} Y_{Lm}(\theta, \phi) \xi_q. \quad (121)$$

Šios funkcijos tenkina ortonormavimo [8]

$$\int \mathbf{Y}_{J'M'}^{L'*}(\theta, \phi) \mathbf{Y}_{JM}^L(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \delta(J, J')\delta(M, M')\delta(L, L') \quad (122)$$

ir pilnumo

$$\sum_{L,J,M} \mathbf{Y}_{JM}^{L*}(\theta, \phi) \mathbf{Y}_{JM}^L(\theta', \phi') = 3\delta(\cos \theta - \cos \theta')\delta(\phi - \phi') \quad (123)$$

sąlygas.

Iš (121) apibrėžimo seka, kad vektorinė sferinė funkcija yra tikrinė operatorių  $\mathbf{J}^2$ ,  $J_z$ ,  $\mathbf{L}^2$ ,  $\mathbf{S}^2$  ir inversijos P funkcija [8]:

$$\mathbf{J}^2 \mathbf{Y}_{JM}^L(\theta, \phi) = J(J+1) \mathbf{Y}_{JM}^L(\theta, \phi), \quad (124)$$

$$J_z \mathbf{Y}_{JM}^L(\theta, \phi) = M \mathbf{Y}_{JM}^L(\theta, \phi), \quad (125)$$

$$\mathbf{L}^2 \mathbf{Y}_{JM}^L(\theta, \phi) = L(L+1) \mathbf{Y}_{JM}^L(\theta, \phi), \quad (126)$$

$$\mathbf{S}^2 \mathbf{Y}_{JM}^L(\theta, \phi) = S(S+1) \mathbf{Y}_{JM}^L(\theta, \phi), \quad (127)$$

$$P \mathbf{Y}_{JM}^L(\theta, \phi) = (-1)^{L+1} \mathbf{Y}_{JM}^L(\theta, \phi). \quad (128)$$

Bet kokia vektorinė funkcija  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  skleidžiama vektorinėmis sferinėmis funkcijomis šitaip:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \sum_{L,J,M} F_{JM}^L(r) \mathbf{Y}_{JM}^L(\theta, \phi). \quad (129)$$

Dabar surasime skleidinį, kai vektorinė funkcija gaunama, paveikiant vektoriniu operatoriumi sferinę funkciją

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{V}(\mathbf{r})Y_{lm}(\theta, \phi) = \sum_L (-1)^{L+m} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \langle L||\mathbf{V}||l \rangle_{\Omega} \mathbf{Y}_{lm}^L(\theta, \phi). \quad (130)$$

Čia  $\Omega$  rodo, kad submatriciniame elemente integruojama tiksliai  $\theta$  ir  $\phi$  kampų atžvilgiu, o  $L$  įgyja vertes, tenkinančias trikampio, sudaryto iš  $L, l, 1$ , sąlygas.

(130) galima pritaikyti elektromagnetinio lauko atveju. Jam operatorius  $\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \text{grad } f(r)$ , kur  $f(r)$  skaliarinė funkcija. Šiuo atveju submatricinio elemento išraiškos (130) yra:

$$\langle L||\nabla f(r)||l \rangle = \begin{cases} \sqrt{l+1} \left( \frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right), & \text{kai } L = l+1; \\ 0, & \text{kai } L = l; \\ -\sqrt{l} \left( \frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r} \right), & \text{kai } L = l-1. \end{cases} \quad (131)$$

(130) elektromagnetinio lauko atveju –

$$\begin{aligned} \text{grad}[f(r) Y_{lq}(\theta, \phi)] &= \left[ \frac{l}{2l+1} \right]^{1/2} \left( \frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r} \right) f(r) \mathbf{Y}_{lq}^{l-1}(\theta, \phi) \\ &\quad - \left[ \frac{l+1}{2l+1} \right]^{1/2} \left( \frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right) f(r) \mathbf{Y}_{lq}^{l+1}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (132)$$

(132) formulė plačiai naudojama ir vadinama gradientine.

Dar naudojamos ir kitaip apibrėžtos vektorinės sferinės funkcijos, kurios išreiškiamos (132) tiesiniais dariniais:

$$\mathbf{Y}_{JM}^{(1)}(\theta, \phi) = \left[ \frac{J+1}{2J+1} \right]^{1/2} \mathbf{Y}_{JM}^{J-1}(\theta, \phi) + \left[ \frac{J}{2J+1} \right]^{1/2} \mathbf{Y}_{JM}^{J+1}(\theta, \phi), \quad (133)$$

$$\mathbf{Y}_{JM}^{(0)}(\theta, \phi) = \mathbf{Y}_{JM}^J(\theta, \phi) \quad (134)$$

$$\mathbf{Y}_{JM}^{(-1)}(\theta, \phi) = \left[ \frac{J}{2J+1} \right]^{1/2} \mathbf{Y}_{JM}^{J-1}(\theta, \phi) - \left[ \frac{J+1}{2J+1} \right]^{1/2} \mathbf{Y}_{JM}^{J+1}(\theta, \phi). \quad (135)$$

Jos sudaro ortonormuotų funkcijų bazę vektorinių funkcijų erdvės sferos paviršiuje. Dvi pirmosios (133) ir (134) ortogonalios normalės vektoriumi  $\mathbf{n}$ , o trečioji – jam lygiagreti:  $\mathbf{n} \mathbf{Y}_{JM}^{(1)}(\theta, \phi) = 0$ ,  $\mathbf{n} \mathbf{Y}_{JM}^{(0)}(\theta, \phi) = 0$  ir  $[\mathbf{n} \times \mathbf{Y}_{JM}^{(-1)}(\theta, \phi)] = 0$ .

Daugiau vektorinių funkcijų skleidimo pavyzdžių galima rasti V. Balašovo ir kt. knygoje [8].

### 1.12 Fotono sąvoka. Spinduliuotės skleidimas multipoliais

Laisvojo elektromagnetinio lauko hamiltoniano operatorių galima užrašyti [8, 68, 69]:

$$H = \sum_i \hbar w_i a_i^+ a_i, \quad (136)$$

kur  $w_i = 2\pi\nu_i$  – ciklinis dažnis,  $a_i^+$  ir  $a_i$  – fotono atsiradimo ir išnykimo operatoriai. Iš šios lygties matyti, kad lauko  $i$ -ojo laisvės laipsnio sužadinimą atitinka diskretinis ekvidistancinis energijos spektras, kurio gretimi lygmenys nutolę vienas nuo kito per vienodą energiją  $\hbar w_i$ . Todėl galima įvesti fotono sąvoką. Fotonas yra elementarus nedalomas elektromagnetinio lauko energijos kvantas. Elektromagnetinio lauko  $i$ -ojo laisvės laipsnio sužadinimą galima traktuoti kaip fotono, kurio energija  $\hbar w_i$ , atsiradimą. Fotoną aprašo kvantinių skaičių  $i$  rinkinys. Naudojami du kvantinių skaičių rinkiniai:  $i = \lambda k$  ir  $i = pkLM$ .

Pirmasis rinkinys ( $i = \lambda k$ ) naudojamas tuomet, kai elektromagnetinis laukas vaizduojamas plokščiomis bangomis. Elektromagnetinio lauko banginės lygties

$$\nabla \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (137)$$

su kuloninės kalibruotės sąlyga

$$\operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (138)$$

sprendinys užrašomas plokščių bangų skleidiniu

$$\mathbf{A}_{\lambda k}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\hbar c}{k}} \mathbf{e}_{\lambda k} \exp(ikr - iwt). \quad (139)$$

Čia  $k = |\mathbf{k}| = w/c$ ,  $\mathbf{e}_{\lambda k}$  – plokščios bangos poliarizacijos vienetiniai vektoriai, kuriems galioja  $\mathbf{e}_{\lambda k} \cdot \mathbf{k} = 0$  ir  $\mathbf{e}_{\lambda k}^* \cdot \mathbf{e}_{\mu k} = \delta(\lambda, \mu)$  sąlygos. Jos rodo, kad elektromagnetinės bangos poliarizacijos plokštuma statmena bangos judėjimo kryptčiai. Tai reiškia, kad jos yra skersinės bangos.

$\hbar k$  kvantinis skaičius turi fotono judėjimo kiekio prasnę. Poliarizacijos vektoriams dažniausiai naudojamas apskritiminis vaizdavimas. Tuo atveju, kai dešininėje Dekarto koordinatų sistemoje  $z$  ašis nukreipiama  $\mathbf{k}$  kryptimi,

$$\mathbf{e}_{\lambda k} = -(\lambda\sqrt{2})(\mathbf{e}_x + i\lambda\mathbf{e}_y). \quad (140)$$

Vienetiniai ortai  $\mathbf{e}_x$  ir  $\mathbf{e}_y$  nukreipiami  $x$  ir  $y$  ašių kryptimis, o  $\lambda = \pm 1$  vadinamas spirališkumu.

Kadangi fotono masė lygi nuliui, jam negalima priskirti sukiniio tokia prasme, kokia suteikiama turinčiai masę dalelei. Todėl fotonui aprašyti naudojamas spirališkumas  $\lambda$ , kuris lygus fotono pilnutinio judėjimo kiekio momento projekcijai į jo judėjimo kryptį. Kadangi fotonas orbitinio judėjimo kiekio momento neturi, indėlių į spirališkumą įneša tiksliai sukiniinis momentas, kuris lygus 1. Tuomet  $\lambda = \pm 1$ , nes vertė  $\lambda = 0$  negalima dėl kuloninės kalibruotės sąlygos. Tokiu būdu, fotonai yra vektorinės dalelės, kurios skiriasi nuo turinčių masę dalelių tuo, jog aprašomos dvikomponentėmis banginėmis funkcijomis vietoje trikomponenčių. Iš analogijos su klasikine elektrodinamika seka, kad  $\lambda = 1$  atitinka dešininės, o  $\lambda = -1$  – kairinės apskritiminės poliarizacijos spinduliuotę. Kitokios poliarizacijos spinduliuotės būseną galima užrašyti apskritiminės poliarizacijos būsenų superpozicija. Pavyzdžiui, nepoliarizuota spinduliuotė vaizduojama kaip lygių dalių dešininės ir kairinės apskritiminės poliarizacijos spinduliuočių suma. Fotono, poliarizuoto  $\mathbf{e}_\psi$  kryptimi koordinatų sistemoje, kurios  $z \parallel \mathbf{k}$ , o azimutinis kampas  $\psi$ , banginę funkciją galima užrašyti:

$$|\mathbf{e}_\psi, \mathbf{k}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \{ \exp(-i\psi)|\lambda = +1\mathbf{k}\rangle - \exp(-i\psi)|\lambda = -1\mathbf{k}\rangle \}. \quad (141)$$

Antrasis kvantinių skaičių rinkinys ( $i = p k L M$ ) naudojamas, kai (137) lygties sprendinys užrašomas vektorinėmis sferinėmis funkcijomis:

$$\mathbf{A}_{e(m)kLM}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{A}_{e(m)kLM}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), \quad (142)$$

$$\mathcal{A}_{m kLM}(\mathbf{r}) = -2\sqrt{\hbar kc} i^L j_L(kr) \mathbf{Y}_{LM}^L(\mathbf{n}), \quad (143)$$

$$\mathcal{A}_{e kLM}(\mathbf{r}) = 2\sqrt{\hbar kc} \times \left\{ \left[ \frac{L+1}{2L+1} \right]^{1/2} i^{L-1} j_{L-1}(kr) \mathbf{Y}_{LM}^{L-1}(\mathbf{n}) + \left[ \frac{L}{2L+1} \right]^{1/2} i^{L+1} j_{L+1}(kr) \mathbf{Y}_{LM}^{L+1}(\mathbf{n}) \right\}, \quad (144)$$

kur  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ ,  $w = kc$ ,  $j_L(kr)$  – sferinė Beselio funkcija,  $\mathbf{Y}_{LM}^L(\mathbf{n})$  yra vektorinė sferinė funkcija (121). Šis skleidimas dar vadinamas multipoliniu koordinatų sistemoje, kur  $z \parallel \mathbf{k}$ . Elektrinį

multipolinį (EL) skleidinį vaizduoja  $|ekLM\rangle$  funkcijos, kurių lygiškumas  $\pi = (-1)^L$ , o magnetinį (ML) –  $|mkLM\rangle$ , kurių  $\pi = (-1)^{L+1}$ . Bendru atveju fotono funkciją patogiau užrašyti  $|pkLM\rangle$ ,  $\pi = (-1)^{L+p}$ , kur EL atitinka  $p = 0$ , o ML –  $p = 1$ .

$|\lambda k\rangle$  funkciją galima išskleisti  $|pkLM\rangle$  funkcijų bazėje:

$$|\lambda k\rangle = \frac{1}{k} \sum_{p=0,1} \sum_{L,M} \langle pLM|\theta, \phi, \lambda\rangle |pkLM\rangle, \quad (145)$$

kur  $\theta$  ir  $\phi$  –  $\mathbf{k}$  vektoriaus polinis ir azimutinis kampai. Norint surasti transformacijos matricą  $\langle pLM|\theta, \phi, \lambda\rangle$ , reikia žinoti  $\mathbf{A}_{\lambda,k}(\mathbf{r})$  (139) skleidinį multipoliais. Koordinačių sistemoje, kurioje  $z$  nukreipta  $k$  kryptimi, jis yra šitoks [8]:

$$A_{\lambda,k}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\hbar c}{k}} \mathbf{e}_\lambda \exp(ikz) = \frac{1}{k\sqrt{8\pi}} \sum_{p=0,1} \sum_{L=1}^{\infty} \sqrt{2L+1} \lambda^p \mathcal{A}_{pkLM}(\mathbf{r}). \quad (146)$$

Tuomet (145) įgyja pavidalą:

$$|\lambda k\rangle = \frac{1}{k\sqrt{8\pi}} \sum_{p=0,1} \sum_{L=1}^{\infty} \sqrt{2L+1} \lambda^p |pkLM\rangle. \quad (147)$$

Iš šių išraiškų matyti, kad fotonų su nuliniu judėjimo kiekio momentu nėra ( $L > 0$ ).

### 1.13 Tenzorinių operatorių matricinių elementų sandaugos

Ieškosime tenzorinio operatoriaus  $T_q^{(k)}$  matricinių elementų sandaugos

$$\langle j_1 m_1 | T_q^{(k)} | j_2 m_2 \rangle \langle j'_1 m'_1 | T_q^{(k')} | j'_2 m'_2 \rangle^* \quad (148)$$

išraiškos. Banginės funkcijos ir operatoriai yra trimatės erdvės ir sukininių kintamųjų funkcijos. Laikysime, kad būsenos, aprašomos judėjimo kiekio momentų  $j_i$  ir projekcijos  $m_i$ , gali būti nustatomos skirtingų koordinačių sistemų  $z$  ašies atžvilgiu.

Sandaugai (148) apskaičiuoti reikia, kad visos banginės funkcijos ir operatoriai būtų apibrėžti vienoje koordinačių sistemoje, o judėjimo kiekio momentų projekcijos nustatomos bendros  $z$  ašies atžvilgiu. Tam tikslui reikia visų būsenų ir operatorių koordinačių ašis pasukti taip, kad jos sutaptų su matricinio elemento skaičiavimui parinkta koordinačių sistema. Būsenos banginė funkcija naujoje koordinačių sistemoje užrašoma skleidiniu:

$$|jm\rangle = \sum_{\tilde{m}} |j\tilde{m}\rangle D_{\tilde{m},m}^j(\hat{j}), \quad (149)$$

kur  $\hat{j}$  žymi Eulerio kampus  $\phi, \theta, \psi$  [1], o  $D_{\tilde{m},m}^j(\hat{j})$  yra Vignerio posūkių matrica [18].

Pritaikius transformaciją (149), matricinių elementų sandaugą (148) galima užrašyti

$$\begin{aligned}
& \langle j_1 m_1 | T_q^{(k)} | j_2 m_2 \rangle \langle j'_1 m'_1 | T_{q'}^{(k')} | j'_2 m'_2 \rangle^* = \sum_{\tilde{m}_1, \tilde{m}'_1, \tilde{m}_2, \tilde{m}'_2, \tilde{q}, \tilde{q}'} \langle j_1 \tilde{m}_1 | T_{q'}^{(k)} | j_2 \tilde{m}_2 \rangle^* \\
& \times \langle j_1 \tilde{m}'_1 | T_q^{(k)} | j_2 \tilde{m}'_2 \rangle D_{\tilde{m}_1, m_1}^{*j_1}(\hat{j}_1) D_{\tilde{q}, q}^{*k}(\hat{k}_0) D_{\tilde{m}_2, m_2}^{j_2}(\hat{j}_2) D_{\tilde{m}'_1, m'_1}^{j'_1}(\hat{j}'_1) D_{\tilde{q}', q'}^{k'}(\hat{k}'_0) D_{\tilde{m}'_2, m'_2}^{*j'_2}(\hat{j}'_2) \\
& = \sum_{K_1, N_1, N'_1, K_2, N_2, N'_2, K_r, N_r, N'_r} \langle j_1 || T^{(k)} || j_2 \rangle \langle j'_1 || T^{(k')} || j'_2 \rangle^* \begin{Bmatrix} j'_2 & K_2 & j_1 \\ k' & K_r & k \\ j'_1 & K_1 & j_1 \end{Bmatrix} \\
& \quad \times (2j_1 + 1)[(2k + 1)(2j_2 + 1)(2j'_1 + 1)(2K_1 + 1)]^{1/2} \\
& \times \begin{bmatrix} K_2 & K_r & K_1 \\ N_2 & N_r & N_1 \end{bmatrix} T_{N'_1 N_1}^{*K_1}(j_1, j'_1, m_1, m'_1 | \hat{j}_1) T_{N'_r N_r}^{*K_r}(k, k', q, q' | \hat{k}_0) T_{N'_2 N_2}^{K_2}(j_2, j'_2, m_2, m'_2 | \hat{j}_2). \quad (150)
\end{aligned}$$

Čia įvestas pažymėjimas

$$T_{N'N}^K(j, j', m, m' | \hat{j}) = (-1)^{j'-m'} \left[ \frac{2K+1}{2j+1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} j & j' & K \\ m & m' & N \end{bmatrix} D_{N'N}^K(\hat{j}). \quad (151)$$

(150) išraiška surasta panaudojant judėjimo kiekio momento teorijos grafinę techniką [1] ir sąryšį

$$D_{MM}^J(\hat{J}) D_{M'M'}^{*J'}(\hat{J}) = (-1)^{J'-M'} \sum_{K, N, N'} \left[ \frac{2K+1}{2J+1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} J' & K & J \\ \tilde{M}' & N' & \tilde{M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J & J' & K \\ M & M' & N \end{bmatrix} D_{N'N}^K(\hat{J}). \quad (152)$$

Tuo atveju, kai procesui galioja ašinė simetrija,  $N = 0$ ,  $M' = -M$ , ir (152) sąryšis atrodo šitaip:

$$D_{MM}^J(\hat{J}) D_{M'M'}^{*J'}(\hat{J}) = (-1)^{J'-M} \left[ \frac{4\pi}{2J+1} \right]^{1/2} \sum_{K, N} \begin{bmatrix} J' & K & J \\ \tilde{M}' & N & \tilde{M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J & J' & K \\ M & -M & 0 \end{bmatrix} Y_{KN}^*(\hat{J}), \quad (153)$$

nes (153) panaudota

$$D_{m0}^l(\alpha, \beta, \gamma) = \left[ \frac{4\pi}{2l+1} \right]^{1/2} Y_{lm}^*(\beta, \alpha). \quad (154)$$

Judėjimo kiekio momento diagramos, panaudotos (150) surasti, pavaizduotos 8 pav.

Atskiru atveju, kai  $N = 0$ ,

$$T_N^K(j, j', m | \hat{j}) = (-1)^{j'-m} \left[ \frac{4\pi}{2j+1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} j & j' & K \\ m & -m & 0 \end{bmatrix} Y_{KN}(\hat{j}). \quad (155)$$

## 1.14 Poliarizacija

Mikrodalelių poliarizacija aprašoma jų pilnutinio judėjimo kiekio momento  $\mathbf{J}$  vektoriaus projekcija  $M$  į pasirinktą kryptį. Paprastai Dekarto koordinatinių sistemos  $z$  ašis sutapatinama su šia kryptimi. Tapatingų dalelių ansamblio poliarizacija yra jo atstojamojo judėjimo kiekio momento vektoriaus vertė. Jeigu  $\mathbf{J} = \sum_i \mathbf{J}_i$ , kur  $\mathbf{J}_i$  atskirų dalelių judėjimo kiekio momento vektoriai, projekcija į  $z$  ašį nelygi nuliui, dalelių ansamblis yra poliarizuotas. Poliarizacija yra bendra sąvoka. Skiriamos dvi poliarizacijos rūšys: orientacija ir rikiavimas. Skirtumui tarp jų paaiškinti, pasinaudosime 9 ir 10 paveikslais. Kad būtų aiškiau, pasirinkime dalelių, kurių  $J = 3/2$ , ansamblio pavyzdį. Orientaciją vaizduoja 9 pav., o rikiavimą – 10 pav. Linijos storis proporcingas dalelių tankiui  $n(M)$  būsenose, aprašomose judėjimo kiekio momento projekcijų vertėmis  $-3/2 \leq M \leq +3/2$ .

Orientacijai ir rikiavimui aprašyti naudojami bedimensiniai parametrai  $A_k$  ( $k=1,2,\dots$ ). Jie yra santyčiai, rodantys dalelių atstojamojo judėjimo kiekio momento nuokrypį nuo izotropinio. Pavyzdžiui,  $J = 3/2$  atveju

$$A_1(J = 3/2) = \frac{n(M = 3/2) + n(M = 1/2) - n(M = -1/2) - n(M = -3/2)}{n(M = 3/2) + n(M = 1/2) + n(M = -1/2) + n(M = -3/2)}, \quad (156)$$

$$A_2(J = 3/2) = \frac{2[n(|M| = 3/2) - n(|M| = 1/2)]}{2[n(|M| = 3/2) + n(|M| = 1/2)]}. \quad (157)$$

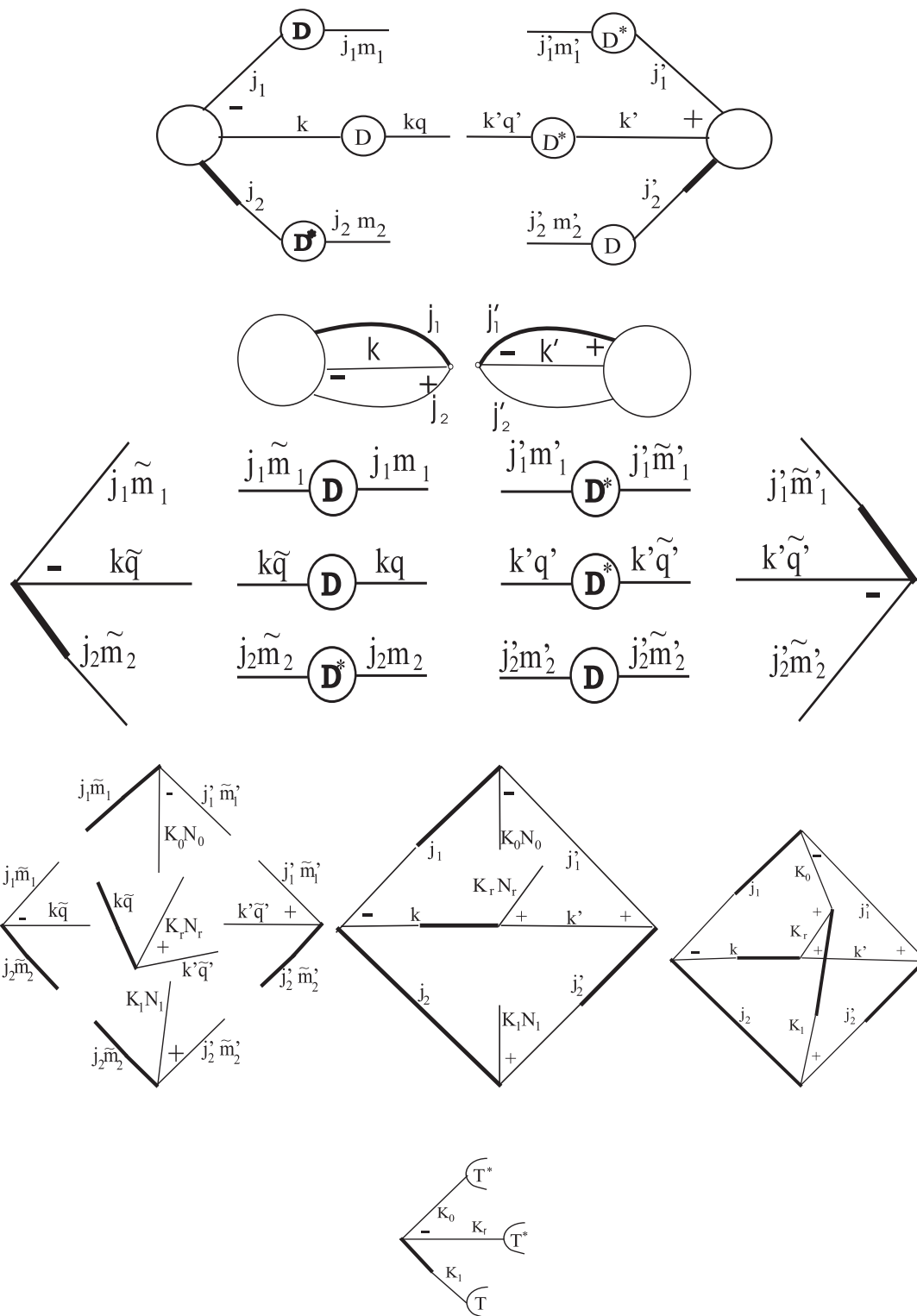
Kvantinėje mechanikoje poliarizaciją aprašo tikimybė, kad dėl dalelės sąveikos su kita dalele, pvz., atomo su fotonu ar atomo su elektronu, jos judėjimo kiekio momento projekcija į  $z$  ašį bus  $M$ . Tuomet rikiavimo parametras  $A_2$ , kai  $J = 3/2$  galima užrašyti

$$A_2(J = 3/2) = \frac{2[\sigma(J = 3/2, |M| = 3/2) - \sigma(J = 3/2, |M| = 1/2)]}{2[\sigma(J = 3/2, |M| = 3/2) + \sigma(J = 3/2, |M| = 1/2)]}, \quad (158)$$

o orientacijos –

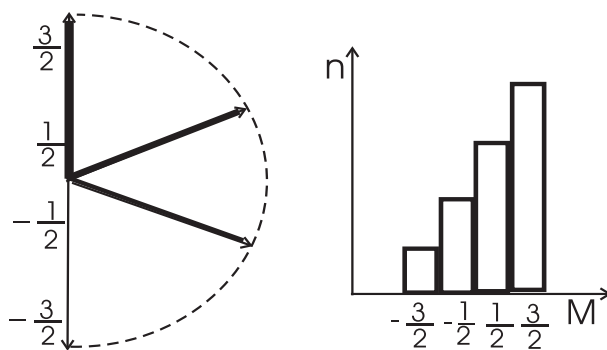
$$A_1(J = 3/2) = \frac{\sigma(J = 3/2, M = 3/2) + \sigma(J = 3/2, M = 1/2) - \sigma(J = 3/2, M = -1/2) - \sigma(J = 3/2, M = -3/2)}{\sigma(J = 3/2, M = 3/2) + \sigma(J = 3/2, M = 1/2) + \sigma(J = 3/2, M = -1/2) + \sigma(J = 3/2, M = -3/2)}. \quad (159)$$

Iš (156) – (159) matyti, kad  $-1 \leq A_1 \leq +1$  ir  $-1 \leq A_2 \leq +1$ , t.y. gali įgyti teigiamas ir neigiamas vertes.  $|A_1| = 1$ , kai visos dalelės orientuotos viena kryptimi išilgai ar prieš  $z$  ašį, o  $|A_2| = 1$ , kai yra tiksliai tos krypties dalelių, kurių  $|M|$  vienodas.

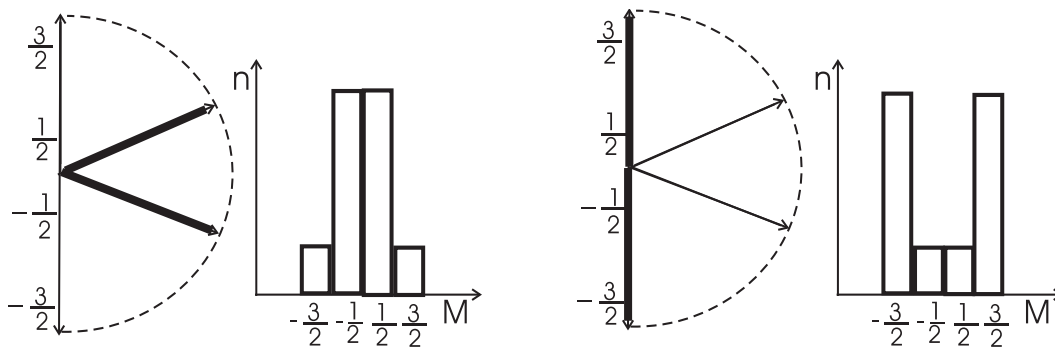


8 pav. Tenzorinių operatorių matricinių elementų sandaugai surasti naudotos judėjimo kiekio momento diagramos.





9 pav. Dalelių ansamblio orientacija. Dešinėje dalelių tankio  $n_i$  priklausomybė nuo pilnutinio judėjimo kiekio momento projekcijos  $M$  į  $z$  ašį vertės.



10 pav. Dalelių ansamblio rikiavimas ir dalelių tankio  $n$  priklausomybė nuo pilnutinio judėjimo kiekio momento projekcijos  $M$  į  $z$  ašį vertės. Kairėje dvi diagramos vaizduoja neigiamą, o dešinėje – kitos dvi diagramos vaizduoja teigiamą rikiavimo parametro  $A_2$  vertę.

## 2 Atomo sąveika su spinduliuote

Kai spinduliuotės pluoštelis nukreipiamas į atomus ar jonus, jie gali būti sužadunami arba jonizuojami, o spinduliuotė gali būti sugerama arba išsklaidoma. Elektromagnetinės spinduliuotės sklaida gali būti koherentinė (Reilėjaus) ir nekorentinė (Komptono). Šiame skyriuje nagrinėjamas poliarizuotų atomų sužadinimas ir jonizacija poliarizuota spinduliuote.

### 2.1 Atomo sužadinimas spinduliuote

Lazerio [71] ar parenkamo dažnio sinchrotroninė spinduliuotė leidžia ne tik tai išmušti elektronus iš norimo atomo sluoksnio, bet ir juos sužadinti į pageidaujamą būseną [72, 73]. Jeigu spinduliuotė poliarizuota, tai atomo sužadinta būsena bus poliarizuota. Taigi atomų sužadinimas poliarizuota spinduliuote yra vienas iš būdų sukurti poliarizuotus atomus tolimesniems eksperimentams [74, 75]. Atomų vidinių sluoksnių sužadinimo atveju jonai gali spinduliuoti fluorescencijos spinduliuotę [28, 51], kuri teikia informacijos apie atomo poliarizacijos būseną prieš sužadinimą. Kai elektronas sužadinamas iš išorinio elektronų sluoksnio, fluorescencija yra vienintelis sužadintos būsenos išnykimo kelias. Elektrono išspinduliavimas vidinio elektronų sluoksnio sužadinimo atveju yra kitas atomo sužadintos būsenos išnykimo būdas [29]. Taigi, atomo fotosužadinimas gali būti pirmasis etapas atomo sužadintoms būnoms su gerai žinomais judėjimo kiekio momento orientacija ir lygiškumu sukurti tolimesniam poliarizacijos ir kampinių koreliacijų tyrimui [55, 51].

Šio skyriaus tikslas – išvesti poliarizuoto atomo sužadinimo poliarizuota spinduliuote tikimybės bendrąją išraišką ir ją panaudoti įvairiems atvejams, aprašantiems konkrečius eksperimentus. Taip pat pritaikyti bendrąją išraišką tam atvejui, kai sužadinimas spinduliuote tėra tik pirmasis sudėtingo proceso etapas. Tikimybės bendroji išraiška bus surasta, panaudojant judėjimo kiekio momento grafinę techniką [1].

#### 2.1.1 Atomo sužadinimo skerspjūvis

Pagal bendrąją trikdžių teoriją proceso, kurio metu išspinduliuojamas fotonas su banginiu vektoriumi intervale  $\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_0 + d\mathbf{k}_0$  diferencialinė tikimybė yra apibrėžiama [76]:

$$dW(i \rightarrow f) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| -\frac{e}{m} \left[ \frac{2\pi(n+1)}{V\omega} \right]^{1/2} \hat{\epsilon}_\lambda \langle f | \mathbf{p} \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \omega) \frac{V d\mathbf{k}_0}{(2\pi)^3}. \quad (1)$$

Čia  $i$  ir  $f$  – pradinė ir galinė būsenos,  $\mathbf{p}$  – elektrono judėjimo kiekis,  $E_i$  ir  $E_f$  – atomo pradinės ir galinės būsenos energija,  $n$  – fotonų skaičius pradinėje būsenoje,  $\omega = 2\pi\nu$  – fotono ciklinis

dažnis, kuris atominėje vienetų sistemoje sutampa su fotono energija,  $V$  – tūrio elementas. Integruojant (1) pagal  $dk_0 = d\omega/c$ , galima surasti fotono, kurio poliarizacija  $\hat{\epsilon}_\lambda$ , išspinduliavimo į erdvinio kampo elementą  $d\Omega$  tikimybę

$$dW_\lambda(i \rightarrow f) = \frac{e^2\omega}{2\pi\hbar c^3 m^2} |\hat{\epsilon}_\lambda \langle f | \mathbf{p} \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) | i \rangle|^2 (\bar{n}_{\mathbf{k}_0\lambda} + 1) d\Omega. \quad (2)$$

Analogiškai galima surasti fotoabsorbcijos diferencialinę tikimybę:

$$dW_\lambda(i \rightarrow f) = \frac{e^2\omega}{2\pi\hbar c^3 m^2} |\hat{\epsilon}_\lambda \langle f | \mathbf{p} \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}) | i \rangle|^2 \bar{n}_{\mathbf{k}_0\lambda} d\Omega. \quad (3)$$

Formulėse (2) ir (3)  $\bar{n}_{\mathbf{k}_0\lambda}$  – fiksuotos poliarizacijos vidutinis fotonų skaičius banginio vektoriaus intervale  $\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_0 + d\mathbf{k}_0$ . Jį galima surasti, žinant spinduliuotės spektrinį intensyvumą  $I_{\mathbf{k}_0\lambda}$  [76]

$$\bar{n}_{\mathbf{k}_0\lambda} = \frac{8\pi^3 c^3}{\hbar\omega^3} I_{\mathbf{k}_0\lambda}. \quad (4)$$

Tuomet sąryšis tarp tikimybės fotoną išspinduliuoti ( $dW^{spont}$ ), sugerti ( $dW^{abs}$ ) ir priverstinai išspinduliuoti ( $dW^{ind}$ ) yra šitoks:

$$dW_\lambda^{abs}(f \rightarrow i) = dW_\lambda^{ind}(i \rightarrow f) = dW_\lambda^{spont}(i \rightarrow f) \frac{8\pi^3 c^2}{\hbar\omega^3} I_{\mathbf{k}_0\lambda}. \quad (5)$$

Fotoabsorbcijos ir priverstinės spinduliuotės nagrinėjimo patogumui įvedamas efektyvus diferencialinis absorbcijos skerspjūvis, kuris apibrėžiamas kaip diferencialinės tikimybės ir į atomą krentančios spinduliuotės intensyvumo santykis:

$$\frac{d\sigma_\lambda(f \rightarrow i)}{d\Omega} = \frac{dW_\lambda(f \rightarrow i)}{I_{\mathbf{k}_0\lambda}}. \quad (6)$$

Kadangi spektrinių linijų pločiai visuomet nelygūs nuliui, atomas gali absorbuoti ne tik grynai monochromatinę elektromagnetinę spinduliuotę, bet ir spinduliuotes, kurių dažniai yra artimi  $\omega$ .

### 2.1.2 Spinduliuotės poliarizacija

Elektrinio dipolinio šuolio  $\Delta m = 0$  metu išspinduliuota šviesa, poliarizuota išilgai kvantavimo arba  $z$  ašies, vadinama  $\pi$  šviesa. Kai  $\Delta m = +1$  arba  $\Delta m = -1$ , randasi atitinkamai  $\sigma^+$  ir  $\sigma^-$  šviesa.  $\pi$  šviesos kampinis pasiskirstymas proporcingas  $\sin^2 \theta$ , o  $\sigma^\pm - (1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta)$ , kur  $\theta$  – kampas tarp šviesos elektrinio lauko  $\mathbf{E}$  ir stebėjimo krypties.

Kai išorinis magnetinis laukas  $\mathbf{B}$  nukreiptas link stebėtojo, t.y. lygiagretus, stebimos tik  $\sigma$  komponentės, nes  $\pi$  komponentė nematoma. Šiuo atveju pagal susitarimą  $\sigma^+$  vadinama

kairinės, o  $\sigma^-$  dešinės apskritiminės poliarizacijos šviesa. Jeigu spinduliuotė stebima statmenai  $z$  ašiai kryptimi, t.y.  $\theta = 90^\circ$  kampū,  $I_\pi$  bus  $\pi$  šviesos intensyvumas, o  $I_\sigma = \frac{1}{2}I_{\sigma^+} + \frac{1}{2}I_{\sigma^-}$  šviesos, poliarizuotos statmenai  $z$  ašiai, intensyvumas. Taigi, šviesos, išspinduliuotos elektronui, peršokant iš aukštesniojo lygmens  $i$  į žemesnįjį  $f$ , intensyvumas  $I_0 = \frac{2}{3}(I_\pi + 2I_\sigma)$  yra proporcingas aukštesniojo lygmens užpildai  $n(i)$

$$I_0 = \frac{\hbar\omega_{if}}{4\pi l} n(i) A(i \rightarrow f), \quad (7)$$

kur  $l$  – atstumas nuo atomo iki detektoriaus,  $A(i \rightarrow f)$  – Einšteino koeficientas (šulio tikimybė per laiko vienetą [76]).

### 2.1.3 Atomo sužadavimo tikimybės išraiškos suradimas

Nagrinėsime šitokią atomo sužadavimo spinduliuote procesą:

$$A(\alpha_0 J_0 M_0) + h\nu(\hat{\epsilon}_\lambda \mathbf{k}_0) \rightarrow A^*(\alpha_1 J_1 M_1). \quad (8)$$

Čia atomas  $A$  būsenoje  $\alpha_0 J_0 M_0$  elektromagnetinės spinduliuotės sužadamas į būseną  $\alpha_1 J_1 M_1$ , kur  $\alpha_i$  žymi  $i$  būsenos konfigūraciją ir kitus kvantinius skaičius,  $J_i$  yra elektronų apvalkalo pilnutinis judėjimo kiekio momentas, o  $M_i$  – jo projekcija į laboratorinę  $z$  ašį. Elektromagnetinė spinduliuotė aprašoma banginiu vektoriumi  $\mathbf{k}_0$  ir poliarizacijos vienetiniu vektoriumi  $\hat{\epsilon}_\lambda$ .  $\lambda = \pm 1$  ir vadinamas spirališkumu. Atominėje vienetų sistemoje  $k_0 = \omega/c$ , kur  $\omega$  – fotono energija a. v. Laikoma, kad lygmenų smulkiosios sandaros suskilimas daug didesnis už hipersmulkiosios sandaros. Šiuo atveju atomo lygmenis galima aprašyti elektronų apvalkalo pilnuoju judėjimo kiekio momentu. Reikalingi formulių pakeitimai, įgalinantys aprašyti tuos atvejus, kai hipersmulkioji sandara svarbi, bus nurodyti vėliau. Padarysime dar vieną prielaidą, kad projekcijų  $M_0$  ir  $M_1$  matavimo kryptys gali būti skirtingos.

(8) proceso efektyvumą galima užrašyti:

$$\begin{aligned} \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_\lambda \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1) &= 2\pi^2 \left[ \int \langle \alpha_1 J_1 M_1 | \mathbf{J}(\mathbf{r}) | \alpha_0 J_0 M_0 \rangle \mathbf{A}_{\lambda \mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right] \\ &\times \left[ \int \langle \alpha_1 J_1 M_1 | \mathbf{J}(\mathbf{r}) | \alpha_0 J_0 M_0 \rangle \mathbf{A}_{\lambda \mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right]^*. \end{aligned} \quad (9)$$

Čia  $\mathbf{J}(\mathbf{r})$  yra elektronų srovės operatorius, o  $\mathbf{A}_{\lambda \mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$  – elektromagnetinio lauko vektorinis potencialas. Padarę prielaidą, kad  $kr \ll 1$ , ir transformavę fotono banginę funkciją nuo laboratorinės koordinatų sistemos  $z$  ašies prie atominės koordinatų sistemos  $z$  ašies bei  $\mathbf{A}_{\lambda \mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$  išskleidę multipoliais (žr. pirmojo skyriaus 1.12 skirsnį), (9) formulės dalis laužtiniuose skliaustuose įgyja

pavidalą:

$$\int \langle \alpha_1 J_1 M_1 | \mathbf{J}(\mathbf{r}) | \alpha_0 J_0 M_0 \rangle \mathbf{A}_{\lambda k_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{p=0,1} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{q=-k}^{q=k} i^k (-i\lambda)^p \left[ \frac{k+1}{k} \right]^{1/2} \frac{k_0^{k-1/2}}{(2k-1)!!} D_{q\lambda}^k(\hat{k}_0) \\ \times \langle \alpha_1 J_1 M_1 | \mathcal{Q}_{kq}^p | \alpha_0 J_0 M_0 \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{q=-k}^{q=k} \langle \alpha_1 J_1 M_1 | Q_q^{(k)} | \alpha_0 J_0 M_0 \rangle D_{q\lambda}^k(\hat{k}_0), \quad (10)$$

$$\langle \alpha_1 J_1 M_1 | Q_q^{(k)} | \alpha_0 J_0 M_0 \rangle = k_0^{k-1/2} \sum_{p=0,1} \left[ \frac{k+1}{k} \right]^{1/2} \frac{i^k (-i\lambda)^p}{(2k-1)!!} \langle \alpha_1 J_1 M_1 | \mathcal{Q}_{kq}^p | \alpha_0 J_0 M_0 \rangle. \quad (11)$$

Čia  $D_{q\lambda}^k(\hat{k}_0)$  – Vignerio posūkio matrica [18]. Kai  $p = 0$ , turime elektrinio multipolinio šuolio operatorių (Ek) [4]

$$\mathcal{Q}_{kq}^0 = -r^k C_q^{(k)}, \quad (12)$$

o  $p = 1$  – magnetinio multipolinio šuolio operatorių (Mk)[4]

$$\mathcal{Q}_{kq}^1 = -\frac{1}{c} [k(2k-1)]^{1/2} r^{k-1} \left\{ \frac{1}{k+1} \left[ C^{(k-1)} \times L^{(1)} \right]_q^{(k)} + \left[ C^{(k-1)} \times S^{(1)} \right]_q^{(k)} \right\}. \quad (13)$$

Čia  $L^{(1)}$  ir  $S^{(1)}$  yra pilnutiniai atitinkamai orbitinio ir sukininio judėjimo kiekio momentų operatoriai, o  $C_q^{(k)}$  – sferinės funkcijos, normuotos į  $[4\pi/(2k+1)]^{1/2}$  (48), operatorius.

Reikia pažymėti, kad elektrinio ir magnetinio lauko multipolio lygiškumai yra atitinkamai  $(-1)^k$  ir  $(-1)^{k+1}$ . Dėl lygiškumo atrankos taisyklių į šuolių tikimybes tarp diskretinių lygmenų duoda indėlių tiksliai arba Ek, arba Mk elektromagnetinio lauko multipoliai. Kadangi nagrinėjamos tiksliai grynosios elektromagnetinio lauko poliarizacijos būsenos, Stokso parametrai nebus įvesti.

Elektrinio dipolinio šuolio atveju (11) matricinio elemento išraiška supaprastėja:

$$\langle \alpha_1 J_1 M_1 | Q_q^{(1)} | \alpha_0 J_0 M_0 \rangle = i\sqrt{2k_0} \langle \alpha_1 J_1 M_1 | \mathcal{Q}_{1q}^0 | \alpha_0 J_0 M_0 \rangle. \quad (14)$$

Spirališkumas  $\lambda = \pm 1$  vaizduoja kairinės ir dešinės apskritiminės poliarizacijos spinduliuotę. Bet kokios  $\epsilon$  poliarizacijos atveju spinduliuotę galima aprašyti apskritiminės poliarizacijos spinduliuočių tiesiniu dariniu:

$$\mathbf{A}_{\epsilon \mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \alpha \mathbf{A}_{\lambda=+1 \mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) + \beta \mathbf{A}_{\lambda=-1 \mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (15)$$

Šią išraišką reikia įrašyti į (10) ieškant (9) skerspjūvio išraiškos.

Iš (14) matyti, kad elektriniam dipoliniam artėjime nėra priklausomybės nuo spinduliuotės banginio vektoriaus krypties pakeitimo priešinga. Todėl, apskaičiuotas dipolinės spinduliuotės kampinis pasiskirstymas yra simetriškas banginio vektoriaus  $\mathbf{k}_0$  krypties pakeitimo atžvilgiu. Kai

skleidime multipoliais paliekami nariai iki antrosios eilės, spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametro išraiškoje atėina E1-M1 ir E1-E2 interferenciniai nariai, turintys nelyginį lyginumą, dėl ko simetrija spinduliuotės banginio vektoriaus krypties pakeitimo priešinga atžvilgiu išnyksta [77].

Kartais dalelės poliarizaciją būna daug patogiau nustatyti kitos krypties negu naudota matriciniams elementams apskaičiuoti. Perėjimui nuo banginės funkcijos, apibrėžtos laboratorinėje koordinačių sistemoje, prie banginės funkcijos atomo koordinačių sistemoje, naudojamos šuolio operatoriaus matriciniam elementui surasti, panaudosime (1.149) operaciją visų dalelių banginėms funkcijoms. Tuomet laboratorinėje koordinačių sistemoje matricinį elementą  $\langle \alpha_1 J_1 M_1 | Q_q^{(k)} | \alpha_0 J_0 M_0 \rangle$  galime užrašyti:

$$\langle \alpha_1 J_1 M_1 | Q_q^{(k)} | \alpha_0 J_0 M_0 \rangle = \sum_{\tilde{M}_0, \tilde{q}, \tilde{M}_1} \langle \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 | Q_{\tilde{q}}^{(k)} | \alpha_0 J_0 \tilde{M}_0 \rangle D_{\tilde{M}_0 M_0}^{J_0}(\hat{J}_1) D_{\tilde{q} q}^k(\hat{k}_0) D_{\tilde{M}_1 M_1}^{*J_1}(\hat{J}_1). \quad (16)$$

Matricinis elementas  $\langle \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 | Q_{\tilde{q}}^{(k)} | \alpha_0 J_0 \tilde{M}_0 \rangle$  apibrėžtas atomo koordinačių sistemoje.

Įrašę matricinių elementų (16) išraiškas į (9) išraišką, gauname (8) skerspjūvio išraišką:

$$\begin{aligned} \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \epsilon_\lambda \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1) &= 2\pi^2 \sum_{k, k', \tilde{M}_0, \tilde{q}, \tilde{M}_1, \tilde{M}'_0, \tilde{q}', \tilde{M}'_1} \langle \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 | Q_{\tilde{q}}^{(k)} | \alpha_0 J_0 \tilde{M}_0 \rangle \\ &\times D_{\tilde{M}_0 M_0}^{J_0}(\hat{J}_1) D_{\tilde{q} \lambda}^k(\hat{k}_0) D_{\tilde{M}_1 M_1}^{*J_1}(\hat{J}_1) \langle \alpha_1 J_1 \tilde{M}'_1 | Q_{\tilde{q}'}^{(k')} | \alpha_0 J_0 \tilde{M}'_0 \rangle^* D_{\tilde{M}'_0 M_0}^{*J_0}(\hat{J}_1) D_{\tilde{q}' \lambda}^{*k'}(\hat{k}_0) D_{\tilde{M}'_1 M_1}^{J_1}(\hat{J}_1) \end{aligned} \quad (17)$$

(16) matricinio elemento kampinė dalis pavaizduota B<sub>1</sub> diagramoje (žr. 11 pav.). Joje atviros linijos vaizduoja judėjimo kiekio momentus, kurių projekcijos nustatomos laboratorinės koordinačių sistemos  $z$  ašies atžvilgiu, o apskritimai su D raide viduryje vaizduoja Vignerio posūkio matricias. Stačiakampiai atstovauja pradinės ir galinės būsenų konfigūracijas ir kitus kvantinius skaičius. Pritaikome Vignerio ir Ekarto teoremą (1.53), kuri leidžia atskirti matricinio elemento dalį, invariantinę erdvės sukimo atžvilgiu, (diagrama B<sub>2</sub>) nuo priklausomybės nuo judėjimo kiekio momentų orientacijos erdvėje (diagrama B<sub>3</sub>). Antras Klebšo ir Gordano koeficientas atėina iš kompleksiskai sujungtinio matricinio elemento (9) išraiškoje. Vignerio posūkio matricias  $D_{M, M}^J(\hat{J})$  iš matricinio ir jam kompleksiskai jungtinio matricinio elemento (9) judėjimo kiekio momentams  $J_0, J_1$  ir  $k, k'$  skleidžiame neredukuotinais tenzoriais  $T_N^K(\hat{J})$  (1.109). Iš šių skleidinių atėina trys Klebšo ir Gordano koeficientai. Dar du – iš Vignerio ir Ekarto teoremos pritaikymo (žr. B<sub>3</sub> diagramą) matriciniam elementui ir jam kompleksiskai jungtiniam. Visi penki Klebšo ir Gordano koeficientai pavaizduoti B<sub>4</sub> diagramoje (11 pav). Sumuojame (17) išraiškoje esančių projekcijų atžvilgiu ir gauname B<sub>5</sub> diagramą. Joje esančias atviras linijas uždarome su Klebšo ir

Gordano koeficientu ir gauname  $B_6$  diagramą. Atsiranda naujas Klebšo ir Gordano koeficientas, prie kurio laisvų linijų prijungiamo iš Vignerio posūkio matricių sandaugų skleidinio atsiradusius neredukuotinius tenzorius  $T_N^K$ . Gautoji  $B_7$  diagrama aprašo judėjimo kiekio momentų  $J_0, J_1$  ir fotono multipolių orientacijas erdvėje. Galutinė atomo sužadavimo tikimybės išraiška užrašoma panaudojant  $B_2, B_6$  ir  $B_7$  diagramas:

$$\begin{aligned} \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_\lambda \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1) &= C \sum_{K_0, K_r, K_1, k, k'} B^r(K_0, K_r, K_1, k, k') \\ &\times \sum_{N_0, N_r, N_1, q} \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ N_0 & N_r & N_1 \end{bmatrix} T_{N_0}^{*K_0}(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) T_{N_r}^{*K_r}(k, k', \lambda | \hat{k}_0) T_{N_1}^{K_1}(J_1, J_1, M_1 | \hat{J}_1), \end{aligned} \quad (18)$$

kur

$$\begin{aligned} B^r(K_0, K_r, K_1, k, k') &= (\alpha_1 J_1 || Q^{(k)} || \alpha_0 J_0) (\alpha_1 J_1 || Q^{(k')} || \alpha_0 J_0)^* \left\{ \begin{array}{ccc} J_0 & K_0 & J_0 \\ k & K_r & k' \\ J_1 & K_1 & J_1 \end{array} \right\} \\ &[(2J_0 + 1)(2J_1 + 1)(2k + 1)(2K_1 + 1)]^{1/2}. \end{aligned} \quad (19)$$

(19) išraiškoje panaudotas sąryšis

$$(\alpha_1 J_1 || Q^{(k)} || \alpha_0 J_0) = [2J_1 + 1]^{1/2} \langle \alpha_1 J_1 || Q^{(k)} || \alpha_0 J_0 \rangle. \quad (20)$$

Kai atomo energijos lygmenų hipersmulkioji sandara svarbi, submatricinį elementą  $(\alpha_1 J_1 || Q^{(k)} || \alpha_0 J_0)$  (19) išraiškoje reikia pakeisti  $(\alpha_1 J_1(I) F_1 || Q^{(k)} || \alpha_0 J_0(I) F_0)$  submatriciniu elementu, pasinaudojant sąryšiu

$$\begin{aligned} (\alpha_1 J_1(I) F_1 || Q^{(k)} || \alpha_0 J_0(I) F_0) &= (-1)^{F_0 - J_1 + I + k} [(2F_0 + 1)(2J_1 + 1)]^{1/2} \\ &\times \left\{ \begin{array}{ccc} F_0 & k & F_1 \\ J_1 & I & J_0 \end{array} \right\} (\alpha_1 J_1 || Q^{(k)} || \alpha_0 J_0). \end{aligned} \quad (21)$$

Čia  $I$  – branduolio sukiny. Tuomet vertes  $J_0$  ir  $J_1$  (19) ir (20) formulėse reikia pakeisti  $F_0$  ir  $F_1$ .

Jeigu tikimybę  $W(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_\lambda \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1)$  padalinsime iš spinduliuotės srauto tankio, gausime skerspjuvį. Taigi, tikimybei ir skerspjuviui galime naudoti tas pačias išraiškas. Reikia pakeisti tiksliai konstantą  $C$ .

#### 2.1.4 Fotosužadınimas – pirmoji daugiapakopio proceso stadija

Atomui sužadintoje būsenoje paruošti dažnai naudojama lazerio ar kito šaltinio elektromagnetinė spinduliuotė. Sekančio proceso pasėkoje ši atomo būseną nėra registruojama, todėl dvipakopio

proceso skerspjūvio išraišką reikia koherentiškai sumuoti nestebimų  $M_1$  būsenų atžvilgiu [24]. Kai sužadınimas (8) yra pirmasis daugiapakopio proceso etapas, sekantį procesą galima užrašyti šitaip:

$$A^*(\alpha_1 J_1 M_1) + b(a) \rightarrow A(\alpha_2 J_2 M_2) + b'(a'). \quad (22)$$

Čia  $b(a)$  vaizduoja spinduliuotę ar dalelę, sąveikaujančią su sužadintu atomu  $A^*(\alpha_1 J_1 M_1)$ . Jos būseną pažymėta  $a$ .  $b'(a')$  aprašo vieną ar daugiau iš atomo išmuštų dalelių  $a'$  būsenoje. Dvapakopio proceso (8) ir (22) tikimybė  $W^t$  bus:

$$\begin{aligned} W^t(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_\lambda \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 a \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 a') &= \left| \sum_{M_1} \langle \alpha_2 J_2 M_2 a' | H_2 | \alpha_1 J_1 M_1 a \rangle \right. \\ &\times \langle \alpha_1 J_1 M_1 | H_1 | \alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_\lambda \mathbf{k}_0 \rangle \left. \right|^2 = \sum_{M_1, M'_1} \langle \alpha_2 J_2 M_2 a' | H_2 | \alpha_1 J_1 M_1 a \rangle \langle \alpha_2 J_2 M_2 a' | H_2 | \alpha_1 J_1 M'_1 a \rangle^* \\ &\times \langle \alpha_1 J_1 M_1 | H_1 | \alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_\lambda \mathbf{k}_0 \rangle \langle \alpha_1 J_1 M'_1 | H_1 | \alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_\lambda \mathbf{k}_0 \rangle^*. \end{aligned} \quad (23)$$

Čia  $H_1$  ir  $H_2$  atitinkamai yra pirmojo ir antrojo procesų sąveikos operatoriai. Šiuo atveju Vignerio posūkio matricų sandaugos skleidiniui nestebimos būsenos atžvilgiu reikia pritaikyti (1.106) formulę. Neredukuotinis tenzorius  $T_{N_1 N'_1}^{K_1}(J_1, J'_1, M_1, M'_1 | \hat{J}_1)$  apibrėžiamas (1.108) formule. Po šių paruošiamųjų operacijų galima (23) išraišką sumuoti  $M_1, M'_1$  atžvilgiu. Tolimesniuose skyriuose pamatysime, kad visų skerspjūvių ir tikimybių išraiškose nuo neregistruojamų projekcijų priklauso tiktai neredukuotiniai tenzoriai  $T_{N_1 N'_1}^{K_1}(J_1, J'_1, M_1, M'_1 | \hat{J}_1)$ . Tai reiškia, kad sumuojama tik šių operatorių sandauga:

$$\begin{aligned} \sum_{M_1, M'_1} T_{N_1 N}^{K_1}(J_1, J_1, M_1, M'_1 | \hat{J}_1) T_{N'_1 N'}^{*K'_1}(J_1, J_1, M_1, M'_1 | \hat{J}_1) &= \frac{\sqrt{(2K_1 + 1)(2K'_1 + 1)}}{2J_1 + 1} \\ &\times D_{N_1 N}^{*K_1}(\hat{J}) D_{N'_1 N'}^{K'_1}(\hat{J}) \sum_{M_1, M'_1} (-1)^{2J_1 - 2M'_1} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K_1 \\ M_1 & M'_1 & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K'_1 \\ M_1 & M'_1 & N' \end{bmatrix} \\ &= \frac{2K_1 + 1}{2J_1 + 1} D_{N_1 N}^{*K_1}(\hat{J}) D_{N'_1 N}^{K'_1}(\hat{J}) \delta(K_1, K'_1) \delta(N, N'). \end{aligned} \quad (24)$$

Kadangi tarpinė būseną neregistruojama, kvantavimo ašį galima parinkti taip, kad išraiškos būtų paprastesnės. Todėl ją galima sutapatinti su laboratorine  $z$  ašimi, t.y. kampai  $\theta = \phi = 0$ :

$$D_{N_1 N}^{*K_1}(0, 0, 0) D_{N'_1 N}^{K'_1}(0, 0, 0) = \delta(N_1, N) \delta(N'_1, N). \quad (25)$$

Tuomet (24) išraiškoje lieka daugiklis  $(2K_1 + 1)/(2J_1 + 1)$ . Vėliau pamatysime, kad  $\sqrt{2K_1 + 1}$  patogų priskirti pirmajam procesui, o  $\sqrt{2K_1 + 1}/(2J_1 + 1)$  – antrajam. Taip padarius pirmojo ir antrojo procesų tikimybės sutaps su nepoliarizuotų dalelių sąveikos pilnosiomis tikimybėmis.



Dabar dvipakopio proceso tikimybę jau galime užrašyti tarpinės būsenos skleidinio multipoliais tokiu pavidalu:

$$\begin{aligned} & W^t(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 a \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 a') \\ &= \sum_{K_1, N_1} W_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 a) \cdot W_{K_1 N_1}^A(\alpha_1 J_1 a \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 a'), \end{aligned} \quad (26)$$

kur  $W^A$  žymi antrojo proceso tikimybę. Ji bus surasta vėliau, nes priklauso nuo konkretaus antrojo proceso.

Fotosužadinimo tikimybės skleidinio tarpinės būsenos multipoliais nario išraiška yra:

$$\begin{aligned} \frac{dW_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)}{d\Omega} &= C \sum_{K_0, K_r, k, k'} B^r(K_0, K_r, K_1, k, k') \sqrt{2K_1 + 1} \sum_{N_0, N_r, q} \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ N_0 & N_r & N_1 \end{bmatrix} \\ &\times T_{N_0}^{*K_0}(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) T_{N_r}^{*K_r}(k, k', q | \hat{k}_0), \end{aligned} \quad (27)$$

$$W_{00}(\alpha_0 J_0 k \rightarrow \alpha_1 J_1) = \frac{C}{(2J_0 + 1)(2k + 1)} |\langle \alpha_1 J_1 || Q^{(k)} || \alpha_0 J_0 \rangle|^2. \quad (28)$$

Pasiūlytą procedūrą lengva pritaikyti bet kokiam daugiapakopiam procesui. Pavyzdžiui, tripakopio proceso atveju

$$\begin{aligned} & W^t(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_{q_1} \mathbf{k}_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow J_3 M_3 \hat{e}_{q_2} \mathbf{k}_2) \\ &= \sum_{M_1, M'_1, M_2, M'_2} W^1(J_0 M_0 \hat{e}_{q_1} \mathbf{k}_1 \rightarrow J_1 M_1 M'_1 \mathbf{p}_1 m_1) W^2(J_1 M_1 M'_1 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow J_2 M_2 M'_2 \mathbf{p}_2 m_2) \\ &\times W^3(J_2 M_2 M'_2 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow J_3 M_3 \hat{e}_{q_2} \mathbf{k}_2) = \sum_{K_1, N_1, K_2, N_2} W_{K_1 N_1}^1(J_0 M_0 \hat{e}_{q_1} \mathbf{k}_1 \rightarrow J_1 \mathbf{p}_1 m_1) \\ &\frac{2K_1 + 1}{2J_1 + 1} W_{K_1 N_1 K_2 N_2}^2(J_1 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow J_2 \mathbf{p}_2 m_2) \frac{2K_2 + 1}{2J_2 + 1} W_{K_2 N_2}^3(J_2 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow J_3 M_3 \hat{e}_{q_2} \mathbf{k}_2). \end{aligned} \quad (29)$$

Iš (29) matyti, kad pilnutinė tripakopio proceso tikimybė užrašoma neregistruojamų tarpinių būsenų multipolių skleidiniais.

### 2.1.5 Nepoliarizuotų atomų sužadinimas

Poliarizuotų atomų sužadinimo poliarizuota spinduliuote tikimybės (19) ir (27) išraiškos yra pačios bendriausios šio proceso formulės. Parodysime, kaip jas galima pritaikyti paprastesniems atvejams. Vienas jų – dažnai pasitaikantis nepoliarizuotų atomų sužadinimas poliarizuota spinduliuote.

Iš kvantinės mechanikos žinome, kad tikimybės reikia sumuoti neregistruojamų galinių būsenų ir vidurkinti nepoliarizuotų pradinių būsenų atžvilgiu. Mūsų atveju atomas nepoliarizuotas,

todėl (27) išraišką reikia vidurkinti  $M_0$  atžvilgiu, t.y. tenzorių  $T_{N_0}^{K_0}(J_0, J_0, M_0|\hat{J}_0)$  sumuoti  $M_0$  atžvilgiu, nes tiksliai jis priklauso nuo projekcijų  $M_0$ . Pasinaudojame

$$\sum_{M_0} T_{N_0}^{K_0}(J_0, J_0, M_0|\hat{J}_0) = \delta(K_0, 0), \delta(N_0, 0) \quad (30)$$

ir gauname, kad  $K_0 = N_0 = 0$ . Įrašome šias vertes į (27). Atlikę veiksmus, galime užrašyti nepolarizuoto atomo sužadavimo poliarizuota spinduliuote kaip pirmojo etapo proceso tikimybės išraišką:

$$\begin{aligned} W(\alpha_0 J_0 \hat{e}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) &= \sum_{K, N, k, k'} \frac{4\pi C}{(2J_0 + 1)\sqrt{(2k + 1)}} (-1)^{k' - q} B^r(0, K, K, k, k') \\ &\times \begin{bmatrix} k & k' & K \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} Y_{KN}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (31)$$

$\theta$  ir  $\phi$  – kampai tarp laboratorinės  $z$  ašies ir apskritiminės spinduliuotės krypties arba tiesinės poliarizacijos spinduliuotės elektrinio vektoriaus  $\mathbf{E}$  krypties. Sutapatinę šias kryptis su  $z$  ašimi, pagal (1.86) formulę gauname, kad  $N = 0$ .

Galutinė nepolarizuoto atomo sužadavimo poliarizuota spinduliuote tikimybės atskiro multipolinio skleidimo galinės būsenos atžvilgiu nario išraiška yra:

$$\begin{aligned} &W_{K_0}(\alpha_0 J_0 \hat{e}_q \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1) \\ &= \frac{C}{2J_0 + 1} \sum_{k, k'} \left[ \frac{2K + 1}{(2k + 1)} \right]^{1/2} (-1)^{k' - q} B^r(0, K, K, k, k') \begin{bmatrix} k & k' & K \\ q & -q & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} &B^r(0, K, K, k, k') = (\alpha_1 J_1 \| Q^{(k)} \| \alpha_0 J_0) (\alpha_1 J_1 \| Q^{(k')} \| \alpha_0 J_0)^* \\ &\times (-1)^{k' + K + J_1 + J_0} \left[ \frac{(2J_1 + 1)(2k + 1)}{2K + 1} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} k & k' & K \\ J_1 & J_1 & J_0 \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (33)$$

Apskritimiškai poliarizuotos dipolinės spinduliuotės atveju  $k = k' = 1$ ,  $q = \pm 1$  ir  $K = 0, 1, 2$ . Taigi, sužadintas atomas yra orientuotas, kai  $K = 1$  ir  $J_1 \geq 1/2$ , ir išrikuotas, kai  $K = 2$  ir  $J_1 \geq 1$ . Multipolinio skleidimo rangai  $K = 1$  ir  $K = 2$  aprašo atitinkamai orientaciją ir rikiavimą. Tiesiškai poliarizuotai spinduliuotei  $q = 0$ , o  $K = 0, 2$ , kas seka iš Klebšo ir Gordano koeficiento su nulinėmis projekcijomis (1.43).

Nepolarizuota šviesa atvaizduojama lygių dalių dešinės ( $q = +1$ ) ir kairinės ( $q = -1$ ) apskritiminės poliarizacijos spinduliuočių suma. Sudėjus narius (32) su  $q = +1$  ir  $q = -1$ , lieka tiksliai nariai su  $K = 0, 2$ . Tai reiškia, kad sužadinto atomo būseną bus išrikuota netgi sužadinama nepolarizuota spinduliuote.

Orientacijai ir rikiavimui aprašyti buvo pasiūlyti parametrai  $A_1$  ir  $A_2$  [8]. Sužadininiai elektrine dipoline spinduliuote jų išraiškos yra:

$$A_1 = \frac{W_{10}}{W_{00}} = 3(-1)^{J_1+J_0+1-q} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ J_1 & J_1 & J_0 \end{Bmatrix}, \quad (34)$$

$$A_2 = \frac{W_{20}}{W_{00}} = 3(-1)^{J_1+J_0-q} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ J_1 & J_1 & J_0 \end{Bmatrix}. \quad (35)$$

Jie tinka bet kokiai sužadinto atomo poliarizacijos būsenai aprašyti ir nepriklauso nuo atomo submatricinių elementų.

Tiesiškai poliarizuotai elektrinei dipolinei spinduliuotei  $A_1^L = 0$ , o

$$A_2^L = \sqrt{6}(-1)^{J_1+J_0} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ J_1 & J_1 & J_0 \end{Bmatrix}. \quad (36)$$

Apskritimiškai poliarizuotai elektrinei dipolinei spinduliuotei  $A_2$  sutampa su nepoliarizuotos šviesos

$$A_2 = \left[\frac{3}{2}\right]^{1/2} (-1)^{J_1+J_0-1} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ J_1 & J_1 & J_0 \end{Bmatrix}, \quad (37)$$

$$A_1 = \frac{3}{\sqrt{2}}(-1)^{J_1+J_0} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ J_1 & J_1 & J_0 \end{Bmatrix}. \quad (38)$$

1 lentelėje pateiktos apskaičiuotos orientacijos ir rikiavimo parametrų vertės  $J_0 \leq 4$  ir  $J_1 \leq 5$  atveju. Atomo sužadintos būsenos poliarizacija turi įtakos antrojo proceso dydžiams. Pavyzdžiui, buvo užregistruota [78], kad perduotoji sukinių poliarizacija kriptono rezonansiškai sužadintos  $3d_J^{-1}5p$  būsenos Auger elektronams siekia iki 80%.

### 2.1.6 Poliarizuotų atomų sužadinimas nepoliarizuota spinduliuote

Jeigu elektromagnetinė spinduliuotė nepoliarizuota, kaip jau buvo minėta, ji aprašoma lygių dalių dešininės ir kairinės apskritiminės poliarizacijos spinduliuočių suma, todėl  $K_r = 0, 2$ . Parinę spinduliuotės sklaidimo kryptį išilgai  $z$  ašies, pagal (1.86) gauname, kad  $N_r = 0$  ir  $N_0 = N_1$ , kurias įrašome į (31) ir gauname:

$$\begin{aligned} W_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_q \rightarrow \alpha_1 J_1) &= C \sum_{K_0, K_r, k, k'} \left[ \frac{4\pi}{(2J_0 + 1)(2k + 1)} \right]^{1/2} (-1)^{J_0 - M_0 + k' - q} \\ &\times [2K_r + 1]^{1/2} B^r(K_0, K_r, K_1, 1, 1) \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ N_1 & 0 & N_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} k & k & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} Y_{K_0 N_1}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (39)$$

**1 lentelė.** Parametrai, aprašantys orientaciją  $A_1$  ir rikiavimą  $A_2$  dešininės apskritiminės poliarizacijos dipolinei spinduliuotei ir rikiavimą  $A_2^L$  tiesinės poliarizacijos dipolinei spinduliuotei

$J_0$	$J_1$	$A_1$	$A_2$	$A_2^L$	$J_0$	$J_1$	$A_1$	$A_2$	$A_2^L$
0	1	1.2247	0.7071	-1.4142	5/2	3/2	-0.6708	0.1	-0.2
1/2	1/2	1	0	0		5/2	0.2928	-0.4276	0.8552
	3/2	1.1180	0.5	-1		7/2	0.9820	0.3873	-0.6546
1	0	0	0	0	3	2	-0.7071	0.1195	-0.2390
	1	0.6124	-0.3536	0.7071		3	0.25	-0.4330	0.8660
	2	1.0607	0.4183	-0.8367		4	0.9682	0.3134	-0.6268
3/2	1/2	-0.5	0	0	7/2	5/2	-0.7319	0.1336	-0.2673
	3/2	0.4472	-0.4	0.8		7/2	0.2182	-0.4364	0.8729
	5/2	1.0247	0.3742	-0.7483		9/2	0.9574	0.3028	-0.6055
2	1	-0.6124	0.0707	-0.1414	4	3	-0.75	0.1443	-0.2887
	2	0.3536	-0.4183	0.8367		4	0.1936	-0.4387	0.8775
	3	1	0.3464	-0.6928		5	0.9487	0.2944	-0.5889

Kampai  $\theta$  ir  $\phi$  yra atomo judėjimo kiekio momento  $J_0$  nuokrypis nuo laboratorinės  $z$  ašies ir tuo pačiu nuo spinduliuotės sklaidimo krypties.

Elektrinės dipolinės elektromagnetinės spinduliuotės atveju  $k = k' = 1$ , ir (39) galima perrašyti:

$$W_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) = W_{00}(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)[1 + A_2(J_0 M_0, K_1 N_1, \theta, \phi)], \quad (40)$$

$$A_2(J_0 M_0, K_1 N_1, \theta, \phi) = \sum_{K_0} \left[ \frac{4\pi}{2K_0 + 1} \right]^{1/2} Y_{K_0 N_1}(\theta, \phi) \beta(K_0, 2, K_1) \begin{bmatrix} K_0 & 2 & K_1 \\ N_1 & 0 & N_1 \end{bmatrix}, \quad (41)$$

$$\begin{aligned} \beta(K_0, 2, K_1) &= 3(2J_0 + 1)[(2J_1 + 1)(2K_1 + 1)(2K_0 + 1)(2K_r + 1)]^{1/2} (-1)^{J_0 - M_0 + 1 - q} \\ &\times \begin{bmatrix} 1 & 1 & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} J_0 & K_0 & J_0 \\ 1 & 2 & 1 \\ J_1 & K_1 & J_1 \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (42)$$

$A_2(J_0 M_0, K_1 N_1, \theta, \phi)$  parametras aprašo sužadinto atomo rikiavimą, kuris atsiranda sužadinant poliarizuotą atomą. Jis vadinamas diferencialiniu rikiavimu ir priklauso nuo atomo judėjimo kiekio momento  $J_0$  orientacijos spinduliuotės sklaidimo krypties atžvilgiu, bet nepriklauso nuo submatricinių elementų verčių, kas reiškia, kad šis parametras nepriklauso nuo jų skaičiavimo tikslumo.  $A_2$  vertei apskaičiuoti reikia žinoti kvantinius skaičius  $J_0$ ,  $J_1$  ir  $\mathbf{J}_0$  kryptį. Jeigu

**2 lentelė.** Parametrai  $A_2(J_0, M_0 = J_0, K_1, 0, 0, 0)$ , aprašantys rikiavimą, po atomo, poliarizuoto nepoliarizuotos spinduliuotės sklidimo kryptimi ( $J_0 \leq 3, J_1 \leq 3$ ), sužadinimo.

		$K_1$					
$J_0$	$J_1$	1	2	3	4	5	6
0	1		0.9129				
1/2	1/2	-0.8165					
	3/2	0.1291		0.8874			
1	1		-0.9129				
	2		0.4781		0.6454		
3/2	1/2	0.6124					
	3/2	0.6197		-0.7099			
	5/2	0.1863		0.6705		0.4179	
2	1		0.4564				
	2		-0.8964		-0.4781		
	3		0.4182		0.6677		0.2542
5/2	3/2	0.5809		0.2958			
	5/2	-0.6506		-0.9015		-0.2985	
3	2		0.5976		0.1793		
	3		-0.9149		-0.7555		-0.1779

atomas paruošiamas būsenoje, kurioje  $J_0$  nukreiptas išilgai  $z$  ašies (ir spinduliuotės krypties), (pagal (1.86) formulę)  $N_1 = 0$ , ir  $A_2$  išraiška supaprastėja

$$A_2(J_0 J_0, K_1 0, 0, 0) = 3(2J_0 + 1) \sum_{K_0 \leq 2J_0} [5(2K_1 + 1)(2K_0 + 1)/6]^{1/2} \times \begin{bmatrix} K_0 & 2 & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ J_0 & -J_0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} J_0 & K_0 & J_0 \\ 1 & 2 & 1 \\ J_1 & K_1 & J_1 \end{Bmatrix}. \quad (43)$$

Čia  $K_1 \leq 2J_1$ , o  $M_0 = J_0$ .

Apskaičiuotos pagal (43) formulę  $A_2(J_0 J_0, K_1 0, 0, 0)$  vertės pateiktos 2 lentelėje. Jos nepriklauso nuo atomo submatricinių elementų, todėl tinka bet kokiam atomui.

## 2.2 Poliarizuoto atomo jonizacija poliarizuota spinduliuote

Poliarizacijos pasireiškimui atomų fotojonizacijoje tirti skirta bene daugiausia darbų. Poliarizuotų atomų fotojonizaciją poliarizuota dipoline spinduliuote bendru atveju pirmasis aprašė Jacobs [22], taikydamas tankio matricos formalizmą. Iš bendrosios išraiškos jis išvedė fotoelektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos ir jų sukinio polarizacijos parametrų formules. Metais vėliau (1973 m.) Cherepkov [46] taip pat nagrinėjo fotoelektronų iš poliarizuotų vienelektronių atomų polarizaciją ir kampinį pasiskirstymą dipolinės spinduliuotės artinyje, tačiau jo darbas liko nepastebėtas. Vėlesni autoriai [24, 25] polarizacijai iš nepoliarizuotų atomų aprašyti įvedė patogius parametrus  $\xi$ ,  $\delta$  ir  $\gamma$ , kurie naudojami iki šiol. Klar darbuose [24, 25] fotojono būsenos nuo nagrinėjimo pradžios buvo laikomos nepoliarizuotomis, o spinduliuotė aprašoma dipolinia-me artinyje. Pirmajame straipsnyje [24] jis naudojo Fano ir Dill [39] įvestą perduotąjį judėjimo kiekio momentą  $j_t$ , o antrajame darbe [25] – jo atsisakė. Pastarajame straipsnyje išnagrinėta nepoliarizuotų ir poliarizuotų elektronų iš nepoliarizuotų atomų bei nepoliarizuotų elektronų iš poliarizuotų atomų kampiniai pasiskirstymai. Jame taip pat nagrinėtos pilnojo eksperimento [10] galimybės. Vėliau buvo parodyta, kad penkių matuojamų dydžių – pilnutinio skerspjūvio  $\sigma$ , fotoelektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametro  $\beta$  ir trijų fotoelektrono sukinio polarizacijos parametrų  $\xi$ ,  $\delta$ ,  $\gamma$  – nepakanka nustatyti visiems teoriniams submatriciniams elementams ir sklaidos fazėms reliatyvistiniame artinyje, jeigu visi atomo sluoksniai užpildyti [79]. Jų pakanka tikrai nereliatyvistiniam atvejui.

Nepoliarizuotų fotoelektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrai apskaičiuoti pradžioje buvo naudojama Cooper ir Zare [41] išraiška. Vėliau Fano ir Dill [39], nenaudodami tankio matricos formalizmo, išvedė formules, kuriose įvedė perduotąjį judėjimo kiekio momentą  $j_t$ . Jos buvo naudojamos fotoelektronų iš nepoliarizuotų atomų su neužpildytais sluoksniais fotoelektronų kampiniam pasiskirstymui [81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88] skaičiuoti. Connerade ir kt. [84] bei Faucher ir kt. [85] atsižvelgė į rezonansų fotojonizacijos skerspjūvyje įtaką asimetrijos parametrai  $\beta$ . Aukštesnių už dipolinį narių indėlis į fotoelektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrai svarbus, kai fotono energija pasiekia 1,4 KeV [89]. Pastaraisiais metais pastebėta teoriškai [48, 77, 90] ir eksperimentiškai [48], kad nedipoliniai nariai gali būti svarbūs ir esant mažoms fotono energijoms.

Fotojonų rikiavimo parametrai nagrinėti atskiriems atomams su užpildytais sluoksniais [52, 91]. Rikiavimas pasireiškia atskirų antrojo etapo procesų parametruose, kai fotojonizacija ar kiti procesai naudojami kaip pirmasis etapas atomams ar jonams paruošti.

Teoriškai nuspėta [22, 46] fotoelektronų sukinių poliarizacija pirmą kartą buvo išmatuota Xe atomų išorinį sluoksnį jonizuojant nepoliarizuota spinduliuote [92]. Kabachnik ir Sazhina [23] išnagrino fotoelektronų sukinių poliarizaciją rezonansų srityje, o Cherepkov ir Semionov [93] ištyrė nedipolinių narių indėlių fotoelektono sukinių poliarizaciją ir nustatė, kad jis galėtų būti eksperimentiškai pastebėtas fotono energijoms, mažesnėms už 350 eV Xe 4p ir 5p sluoksnių fotojonizacijos atveju, ypač tuomet, kai dipolinių narių indėlis artimas nuliui.

Kai jonizuojamas poliarizuotas atomas, fotoelektronų aprašantys parametrai priklauso nuo atomo pilnutinio judėjimo kiekio momento orientacijos fotono judėjimo krypties atžvilgiu [25]. Šių parametrų priklausomybė nuo atomo pilnojo judėjimo kiekio momento krypties vadinama magnetiniu dichroizmu [20, 26]. Laan ir kt. [94, 95] magnetinį dichroizmą naudojo aprašydami fotoemisiją iš lokalizuotų magnetinių sistemų. Jis buvo pamatuotas O [47], Cr [12, 96], Fe [19], Eu [97] atomų fotojonizacijai. Grum-Grzhimailo [98] teoriškai parodė, kad spinduliuotės skleidinio nedipoliniai nariai gali būti žymūs elektronų iš Na sužadinto 3p sluoksnio fotojonizacijai, kai fotono energija artima Cooper minimumui fotojonizacijos skerspjūvyje, t.y. apie 10 eV.

### 2.2.1 Fotojonizacijos skerspjūvio išraiškos suradimas

Nagrinsime šitokią atomo sužadinimo spinduliuote procesą:

$$A(\alpha_0 J_0 M_0) + h\nu(\hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0) \rightarrow A^+(\alpha_1 J_1 M_1) + e^-(\mathbf{p}, sm_s). \quad (44)$$

Laikome, kad lygmenų smulkioji sandara daug didesnė už hipersmulkiają sandarą, į kurią buvo atsižvelgta [31] straipsnyje. Spinduliuotė aprašoma banginiu skaičiumi  $\mathbf{k}_0$  ir poliarizacijos vienetiniu vektoriumi  $\hat{\epsilon}_q$ , kur  $q = \pm 1$  – spirališkumas. Fotoelektronas aprašomas judėjimo kiekiu  $\mathbf{p}$  ( $p = m_e v = \sqrt{2\varepsilon m_e}$ ,  $v$  – elektrono greitis,  $\varepsilon$  – energija), sukiniu  $s$  ir jo projekcija  $m_s$  į pasirinktą laboratorinę  $z$  ašį.

Pagal Fermio aukso taisyklę [68] (44) tikimybė yra:

$$W = 2\pi \langle \alpha_1 J_1 M_1, \mathbf{p} m_s | H' | \alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rangle \langle \alpha_1 J_1 M_1, \mathbf{p} m_s | H' | J_0 M_0 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rangle^*. \quad (45)$$

Čia  $H'$  – atomo elektronų sąveikos su fononu operatorius. (44) proceso skerspjūvį surastume, jeigu tikimybę (45) padalintume iš fotonų srauto tankio [99].

Fotono ir elektrono banginės funkcijos apibrėžtos Dekarto, o atomo ir jono – sferinėje koordinatų sistemose. Skerspjūvio išraiškai surasti reikia visas funkcijas turėti vienoje koordinatų sistemoje. Patogiaus pasirinkti sferinę koordinatų sistemą, nes atomas ir jonas yra sudėtingesnės daugelio dalelių sistemos, kurioms būdingas sferinis dalelių judėjimas apie koordinatų sistemos

centre esantį branduolį. Kvantinėje mechanikoje dalelės banginę funkciją galima atvaizduoti kitų funkcijų skleidiniu, jeigu pastarosios sudaro pilną funkcijų bazę [68]. Šiam tikslui puikiai tinka sferinės funkcijos. Fotonui pasinaudosime 1.12 skyriaus ir (2.10)–(2.13) formulėmis, o elektrono banginę funkciją skleisime sferinėmis funkcijomis

$$\begin{aligned} |\mathbf{p}m\rangle &= 4\pi \sum_{\lambda\mu} R_\lambda(r) Y_{\lambda\mu}(\hat{r}) Y_{\lambda\mu}^*(\hat{p}) \xi_m(\sigma) = \sum_{\lambda\mu} \sqrt{4\pi(2\lambda+1)} R_\lambda(r) C_\mu^{(\lambda)}(\hat{r}) Y_{\lambda\mu}^*(\hat{p}) \xi_m(\sigma) \\ &= \sum_{\lambda\mu} (2\lambda+1) R_\lambda(r) C_\mu^{(\lambda)}(\hat{r}) D_{\mu,0}^\lambda(\hat{p}) \xi_m(\sigma) \end{aligned} \quad (46)$$

Čia  $\xi_m(\sigma)$  – elektrono sukinio banginė funkcija,

$$R_\lambda^*(r) = i^\lambda \exp[i(\sigma_\lambda(p) + \delta_\lambda)] r^{-1} P(\varepsilon\lambda|r). \quad (47)$$

Išlėkusio į kontinuumą elektrono radialiosios banginės funkcijos  $P(\varepsilon\lambda|r)$ , normuotos į  $\delta(\varepsilon - \varepsilon')$ .

Jų asimptotika, kai  $r$  artėja į begalybę, yra:

$$P(\varepsilon\lambda|r \rightarrow \infty) \sim (\pi p)^{-1/2} \sin(pr - \lambda\pi/2 + Z_{ef} \ln(2pr)/p + \sigma_\lambda(p) + \delta_\lambda) \quad (48)$$

su kulonine faze

$$\sigma_\lambda(p) = \arg \Gamma(\lambda + 1 - i(Z_{ef} - 1)/p). \quad (49)$$

Efektinis branduolio krūvis yra  $Z_{ef} = Z - N + 1$ ,  $Z$  – branduolio krūvis,  $N$  – elektronų skaičius,  $p = (2\varepsilon)^{1/2}$  atominių vienetų,  $\varepsilon$  – fotoelektrono energija atominiais vienetais,  $\delta_\lambda$  – fazės poslinkis, atsirandantis dėl suderintinio lauko nuokrypio nuo kuloninio. Kartais (48) asimptotikos vardiklyje  $\sqrt{\pi}$  nebūna, todėl užrašant konstantas skerspjūvių išraiškose būtina į tai atsižvelgti. Sąryšis tarp tolydinio spektro radialiosios funkcijos normavimo į  $\delta(\varepsilon - \varepsilon')$  ir  $\delta(p - p')$  yra  $C_{\varepsilon\lambda} = C_{p\lambda}/\sqrt{p}$ , kur  $p = 2\pi k$ ,  $p$  – judėjimo kiekis,  $k$  – banginis skaičius.

Surasime pačią bendriausią poliarizuotų atomų fotojonizacijos skerspjūvio formulę, todėl numatysime galimybę matuoti reakcijos produktus bet kokia kryptimi. Perėjimui nuo banginės funkcijos, apibrėžtos laboratorinėje koordinačių sistemoje, prie banginės funkcijos atomo koordinačių sistemoje, naudojamos šuolio operatoriaus matriciniam elementu surasti, panaudosime (1.149) operaciją visų dalelių banginėms funkcijoms. Tuomet skerspjūvio (45) išraišką galime užrašyti

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p} s m_s)}{d\Omega} &= \pi \sum_{k, k', \lambda, \lambda', \tilde{M}_0, \tilde{q}, \tilde{M}_1, \tilde{m}_s, \mu, \tilde{M}'_0, \tilde{q}', \tilde{M}'_1, \tilde{m}'_s, \mu'} \\ &\times \langle \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 \lambda \mu \tilde{m}_s | Q_{\tilde{q}}^{(k)} | \alpha_0 J_0 \tilde{M}_0 \rangle D_{\tilde{M}_0 M_0}^{*J_0}(\hat{J}_1) D_{\tilde{q}q}^{*k}(\hat{k}_0) D_{\tilde{M}_1 M_1}^{J_1}(\hat{J}_1) D_{\mu 0}^\lambda(\hat{p}) D_{\tilde{m}_s m_s}^s(\hat{s}) \end{aligned}$$



$$\times \langle \alpha_1 J_1 \tilde{M}'_1 \lambda' \mu' \tilde{m}'_s | Q_{\hat{q}'}^{(k')} | \alpha_0 J_0 \tilde{M}'_0 \rangle^* D_{\tilde{M}'_0 M_0}^{J_0}(\hat{J}_1) D_{\hat{q}'}^{k'}(\hat{k}_0) D_{\tilde{M}'_1 M_1}^{*J_1}(\hat{J}_1) D_{\mu' 0}^{*\lambda'}(\hat{p}) D_{\tilde{m}_s m'_s}^{*s}(\hat{s}). \quad (50)$$

Skerspūvio išraiškai surasti panaudosime judėjimo kiekio momento grafinę techniką. Visos diagramos pateiktis 12 pav. ir 13 pav.  $C_1$  diagrama vaizduoja multipolinio šuolio operatoriaus matricinį elementą ir jam kompleksiskai jungtinį matricinį elementą laboratorinėje koordinačių sistemoje. Nupjautos Vignerio posūkių matricos nuo matricinio ir jam kompleksiskai jungtinio elementų pavaizduotos  $C_2$  diagramoje. Nupjovus  $C_2$  diagramas,  $C_1$  matriciniuose elementuose lieka atviros  $J_0, J_1, k, \lambda, s$  ir  $J_0, J_1, k', \lambda', s$  linijos, kurios uždaromos  $C_3$  diagramomis. Pasirinkta elektrono judėjimo kiekio  $\lambda$  ir  $s$  momentų sujungimo į rezultatinį  $j$  schema. Prijungus  $C_3$  apibendrintus Klebšo ir Gordano koeficientus prie  $C_1$  po  $C_2$  nupjovimo, gaunami submatriciniai elementai  $C_4$ , kurie jau yra invariantiški koordinačių sistemos pasukimo atžvilgiu. Likusios  $C_2$  ir  $C_3$  diagramos priklauso nuo koordinačių sistemos pasukimo. Tolimesni žingsniai analogiškai jau nagrinėtam atomo sužadavimo spinduliuote atvejui.  $D$  matricių sandaugas skleidžiame sferiniais tenzoriais  $T$  pagal (1.106) ir (1.107) formules, atsiradusius Klebšo ir Gordano koeficientus su varnele pažymėtomis projekcijomis ir  $C_3$  apibendrintus Klebšo ir Gordano koeficientus sumuojame, gaudami  $C_5$  diagramą. Ji vaizduoja ieškomo skerspūvio skleidimą sferiniais multipoliais. Tačiau orientaciją erdvėje aprašanti išraiška dar gali būti supaprastinta. Uždarome  $C_5$  diagramą apibendrintu Klebšo ir Gordano koeficientu, kuris yra toks pat, kaip ir  $C_7$ , tiktai be tenzorių  $T$ , ir gauname  $C_6$ . Dabar orientacijas erdvėje aprašo tiktai  $C_7$  diagrama. Belieka užrašyti galutinę (50) skerspūvio išraišką, pasinaudojant  $C_4, C_6$  ir  $C_7$  diagramomis,

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0, \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1, \mathbf{p} s m_s)}{d\Omega} &= \pi \sum_{k, \lambda, j, J, k', \lambda', j', J'} (2J+1)(2J'+1)(2\lambda+1) \\ &\times \langle \alpha_1(J_1), \epsilon \lambda s(j) J | | Q^{(k)} | | \alpha_0 J_0 \rangle \langle \alpha_1(J_1), \epsilon \lambda' s(j') J' | | Q^{(k')} | | \alpha_0 J_0 \rangle^* \\ &\times \sum_{\substack{K_0, K_r, K_1 \\ K_\lambda, K_s, K_j}}^{K_0, K_r, K_1} (-1)^{K_0+K_r} \begin{Bmatrix} J_0 & K_0 & J_0 \\ k' & K_r & k \\ J' & K & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_1 & K_1 & J_1 \\ j' & K_j & j \\ J' & K & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda' & K_\lambda & \lambda \\ s & K_s & s \\ j' & K_j & j \end{Bmatrix} \\ &\times [(2J_0+1)(2J_1+1)(2K_j+1)(2K+1)(2k+1)(2s+1)(2\lambda'+1)(2j'+1)(2j+1)]^{1/2} \\ &\times \left[ [T^{K_1} \times [T^{K_\lambda} \times T^{K_s}] K_j]^K \times [T^{K_0} \times T^{K_r}]^K \right]_0^0. \end{aligned} \quad (51)$$

(51) išraiškai suteiksime pavidalą, panašų į fotosužadavimo tikimybės (18),

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p} m_s)}{d\Omega} &= \pi \sum_{K_0, K_r, K_1, K_\lambda, K_s, K_j, K, k_1, k'_1} \mathcal{B}^{ph}(K_1, K_0, K_r, K_\lambda, K_s, K_j, K, k_1, k'_1) \\ &\times \sum_{N_0, N_r, N_1, N_\lambda, N_j, N, N_s} \begin{bmatrix} K_1 & K_j & K \\ N_1 & N_j & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_\lambda & K_s & K_j \\ N_\lambda & N_s & N_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K \\ N_0 & N_r & N \end{bmatrix} T_{N_1 N'_1}^{K_1}(J_1, J_1, M_1, M_1 | \hat{J}_1) \end{aligned}$$

$$\times T_{N_0}^{*K_0}(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) T_{N_r}^{*K_r}(k_1, k'_1, q | \hat{\mathbf{k}}_0) T_{N_s}^{K_s}(s, s, m_s | \hat{s}) \sqrt{4\pi} Y_{K_\lambda N_\lambda}(\hat{\mathbf{p}}), \quad (52)$$

kur

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^{ph}(K_1, K_0, K_r, K_\lambda, K_s, K_j, K, k_1, k'_1) &= \sum_{\lambda, j, \lambda', j', J'} (2J+1)(2J'+1)(-1)^{\lambda'} \\ &\times \langle \alpha_1 J_1 \varepsilon_1 \lambda(j) J || Q^{(k_1)} || \alpha_0 J_0 \rangle \langle \alpha_1 J_1 \varepsilon_1 \lambda'(j') J' || Q^{(k'_1)} || \alpha_0 J_0 \rangle^* \\ &\times [(2J_0+1)(2K_j+1)(2J_1+1)(2k_1+1)(2s+1)(2\lambda+1)(2\lambda'+1)(2j+1)(2j'+1)]^{1/2} \\ &\times \begin{bmatrix} \lambda & \lambda' & K_\lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} J_0 & K_0 & J_0 \\ k'_1 & K_r & k_1 \\ J' & K & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_1 & K_1 & J_1 \\ j' & K_j & j \\ J' & K & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda' & K_\lambda & \lambda \\ s & K_s & s \\ j' & K_j & j \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (53)$$

Kai fotojonizacija naudojama kaip pirmosios pakopos procesas, (52) truputį pasikeičia, nes joje turi būti susumuota neregistruojamų būsenų atžvilgiu. Tuomet atskiro multipolinio skleidimo pagal tarpines būsenas nario išraiška yra:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p} m_s)}{d\Omega} &= \pi \sum_{K_0, K_r, K_\lambda, K_s, K_j, K, k_1, k'_1} \mathcal{B}^{ph}(K_1, K_0, K_r, K_\lambda, K_s, K_j, K, k_1, k'_1) \\ &\times (2K_1+1)^{1/2} \sum_{N_0, N_r, N_\lambda, N_j, N, N_s} \begin{bmatrix} K_1 & K_j & K \\ N_1 & N_j & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_\lambda & K_s & K_j \\ N_\lambda & N_s & N_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K \\ N_0 & N_r & N \end{bmatrix} \\ &\times T_{N_0}^{*K_0}(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) T_{N_r}^{*K_r}(k_1, k'_1, q | \hat{\mathbf{k}}_0) T_{N_s}^{K_s}(s, s, m_s | \hat{s}) \sqrt{4\pi} Y_{K_\lambda N_\lambda}(\hat{\mathbf{p}}). \end{aligned} \quad (54)$$

Surastosis (52) ir (53) išraiškos yra bendriausios poliarizuotų atomų jonizacijos poliarizuotais fotonais išraiškos. Jas sumuojant neregistruojamų ir vidurkinant nepoliarizuotų būsenų atžvilgiu, galima surasti paprastesnes skerspjūvio išraiškas, aprašančias konkrečius eksperimentus.

### 2.2.2 Pilnutinis nepoliarizuoto atomo fotojonizacijos skerspjūvis

Nepoliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuota spinduliuote skerspjūvis – dažnai matuojamas ir skaičiuojamas dydis. Jam surasti reikia (52) išraišką vidurkinti atomo pradinės būsenos pilnutinio judėjimo kiekio momento ir spinduliuotės poliarizaciją aprašančių projekcijų ( $q = \pm 1$ ), sumuoti fotojono galinės būsenos pilnutinio judėjimo kiekio momento ir fotoelektrono sukinio projekcijų bei integruoti fotoelektrono išlėkimo iš atomo kampų atžvilgiu. Atlikę šiuos veiksmus, gauname

$$\begin{aligned} \sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) &= \frac{1}{2(2J_0+1)} \sum_{M_0, q, M_1, m_s} \int d\Omega \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p} m_s)}{d\Omega} \\ &= \frac{4\pi^2}{2J_0+1} \sum_k \frac{1}{2k+1} \mathcal{B}^{ph}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, k, k), \end{aligned} \quad (55)$$

kur

$$\mathcal{B}^{ph}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, k, k) = \sum_{\lambda, j, J} (2J + 1) |\langle \alpha_1 J_1, \varepsilon \lambda(j) J || Q^{(k)} || \alpha_0 J_0 \rangle|^2. \quad (56)$$

Elektrinės dipolinės spinduliuotės atveju  $k = 1$ , ir iš (54) seka gerai žinoma formulė

$$\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) = \frac{8\pi^2 \alpha E}{3(2J_0 + 1)} \sum_{\lambda, j, J} (2J + 1) |\langle \alpha_1 J_1, \varepsilon \lambda(j) J || r C^{(1)} || \alpha_0 J_0 \rangle|^2. \quad (57)$$

(57) formulė užrašyta elektrinio dipolinio šuolio operatoriaus ilgio forma. Fotono energija  $E$  matuojama atominiais vienetais. Jai surasti į (54) buvo įrašytos (2.11) ir (2.12) formulės. Iš (2.11) matyti, kad  $k = 1$  ir  $p = 0$  atveju ateina daugiklis  $i\sqrt{2k_0}$  prieš elektrinio dipolinio šuolio operatoriaus submatricinį elementą.

### 2.2.3 Submatriciniai elementai

Sakysime, kad atomo ir jono būsenos  $i$  aprašomos elektronų apvalkalo konfigūracija  $C_i$ , pilnutiniais orbitiniu  $L_i$  ir sukininiu  $S_i$  judėjimo kieki momentais, kurie susiejami į atstojamąjį judėjimo kiekio momentą  $J_i$ , kas reiškia, kad galioja  $LS$  ryšys. Branduolio sukinys  $I$  yra vienodas pradinei ir galinei būsenoms. Todėl būseną  $\alpha_i F_i$  galima užrašyti  $C_i L_i S_i (J_i) I F_i$ , o šuolio operatoriaus submatricinis elementas yra:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1 J_1, \varepsilon \lambda s(j) F || Q^{(k)} || \alpha_0 J_0 \rangle &= \sum_J (-1)^{F_1 - F_0 + j - k} \\ &\times \langle C_1 L_1 S_1, \varepsilon \lambda s(j) J || Q^{(k)} || C_0 L_0 S_0 J_0 \rangle (2J + 1) [(2F_0 + 1)(2F_1 + 1)]^{1/2} \\ &\times \left\{ \begin{matrix} j & F & F_1 \\ I & J_1 & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} k & F & F_0 \\ I & J_0 & J \end{matrix} \right\}, \end{aligned} \quad (58)$$

kur

$$\begin{aligned} \langle C_1 L_1 S_1, \varepsilon \lambda s(j) J || Q^{(k)} || C_0 L_0 S_0 J_0 \rangle &= \sum_{L, C'_1 L'_1 S'_1, C'_0 L'_0 S'_0} (-1)^{k + S_0 + J_0 + L} c(C_1 L_1 S_1, C'_1 L'_1 S'_1) \\ &\times c(C_0 L_0 S_0, C'_0 L'_0 S'_0) (2L + 1) [(2J_1 + 1)(2j + 1)(2S'_0 + 1)(2J_0 + 1)]^{1/2} \\ &\times \langle C'_1 L'_1 \varepsilon \lambda(L), S'_1 s(S'_0) || Q^{(k)} || C'_0 L'_0 S'_0 \rangle \left\{ \begin{matrix} L'_1 & S'_1 & J_1 \\ \lambda & s & j \\ L & S'_0 & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L'_0 & S'_0 & J_0 \\ J & k & L \end{matrix} \right\}. \end{aligned} \quad (59)$$

(59) išraiškoje panaudotos daugiakonfigūracinės tarpinio ryšio funkcijos

$$\phi(C_i L_i S_i J_i) = \sum_{C'_i L'_i S'_i} c(C_i L_i S_i, C'_i L'_i S'_i) \phi(C'_i L'_i S'_i J_i), \quad (60)$$

kur  $c(C_i L_i S_i, C'_i L'_i S'_i)$  – skleidimo koeficientai, o kvantiniai skaičius  $J_i$  yra geras, kas reiškia, kad energijos operatoriaus matrica diagonali  $J$  atžvilgiu.  $\langle C'_1 L'_1 \varepsilon \lambda(L), S'_1 s(S'_0) || Q^{(k)} || C'_0 L'_0 S'_0 \rangle$  submatricinio elemento išraiška priklauso nuo pradinės ir galinės konfigūracijų. Šarminių metalų ir boro grupės atomų vidinių sluoksnių fotojonizacijos atveju šių submatricinių elementų išraiškos yra Kupliauskienės straipsnyje [100]. Jame laikoma, kad pradinės ir galinės būsenų banginių funkcijų radialiosios orbitalės surastos nepriklausomai, todėl yra neortogonalios [101].

Kai pradinė būsena yra  $i = n_i l^{4l+2} n' l' L_0 S_0$  ir galinės būsenos  $f = n_f l^{4l+1} n'' l'' (L_1 S_1) \lambda_s L' S'$  radialiosios orbitalės skiriasi nuo pradinės būsenos, fotojonizacijos iš užpildyto sluoksnio elektriniame dipoliniame artinyje submatricinis elementas yra [100]:

$$\begin{aligned} \langle f || Q^{(1)} || i \rangle &= \delta(S_0, s) \delta(L_0, l') \langle n_f l | n_i l \rangle^{4l+1} \{ f^{(1)} \langle n'' l'' | n' l' \rangle \langle \varepsilon \lambda | R | n_i l \rangle \\ &+ f^{(2)} \langle \varepsilon \lambda | n' l' \rangle \langle n'' l'' | R | n_i l \rangle + f^{(3)} \langle \varepsilon \lambda | n_i l \rangle \langle n'' l'' | R | n' l' \rangle \\ &+ f^{(4)} \langle n'' l'' | n_i l \rangle \langle \varepsilon \lambda | R | n' l' \rangle \}. \end{aligned} \quad (61)$$

Čia

$$\begin{aligned} f^{(1)}(l^{4l+1} l'' (L_1 S_1), \lambda_s L' S', l^{4l+2} l' L_0 S_0) &= \delta(l'', l) \delta(S', S_0) (-1)^{l+L_0+L_1+1} \\ &\times \left[ \frac{(2L_1+1)(2L'+1)(2S_1+1)}{2(2l'+1)} \right]^{1/2} \left\{ \begin{array}{ccc} \lambda & 1 & l \\ L_0 & L_1 & L' \end{array} \right\}, \end{aligned} \quad (62)$$

$$\begin{aligned} f^{(2)}(l^{4l+1} l'' (L_1 S_1), \lambda_s L' S', l^{4l+2} l' L_0 S_0) &= \delta(\lambda, l') \delta(S', S_0) \delta(S_1, 0) \delta(L_1, 1) \\ &\times \delta(S_1, 0, s) \delta(L_0, L', L_1) \left[ \frac{2(2L'+1)}{(2L_1+1)(2l'+1)} \right]^{1/2}, \end{aligned} \quad (63)$$

$$\begin{aligned} f^{(3)}(l^{4l+1} l'' (L_1 S_1), \lambda_s L' S', l^{4l+2} l' L_0 S_0) &= -\delta(\lambda, l) \delta(S', S_0) \delta(l'', L') \\ &\times \left[ \frac{(2L_1+1)(2S_1)}{2(2l'+1)(2l''+1)} \right]^{1/2}, \end{aligned} \quad (64)$$

$$\begin{aligned} f^{(4)}(l^{4l+1} l'' (L_1 S_1), \lambda_s L' S', l^{4l+2} l' L_0 S_0) &= \delta(l'', l) \delta(S', S_0) \delta(\lambda, L') \\ &\times \delta(L_1, 0) \delta(S_1, 0) \delta(S_0, 0, s) \left[ \frac{2(2l+1)}{2l'+1} \right]^{1/2}, \end{aligned} \quad (65)$$

$$\langle nl | R | n' l' \rangle = (l || C^{(1)} || l') \int_0^\infty P(nl|r) R P(n' l' | r) dr, \quad (66)$$

kur  $R = r$  ilgio formos ir  $R = d/dr - [l(l+1) - l'(l'+1)]/2r$  greičio formos elektrinio dipolinio šuolio operatoriaus radialiosios dalys. Kartais būna patogų šuolio operatoriaus radialųjį integralą (66), kai elektronas peršoka į tolydinį spektrą, apibrėžti šitaip:

$$\langle nl | R | \varepsilon \lambda \rangle = (l || C^{(1)} || \lambda) i^\lambda \exp[i(\sigma_\lambda + \delta_\lambda)] \int_0^\infty P(nl|r) R P(\varepsilon \lambda | r) dr. \quad (67)$$

Čia  $\sigma_\lambda$  ir  $\delta_\lambda$  - sklaidos fazės.

Submatricinis elementas šuoliui  $nl^N(L_1S_1)n'l'L_0S_0 \rightarrow nl^N L_1S_1\varepsilon\lambda LS$  yra:

$$\begin{aligned} & \langle nl^N(L_1S_1)\varepsilon\lambda LS || Q^{(1)} || nl^N(L_1S_1)n'l'L_0S_0 \rangle \\ & = \delta(S, S_0)(-1)^{L_1+l'+L_0}\sqrt{2L+1}\langle n'l'|R|\varepsilon\lambda \rangle \begin{Bmatrix} l' & L_0 & L_1 \\ L & \lambda & 1 \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (68)$$

Fotojonizacijai iš ekvivalentinių elektronų sluoksnio  $nl^N(L_0S_0) \rightarrow nl^{N-1}L_1S_1\varepsilon\lambda LS$  submatricinis elementas yra:

$$\begin{aligned} & \langle nl^{N-1}L_1S_1\varepsilon\lambda LS || Q^{(1)} || nl^N L_0S_0 \rangle \\ & = \delta(S, S_0)(-1)^{L_1+l+l_0}\sqrt{N(2L+1)}\langle nl|R|\varepsilon\lambda \rangle \begin{Bmatrix} l & L_0 & L_1 \\ L & \lambda & 1 \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (69)$$

#### 2.2.4 Fotoelektonų iš nepoliarizuoto atomo kampinis pasiskirstymas

Norint surasti fotoelektonų iš nepoliarizuotų atomų kampinį pasiskirstymą aprašanti skerspjūvi reikia (52) išraišką sumuoti elektrono sukinio ir jono būsenų ir vidurkinti atomo pradinės būsenos atžvilgiu. Iš šio sumavimo seka, kad  $K_0 = N_0 = K_1 = N_1 = K_s = N_s = 0$ ,  $K = K_j = K_\lambda = K_r$  ir  $N = N_j = N_\lambda = N_r$ . Sutapatiname laboratorinę kvantavimo ašį su krentančios spinduliuotės kryptimi, kas reiškia, kad  $Y_{K_r N_r}(0, 0) = [(2K_r + 1)/4\pi]^{1/2}\delta(N_r, 0)$ . Pažymėkime multipolio skleidinio rangus  $K$  ir užrašykime galutinę išraišką:

$$\begin{aligned} & \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 \hat{\varepsilon}_q \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p})}{d\Omega} = \frac{1}{2J_0 + 1} \sum_{M_0, M_1, m_s} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\varepsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p} m_s)}{d\Omega} \\ & = \pi \sum_{K, k, k'} \mathcal{B}^{ph}(0, 0, K, K, 0, K, K, k, k') \frac{2K + 1}{(2J_0 + 1)\sqrt{2k + 1}} (-1)^{k'-q} \begin{bmatrix} k & k' & K \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} P_K(\cos \theta). \end{aligned} \quad (70)$$

Nepoliarizuotos ir apskritimiškai poliarizuotos elektrinės dipolinės spinduliuotės atveju ( $k = k' = 1, K = 0, 2$ ) gauname gerai žinomą paprastą skerspjūvio išraišką:

$$\frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p})}{d\Omega} = \frac{\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)}{4\pi} \left[ 1 - \frac{1}{2}\beta P_2(\cos(\theta)) \right], \quad (71)$$

kur

$$\beta = \frac{5\sqrt{2}\mathcal{B}^{ph}(0, 0, 2, 2, 0, 2, 2, 1, 1)}{\mathcal{B}^{ph}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1)} \quad (72)$$

yra fotoelektonų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras.

Jonizacijai tiesinės poliarizacijos spinduliuote daugiklis prieš  $\beta$  (71) formulėje yra ne  $-1/2$ , bet  $+1$ . Kampas  $\theta$  matuojamas nuo spinduliuotės krypties nepoliarizuotos ir apskritiminės ir nuo elektrinio lauko  $\mathbf{E}$  krypties tiesinės poliarizacijos atveju.

### 2.2.5 Fotojono poliarizacija

Kadangi fotojono poliarizacijos tiesiogiai išmatuoti negalima, ją aprašančio skerspjūvio ieškosime iš fotojonizacijos kaip pirmojo daugiapakopio proceso etapo skerspjūvio išraiškos (54). Panauginėsime nepoliarizuotų ir poliarizatuotų atomų fotojonizacijos atvejus.

Kai atomas nepoliarizuotas, o fotoelektronai neregistruojami, reikia (54) vidurkinti atomo būsenų, sumuoti fotoelektrono sukinio projekcijų ir intergruoti fotoelektrono kampų atžvilgiu. Gauname, kad  $K_0 = N_0 = K_s = N_s = K_\lambda = N_\lambda = K_j = N_j = 0$ , o  $K_r = K_1 = K$ . Kvantavimo ašimi parinkus spinduliuotės kryptį gaunama, kad  $N_r = N_1 = N = 0$ . Įrašius šias vertes į (54), galima užrašyti:

$$\begin{aligned} \sigma(\alpha_0 J_0 \hat{e}_q \rightarrow \alpha_1 J_1) &= \frac{1}{2J_0 + 1} \sum_{M_0, m_s, K_1, N_1} \int d\Omega \frac{d\sigma_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p} m_s)}{d\Omega} \\ &= \frac{4\pi^2}{2J_0 + 1} \sum_{K_1, k, k'} (-1)^{k'-q} \frac{2K_1 + 1}{\sqrt{2k + 1}} \begin{bmatrix} k & k' & K_1 \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \mathcal{B}^{ph}(K_1, 0, K_1, 0, 0, 0, K_1, k, k'). \end{aligned} \quad (73)$$

Ši išraiška supaprastėja elektrinės dipolinės spinduliuotės atveju, kai  $k = k' = 1$ , o  $K_1 = 0, 1, 2$ :

$$\sigma(\alpha_0 J_0 \hat{e}_q \rightarrow \alpha_1 J_1) = \sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) \left[ 1 + \sum_{K>0} A_K \right], \quad (74)$$

kur

$$A_K = \frac{B(K)}{B(0)}, \quad (75)$$

$$B(K) = \frac{2K + 1}{\sqrt{3}} (-1)^{1-q} \begin{bmatrix} 1 & 1 & K \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \mathcal{B}^{ph}(K, 0, K, 0, 0, 0, K, 1, 1). \quad (76)$$

Kai  $K = 1$ , fotojonas yra orientuotas, o  $K = 2$  – išrikiuotas.

Kai fotojonizuojamas poliarizuotas atomas, fotojono būseną priklauso nuo atomo pilnutinio judėjimo kiekio momento  $J_0$  orientacijos spinduliuotės krypties atžvilgiu. Norint surasti fotojono poliarizaciją aprašančio skerspjūvio išraišką, reikia (54) integruoti fotoelektrono kampų ir sumuoti jo sukinio projekcijų atžvilgiu. Gauname, kad  $K_s = N_s = K_\lambda = N_\lambda = K_j = N_j = 0$ . Įrašome jas į (54), kvantavimo ašimi parenkame spinduliuotės sklaidimo kryptį. Skerspjūvio multipolinio skleidimo atskiro nario išraiška yra:

$$\begin{aligned} \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_q \rightarrow \alpha_1 J_1) &= \frac{1}{2J_0 + 1} \sum_{m_s, K_1, N_1} \int d\Omega \frac{d\sigma_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p} m_s)}{d\Omega} \\ &= 4\pi^2 \sum_{K_0, K_r, k, k'} \mathcal{B}^{ph}(K_1, K_0, K_r, 0, 0, 0, K_1, k, k') \left[ \frac{4\pi(2K_1 + 1)(2K_r + 1)}{(2k + 1)(2J_0 + 1)} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ N_1 & 0 & N_1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\times (-1)^{k'-q} \begin{bmatrix} k & k' & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} (-1)^{J_0-M_0} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_0 N_1}^*(\theta_A, \phi_A). \quad (77)$$

Čia  $\theta_A$  ir  $\phi_A$  – atomo judėjimo kiekio momento polinis ir azimutinis kampai, matuojami nuo spinduliuotės sklidimo krypties.

(77) išraiška supaprastėja elektrinės dipolinės spinduliuotės atveju, kai  $J_0$  nukreiptas spinduliuotės sklidimo kryptimi:

$$\begin{aligned} \sigma_{K_1 0}(\alpha_0 J_0 M_0 = J_0 \hat{e}_q \rightarrow \alpha_1 J_1) &= 4\pi^2 \sum_{K_0, K_r} \mathcal{B}^{ph}(K_1, K_0, K_r, 0, 0, 0, K_1, 1, 1) (-1)^{k'-q} \\ &\times \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \left[ \frac{(2K_0+1)(2K_1+1)(2K_r+1)}{3(2J_0+1)} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ J_0 & -J_0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (78)$$

Šiuo atveju skerspjūvis nelygus nuliui tik tuomet, kai  $K_0 + K_r + K_1$  yra lyginis skaičius.

(77) išraišką galima perrašyti ir šitaip:

$$\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_q \rightarrow \alpha_1 J_1) = \sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) \left[ 1 + \sum_{K_1 > 0} A_{K_1}(\theta_A, \phi_A) \right], \quad (79)$$

kur dipolinės spinduliuotės atveju  $A_2(\theta_A, \phi_A)$  vadinamas diferencialiniu rikiavimo parametru.

Jis yra:

$$\begin{aligned} A_{K_1 > 0}(\theta_A, \phi_A) &= \frac{\pi}{\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)} \sum_{K_0, K_r, k, k'} \mathcal{B}^{ph}(K_1, K_0, K_r, 0, 0, 0, K_1, k, k') \\ &\quad \left[ \frac{4\pi(2K_1+1)(2K_r+1)}{(2k+1)(2J_0+1)} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ N_1 & 0 & N_1 \end{bmatrix} \\ &\times (-1)^{k'-q} \begin{bmatrix} k & k' & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} (-1)^{J_0-M_0} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_0 N_1}^*(\theta_A, \phi_A). \end{aligned} \quad (80)$$

### 2.2.6 Poliarizuoto atomo pilnutinis fotojonizacijos skerspjūvis

Atomo fotojonizacijos pilnutinis skerspjūvis priklauso nuo atomo poliarizacijos. Jo vertės skirtingos kairinės ir dešinės apskritiminės poliarizacijos spinduliuotei. Pilnutiniam skerspjūviui surasti reikia (52) sumuoti fotojono ir fotoelektrono sukinio projekcijų ir integruoti fotoelektrono kampų atžvilgiu, nes fotoelektrono sukinio poliarizacija nefiksuoja, ir registruojami visi fotoelektronai. Gauname, kad  $K_1 = N_1 = K_\lambda = N_\lambda = K_s = N_s = K_j = N_j = K = N = 0$  ir  $K_0 = K_r$ . Sutapatinus kvantavimo ašį su spinduliuotės kryptimi,  $N_0 = N_r = 0$ , o  $Y_{K_0 0}(\theta_A, \phi_A) = [(2K_0+1)/4\pi]^{1/2} P_{K_0}(\cos \theta_A)$ , kur  $\theta_A$  matuojamas nuo spinduliuotės krypties. Tuomet galima užrašyti:

$$\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_q \rightarrow \alpha_1 J_1) = 4\pi^2 \sum_{K_r, k, k'} \mathcal{B}^{ph}(0, K_r, K_r, 0, 0, 0, 0, k, k') (-1)^{K_r+J_0-M_0+k'-q}$$

$$\times \left[ \frac{4\pi(2K_0 + 1)}{(2k + 1)(2K_r + 1)(2J_0 + 1)} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_r \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k & k' & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} P_{K_r}(\cos \theta_A). \quad (81)$$

Santykinis skirtumas tarp skerspjūvių, jonizuojant dešininės ir kairinės apskritiminės poliarizacijos spinduliuote, vadinamas apskritiminiu dichroizmu ir apibrėžiamas šitaip:

$$\Delta_c = \frac{I(q) - I(-q)}{I(q) + I(-q)}, \quad (82)$$

kur intensyvumas tiesiog proporcingas fotojonizacijos skerspjūviui  $I(q) = C\sigma(\alpha_0 J_0 \hat{e}_q \rightarrow \lambda_1 J_1)$ , o  $C$  – proporcingumo konstanta. Įrašome skerspjūvio išraiškas (81) į (82). Kadangi

$$\begin{aligned} (-1)^{k'-q} \begin{bmatrix} k & k' & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} &\mp (-1)^{k'+q} \begin{bmatrix} k & k' & K_r \\ -q & q & 0 \end{bmatrix} \\ &= (-1)^{k-q} \begin{bmatrix} k & k' & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} [1 \mp (-1)^{k+k'-K_r}], \end{aligned} \quad (83)$$

matome, kad į skaitiklį įneša indėlių nariai, kurių  $k + k' - K_r$  nelyginis, o į vardiklį – lyginis.

Elektrinės dipolinės spinduliuotės atveju  $k = k' = 1$ . Tuomet vardiklyje nelygūs nuliui nariai, kai  $K_r = 0, 2$ , o skaitiklyje –  $K_r = 1$ . Pastarasis galimas tik tai apskritiminės poliarizacijos spinduliuotei, todėl vadinamas apskritiminiu dichroizmu, nes darant eksperimentą su tiesinės poliarizacijos spinduliuote, poliarizuoto atomo fotojonizacijos skerspjūvyje jo pastebėti negalima.

Kai  $k = k' = 1$ ,

$$\Delta_c = \frac{\sqrt{3/2} \mathcal{B}^{ph}(0, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1) (-1)^{J_0 - M_0} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & 1 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} P_1(\cos \theta_A)}{\mathcal{B}^{ph}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1) / \sqrt{3} + \sqrt{5/2} \mathcal{B}^{ph}(0, 2, 2, 0, 0, 0, 0, 1, 1) \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & 2 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} P_2(\cos \theta_A)}. \quad (84)$$

Čia įrašyta  $\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} = 1/\sqrt{2}$  skaitiklyje ir  $\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} = 1/\sqrt{6}$  vardiklyje.

(84) išraiška supaprastėja, kai atomas poliarizuojamas išilgai spinduliuotės sklidimo krypties.

Tuomet  $P_1(\cos 0) = P_2(\cos 0) = 1$ .

### 2.2.7 Fotoelektronų kampinis pasiskirstymas poliarizuotam atomui

Poliarizuotų atomų fotojonizacijos diferencialinio skerspjūvio priklausomybę nuo atomo poliarizacijos lengviausia pastebėti matuojant skirtumą tarp skerspjūvių dviem skirtingoms atomo ar spinduliuotės poliarizacijoms. 2.2.6 skirsnyje matėme, kad net pilnutinis skerspjūvis priklauso nuo spinduliuotės apskritiminės poliarizacijos. Diferencialinis skerspjūvis atveria daugiau



galimybių. Matuojant fotoelektronų iš poliarizuotų atomų kampinį pasiskirstymą, galima nustatyti šitokius reiškinius [20]:

1. Fotoelektronų kampinio pasiskirstymo apskritiminį dichroizmą (CDAD). Matuojama fotoelektronų intensyvumų skirtumas, jonizuojant kairinės ir dešinės apskritiminės poliarizacijos spinduliuote.
2. Fotoelektronų kampinio pasiskirstymo tiesinį dichroizmą (LDAD). Matuojamas fotojonizacijos skerspjuvių, kai jonizuojama dviem statmenomis kryptimis tiesiškai poliarizuota spinduliuote, skirtumas.
3. Fotoelektronų kampinio pasiskirstymo apskritiminį magnetinį dichroizmą (CMDAD). Matuojama, naudojant fiksuotos poliarizacijos spinduliuotę, dviem priešingai poliarizuoto atomo kryptims.
4. Fotoelektronų kampinio pasiskirstymo tiesinį magnetinį dichroizmą (LMDAD). Matuojama, kai spinduliuotės poliarizacija fiksuota, o atomo poliarizacijos statmenos.

Surasime fotojonizacijos diferencialinio skerspjuvio išraišką, kuri tiktų visų tipų dichroizams. Sumuojame (52) nematuojamų būsenų  $M_1$  ir  $m_s$  atžvilgiu. Gauname, kad  $K_1 = N_1 = K_s = N_s = 0$ ,  $K_\lambda = K_j = K$ ,  $N_\lambda = N_j = N$ . Įrašę šias vertes į (52), užrašome diferencialinio skerspjuvio išraišką:

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{P})}{d\Omega} &= 4\pi^2 \sum_{K_0, K_r, K_\lambda, k, k'} \mathcal{B}^{ph}(0, K_0, K_r, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_\lambda, k, k') \\
&\times \sum_{N_0, N_r, N_\lambda} \left[ \frac{4\pi}{(2J_0 + 1)(2k + 1)} \right]^{1/2} (-1)^{J_0 - M_0 + k - q} \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_\lambda \\ N_0 & N_r & N_\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} \\
&\times \begin{bmatrix} k & k' & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} Y_{K_\lambda N_\lambda}(\theta, \phi) Y_{K_0 N_0}^*(\theta_A, \phi_A) Y_{K_r N_r}^*(\theta_0, \phi_0). \tag{85}
\end{aligned}$$

Čia  $\theta_0$  ir  $\phi_0$ ,  $\theta$  ir  $\phi$ ,  $\theta_A$  ir  $\phi_A$  yra atitinkamai spinduliuotės sklidimo (arba elektrinio vektoriaus  $\mathbf{E}$ ), fotoelektrono išlėkimo ir atomo judėjimo kiekio momento  $J$  kryptių polinis ir azimutinis kampai, matuojami nuo laboratorinės  $z$  ašies krypties. Šią ašį sutapatinus su spinduliuotės kryptimi,  $Y_{K_r N_r}(0, 0) = [(2K_r + 1)/4\pi]^{1/2} \delta(N_r, 0)$  ir  $N_0 = N_\lambda$ . tuomet (85) išraiškoje triguba suma pagal sklidimo rangų projekcijas virsta vienguba, o pati išraiška supaprastėja.

Matome, kad diferencialinio skerspjuvio (85) išraiška yra sudėtinga. Visi minėti dichrozmo atvejai dipolinės spinduliuotės atveju išnagrinėti Cherepkov ir kt. straipsnyje [20], naudojant

tankio matricos techniką. Į nedipolinių narių indėlių CMDAD ir LMDAD atsižvelgė Grum-Grzhimailo [98], skaičiuodamas Na atomo  $3p^{3/2}$  poliarizuotoje būsenoje fotojonizaciją. Schulz ir kt. [97] LMDAD nagrinėjo europio 4d sluoksnio fotojonizacijai. Tačiau tokias pat išraiškas galima gauti ir startuojant nuo (82) formulės.

Pavyzdžio dėlei surasime fotoelektronų kampinio pasiskirstymo apskritiminio dichrozmo išraišką. Kaip matėme iš (82), čia matuojama fotoelektronų intensyvumas įvairiais kampais dešininės ir kairinės poliarizacijos spinduliuotės atveju.  $\Delta_c$  surandamas į (82) įrašant (85) ir laikant, kad  $k = k' = 1$  bei  $z$  ašį sutapatinant su spinduliuotės kryptimi. Skaitiklyje lieka nariai su  $K_r = 1$ , o vardiklyje –  $K_r = 0, 2$ . Gauname, kad

$$I(q) - I(-q) = \frac{8\pi^2}{\sqrt{2J_0 + 1}} \sum_{K_0, K_\lambda} \mathcal{B}^{ph}(0, K_0, 1, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_\lambda, 1, 1) \sum_{N_0} \begin{bmatrix} K_0 & 1 & K_\lambda \\ N_0 & 0 & N_0 \end{bmatrix} \\ \times (-1)^{J_0 - M_0 + 1 - q} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} Y_{K_\lambda N_0}(\theta, \phi) Y_{K_0 N_0}^*(\theta_A, \phi_A). \quad (86)$$

Parinkus atomo poliarizacijos kryptį išilgai  $z$  ašies, CDAD parametro išraiška yra šitokia:

$$\Delta_c = \frac{\sum_{K_\lambda} B(1, K_\lambda) P_{K_\lambda}(\cos \theta)}{\sum_{K_\lambda} [B(0, K_\lambda) + B(2, K_\lambda) P_{K_\lambda}(\cos \theta)]}, \quad (87)$$

kur

$$B(K, K_\lambda) = (-1)^{1-q} \sum_{K_0} \frac{[(2K + 1)(2K_\lambda + 1)]^{1/2}}{4\pi} \mathcal{B}^{ph}(0, K_0, K, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_\lambda, 1, 1) \\ \times \begin{bmatrix} K_0 & K & K_\lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ J_0 & -J_0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ q & -q & 0 \end{bmatrix}. \quad (88)$$

$B(K, K_\lambda)$  nelygus nuliui, kai  $K + K_0 + K_\lambda$  yra lyginis skaičius. Žinant, kad  $|\lambda - \lambda'| \leq K_\lambda \leq \lambda - \lambda'$  visuomet lyginis skaičius, skaitiklyje nelygūs nuliui nariai, kuriuose  $K_0$  nelyginis, nes  $K = 1$ , o vardiklyje –  $K_0$  lyginis, nes  $K$  lygus 0 ir 2.

### 2.2.8 Fotoelektrono sukinio poliarizacija

Nagrinėsime fotoelektrono iš nepoliarizuoto atomo sukinio poliarizaciją, kuri nusakoma poliarizacijos laipsniu:

$$P^q = \frac{\sigma(m_s = +1/2) - \sigma(m_s = -1/2)}{\sigma(m_s = +1/2) + \sigma(m_s = -1/2)}, \quad (89)$$

kur  $\sigma(m_s) = \sigma(\alpha_0 J_0 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p} m_s)$ . Jį patogiu matuoti trimis elektrono sukinio orientacijos atžvilgiu sklaidos plokštumos kryptimis. Sklaidos plokštuma brėžiama per fotono ir fotoelektrono kryptis per koordinatinių sistemos pradžia.

Pirmieji nagrinėję fotoelektrono poliarizaciją teoretikai įvedė tris parametrus  $\xi, \delta, \gamma$ , kurie surandami panaudojant trimis minėtomis kryptimis išmatuotus poliarizacijos laipsnius [24, 46, 102]. Jie surandami iš poliarizacijos laipsnio formulių.

a) Elektrono sukinio kryptis statmena elektrono kryptčiai ir sklaidos plokštumai:

$$P^q(trans \perp, \theta) = \frac{-2\xi_q \sin 2\theta}{1 + \beta_q P_2(\cos \theta)}, \quad (90)$$

kur

$$\xi_q = \begin{cases} \xi & q = 0 \\ -\frac{1}{2}\xi & q = \pm 1 \end{cases}, \quad (91)$$

$$\beta_q = \begin{cases} \beta & q = 0 \\ -\frac{1}{2}\beta & q = \pm 1 \end{cases}, \quad (92)$$

$\beta$  – elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras, elektrono sukinio orientacijos azimutinis  $\theta_s$  ir polinis  $\phi_s$  ir elektrono judėjimo krypties azimutinis  $\theta$  ir polinis  $\phi$  kampai atžvilgiu spinduliuotės krypties yra:  $\theta_s = \theta$ ,  $\phi_s = \pi/2$ ,  $\phi = \phi/2$ ,  $\phi_s = \phi$ .

b) Elektrono sukinio kryptis statmena elektrono kryptčiai, bet lygiagreti sklaidos plokštumai

$$P^{q=\pm 1}(trans||, \theta) = -sign q \frac{\delta \sin \theta}{1 - \frac{1}{2}\beta P_2(\cos \theta)}, \quad (93)$$

kur  $\theta_s = \theta + \pi/2$ ,  $\phi = \pi/2$  ir  $\phi_s = \phi/2$ .

c) Elektrono sukinio kryptis lygiagreti elektrono judėjimo kryptčiai:

$$P^{q=\pm 1}(long, \theta) = sign q \frac{\gamma \cos \theta}{1 - \frac{1}{2}\beta P_2(\cos \theta)}, \quad (94)$$

kur  $\theta_s = \theta$ ,  $\phi = \phi/2$  ir  $\phi_s = \phi/2$ .

Parametrams  $\xi, \delta, \gamma$  surasti reikalinga  $d\sigma(m_s) = d\sigma(\alpha_0 J_0 \hat{e}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p} m_s) / d\Omega$  išraiška. Kadangi atomas nepoliarizuotas, o jono būsenos neregistruojamos, (52) sumuojama  $M_0$  ir  $M_1$  bei vidurkinama pradinių būsenų atžvilgiu, t.y. dalinama iš  $2J_0 + 1$ . Gaunama, kad  $K_0 = N_0 = K_1 = N_1 = 0$ ,  $K_r = K_j = K$ . Įrašius jas į (52), parinkus koordinačių  $z$  ašį išilgai spinduliuotės krypties ir apsiribojus elektrinės dipolinės spinduliuotės atveju, gaunamas elektrono poliarizaciją aprašantis skerspjūvis:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 \hat{e}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p} m_s)}{d\Omega} &= 4\pi^2 \sum_{K_r, K_\lambda, K_s} \mathcal{B}^{ph}(0, 0, K_r, K_\lambda, K_s, K_r, K_r, 1, 1) \\ &\times \sum_N (-1)^{1-q+s-m_s} \left[ \frac{2K_r + 1}{3(2s + 1)} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} K_\lambda & K_s & K_r \\ N & -N & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s & s & K_s \\ m_s & -m_s & 0 \end{bmatrix} \\ &\times Y_{K_s - N}(\theta_s, \phi_s) Y_{K_r N}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (95)$$

Iš (95) matyti, kad galimos tikrai  $K_r = 0, 1, 2$ ,  $K_s = 0, 1$  ir  $K_\lambda$  lyginės vertės. Įrašome (95) į (89) ir, pasinaudoję ( $s = m_s = 1/2$ )

$$\begin{aligned} (-1)^{s-m_s} \begin{bmatrix} s & s & K_s \\ m_s & -m_s & 0 \end{bmatrix} &\mp (-1)^{s+m_s} \begin{bmatrix} s & s & K_s \\ -m_s & m_s & 0 \end{bmatrix} \\ &= (-1)^{s-m_s} \begin{bmatrix} s & s & K_s \\ m_s & -m_s & 0 \end{bmatrix} [1 \mp (-1)^{2m_s+s+s-K_s}], \end{aligned} \quad (96)$$

kuris rodo, kad skaitiklyje lieka nariai su  $K_s = 1$ , o vardiklyje –  $K_s = 0$ , gauname šitokią poliarizacijos laipsnio išraišką:

$$P^q = \frac{4\pi \sum_{K_r, K_\lambda, N} B(K_r, K_\lambda, 1, N) Y_{1-N}(\theta_s, \phi_s) Y_{K_\lambda N}(\theta, \phi)}{\sum_{K_r} (2K_r + 1) B(K_r, K_\lambda, 0, 0) P_{K_r}(\cos \theta)}. \quad (97)$$

Į (97) įrašius kampų vertes galima surasti parametrų  $\xi, \delta, \gamma$  išraiškas. Jos pateiktos Kupliauskienės ir kt. straipsnyje [31].

## 2.2.9 Skaičiavimo kompiuterinė programa ir kai kurie rezultatai

### Programa PHION

Poliarizacijos ir kampinio pasiskirstymo parametrams apskaičiuoti reikalingi submatriciniai elementai. Aptarsime programą, skaičiuojančią šiuos elementus. Jos blokinė schema pavaizduota 14 pav.

Programa PHION skaičiuoja fotojonizacijos skerspjūvius, submatricinius elementus ir sklaidos fazes vienkonfigūraciniame artinyje šiems šuoliams:

$$\prod_{n_0 l_0} (n_0 l_0^{4l_0+2}) n l^N (L_{01} S_{01}) n' l' L_0 S_0 + h\nu \rightarrow \prod_{n_0 l_0} (n_0 l_0^{4l_0+2}) n l^N L_{01} S_{01} + e^1(\varepsilon\lambda), \quad (98)$$

$$\prod_{n_0 l_0} (n_0 l_0^{4l_0+2}) n l^N L_0 S_0 + h\nu \rightarrow \prod_{n_0 l_0} (n_0 l_0^{4l_0+2}) n l^{N-1} L_1 S_1 + e^1(\varepsilon\lambda), \quad (99)$$

$$\prod_{n_0 l_0} (n_0 l_0^{4l_0+2}) n l^{4l+2} n' l' L_0 S_0 + h\nu \rightarrow \prod_{n_0 l_0} (n_0 l_0^{4l_0+2}) n l^{4l+1} n'' l'' L_1 S_1 + e^1(\varepsilon\lambda). \quad (100)$$

Kilminiai koeficientai įvedami papildomai, o elektronas gali būti atplėšiamas nebūtinai iš išorinio ar subvalentinio sluoksnio.

Paprogramė BEGIN įveda pradinis duomenis: fotoelektrono judėjimo kiekio momentą  $\lambda$ , jo energijų  $\varepsilon$  kiekį ir vertes, branduolio krūvį  $Z$ , radialiųjų orbitalių (ekvivalentinių elektronų sluoksnių) skaičių pradinėje ir galinėje konfigūracijose, kiekvieno sluoksnio  $nl$  ir elektronų skaičių  $N$  jame, pradinės ir galinės būsenos diskretinių elektronų radialiųjų orbitales, surastas su Hartrio ir Foko lygčių skaitmeninio sprendimo programa [103]. Paprogramės TS, FROBRI

ir LAGR6 naudojamos diskretinėms radialiosioms orbitalėms pervedi nuo logaritminio prie pastovaus integravimo žingsnio, kuris naudojamas šioje programoje tolydinio spektro radialiajai orbitalei surasti. Paprogramė VANDA generuoja vandeniliškas skaitmenines diskretinio spektro radialiąsias orbitales.

Paprogramė FOTO organizuoja tolydinio spektro radialiosios orbitalės suradimą ir fotojonizacijos skerspjūvio skaičiavimą. Trumpai aptarsime tolydinio spektro radialiųjų orbitalių skaičiavimą.

Elektrono, turinčio  $\varepsilon$  atominių vienetų energiją, judėjimas atomo ar jono kamieno potencialo lauke aprašomas suderintinio lauko lygtimi

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - 2\phi(\varepsilon\lambda|r) - \frac{\lambda(\lambda+1)}{r^2} + 2\varepsilon \right] P(\varepsilon\lambda|r) - \xi(\varepsilon\lambda|r) = 0, \quad (101)$$

kur  $P(\varepsilon\lambda|r)$  – ieškomoji elektrono tolydiniame spektre banginė funkcija, normuota į  $\delta(\varepsilon - \varepsilon')$ ,  $\phi(\varepsilon\lambda|r)$  – tiesioginė, o  $\xi(\varepsilon\lambda|r)$  – pakaitinė potencialo dalis, kurios aprašomos šitaip [2]:

$$\phi(\varepsilon\lambda|r) = \frac{Y(\varepsilon\lambda|r) - Z}{r}, \quad (102)$$

$$\xi(\varepsilon\lambda|r) = \frac{2}{r} \sum_{nl} \sum_k g_k(\varepsilon\lambda, nl) Y(\varepsilon\lambda, nl|r) P(nl|r), \quad (103)$$

o jose esantys radialieji integralai išreiškiami šitaip:

$$Y(\varepsilon\lambda|r) = \sum_{nl} [1 + \delta(\lambda, l)] \sum_k f_k(\varepsilon\lambda, nl) Y_k(nl, nl|r), \quad (104)$$

$$Y_k(\varepsilon\lambda, nl|r) = r^{-1} \int_0^r r_1^k P(\varepsilon\lambda|r_1) P(nl|r_1) dr_1 + r_1^{k+1} \int_r^\infty r_1^{-k-1} P(\varepsilon\lambda|r_1) P(nl|r_1) dr_1. \quad (105)$$

Čia  $f_k$  ir  $g_k$  – kampiniai koeficientai, kurie konfigūracijos vidurkiui apskaičiuojami pagal formules [2]:

$$f_0(nl, nl) = \frac{N_{nl}(N_{nl} - 1)}{2}, \quad (106)$$

$$f_k(nl, nl) = -\frac{N_{nl}(N_{nl} - 1)}{2(2l + 1)(4l + 1)} (l|C^{(k)}|l)^2, \quad k > 0, \quad (107)$$

$$f_0(nl, n'l') = N_{nl}N_{n'l'}, \quad (108)$$

$$f_k(nl, n'l') = 0, \quad k > 0, \quad (109)$$

$$g_k(nl, n'l') = -\frac{N_{nl}N_{n'l'}}{2(2l + 1)(2l' + 1)} (l|C^{(k)}|l')^2. \quad (110)$$

Lygtis (101) sprendžiama iteracijų metodu. Perskaičius iš nurodytos bylos skaitmenines funkcijas, pagal (102) ir (103) formules skaičiuojami tiesioginis ir pakaitinis potencialai. Tada

lygtis (101) sprendžiama Numerovo metodu, t.y. turint du pirmuosius funkcijos  $P(\varepsilon\lambda|r)$  taškus, likusieji taškai surandami iš sąryšių:

$$P_k = \frac{2(1 + \frac{5}{12}h^2F_{k-1}P_{k-1} - (1 - \frac{1}{12}h^2F_{k-2}) + \frac{1}{12}h^2(G_k - 10G_{k-1} + G_{k-2}))}{1 - \frac{h^2}{12}F_k}, \quad (111)$$

kur

$$F_k = 2\phi(\varepsilon\lambda|r_k) + \frac{\lambda(\lambda+1)}{r_k^2} - 2\varepsilon, \quad (112)$$

$$G_k = \xi(\varepsilon\lambda|r_k), \quad (113)$$

$h$  – žingsnis, kuriuo keičiamas funkcijos argumentas  $r$ .

Nulinio artinio sprendinys, apskaičiuotas be pakaitinio nario, panaudojamas pakaitiniam nariui apskaičiuoti, po to skaičiuojama pirmojo artinio funkcijos vertė ir t.t. Iteracijų procesas tęsiamas tol, kol dviejų gretimų iteracijų metu gautos funkcijos sutampa norimu tikslumu (lyginamos dvi labiausiai tarpusavyje besiskiriančios funkcijų vertės). Kiekvieno artinio sprendinys normuojamas R. Cowan [3] siūlomu būdu. Tam tikslui, užbaigus banginės funkcijos skaičiavimą iki atomo ribos, kai kamieno radialiosios orbitalės tampa pakankamai artimos nuliui, toliau skaičiavimas tęsiamas iki tol, kol dviejų gretimų pūpsnių amplitudės ima sutapti norimu tikslumu. Skaičiuojama be pakaitinio nario bei naudojantis asimptotinė tiesioginės potencialo dalies išraiška:

$$\phi(\varepsilon\lambda|r) = \frac{N-Z}{r}, \quad (114)$$

kur  $N$  – kamieno elektronų skaičius. Tada normuota banginė funkcija bus

$$P(\varepsilon\lambda|r) = \frac{A(r_0, \varepsilon) P''(\varepsilon\lambda|r)}{\sqrt{\pi\sqrt{2\varepsilon}} B}, \quad (115)$$

$$A(r_0, \varepsilon) = 1 - \frac{Z-N}{4\varepsilon r} \left[ 1 - \frac{5(Z-N)}{8\varepsilon r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2(Z-N)r} \right]. \quad (116)$$

Čia  $P''(\varepsilon\lambda|r)$  – nenormuota banginė funkcija, o  $B$  - jos amplitudė paskutinio maksimumo taške.

Paprogramė TOLFN pagal aprašytą algoritmą suranda tolydinio spektro radialiąją orbitaę  $P(\varepsilon\lambda|r)$ . Pirmieji du funkcijos taškai surandami Hartree metodu (paprogramė P1N) arba iš vandeniliškos funkcijos (paprogramė PIRMI)

$$P(\varepsilon\lambda|r) = Cr^{\lambda+1} \exp(-iqr) F\left(i\frac{Z}{q} + \lambda + 1; 2\lambda + 2; 2iqr\right), \quad (117)$$

$q = \sqrt{2\varepsilon}$ . Normavimo daugiklis, kai funkcija normuota į  $\delta(\varepsilon - \varepsilon')$ , yra:

$$C = \frac{2^{\lambda+1} q^\lambda \sqrt{Z}}{[1 - \exp(-2\pi Z/q)]^{1/2}} \frac{\prod_j^\lambda \left[ j^2 + \frac{Z^2}{q^2} \right]^{1/2}}{(2\lambda + 1)!}. \quad (118)$$

Kai  $\lambda = 0$ , sandauga pagal  $j$  lygi vienetui.

Esant  $\lambda \geq 3$ , pirmiesiems dviem taškams surasti naudojama paprogramė P2TSK, kuri, naudodama vandenilišką funkcijos pradžia, ieško tolimesnių taškų, kol suranda vertę, didesnę už nulį pageidaujama tikslumu ( $10^{-7}$ – $10^{-8}$ ). Taip reikia daryti todėl, kad funkcijos pradžia proporcinga  $r^{\lambda+1}$ , ir, esant didelėms  $\lambda$  vertėms, gana toli nuo pradžios funkcijos vertė būna artima nuliui.

Kitos paprogramės skaičiuoja:

TSPOSK, YKSK tiesioginį (102) ir PAMPO, YT pakaitinį (103) potencialus;

CKK, panaudodama DELTA ir FAKR, sferinės funkcijos (1.64) submatricinį elementą;

DQSF skaitmeninės funkcijos integralą pagal Simpsono formulę;

FAKR redukuotąjį faktorialą  $N!/10^N$ ;

KAMP įveda priklausančius nuo termo  $f_k$  ir  $g_k$  koeficientus;

KAMPK konfigūracijos vidurkio  $f_k$  ir  $g_k$  koeficientus;

LAGR6 interpoliuoja funkcijos vertes, naudodama šeštos eilės Lagranžo polinomą;

RLK elektrinio dipolinio šuolio operatoriaus ilgio formos integralą  $\langle nl|r^k|\varepsilon\lambda\rangle$ ;

RDK integralą  $\langle nl|d/dr|\varepsilon\lambda\rangle$ ;

SNL diskretinių radialiųjų orbitalių sanklotos integralą;

TS diskretinių funkcijų didžiausią taškų skaičių;

VANTOL vandenilišką tolydinę funkciją, reikalingą sklaidos fazei nustatyti (blokinėje schemoje neparodyta);

W6JA  $6j$  koeficientą (1.30).

Pradinei duomenys įvedami iš bylos FUNBAN.DAT, o rezultatai surašomi į bylas FUNBAN.REZ, SIGMA.REZ ir ANGLE.REZ. Byloje SIGMA.REZ yra skerspjuvių vertės, ANGLE.REZ – sklaidos fazės ir submatriciniai elementai, FUNBAN.REZ – visi rezultatai.

### Programa **PHOTO**

Ši programa, naudodama submatricinius elementus ir sklaidos fazes, surastus konkreitiems termams  $LS$ , skaičiuoja kampinio pasiskirstymo asimetrijos ir poliarizacijos parametrus tarpiniame ryšyje pagal pageidavimą termams  $LS$ , lygmenims  $LSJ$  ir, atsižvelgdama į branduolio sukinių,  $LS(J)IF$  būsenoms. Jos bokinė schema pavaizduota 15 pav.

Iš pradinių duomenų bylos VALDO perskaitomi tarpinio ryšio koeficientai, po to iš atskirų bylų, kurių vardai surašyti byloje VALDO,  $L_1S_1(\lambda_s)L'S'$  ir  $L_0S_0$  kvantiniai skaičiai, šuolio operatoriaus ilgio ir greičio formos submatriciniai elementai ir sklaidos fazės. Toliau pagal (58) ir (59)

formules (paprogramė MATRJ) apskaičiuojami nuo pilnutinių judėjimo kiekio meomentų  $F_0$  ir  $F_1$  arba  $J_0$  ir  $J_1$  priklausantys submatriciniai elementai. Nuo termo priklausantys submatriciniai elementai  $\langle C'_1 L'_1 \varepsilon \lambda, S'_1 s S'_0 || Q^{(1)} || C'_0 L'_0 S'_0 \rangle$  dar padauginami iš  $i^\lambda \exp(i\sigma_\lambda + i\delta_\lambda) \delta(LS, L'S')$ , kur  $\sigma_\lambda$  – kuloninė sklaidos fazė (49).

Kitos paprogramės skaičiuoja:

GENKP  $K_1, K_0, K_r, K_\lambda, K_j, K$  sumavimo parametrus;

BKJ, BKF  $\mathcal{B}^{ph}(K_1, K_0, K_r, K_\lambda, K_j, K)$  vertes atitinkamai  $LSJ$  ir  $SL(J)IF$  būsenoms;

BETALS, BETAJ, BETAF fotoelektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrus atitinkamai  $LS$ ,  $LSJ$  ir  $SL(J)IF$  būsenoms;

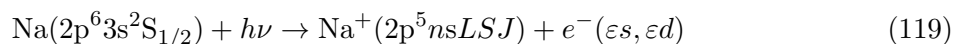
ALIGNLS, ALIGNJ, ALIGNF fotojonų rikiavimo ir orientacijos parametrus atitinkamai  $LS$ ,  $LSJ$  ir  $SL(J)IF$  būsenoms;

POLIJ, POLIF fotoelektrono sukinio poliarizacijos parametrus  $\xi, \delta, \gamma$  atitinkamai  $LSJ$  ir  $SL(J)IF$  būsenoms;

PSIGMJ, PSIGMF fotoelektronų kampinio pasiskirstymo magnetinio apskritiminio dichroizmo parametrus atitinkamai  $LSJ$  ir  $SL(J)IF$  būsenoms.

Programa taip pat naudoja pagalbines paprogrames CKK, DELTA, FAKR, W6JA, aptartas programoje PHION, ir W9J, skaičiuojančią  $9j$  koeficientą.

Kaip programų panaudojimo iliustracija bus apskaičiuoti fotoelektronų iš nepoliarizuoto natrio atomo  $2p$  elektronų sluoksnio kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrai ir fotojonizacijos skerspjūviai. Šuolio



diskretinių būsenų radialiosios orbitalės apskaičiuotos konfigūracijos vidurkiui su Froese Fischer programa [103]. Tolydinio elektrono radialiosios orbitalės surastos sistemos jonas+elektronas termams  $LS$ , atsižvelgiant į pakaitinį potencialą. Skaičiuota vienkonfigūraciniame artinyje tarpiniame ryšyje, kuris svarbus tikrai  $J = 1$  būsenoms:

$$\psi(^1P_1) = 0,977\phi(^1P) + 0,213\phi(^3P), \quad (120)$$

$$\psi(^3P_1) = 0,977\phi(^3P) - 0,213\phi(^1P). \quad (121)$$

Į Na branduolio sukinį ( $I = 3/2$ ) neatsižvelgta, nes eksperimente [104] jis neregistruojamas. Skerspjūviai skaičiuoti relaksavusiųjų radialiųjų orbitalių (RO) [100] ir staigosios perturbacijos (SP) [105] artiniuose.



Palyginimui su eksperimento, kuriame galinės būsenos termų indėlis neatskiriamas, t.y. registruojami visi elektronai, rezultatais apskaičiuoti skerspjūviai susumuoti  $L_1S_1J_1$  atžvilgiu, o asimetrijos parametrai  $\beta$  suvidurkinti

$$\beta(C_0L_0S_0 \rightarrow C_1L_1S_1) = \frac{\sum_{J_0, J_1} (2J_0 + 1) \beta(C_0L_0S_0J_0 \rightarrow C_1L_1S_1J_1) \sigma(C_0L_0S_0J_0 \rightarrow C_1L_1S_1J_1)}{\sum_{J_0, J_1} (2J_0 + 1) \sigma(C_0L_0S_0J_0 \rightarrow C_1L_1S_1J_1)}, \quad (122)$$

$$\beta(C_0 \rightarrow C_1) = \frac{\sum_{L_0, S_0, L_1, S_1} (2L_0 + 1)(2S_0 + 1) \beta(C_0L_0S_0 \rightarrow C_1L_1S_1) \sigma(C_0L_0S_0 \rightarrow C_1L_1S_1)}{\sum_{L_0, S_0, L_1, S_1} (2L_0 + 1)(2S_0 + 1) \sigma(C_0L_0S_0 \rightarrow C_1L_1S_1)}, \quad (123)$$

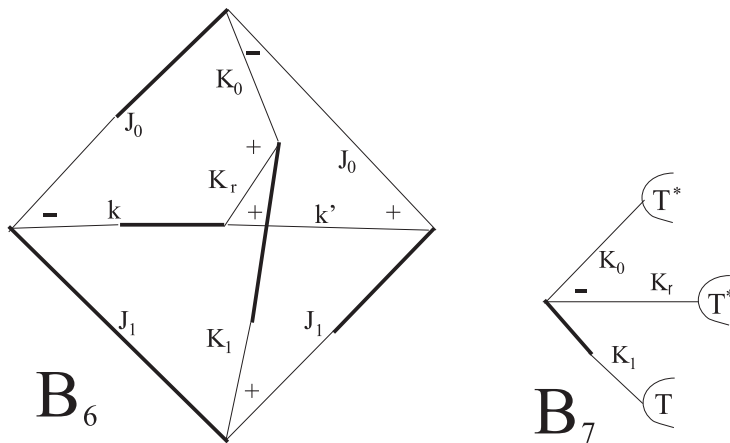
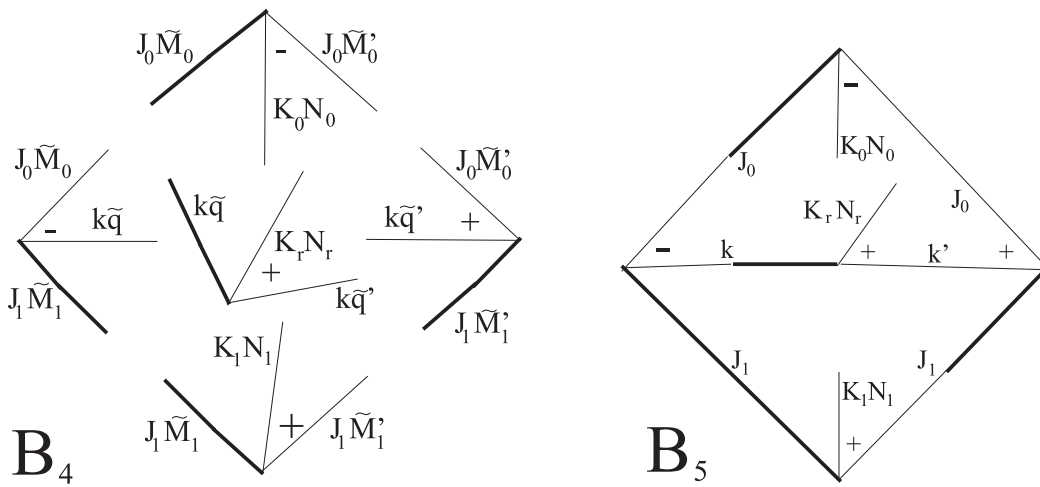
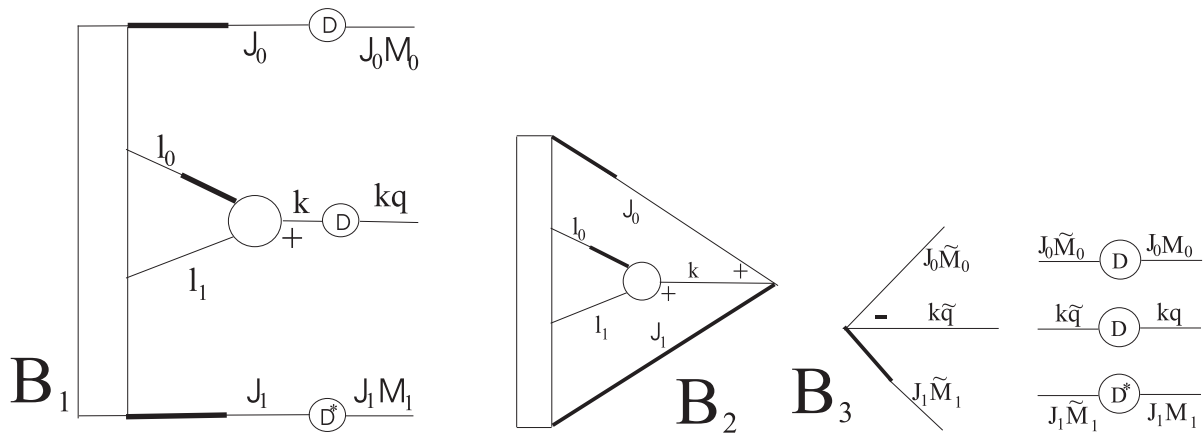
$$\sigma(C_0L_0S_0 \rightarrow C_1L_1S_1) = \frac{1}{(2L_0 + 1)(2S_0 + 1)} \sum_{J_0, J_1} (2J_0 + 1) \sigma(C_0L_0S_0J_0 \rightarrow C_1L_1S_1J_1). \quad (124)$$

Pilnieji Na fotojonizacijos skerspjūviai pavaizduoti 16 pav. kartu su eksperimento [104], skaičiavimo  $R$ -matricos [104] ir RO [106] artiniuose duomenimis. Iš paveikslų rezultatų matyti, kad prie jonizacijos slenkščio (teorinės vertės 36,92 eV  $^1P$  ir 36,54 eV  $^3P$  eksperimentinės vertės 38,46 eV  $^1P$  ir 38,04 eV  $^3P$  [107]) RO ir SP skerspjūviai stipriai skiriasi. Šis skirtumas sumažėja, didėjant fotono energijai. RO skerspjūvių, apskaičiuotų tarpiniame ryšyje [30] ir atskiriems termams  $LS$  [106, 30], forma labiausiai panaši į eksperimentinio, nei SP skaičiavimo rezultatai. Tuo tarpu  $R$  matricos artinio skerspjūvių vertės prie jonizacijos slenkščio daug mažesnės už RO, SP ir eksperimentines vertes, bet, didėjant fotono energijai, jos susilieja su SP vertėmis. Visi teoriniai skerspjūviai prastai dera su eksperimento duomenimis. Priežastis gali būti eksperimentikų [104] neteisingai parinktas jonizacijos slenkstis. Jų darbe jis yra 47,29 eV, kas atitinka  $Na^+$  jonizacijos potencialą (žr. [107]). Tuo tarpu Na 2p sluoksnio jis yra apie 38 eV. Taigi, neatitikimą tarp eksperimentinių ir teorinių rezultatų būtų galima sumažinti eksperimentines skerspjūvio vertes paslenkant apie 9 eV link mažesnių energijų.

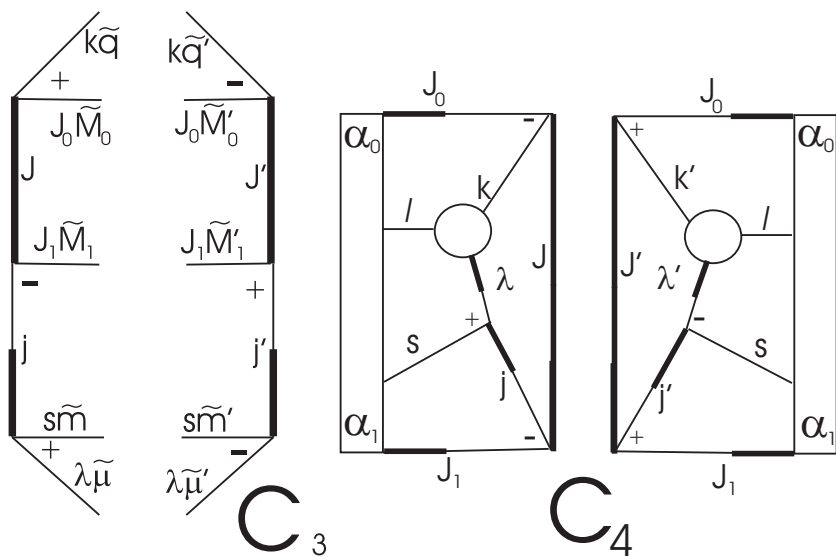
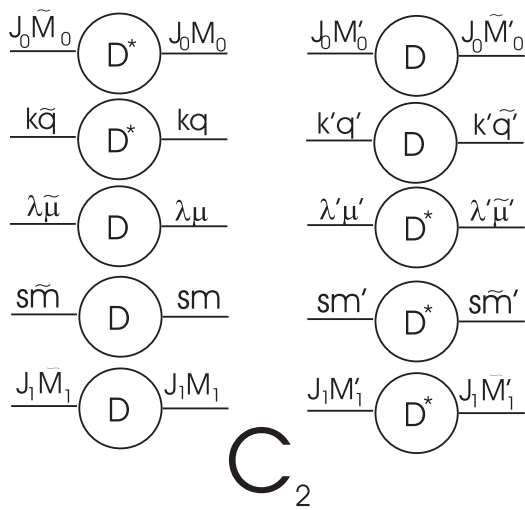
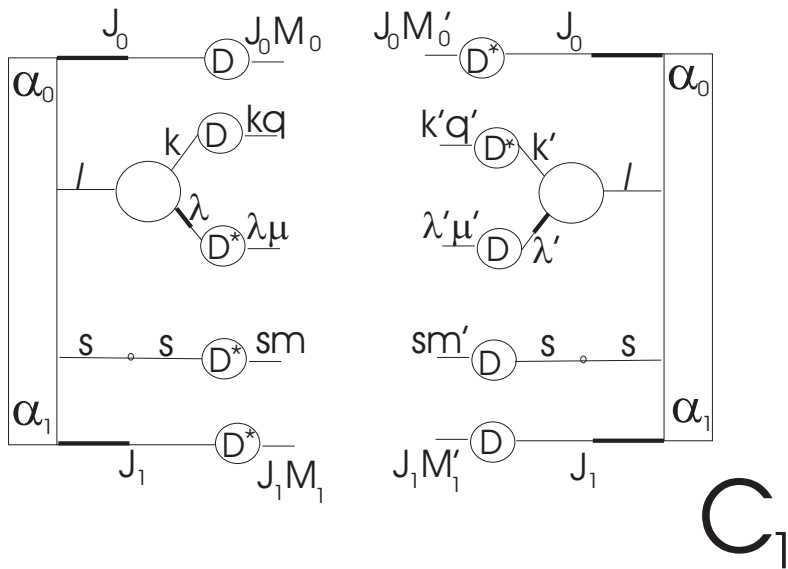
Fotoelektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras  $\beta$  (72), apskaičiuotas RO ir SP artiniuose  $LSJ$  būsenoms ir suvidurkintas pagal (122) ir (123) formules, palygintas su eksperimentiniu [104] 17 pav. Na atomo 2p sluoksnio vienelektronės fotojonizacijos atveju, o 18 pav. – fotojonizacijos, sužadinant  $Na^+$  valentinį elektroną iš 3s į 4s sluoksnį. Asimetrijos parametras taip pat buvo apskaičiuotas  $LS$  būsenoms RO [106, 30] ir daugelio kūnų trikdžių teorijos (MBPT) [108, 109] metodais. Cubaynes ir kt. [104] pastebėjo, kad RO  $\beta$  rezultatai akivaizdžiai geriausiai dera su išmatuotais, tuo tarpu MBPT  $\beta$  vertės [108] apie 10% mažesnės. Todėl piešiniuose tarpusavyje lyginamos RO, SP,  $R$  matricos ir eksperimentinės  $\beta$  vertės.

Vienelektronės fotojonizacijos atveju (17 pav.) SP artinio  $\beta$  geriau dera su eksperimentiniu nei RO ir  $R$  matricos, kas rodo, kad pasyviųjų elektronų relaksacijos ir tarpkanalinės sąveikos efektai yra maži. Tuo tarpu fotojonizacijos sužadinant joną atveju didelis skirtumas tarp RO

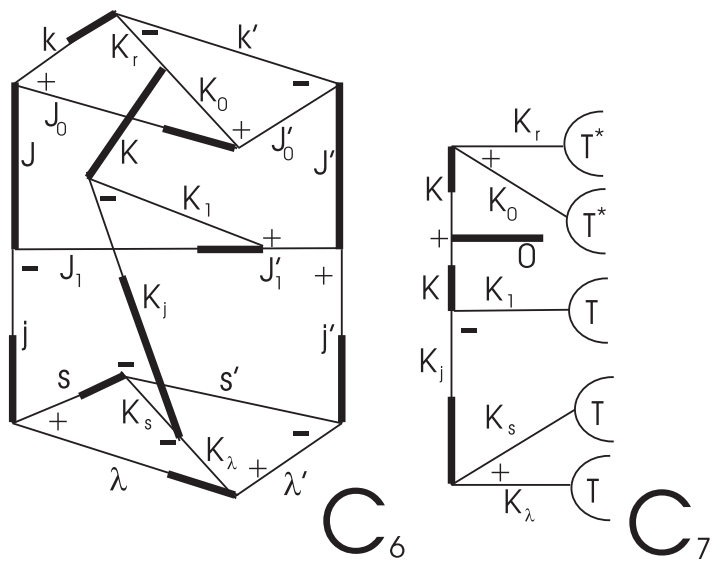
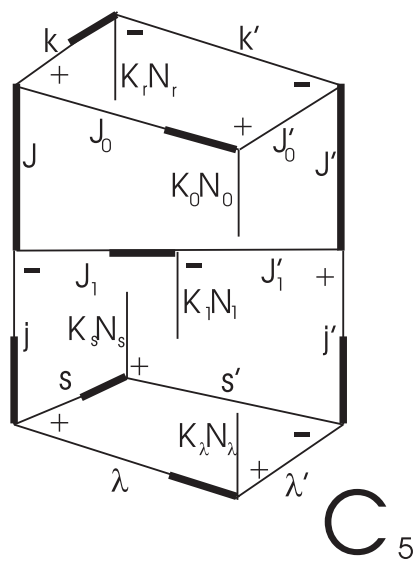
ir SP  $\beta$  parametro verčių prie jonizacijos slenksčio byloja RO artinio naudai, nes pastarojo metodo  $\beta$  parametro vertės geriau dera su išmatuotomis. Kadangi su eksperimento duomenimis lyginamos suvidurkintos  $\beta$  parametro vertės, nėra svarbu, ar jis apskaičiuotas konfigūracijos vidurkiui,  $LS$  termams ar tarpinio ryšio artinyje, nes po suvidurkinimo  $\beta$  vertės skiriasi mažiau nei 2%.



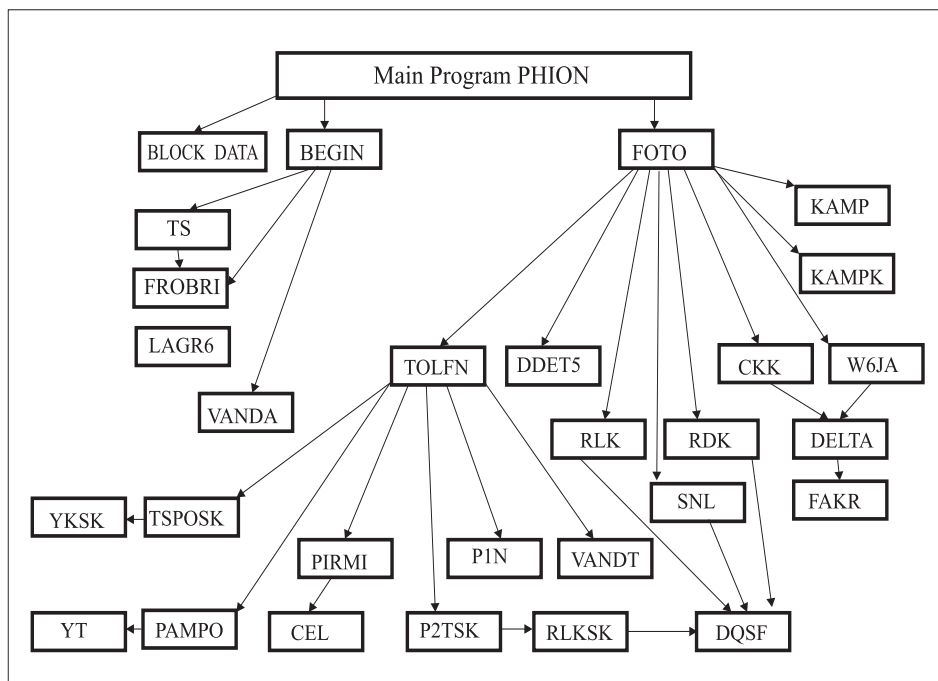
11 pav. Judėjimo kiekio momento diagramos, panaudotos poliarizuoto atomo sužadinimo poliarizuota spinduliuote tikimybės išraiškai surasti.



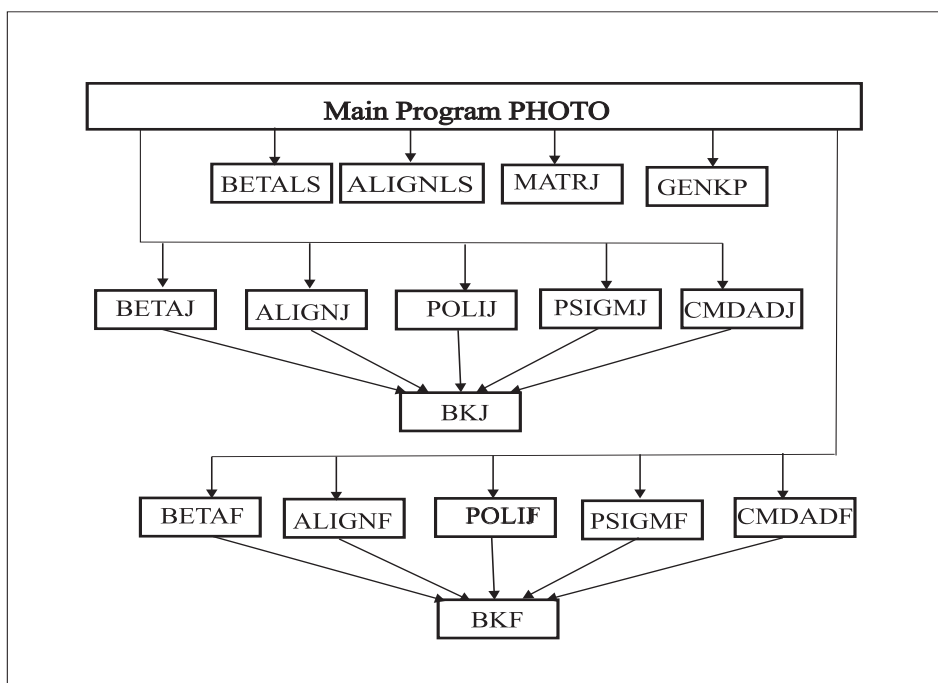
12 pav. Judėjimo kiekio momento diagramos, panaudotos poliarizuoto atomo jonizacijos poliarizuota spinduliuote skerspjūvio išraiškai surasti.



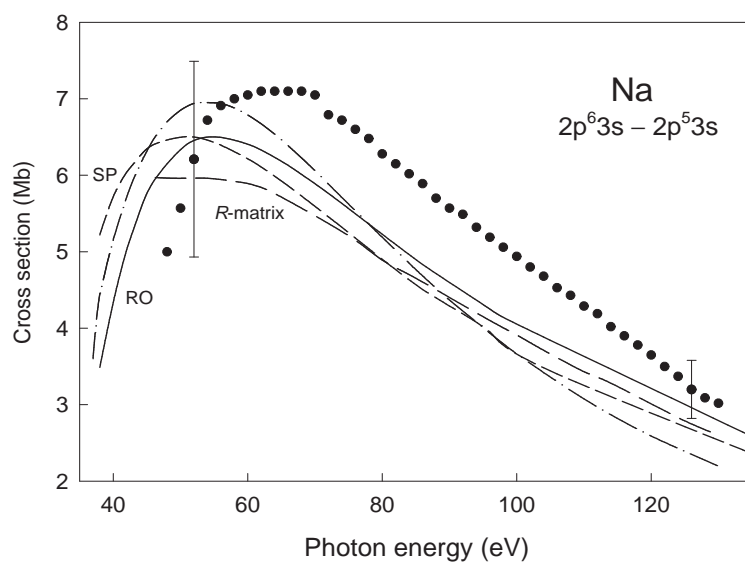
13 pav. Judėjimo kiekio momento diagramos, panaudotos poliarizuoto atomo jonizacijos poliarizuota spinduliute skerspjūvio išraiškai surasti.



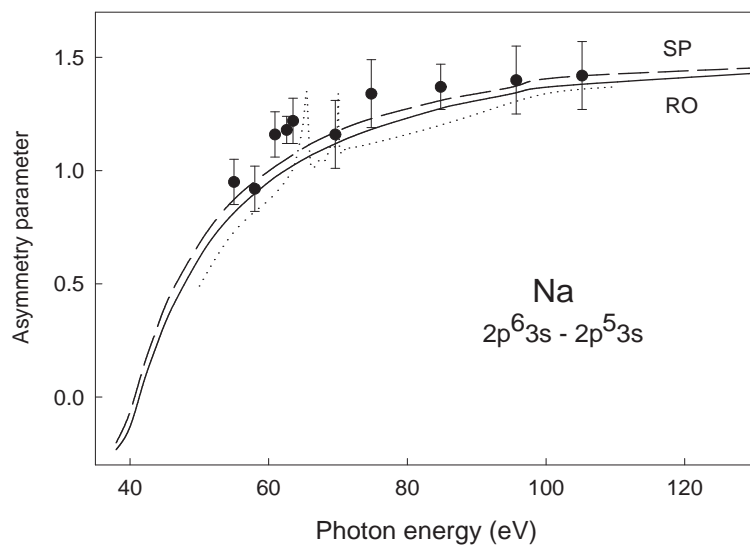
14 pav. Programos fotojonizacijos skerspjūviams, submatriciniams elementams ir sklaidos fazėms skaičiuoti blokinė schema



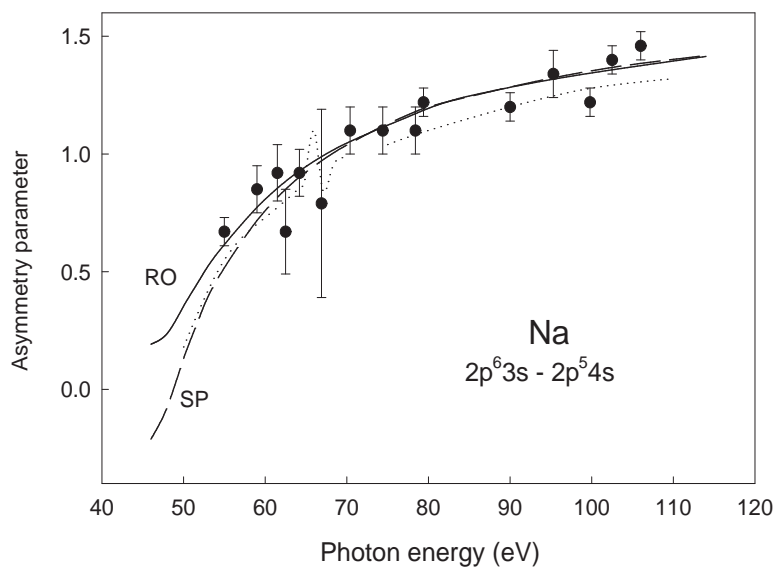
15 pav. Programos kampinio pasiskirstymo asimetrijos ir poliarizacijos fotojonizacijos procese parametrams skaičiuoti blokinė schema



16 pav. Na atomo 2p sluoksnio fotojonizacijos pilnieji skerspjūviai (ilgio forma), apskaičiuoti RO (ištinė kreivė) ir SP (brūkšninė kreivė) metodais. Taškų ir brūšnelių kreivė vaizduoja RO iš [106] rezultatus, ilgų brūšnelių kreivė ir eksperimentiniai taškai – iš [104].



17 pav. Fotoelektronų iš Na atomo 2p sluoksnio kampinio pasiskirstymo asimetrijos vidutiniai parametrai  $\beta$ , apskaičiuoti RO (ištininė kreivė), SP (brūkšninė kreivė),  $R$  matricos (taškinė kreivė) [104] artiniuose. Eksperimentiniai taškai – iš [104].



18 pav. Fotoelektronų iš Na atomo 2p sluoksnio sužadinant joną į 2p<sup>5</sup>4s būseną kampinio pasiskirstymo asimetrijos vidutiniai parametrai  $\beta$ , apskaičiuoti RO (ištininė kreivė), SP (brūkšninė kreivė),  $R$  matricos (taškinė kreivė) [104] artiniuose. Eksperimentiniai taškai – iš [104].



### 3 Atomo sužadintos būsenos suirimas

Tiriant atomų ir jonų, sužadintų ar jonizuotų spinduliuote ar krūvininkais, būsenų išnykimo produktus (elektromagnetinę spinduliuotę ar elektronus) galima gauti daug naudingos informacijos ne tiktai apie atomo sandarą, bet ir apie atomo ar jono sužadintas būsenas sukūrusius procesus ir daugiadaleles sąveikas. Daugiausiai naudojamas Auger procesas [52], kurio metu atomo dvigubai sužadinta būsena suyra jam išspinduliuojant elektroną. Tačiau ši dvigubai sužadinta būsena gali suirti ir atomui išspinduliuojant fotoną. Toks procesas vadinamas fluorescencija, nes šios spinduliuotės atsiradimo priežastis yra prieš tai buvęs atomo sužadinimas ar jonizacija fotonais, elektronais ar kitais krūvininkais. Kartais fluorescencija būna vienintelis atomo sužadintos būsenos išnykimo kelias, pvz., kai sužadinamas atomo išorinio sluoksnio elektronas ar jonizuojamas šarminio metalo atomo išorinis užpildytas sluoksnis. Dažniausiai sužadinto atomo ar jono fluorescencijos ar Auger elektrono išspinduliavimas yra antrojo etapo procesas, sekantis po atomo vidinio elektrono sužadinimo ar atplėšimo. Todėl šiame skyriuje Auger ir radiaciniai šuoliai nagrinėjami kaip sudėtingo proceso antrasis etapas. Diferencialinių skerspjuvių (tikimybių) bendrosios išraiškos surandamos, naudojant atomo teorijos metodus ir judėjimo kiekio momento grafinę techniką.

#### 3.1 Radiaciniai šuoliai

Nagrinėsime radiacinį šuolį, suyrant fotojonizacijos pasekoje atsiradusiai jono sužadintai būsenai. Ieškosime šio dvipakopio proceso diferencialinio skerspjuvio, kuris aprašytų visų procese dalyvaujančių dalelių poliarizaciją pradinėje ir galinėje būsenose, fotoelektronų ir fluorescencijos kampinius pasiskirstymus bei jų tarpusavio kampines koreliacijas. Atskirus šio proceso atvejus nagrinėjo kiti autoriai tankio matricos teorijos metodais. Žinomas Klar straipsnis [24], kuriame, nenaudojant tankio matricos, dvipakopiame artinyje gautos skerspjuvio, aprašančio fotoelektrono ir fluorescencijos fotono kampines koreliacijas, kai nepoliarizuotas atomas jonizuojamas nepoliarizuota spinduliuote. Tačiau jame nebuvo naudojami jono orientacijos ir rikiavimo parametrai.

Mc Farlane [49] Kabachnik [51] ir Berezhko ir kt. [52] gavo išraiškas, aprašančias Rentgeno spinduliuotės kampinį pasiskirstymą po nepoliarizuotų atomų jonizacijos greitaisiais elektronais. Gail ir kt. [70] apskaičiavo elektrinės dipolinės spinduliuotės, išspinduliuotos po rezonansinio krūvio perdavimo iš grafito, sužadinant  $U^{90+}$  joną, kampinio pasiskirtymo asimetrijos

parametrą  $\beta$ . Nepoliarizuotų atomų atveju Kabachnik ir Ueda [110] atliko kampinės koreliacijos tarp fotoelektronų ir poliarizuotų fluorescencijos fotonų teorinę analizę. Fluorescencijos spinduliuotės intensyvumo priklausomybė nuo priešingomis kryptimis orientuotų atomų nagrinėta apskritimiškai [111] ir tiesiškai [28] poliarizuotai jonizuojančiai spinduliuotei.

Šiame skirsnyje laikysime, kad atomo būsenų smulkioji sandara  $\Delta E_{FS}$  yra daug didesnė už sužadintos būsenos lygmens plotį  $\Gamma$ , o pastarasis daug didesnis už hipersmulkiają sandarą  $\Delta E_{HFS}$  ( $\Delta E_{FS} \gg \Gamma \gg \Delta E_{HFS}$ ). Ši prielaida gerai galioja atomų vidinių sluoksnių jonizacijai.

### 3.1.1 Bendrosios išraiškos suradimas

Atomo  $A$  fotojonizacijos ir po jos atsiradusio jono  $A^+$  būsenos  $\alpha_1 J_1 M_1$  radiacinio suirimo procesą galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned} A(\alpha_0 J_0 M_0) + h\nu(\hat{\epsilon}_{q_1}, \mathbf{k}_{01}) &\rightarrow A^+(\alpha_1 J_1 M_1) + e^-(\mathbf{p}_1, m_s) \\ &\rightarrow A^+(\alpha_2 J_2 M_2) + e^-(\mathbf{p}_1, m_s) + h\nu(\hat{\epsilon}_{q_2}, \mathbf{k}_{02}). \end{aligned} \quad (1)$$

Čia  $\hat{\epsilon}_1$ ,  $\mathbf{k}_{01}$  ir  $\hat{\epsilon}_2$ ,  $\mathbf{k}_{02}$  – jonizuojančios ir fluorescencijos spinduliuočių poliarizacijos vienetiniai ir banginiai vektoriai. Dvipakopiame artinyje (1) proceso tikimybę galima užrašyti (žr. 2.1.4 skirsnį) šitaip:

$$\begin{aligned} &\frac{dW(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_{q_1} \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_1 m_s \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{\epsilon}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_1 d\Omega_2} \\ &= \sum_{M_1, M_1'} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_{q_1} \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_1 m_s)}{d\Omega_1} \cdot \frac{dW^r(\alpha_1 J_1 M_1' \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{\epsilon}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_2}. \end{aligned} \quad (2)$$

Čia  $d\Omega_1$  ir  $d\Omega_2$  – fotoelektrono ir fluorescencijos spinduliuotės erdviniai kampai.

Pirmasis narys (2) išraiškoje yra fotojonizacijos diferencialinis skerspjūvis (2.52). Antrasis narys yra tarpinio jono sužadintos būsenos radiacinio suirimo diferencialinė tikimybė. Jos išraiškos ieškosime pasitelkdami judėjimo kiekio momento grafinę techniką. Pagal (2.2) ir (2.17) formules ją galima užrašyti:

$$\begin{aligned} \frac{dW^r(J_1 M_1 \rightarrow J_2 M_2 \hat{\epsilon}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_2} &= \frac{1}{2\pi} \sum_{\tilde{M}_1, \tilde{M}'_1, \tilde{M}_2, \tilde{M}'_2, \tilde{q}_2, \tilde{q}'_2, k_2, k'_2} \langle \alpha_2 J_2 \tilde{M}_2 | Q_{\tilde{q}_2}^{(k_2)} | \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 \rangle \\ &\times \langle \alpha_2 J_2 \tilde{M}'_2 | Q_{\tilde{q}'_2}^{(k'_2)} | \alpha_1 J_1 \tilde{M}'_1 \rangle^* D_{\tilde{M}_2 M_2}^{*J_2}(\hat{J}_2) D_{\tilde{M}_1 M_1}^{J_1}(\hat{J}_1) D_{\tilde{q}_2 q_2}^{k_2}(\hat{\mathbf{k}}_{02}) \\ &\times D_{\tilde{M}'_2 M_2}^{J_2}(\hat{J}_2) D_{\tilde{M}'_1 M_1}^{*J_1}(\hat{J}_1) D_{\tilde{q}'_2 q_2}^{*k'_2}(\hat{\mathbf{k}}_{02}). \end{aligned} \quad (3)$$

Čia Vignerio posūkio matricos  $D_{MM}^J(\hat{J})$  suteikia galimybę visų procese (1) dalyvaujančių dalelių poliarizaciją nustatyti bet kokios laisvai pasirinktos krypties atžvilgiu.

Reikia atkreipti dėmesį į tai, kad šuolio operatoriaus matricinio elemento (3) išraiška skiriasi nuo (2.11) daugikliu  $k_{02}$ , todėl jo išraišką parašysime dar kartą, (2.11) padauginę iš  $k_{02}$ ,

$$\langle \alpha_2 J_2 \tilde{M}_2 | Q_{\hat{q}_2}^{(k_2)} | \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 \rangle = k_{02}^{k_2+1/2} \sum_{p=0,1} \left[ \frac{k_2+1}{k_2} \right]^{1/2} \frac{i^{k_2} (-iq_2)^p}{(2k_2-1)!!} \langle \alpha_2 J_2 \tilde{M}_2 | Q_{k_2 \hat{q}_2}^p | \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 \rangle. \quad (4)$$

(3) tikimybės išraiškai surasti galima panaudoti 11 pav. judėjimo kiekio momento diagramas B<sub>1</sub>–B<sub>7</sub>, indeksus 0 pakeitus į 1, 1 – į 2, o  $k$  ir  $k'$  – į  $k_2$  ir  $k'_2$ . Diagramos B<sub>1</sub>, B<sub>2</sub> ir B<sub>3</sub> vaizduoja operacijas, atliekamas su šuolio operatoriaus matriciniu elementu. Dar ateis tokios pat diagramos su kompleksiskai jungtiniu matriciniu elementu, kuriose  $k_2$  turi būti pakeistas į  $k'_2$ . Vignerio posūkių matricių sandaugą  $D_{\hat{M}_1 M_1}^{J_1}(\hat{J}_1) D_{\hat{M}'_1 M'_1}^{*J_1}(\hat{J}_1)$  skleisime tenzoriais  $T_{N_1}^{K_1}(J_1, J_1, M_1, M'_1, \hat{J}_1)$  pagal (1.106) formulę, o likusioms – pagal (1.107). Panaudodami B<sub>2</sub>, B<sub>6</sub> ir B<sub>7</sub> diagramas, (3) diferencialinės tikimybės išraišką galime užrašyti multipolinių darinių pavidalu:

$$\begin{aligned} \frac{dW^r(J_1 M_1 \rightarrow J_2 M_2 \hat{e}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_2} &= \frac{1}{2\pi} \sum_{K_1, K'_r, K_2, k_2, k'_2} \left[ \frac{(2J_1+1)(2J_2+1)(2k_2+1)}{2K_2+1} \right]^{1/2} (2J_2+1) \\ &\times \langle J_2 || Q^{(k_2)} || J_1 \rangle \langle J_2 || Q^{(k'_2)} || J_1 \rangle^* \left\{ \begin{array}{ccc} J_1 & K_1 & J_1 \\ k_2 & K'_r & k'_2 \\ J_2 & K_2 & J_2 \end{array} \right\} \sum_{N_1, N'_r, N_2, N'_r} \left[ \begin{array}{ccc} K_1 & K'_r & K_2 \\ N_1 & N'_r & N_2 \end{array} \right] \\ &\times T_{N_2}^{*K_2}(J_2, J_2, M_2 | \hat{J}_2) T_{N'_r}^{*K'_r}(k_2, k'_2, q_2 | \hat{\mathbf{k}}_2) T_{N_1 N'_1}^{K_1}(J_1, J_1, M_1, M'_1 | \hat{J}_1). \end{aligned} \quad (5)$$

Tolimesniam nagrinėjimui patogesnės išraiškos, kuriose susumuota neregistruojamos tarpinio jono būsenos  $M_2$  atžvilgiu. Pagal 2.1.4 skirsnyje aprašytą metodiką (1) proceso išraišką galima užrašyti tarpinės būsenos multipolių dariniu:

$$\begin{aligned} &\frac{dW(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_{q_1} \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_1 m_s \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{e}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_1 d\Omega_2} \\ &= \sum_{K_1 N_1} \frac{d\sigma_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_{q_1} \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_1 m_s)}{d\Omega_1} \cdot \frac{dW_{K_1 N_1}^r(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{e}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_2}. \end{aligned} \quad (6)$$

Čia fotojonizacijos diferencialinio skerspjūvio multipolinio darinio atskiro nario išraiška yra (2.54), o diferencialinės tikimybės atskiram nariui gaunama šitokia išraiška:

$$\begin{aligned} \frac{dW_{K_1 N_1}^r(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{e}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_2} &= \frac{1}{2\pi} \sum_{K'_r, K_2, k_2, k'_2} \mathcal{A}(K_1, K'_r, K_2, k_2, k'_2) \\ &\times \sum_{N'_r, N_2} \left[ \begin{array}{ccc} K_1 & K'_r & K_2 \\ N_1 & N'_r & N_2 \end{array} \right] T_{N_2}^{K_2}(J_2, J_2, M_2 | \hat{J}_2) T_{N'_r}^{*K'_r}(k_2, k'_2, q_2 | \hat{\mathbf{k}}_2), \\ \mathcal{A}(K_1, K'_r, K_2, k_1, k'_2) &= (\alpha_2 J_2 || Q^{(k_2)} || \alpha_1 J_1) (\alpha_2 J_2 || Q^{(k'_2)} || \alpha_1 J_1)^* \end{aligned} \quad (7)$$

$$\times \left[ \frac{(2K_1 + 1)(2J_2 + 1)(2k_2 + 1)}{(2J_1 + 1)(2K_2 + 1)} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} J_1 & K_1 & J_1 \\ k_2 & K'_r & k'_2 \\ J_2 & K_2 & J_2 \end{Bmatrix}, \quad (8)$$

$$\langle \alpha_2 J_2 || Q^{(k_2)} || \alpha_1 J_1 \rangle = (2J_2 + 1)^{-1/2} \langle \alpha_2 J_2 || Q^{(k_2)} || \alpha_1 J_1 \rangle. \quad (9)$$

Jeigu (6) suintegruotume fluorescencijos spinduliuotės kampų, susumuotume galinės būsenos dedamųjų  $M_2$  ir spinduliuotės poliarizacijos dedamųjų  $q_2$  atžvilgiu, gautume pilnutinę radiacinio šuolio tikimybę

$$W^r(J_1 \rightarrow J_2) = 4\pi W_{00}^r(J_1 \rightarrow J_2), \quad (10)$$

$$W_{00}^r(J_1 \rightarrow J_2) = \frac{1}{2\pi(2J_1 + 1)} \sum_{k_2} \frac{1}{2k_2 + 1} |(\alpha_2 J_2 || Q^{(k_2)} || \alpha_1 J_1)|^2. \quad (11)$$

(11) išraiškai gauti į (7) įrašyta  $K_1 = N_1 = K'_r = N'_r = K_2 = N_2 = 0$  ir vietoje  $\mathcal{A}(0, 0, 0, k_2, k_2)$  įrašyta (8) fomulė.  $W_{00}^r(J_1 \rightarrow J_2)$  skiriasi nuo pilnutinės radiacinio šuolio tikimybės daugikliu  $4\pi$ .

Elektrinės dipolinės spinduliuotės atveju  $k_2 = 1$ , ką turėdami omenyje įrašome (11) ir (8) į (10) ir gauname gerai žinomą radiacinio šuolio tikimybės pilnutinę išraišką:

$$W^r(J_1 \rightarrow J_2) = \frac{4k_{02}^3}{3(2J_1 + 1)} |(\alpha_2 J_2 || Q^{(1)} || \alpha_1 J_1)|^2. \quad (12)$$

Ji aprašo nepoliarizuoto atomo spontaninės spinduliuotės tikimybę, kai spinduliuotės poliarizacija ir kampinis pasiskirtysymas neregistruojami. (12) fomulėje  $k_{02}$  lygus skirtumui tarp atomo pradinės ir galinės būsenų energijų atominiais vienetais.

Toliau bendrąsias išraiškas (6)–(8) panaudosime kai kuriems atskiriems atvejams, aprašantiems specifines eksperimento sąlygas, nagrinėti.

### 3.1.2 Jono galinė būsena nestebima

Eksperimentuose, tiriančiuose fluorescencijos kampinį pasiskirstymą ir poliarizaciją, jono galinė būsena nėra stebima. Jai registruoti reikėtų atlikti specialų trečiosios pakopos eksperimentą. Todėl naudinga turėti (6) išraiškos atskirą atvejį, gaunamą ją susumavus  $M_2$  dedamųjų atžvilgiu. Pagal (2.30) formulę gauname, kad  $K_2 = N_2 = 0$ . Įrašome šias vertes į (7) ir gauname paprastesnę radiacinio šuolio diferencialinės tikimybės multipolinio skleidinio nario išraišką

$$\frac{dW_{K_1 N_1}^r(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \hat{\epsilon}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_2} = \sum_{M_2} \frac{dW_{K_1 N_1}^r(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{\epsilon}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_2}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi} \sum_{k_2, k'_2} (-1)^{K_1+k_2-q_2} \left[ \frac{4\pi}{(2k_2+1)(2K_1+1)} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} k_2 & k'_2 & K_1 \\ q_2 & -q_2 & 0 \end{bmatrix} \\
&\quad \times \mathcal{A}(K_1, K_1, 0, k_2, k'_2) Y_{K_1 N_1}(\theta_2, \phi_2), \tag{13}
\end{aligned}$$

kuri bus naudojama tolimesniame nagrinėjime.

### 3.1.3 Fluorescencijos kampinis pasiskirstymas ir poliarizacija nepoliarizuotiems atomams

Dėl nepoliarizuotų atomų fotojonizacijos atsiradusios fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametro išraiškai surasti reikia (6) formulę sumuoti jono galutinių būsenų, fotoelektrono sukinių dedamųjų, integruoti fotoelektrono kampų ir vidurkinti atomo pradinių būsenų atžvilgiu. Panaudodami (1.80) integravimui ir (2.30) sumavimui, gauname, kad  $K_0 = N_0 = K_\lambda = N_\lambda = K_s = N_s = K_2 = N_2 = 0$ ,  $K_1 = K_r = K'_r = K$  ir  $N_1 = N_r = N'_r = N$ . Įrašome šias vertes į (6), prileidžiame, kad spinduliuotės kryptis sutampa su laboratorine  $z$  ašimi (žr. (1.86) formulę) ir gauname

$$\frac{dW(\alpha_0 J_0 \hat{\epsilon}_{q_1} \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \hat{\epsilon}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_2} = \sum_{K_1} A(K_1) B(K_1) P_{K_1}(\cos\theta_2), \tag{14}$$

$$A(K_1) = \sum_{k_2, k'_2} \mathcal{A}(K_1, K_1, 0, k_2, k'_2) (-1)^{k_2-q_2} [2k_2+1]^{-1/2} \begin{bmatrix} k_2 & k'_2 & K_1 \\ q_2 & -q_2 & 0 \end{bmatrix}, \tag{15}$$

$$B(K_1) = \frac{4\pi^2}{(2J_0+1)} \sum_{k_1, k'_1} \frac{2K_1+1}{\sqrt{2k_1+1}} \mathcal{B}^{ph}(K_1, 0, K_1, 0, 0, 0, K_1, k_1, k'_1) (-1)^{k'_1-q_1} \begin{bmatrix} k_1 & k'_1 & K_1 \\ q_1 & -q_1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{16}$$

Kai atomas jonizuojamas nepoliarizuota elektrine dipoline spinduliuote,  $k_1 = k'_1 = 1$ ,  $q_1 = \pm 1$ ,  $K_1 = 0, 2$ , o (14) įgyja gerai žinomą pavidalą:

$$\frac{dW(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{02})}{d\theta_2} = \frac{W(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)}{4\pi} [1 + \beta P_2(\cos\theta_2)]. \tag{17}$$

Čia  $W(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)$  – fotono išspinduliavimo per laiko vienetaį po atomo fotojonizacijos pilnutinė tikimybė, o  $\beta$  – fotono kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras. Jo išraiška yra šitokia:

$$\beta = \frac{A(2)}{A(0)} \cdot \frac{B(2)}{B(0)} = \alpha A_2. \tag{18}$$

$A_2$  yra tarpinio jono rikiavimo parametras (2.80), kuris priklauso nuo atomą ir fotojoną aprašančių dydžių. Atskiru atveju, kai atomas jonizuojamas dipoline nepoliarizuota spinduliuote,

$$A_2 = \left[ \frac{3}{2} \right]^{1/2} \sum_{\lambda, j, J, J'} (2J+1)(2J'+1) \langle \alpha_1 J_1 \epsilon_1 \lambda(j) J || Q^{(1)} || \alpha_0 J_0 \rangle$$

$$\begin{aligned} & \times \langle \alpha_1 J_1 \varepsilon_1 \lambda(j) J' || Q^{(1)} || \alpha_0 J_0 \rangle^* (-1)^{J_1 + J_0 + j + 1 + J + J'} \begin{Bmatrix} J_1 & J_1 & 2 \\ J & J' & j \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & J' & J_0 \\ J & 1 & 2 \end{Bmatrix} \\ & \times \left[ \sum_{\lambda, j, J} (2J + 1) |\langle \alpha_1 J_1 \varepsilon_1 \lambda(j) J || Q^{(1)} || \alpha_0 J_0 \rangle|^2 \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (19)$$

Parametras  $\alpha$  priklauso tiksliai nuo fotojono tarpinės ir galinės būsenų. Kai fluorescencija tiesiškai poliarizuota,

$$\alpha = \alpha_2^{\text{lin}} = (-1)^{J_1 + J_2} \sqrt{6(2J_1 + 1)} \begin{Bmatrix} J_1 & J_1 & 2 \\ 1 & 1 & J_2 \end{Bmatrix}. \quad (20)$$

Jeigu fluorescencijos fotono poliarizacija nematuojama arba jis poliarizuotas apskritimiškai,

$$\alpha = \alpha_2^c = (-1)^{J_1 + J_2 + 1} \left[ \frac{3(2J_1 + 1)}{2} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} J_1 & J_1 & 2 \\ 1 & 1 & J_2 \end{Bmatrix}. \quad (21)$$

Kai atoma jonizuoja apskritimiškai poliarizuota elektrinė dipolinė spinduliuotė,  $K_1 = 0, 1, 2$ , ir tampa galimas dar vienas narys dėl tarpinio jono orientacijos, t.y.  $K_1 = 1$ . Tuomet (17) išraiškoje pasirodo ir  $P_1(\cos \theta)$ , prie kurio yra šis daugiklis

$$\alpha = \alpha_1^c = 3(-1)^{J_1 + J_2} \left[ \frac{2J_1 + 1}{2} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ J_1 & J_1 & J_2 \end{Bmatrix}. \quad (22)$$

Spinduliuotės poliarizacija paprastai nusakoma poliarizacijos laipsniu

$$P_{\%} = \frac{I_{\parallel} - I_{\perp}}{I_{\parallel} + I_{\perp}} 100, \quad (23)$$

kur  $I_{\parallel}$  ir  $I_{\perp}$  – šviesos, poliarizuotos išilgai ir statmenai laboratorinei  $z$  ašiai. Įrašius (17) į (23), gauname

$$P_{\%}(\theta) = \frac{3\beta \sin^2 \theta}{\beta(1 - 3\cos^2 \theta - 2)} 100. \quad (24)$$

Kai fluorescencijos spinduliuotė registruojama statmenai šiai ašiai,

$$P_{\%}(90^\circ) = \frac{3\beta}{\beta - 2} 100, \quad (25)$$

kur  $\beta$  yra (18) išraiška.

### 3.1.4 Kampinė koreliacija tarp fotoelektrono ir fluorescencijos nepoliarizuoto atomo atveju

Norint surasti diferencialinės tikimybės, aprašančios kampines koreliacijas tarp fotoelektrono ir fluorescencijos fotono, išraišką, reikia (6) sumuoti  $m_s$  ir  $M_2$  ir vidurkinti  $M_0$  dedamųjų atžvilgiu.

Šių veiksmų rezultatas  $K_0 = N_0 = K_2 = N_2 = K_s = N_2 = 0$ ,  $K'_r = K_1$ ,  $N'_r = -N_1$ ,  $K = K_r$ ,  $K_j = K_\lambda$ ,  $N = N_r$ ,  $N_j = N_\lambda$  turi būti įrašytas į (6). Gauname pageidaujamos tikimybės išraišką:

$$\begin{aligned} \frac{dW(\alpha_0 J_0 \hat{\epsilon}_{q_1} \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \hat{\epsilon}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_1 d\Omega_2} &= \frac{1}{2} \sum_{K_1, N_1} A(K_1) \left[ \frac{4\pi}{2K_1 + 1} \right]^{1/2} Y_{K_1 N_1}^*(\theta_2, \phi_2) \\ &\times (-1)^{K_1} \sum_{K_r, N_r, K_\lambda, N_\lambda} B(K_1, K_\lambda, K_r) \begin{bmatrix} K_1 & K_\lambda & K_r \\ N_1 & N_\lambda & N_r \end{bmatrix} \frac{4\pi}{\sqrt{2K_r + 1}} Y_{K_r N_r}^*(\theta_0, \phi_0) \\ &\times Y_{K_\lambda N_\lambda}(\theta_1, \phi_1). \end{aligned} \quad (26)$$

Čia  $\theta_0$ ,  $\phi_0$ ,  $\theta_1$ ,  $\phi_1$ ,  $\theta_2$ ,  $\phi_2$  yra atitinkamai jonizuojančios spinduliuotės, fotoelektrono ir fluorescencijos spinduliuotės polinis ir azimutinis kampai.  $A(K_1)$  išraiška yra tokia pati, kaip ir (15), o

$$\begin{aligned} B(K_1, K_\lambda, K_r) &= \sum_{k_1, k'_1} \mathcal{B}^{ph}(K_1, 0, K_r, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_r, k_1, k'_1) \\ &\times \frac{1}{2J_0 + 1} \left[ \frac{2K_r + 1}{2k_1 + 1} \right]^{1/2} (-1)^{k_1 - q_1} \begin{bmatrix} k_1 & k'_1 & K_r \\ q_1 & -q_1 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (27)$$

Jeigu fluorescencijos fotonų poliarizacija neregistruojama, (26) išraišką galima užrašyti analogiška forma, kurią gavo Kabachnik ir Ueda [110]:

$$\begin{aligned} \frac{dW(\alpha_0 J_0 \hat{\epsilon}_{q_1} \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_1 d\Omega_2} &= A(0)B(0, 0, 0) \\ &\times \left[ 1 + \alpha_2 \sum_{N_1} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_{2N_1}(\theta_2, \phi_2) A'_{2N_1}(\theta_1, \phi_1) \right], \end{aligned} \quad (28)$$

kur

$$\begin{aligned} A'_{2N_1}(\theta_1, \phi_1) &= B(0, 0, 0)^{-1} \sum_{K_r, N_r, K_\lambda, N_\lambda} B(2, K_\lambda, K_r) \frac{4\pi}{(2K_1 + 1)^{1/2}} \begin{bmatrix} 2 & K_\lambda & K_r \\ N_1 & N_\lambda & N_r \end{bmatrix} \\ &\times Y_{K_r N_r}^*(\theta_0, \phi_0) Y_{K_\lambda N_\lambda}(\theta_1, \phi_1). \end{aligned} \quad (29)$$

Jonizuojančios ir fluorescencijos spinduliuočių dipolinio artinio atveju ( $q_1 = \pm 1$ ,  $q_2 = \pm 1$ ,  $k_1 = k_2 = 1$ )  $\alpha = \alpha_2^c$ . Parinkus laboratorinę  $z$  ašį jonizuojančios spinduliuotės sklidimo kryptimi ( $\theta_0 = \phi_0 = 0$ ), gaunama dar paprastesnė išraiška:

$$\begin{aligned} A'_{2N_1}(\theta_1, \phi_1) &= \frac{1}{(2J_0 + 1)B(0, 0, 0)\sqrt{3}} \sum_{K_r=0,2,K_\lambda} \mathcal{B}^{ph}(2, 0, K_r, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_r, 1, 1) \\ &\times \begin{bmatrix} 2 & K_\lambda & K_r \\ N_1 & -N_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & K_r \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_\lambda - N_1}(\theta_1, \phi_1). \end{aligned} \quad (30)$$

### 3.1.5 Fluorescencijos kampinis pasiskirstymas, jonizuojant poliarizuotus atomus

Poliarizuotų atomų fotojonizacijos atveju fluorescencijos kampinį pasiskirstymą aprašanti diferencialinės tikimybės išraiška gaunama (6) sumuojant  $M_2$ ,  $m_s$  ir integruojant neregistruojamų fotoelektronų kampų atžvilgiu. Tuomet  $K_2 = N_2 = K_s = N_s = K_\lambda = N_\lambda = 0$ . Įrašius šias vertes į (6), gaunama ši išraiška:

$$\frac{dW(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_{q_1} \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \hat{e}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_2} = \frac{1}{2} \sum_{K_1, N_1} A(K_1) \sqrt{\frac{4\pi}{2K_1 + 1}} Y_{K_1 N_1}(\theta_2, \phi_2) \times \sum_{K_0, N_0, K_r, N_r} B'(K_0, K_r, K_1) \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ N_0 & N_r & N_1 \end{bmatrix} 4\pi Y_{K_0 N_0}^*(\theta_A, \phi_A) Y_{K_r N_r}^*(\theta_1, \phi_1). \quad (31)$$

Čia  $A(K_1)$  išraiška yra (15),  $\theta_1$ ,  $\phi_1$ ,  $\theta_A$ ,  $\phi_A$ ,  $\theta_2$ ,  $\phi_2$  yra atitinkamai jonizuojančios spinduliuotės, atomo pilnutinio judėjimo kiekio momento  $\mathbf{J}$  ir fluorescencijos spinduliuotės polinis ir azimutinis kampai, o

$$B'(K_0, K_r, K_1) = \sum_{k_1, k'_1} \mathcal{B}^{ph}(K_1, K_0, K_r, 0, 0, 0, K_1, k, k') \times \frac{4\pi}{\sqrt{(2k_1 + 1)(2J_0 + 1)}} (-1)^{J_0 - M_0} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} (-1)^{k_1 - q_1} \begin{bmatrix} k_1 & k'_1 & K_r \\ q_1 & -q_1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (32)$$

Fluorescencijos spinduliuotės kampinio pasiskirstymo apskritiminis magnetinis dichrozmas (CMDAD) apibrėžiamas šitaip [28]:

$$\Delta_c = \frac{I(J_0 M_0) - I(J_0 - M_0)}{I(J_0 M_0) + I(J_0 - M_0)}, \quad (33)$$

kur  $I(J_0 M_0) = dW(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_{q_1} \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \hat{e}_{q_2} \mathbf{k}_{02})/d\Omega_2$ . Iš

$$\begin{aligned} & (-1)^{J_0 - M_0} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} \pm (-1)^{J_0 + M_0} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ -M_0 & M_0 & 0 \end{bmatrix} \\ & = (-1)^{J_0 - M_0} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} [1 \pm (-1)^{K_0}] \end{aligned} \quad (34)$$

matyti, kad (33) išraiškos skaitiklyje lieka tiktai nariai, kurių  $K_0$  nelyginis, o vardiklyje –  $K_0$  lyginis. Tuomet  $\Delta_c$  išraiška yra šitokia:

$$\Delta_c = \left[ \sum_{K_1, N_1} A(K_1) \sqrt{\frac{4\pi}{2K_1 + 1}} Y_{K_1 N_1}(\theta_2, \phi_2) \sum_{K_0 = \text{odd}, N_0, K_r, N_r} B'(K_0, K_r, K_1) \times \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ N_0 & N_r & N_1 \end{bmatrix} 4\pi Y_{K_0 N_0}^*(\theta_A, \phi_A) Y_{K_r N_r}^*(\theta_1, \phi_1) \right] \left[ \sum_{K_1, N_1} A(K_1) \sqrt{\frac{4\pi}{2K_1 + 1}} Y_{K_1 N_1}(\theta_2, \phi_2) \right]$$



$$\times \sum_{K_0=\text{even}, N_0, K_r, N_r} B'(K_0, K_r, K_1) \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ N_0 & N_r & N_1 \end{bmatrix} 4\pi Y_{K_0 N_0}^*(\theta_A, \phi_A) Y_{K_r N_r}^*(\theta_1, \phi_1) \Big]^{-1}. \quad (35)$$

Šią išraišką galima supaprastinti, parinkus atomo pilnutinio judėjimo kiekio momentą  $\mathbf{J}$ , nukreiptą išilgai apskritiminės poliarizacijos jonizuojančios spinduliuotės krypties, kuri sutampa su laboratorinės koordinačių sistemos  $z$  ašimi. Tuomet

$$Y_{K_0 N_0}^*(0, 0) Y_{K_r N_r}^*(0, 0) = \frac{\sqrt{(2K_r + 1)(2K_0 + 1)}}{4\pi} \delta(N_0, 0) \delta(N_r, 0), \quad (36)$$

$N_1 = 0$ , ir elektrinės dipolinės spinduliuotės artinyje gaunama galutinė  $\Delta_c$  išraiška:

$$\begin{aligned} \Delta_c = & \left\{ \sum_{K_1} A(K_1) P_{K_1}(\cos \theta_2) \sum_{K_0=\text{odd}, K_r} B'(K_0, K_r, K_1) \sqrt{(2K_0 + 1)(2K_r + 1)} \right. \\ & \left. \times \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \right\} \left\{ \sum_{K_1} A(K_1) P_{K_1}(\cos \theta_2) \right. \\ & \left. \times \sum_{K_0=\text{even}, K_r} B'(K_0, K_r, K_1) \sqrt{(2K_0 + 1)(2K_r + 1)} \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \right\}^{-1}. \quad (37) \end{aligned}$$

Čia apskritiminės poliarizacijos apinduliuotei  $K_0 \leq 2J_0$ ,  $K_r = K_1 = 0, 1, 2$ . Fluorescencijos spinduliuotės polinis kampas  $\theta_2$  matuojamas nuo laboratorinės  $z$  ašies.

Tiesiškai poliarizuotos jonizuojančios spinduliuotės atveju fotojonas būna tikrai išrikiuotas, t.y.  $K_0$  gali įgyti tikrai lygines vertes. Todėl  $\Delta_c = 0$ . Tačiau galima pamatuoti fluorescencijos spinduliuotės kampinio pasiskirstymo tiesinį magnetinį dichroizmą (LMDAD)  $\Delta_L$  [28, 47], kuris matuojamas rikiavimo dviems statmenoms kryptims:

$$\Delta_L = \frac{I(\parallel) - I(\perp)}{I(\parallel) + I(\perp)}. \quad (38)$$

Bendroji išraiška, aprašanti LMDAD, bet kokiai eksperimento geometrijai yra sudėtinga. Paprastesnę formulę galima gauti specialiai parenkant jonizuojančios spinduliuotės ir fotojono rikiavimo kryptis lygiagrečiai  $z$  ašiai, o  $x$  ašį – sutampančią su jonizuojančios spinduliuotės elektrinio lauko  $\mathbf{E}$  kryptimi. LMDAD išnagrinėjo Grum-Grzhimailo ir Kabachnik [28].

### 3.1.6 Kampinė koreliacija tarp fotoelektrono ir fluorescencijos po poliarizuoto atomo fotojonizacijos

Tiriant kampinę koreliaciją tarp fotoelektrono ir fluorescencijos po poliarizuoto atomo fotojonizacijos, paprastai informacija apie fotoelektrono sukinio ir jono galutinės būsenos pilnutinio judėjimo kiekio momento kryptį neregistruojama. Todėl, bendrąją išraišką (6) reikia sumuoti

$m_s$  ir  $M_2$  atžvilgiu. Šių veiksmų rezultatas yra  $K_s = N_s = K_2 = N_2 = 0$ . Įrašome šias vertes į (6) ir gauname diferencialinės tikimybės išraišką:

$$\begin{aligned} \frac{dW(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{e}_{q_1} \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \hat{e}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_1 d\Omega_2} &= \sum_{K_1, N_1} A(K_1) \sqrt{\frac{4\pi}{2K_1 + 1}} Y_{K_1 N_1}(\theta_2, \phi_2) \\ &\times \sum_X B''(K_0, K_r, K_\lambda, K_1, K) (4\pi)^{3/2} \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K \\ N_0 & N_r & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_1 & K_\lambda & K \\ N_1 & N_\lambda & N \end{bmatrix} \\ &\times Y_{K_r N_r}^*(\theta_0, \phi_0) Y_{K_0 N_0}^*(\theta_A, \phi_A) Y_{K_\lambda N_\lambda}(\theta_1, \phi_1). \end{aligned} \quad (39)$$

Čia  $A(K_1)$  yra (15) išraiška,  $X = K_0, N_0, K_\lambda, N_\lambda, K_r, N_r, K, N$ ,

$$\begin{aligned} B''(K_0, K_r, K_\lambda, K_1, K) &= \sum_{k_1, k'_1} [(2k_1 + 1)(2J_0 + 1)]^{-1/2} \mathcal{B}^{ph}(K_1, K_0, K_r, K_\lambda, 0, K_\lambda, K, k, k') \\ &\times (-1)^{k_1 - q_1} \begin{bmatrix} k_1 & k'_1 & K_r \\ q_1 & -q_1 & 0 \end{bmatrix} (-1)^{J_0 - M_0} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (40)$$

### 3.1.7 Kompiuterinė programa ir Na ir K atomų skaičiavimo rezultatai

#### Programa FLUOR

Programa FLUOR, kurios blokinė schema pavaizduota 19 pav., skirta fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametro  $\beta$  (18) ir dydžių (30)

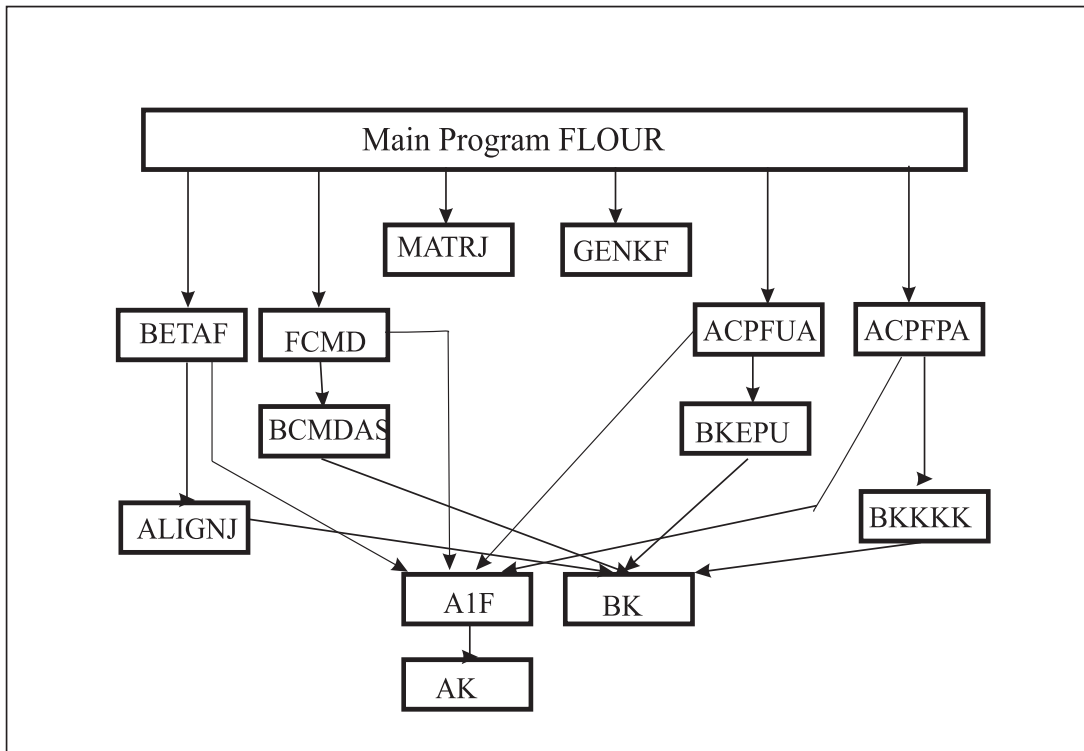
$$\alpha_2 \sum_{K_r=0,2} \mathcal{B}^{ph}(2, 0, K_r, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_r, 1, 1) \begin{bmatrix} 1 & 1 & K_r \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (41)$$

reikalingų kampinei koreliacijai tarp fotoelektronų ir fluorescencijos spinduliuotės surasti, po nepoliarizuotų atomų fotojonizacijos apskaičiuoti. Ji taip pat suranda  $A(K_1)B'(K_0, K_r, K_1)$  (35) ir  $A(K_1)B''(K_0, K_r, K_\lambda, K_1, K)$  (39) atskirus sumų narius, kurie naudojami kitose programose apskritiminių magnetinių dichroizmui (37) ir kampinei koreliacijai tarp fotoelektronų ir fluorescencijos fotonų (39) po poliarizuoto atomo fotojonizacijos apskaičiuoti.

Programa FLUOR visiškai taip pat kaip ir FOTO pradžioje skaito iš bylos VALDO tarpinio ryšio koeficientus, po to iš atskirų bylų submatricinius elementus ir sklaidos fazes, surastus atskiriems termams  $LS$ . Po to, paprogramė MATRJ apskaičiuoja submatricinius elementus (2.59). Kitos paprogramės skaičiuoja:

GENKF sumavimo parametrus  $K_1, K_0, K_r, K_\lambda$  (5);

BETAF fluorescencijos spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametą  $\beta$  (18) nepoliarizuotam atomui;



19 pav. Programos fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos ir kampinės koreliacijos tarp fotoelektronų ir fluorescencijos fotonų fotojonizacijos procese parametrus skaičiuoti blokinė schema

ALIGNJ rikiavimo parametrus (2.75);

FCMD ir BCMDAS parametrus (41) fluorescencijos spinduliuotės po poliarizuotų atomų fotojonizacijos kampiniam pasiskirstymui;

ACPFUA ir BKEPU parametrus (28), reikalingus fotoelektronų ir fluorescencijos spinduliuotės kampinei koreliacijai surasti, kai jonizuojami nepoliarizuoti atomai;

ACPFPA ir BK KKK parametrus (39), reikalingus fotoelektronų ir fluorescencijos spinduliuotės kampinei koreliacijai surasti, kai jonizuojami poliarizuoti atomai.

#### Skaičiavimo rezultatai

Šarminių metalų atomai tinka MCDAD tirti, kadangi jie gali būti paruošti taip, kad jų pilnutinis judėjimo kiekio momentas  $\mathbf{J}$  ( $J = 1/2$ ) būtų orientuotas lygiagrečiai arba antilygiagrečiai apskritiminės poliarizacijos sklidimo kryptiai, t.y.  $M_0 = +1/2$  arba  $M_0 = -1/2$ . Kai jonizuojamas Na atomo 2p, o K – 3p elektronų sluoksnis,  $\text{Na}^+$  ir  $\text{K}^+$  sužadintos būsenos  $2p^5 3s \ ^1P_J$  ir  $3p^5 4s \ ^1P_J$  gali išnykti tiksliai jonams išspinduliuojant fluorescencijos fotonus. Todėl, šiame

skirsnyje gautų formulių praktiniam pritaikymui pademonstruoti parinktas šis procesas:

$$\begin{aligned} A(np^6(n+1)s^2S_{1/2}) + h\nu_1 &\rightarrow A^+(np^5(n+1)s^1P_1) + e(\varepsilon s, \varepsilon d) \\ &\rightarrow A^+(np^6\ ^1S_0) + e(\varepsilon s, \varepsilon d) + h\nu_2. \end{aligned} \quad (42)$$

Čia  $A=Na, K$  and  $A^+=Na^+, K^+$ .

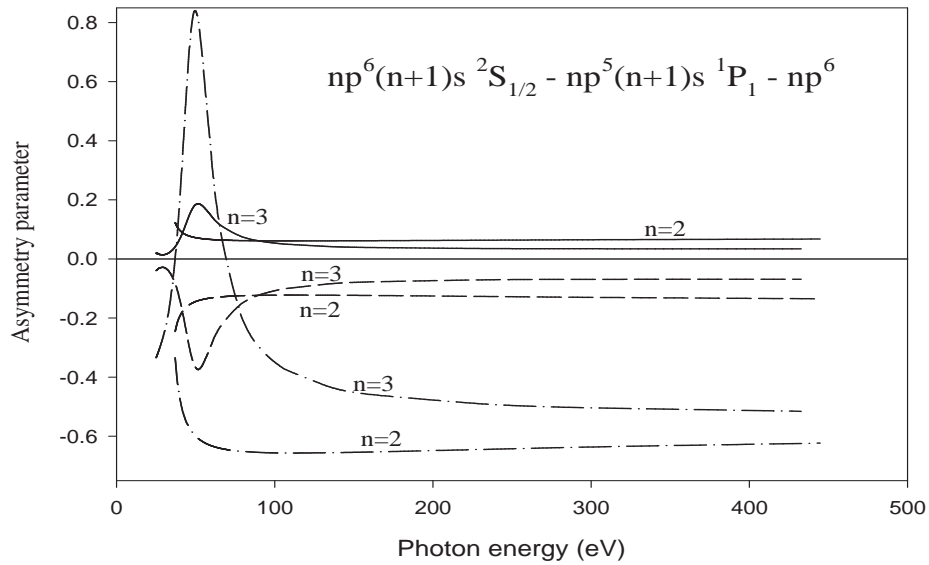
Fotojonizacijos submatriciniai elementai apskaičiuoti su programa PHION staigosios perturbacijos artinyje. Radiacinių šuolių submatriciniams elementams apskaičiuoti panaudota Froese Fischer programa [103]. Tolydinio spektro elektronų dalinių bangų radialiosioms funkcijoms surasti naudotas iššaldyto jono kamieno potencialas, o sistemos jonas+elektronas funkcijos skaičiuotos konfigūracijos vidurkiui atsižvelgiant į pakaitinius narius. Atomo radialiosios orbitalės naudotos fotojonizacijos submatriciniams elementams, o jono – elektrinio dipolinio šuolio operatoriaus submatriciniams elementams surasti. Fotojonizacijos submatriciniai elementai padauginami iš relaksacijos tikimybės, kuri lygi  $|\langle n_i p^5(n_i+1)s | n_f p^5(n_f+1)s \rangle|^2$  sanklotos integralo kvadratui. Čia  $i$  rodo pradinę, o  $f$  – galinę būsenas. Pradinės būsenos radialiosios orbitalės yra atomo, o galinės – jono.

Bandomieji skaičiavimai parodė, kad koreliacinės Na,  $Na^+$ , K ir  $K^+$  pataisos mažos, nes pagrindinės konfigūracijos daugiklis daugiakonfigūraciniame skleidinyje didesnis už 0,98. Tačiau svarbu atsižvelgti į tarpinių ryšių.  $Na^+ 2p^5 3s\ ^1P_1$  funkcija yra (2.120), o  $K^+ 3p^5 4s\ ^1P_1$  yra šitokia:

$$\Psi(3p^5 4s\ ^1P_1) = 0.81 \phi(3p^5 4s\ ^1P_1) + 0.59 \phi(3p^5 4s\ ^3P_1). \quad (43)$$

20 pav. pavaizduotas fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras  $\beta$ , vykstant šuoliui  $np^5(n+1)s^1P_1 \rightarrow np^6\ ^1S_0$  ( $n = 2, 3$ ) po nepoliarizuotų Na ir K atomų fotojonizacijos. Šio šuolio bangų ilgiai yra 37,207 nm ir 60,074 nm [?] atitinkamai Na ir K jonams.  $\beta$  vertės, apskaičiuotos su ilgio ir greičio formos elektrinio dipolinio šuolio operatoriais yra labai artimos, todėl 20 pav. pateikti tiksliai ilgio formos rezultatai. Na atomo atveju  $\beta$  parametrai, apskaičiuoti tiesinės ir apskritiminės poliarizacijos fotonams pastebimai priklauso nuo energijos tiksliai arti jonizacijos slenksčio. K atomui šie parametrai labai sparčiai keičiasi didėjant fotono energijai Kuperio minimumo srityje. Kadangi nuo fluorescencijos priklausantys nariai (20) - (22) nepriklauso nuo energijos, galima manyti, kad šio spartaus kitimo priežastis yra stipri rikiavimo parametro priklausomybė nuo fotono energijos.

21 pav. pavaizduota CMDAD parametro  $\Delta_c$  (33) priklausomybė nuo fluorescencijos spinduliuotės registravimo kampo, kai apskritimiškai poliarizuota spinduliuote jonizuojami poliarizuoti

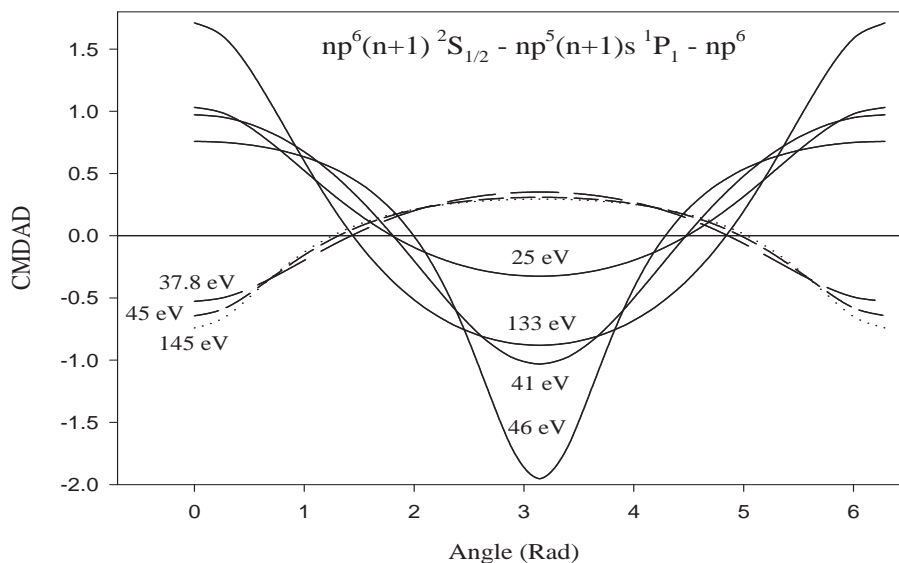


20 pav. Fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras po Na ir K atomų atitinkamai 2p ir 3p sluoksnių jonizacijos apskritimiškai (ištisinė kreivė) ir tiesiškai (brūkšninė kreivė) poliarizuota spinduliuote. Taškų ir brūšnelių kreivė yra orientacijos, jonizuojant apskritimiškai poliarizuota spinduliuote, indėlis.

Na ir K atomai. Iš paveikslėlio rezultatų matyti, kad  $\Delta_c$  vertės K atomui labai stipriai priklauso nuo fotono energijos, o Na atomui – visoms pateiktoms energijoms jos beveik vienodos.

### 3.2 Auger procesas

Atomo dvigubai sužadinta, kuri dar vadinama autojonizacine, ar su vakansija vidiniame sluoksnyje būseną yra nestabili ir gali išnykti dviem būdais. Kai vienas iš aukštesniame sluoksnyje esančių elektronų persoka į vakansiją arba vienas iš dviejų sužadintų elektronų persoka į žemesnę būseną, išspinduliuojamas fotonas. Šis procesas išnagrinėtas 3.1 skirsnyje. Tačiau, galimas ir kitas procesas, kurio metu vienas iš aukštesnio sluoksnio ar dvigubai sužadintų elektronų persoka į žemesnę būseną, o šuolio metu išlaisvinta energija perduodama kitam elektronui, kuris palieka atomą. Šis elektronas vadinamas Auger elektronu, kai išnyksta vidinio sluoksnio



21 pav. CMDAD parametro  $\Delta_c$  (33) priklausomybė nuo kampo. Trumpų, ilgų brūkšnelių ir taškinė kreivės yra Na 2p sluoksnio, o ištisinės – K 3p sluoksnio fotojonizacijos atveju.

vakansija, arba autojonizacijos elektronu, kai išnyksta dvigubai sužadinta būseną. Auger šuolio trukmė vadinamas laiko tarpas tarp vakansijos atsiradimo ir jos išnykimo.

Auger procesas paprastai nagrinėjamas kaip antrosios stadijos arba antrosios pakopos procesas po atomo jonizacijos fotonais, elektronais ar kitais krūvininkais. Aberg [112] nagrinėjo toki procesą vienpakopiame artinyje, kai suyra autojonizacinė ar su vakansija vidiniame sluoksnyje būseną, sukurta atomą jonizuojant elektronais ar fotonais, naudodamas nuo laiko priklausančią daugiakanalę sklaidos teoriją [113]. Sukurtasis metodas buvo pritaikytas Auger procesui po atomo fotojonizacijos tirti. Buvo nustatyta, kad interferencija tarp Auger ir fotoelektronų yra svarbi, kai abiejų elektronų energija panaši [114, 115, 116]. Tačiau, tais atvejais, kai tarpinės būsenos lygmenų smulkioji sandara daug didesnė už lygmens plotį, o pastarasis daug didesnis už hipersmulkiąją sandarą, kas paprastai galioja būsenoms su vakansija, galima taikyti daug paprastesnį dviejų stadijų artinį (žr. 2.1.2 skirsnį).

Pirmieji Auger elektronų kampinį pasiskirstymą po nepoliarizuotų atomų fotojonizacijos nagrinėjo Flüggė ir kt. [50] 1972 metais. Jie nenaudojo tankio matricos metodo, o tarpinio jono rikiavimo parametrus aprašė (1.158) formule, kurioje yra tarpinio jono būsenos projekci-

jos. Cleff ir Mehlhorn [40] panašiai ištyrė Auger elektronų kampinį pasiskirstymą po atomų jonizacijos elektronais. Visuose vėlesniuose kitų autorių straipsniuose jau naudojamas tankio matricos metodas. Juo naudojantis buvo surastos bendros išraiškos, aprašančios Auger elektronų kampinį pasiskirstymą [60] ir sukinio poliarizaciją [24, 54] po nepoliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais. Iš gautų formulių sekė, kad Auger elektronai išspinduliuojami neizotropiškai, kai atomo su vakansija pilnutinis judėjimo kiekio momentas  $J > 1/2$ . Šio neizotropiškumo priežastis – būsenos su vakansija, sukurtos gerai sufokusuotų dalelių pluošteliui susiduriant su atomų taikiniu, poliarizacija. Išrikiuotos būsenos suirimą galima panaudoti pačio autojonizacijos proceso tyrimui. Suyrant išrikiuotai būsenai gali pasireikšti ne tikrai Auger elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrija, bet ir sukinio poliarizacija, kurią matuojant taip pat galima gauti papildomos informacijos apie Auger procesą. Poliarizuotų elektronų spektroskopija leidžia surasti iš eksperimento Auger suirimo įvairių kanalų amplitudes ir santykinės sklaidos fazes [54]. Tuo pačiu metodu nagrinėtas ir Auger elektronų kampinis pasiskirstymas ir sukinio poliarizacija po atomo fotojonizacijos [57, 58].

Dviejų stadijų modelyje gaunama, kad Auger elektronų intensyvumas kis tuo pačiu dėsniumu, koku keičiasi vakansijos sukūrimo tikimybė priklausomai nuo fotono energijos [117]. Kadangi Auger tikimybė nuo energijos nepriklauso, keičiant atomą sužadinančios spinduliuotės energiją, galima išmatuoti interferenciją tarp tiesioginės ir rezonansinės fotojonizacijos kanalų [117] arba iš eksperimento nustatyti Auger šuolio submatricinius elementus [73].

Auger elektronų kampinis pasiskirstymas teoriškai tirtas ir po poliarizuotų atomų jonizacijos. Laikoma, kad poliarizuoti atomai sukuriama juos sužadinant spinduliuote [55, 56]. Po to tiriami vienas [56] arba du vienas po kito vykstantys Auger šuoliai [56, 73].

### 3.2.1 Bendroji išraiška

Konkretumo dėlei nagrinėsime Auger procesą, vykstantį po poliarizuoto atomo fotojonizacijos,

$$\begin{aligned}
 A(\alpha_0 J_0 M_0) + h\nu(\hat{\epsilon}_q, \mathbf{k}_0) &\rightarrow A^+(\alpha_1 J_1 M_1) + e^-(\mathbf{p}_1, m_1) \\
 &\rightarrow A^{2+}(\alpha_2 J_2 M_2) + e^-(\mathbf{p}_1, m_1) + e^-(\mathbf{p}_2, m_2). \quad (44)
 \end{aligned}$$

Čia  $\mathbf{p}_1$  ir  $\mathbf{p}_2$  – fotoelektrono ir Auger elektrono judėjimo kiekiai, o  $m_1$  ir  $m_2$  jų sukinio dedamosios.

Dviejų stadijų artinyje (44) tikimybę galima užrašyti šitaip:

$$\frac{dW(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega_1 d\Omega_2}$$

$$= \sum_{M_1, M'_1} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 M'_1 \mathbf{p}_1 m_1)}{d\Omega_1} \cdot \frac{dW^A(\alpha_1 J_1 M_1 M'_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega_2}. \quad (45)$$

Šioje išraiškoje pirmasis sumos narys yra diferencialinis fotojonizacijos skerspjūvis (2.52). Antrasis sumos narys – tarpinio jono Auger šuolio tikimybė, kurios išraiška pirmajame trikdžių teorijos artinyje yra:

$$\begin{aligned} & \frac{dW^A(\alpha_1 J_1 M_1 M'_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega_2} \\ &= 2\pi \langle \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_2 m_2 | H | \alpha_1 J_1 M_1 \rangle \langle \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_2 m_2 | H | \alpha_1 J_1 M'_1 \rangle^*. \end{aligned} \quad (46)$$

Čia  $H$  – elektrostatinės sąveikos operatorius.

Į (46) išraišką įrašome elektronų banginių funkcijų skleidinius dalinėmis bangomis (2.46) ir atsižvelgiame į galimybę nustatyti proceso dalyvių poliarizaciją kryptimis, kurios skiriasi nuo laboratorinės. Tuomet (46) galima perrašyti šitaip:

$$\begin{aligned} & \frac{dW^A(\alpha_1 J_1 M_1 M'_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega_2} = 2\pi \sum_{\lambda_1, \lambda_2} \frac{[(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)]^{1/2}}{4\pi} \\ & \times \langle \alpha_2 J_2 M_2 \varepsilon_2 \lambda_1 0 m_2 | H | \alpha_1 J_1 M_1 \rangle \langle \alpha_2 J_2 M_2 \varepsilon_2 \lambda_2 0 m_2 | H | \alpha_1 J_1 M'_1 \rangle^* \\ & = 2\pi \sum_{\lambda_1, \mu_1, \tilde{M}_2, \tilde{m}_2, \tilde{M}_1, \lambda_2, \mu_2, \tilde{M}'_2, \tilde{m}'_2, \tilde{M}'_1} \frac{[(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)]^{1/2}}{4\pi} \\ & \times \langle \alpha_2 J_2 \tilde{M}_2 \varepsilon_2 \lambda_1 \mu_1 \tilde{m}_2 | H | \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 \rangle \langle \alpha_2 J_2 \tilde{M}'_2 \varepsilon_2 \lambda_2 \mu_2 \tilde{m}'_2 | H | \alpha_1 J_1 \tilde{M}'_1 \rangle^* \\ & \times D_{0\mu_1}^{*\lambda_1}(\hat{p}) D_{\tilde{M}_2 M_2}^{*J_2}(\hat{J}_2) D_{\tilde{M}_1 M_1}^{J_1}(\hat{J}_1) D_{\tilde{m}_2 m_2}^{*s}(\hat{s}) D_{0\mu_2}^{\lambda_2}(\hat{p}) D_{\tilde{M}'_2 M_2}^{J_2}(\hat{J}_2) D_{\tilde{M}'_1 M'_1}^{*J_1}(\hat{J}_1) D_{\tilde{m}'_2 m_2}^s(\hat{s}) \end{aligned} \quad (47)$$

Matricinio elemento  $\langle \alpha_2 J_2 M_2 \lambda_1 \mu m'_s | H | \alpha_1 J_1 M_1 \rangle$  kampinę dalį vaizduoja  $D_1$  diagrama 22 pav. Joje judėjimo kiekio momentų, vazduojamų atviromis linijomis, projekcijos nustatomos kiekvienai dalelei skirtingomis kryptimis, apie ką byloja prie jų prijungtos Vignerio posūkių matricos. Jas vaizduoja skrituliukai su D raide viduryje. Stačiakampiai  $D_1$  ir kitose diagramose, pažymėti  $C_1$  ir  $C_2$ , vaizduoja konfigūracijos orbitinę ir sukininę dalis bei kitus kvantinius skaičius,  $L_1, S_1$  ir  $L_2, S_2$  – pradinės ir galinės būsenų pilnutiniai orbitinis ir sukininis judėjimo kiekio momentai. Du skrituliukai, susieti plonomis linijomis, yra elektrostatinės sąveikos operatoriai, o tos linijos – Auger procese dalyvaujančių elektronų orbitiniai judėjimo kiekio momentai.

Matricinių elementų išraiškų yra patogų ieškoti bendroje visoms dalelėms koordinačių sistemoje. Pereiti nuo matricinio elemento  $\langle \alpha_2 J_2 M_2 \lambda_1 \mu m'_s | H | \alpha_1 J_1 M_1 \rangle$  prie matricinio elemento  $\langle \alpha_2 J_2 \tilde{M}_2 \varepsilon_2 \lambda_1 \mu_1 \tilde{m}_2 | H | \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 \rangle$  galima nupjaunant Vignerio posūkių matricas. Dabar pats laikas pasirinkti atvirų linijų judėjimo kiekio momentų jungimo tvarką. Pasirenkame šitokią judėjimo kiekio momentų jungimo tvarką:  $\lambda_1 + \mathbf{s} = \mathbf{j}_1$  and  $\mathbf{J}_2 + \mathbf{j}_1 = \mathbf{J}_1$ . Tuomet

$$\langle \alpha_2 J_2 \tilde{M}_2 \lambda_1 \mu \tilde{m}_2 | H | \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 \rangle$$



$$= \sum_{j_1 \tilde{m}} \langle \alpha_2 J_2 \lambda(j_1) J_1 || H || \alpha_1 J_1 \rangle \begin{bmatrix} \lambda & s & j_1 \\ \mu & \tilde{m}_2 & \tilde{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_2 & j_1 & J_1 \\ \tilde{M}_2 & \tilde{m} & \tilde{M}_1 \end{bmatrix}. \quad (48)$$

Submatricinį elementą  $\langle \alpha_2 J_2 \lambda(j_1) J_1 || H || \alpha_1 J_1 \rangle$  vaizduoja diagrama  $D_2$ . Klebšo ir Gordano koeficientų sumą pagal  $\tilde{m}$  ir prijungtas nupjautąsias Vignerio posūkių matricas vaizduoja diagrama  $D_3$ . Diagrama  $D_4$  ateina iš kompleksiškaai jungtinio matricinio elemento (žr. (47) išraišką). Joje  $J_1$  ir  $J_2$  štrichuoti, norint išvengti painiavos, kuri gali kilti, kai skirtingos linijos diagramose žymimos tomis pačiomis raidėmis. Pasinaudojame (1.107) formule  $J_2, \lambda_1, \lambda_2$  ir  $s$  bei (1.106) formule  $J_1$  judėjimo kiekio momentams. Jose esančius Klebšo ir Gordano koeficientus panaudojame iš  $D_3$  ir  $D_4$  diagramų  $D_5$  diagramai gauti. Joje yra  $K_1, K_2, K'_\lambda$  ir  $K_s$  atviros linijos, kurias galima uždaryti, panaudojant vienetai lygią diagramą  $D_6$ . Ją pjauname per linijas  $K_1, K_2, K'_\lambda$  ir  $K_s$ , o vieną iš atsiradusių apibendrintų Klebšo ir Gordano koeficientų prijungiame prie atvirų  $D_5$  diagramos linijų. Gauname invariantišką posūkių erdvėje atžvilgiu judėjimo kiekio momentų diagramą  $D_7$  ir orientacijas erdvėje aprašančią diagramą  $D_8$ . Suskaičiavę storas linijas  $D_5, D_6, D_7$  ir  $D_8$  diagramose, galime užrašyti šį sąryšį:

$$D_5 D_6 = \frac{1}{2K_1 + 1} \sum_{K'} D_7 D_8. \quad (49)$$

Vardiklyje atsiranda daugiklis  $2K_1 + 1$  todėl, kad diagramoje  $D_6$  išnyksta pilnai pastorinta linija  $K_1$ . Diagramą  $D_7$ , perpjovę per linijas  $j_1, K'$  ir  $j_2$ , gauname du  $9j$  koeficientus, kuriuos 22 pav. vaizduoja diagramos  $D_9$  ir  $D_{10}$ .

Auger šuolio diferencialinės tikimybės galutinė išraiška gali būti užrašyta, panaudojant  $D_2, D_8, D_9$  ir  $D_{10}$  diagramas, šitaip:

$$\begin{aligned} & \frac{dW^A(\alpha_1 J_1 M_1 M'_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega_2} = 2\pi(2J_1 + 1) \sum_{\lambda_1, \lambda_2, j_1, j_2} (2\lambda_1 + 1) \\ & \quad \times \langle \alpha_2 J_2 \varepsilon_2 \lambda_1(j_1) J_1 || H || \alpha_1 J_1 \rangle \langle \alpha_2 J_2 \varepsilon_2 \lambda_2(j_2) J_1 || H || \alpha_1 J_1 \rangle^* \\ & \quad \sum_{K_1, K_2, K'_\lambda, K'_s, K'} [(2\lambda_2 + 1)(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)(2s + 1)(2K' + 1)]^{1/2} / (2K_1 + 1) \\ & \quad \times \begin{bmatrix} J_2 & j_1 & J_1 \\ J_2 & j_2 & J_1 \\ K_2 & K' & K_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_2 & s & j_2 \\ K_\lambda & K'_s & K' \\ \lambda_1 & s & j_1 \end{bmatrix} \sum_{N_1, N_2, N'_\lambda, N'_s, N'} \begin{bmatrix} K'_\lambda & K'_s & K' \\ N'_\lambda & N_s & N' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_2 & K' & K_1 \\ N_2 & N' & N_1 \end{bmatrix} \\ & \quad \times T_{N_1 N'_1}^{*K_1}(J_1, J_1, M_1, M'_1 | \hat{J}_1) T_{N'_\lambda}^{K'_\lambda}(\lambda_1, \lambda_2, 0 | \hat{p}_2) T_{N'_s}^{K'_s}(s, s, m_2 | \hat{s}) T_{N_2}^{K_2}(J_2, J'_2, M_2 | \hat{J}_2). \quad (50) \end{aligned}$$

Dabar (45) išraišką galima sumuoti  $M_1$  ir  $M'_1$  atžvilgiu. Pagal 2.1.4 skirsnyje aprašytą metodiką sumuojant ateina daugiklis  $(2K_1 + 1)/(2J_1 + 1)$  (2.24), kuris padalinamas tarp pirmojo ir antrojo procesų šitaip: pirmajam paliekama  $(2K_1 + 1)^{1/2}$ , o antrajam  $-(2K_1 + 1)^{1/2}/(2J_1 + 1)$ ,

kad autojonizacijos pilnoji tikimybė būtų teisingai apibrėžta. Tuomet (44) proceso tikimybę galima užrašyti tarpinės būsenos multipolų suma [118]:

$$\begin{aligned} & \frac{dW(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega_1 d\Omega_2} \\ &= \sum_{K_1, N_1} \frac{d\sigma_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_1 m_1)}{d\Omega_1} \cdot \frac{dW_{K_1 N_1}^A(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega_2}. \end{aligned} \quad (51)$$

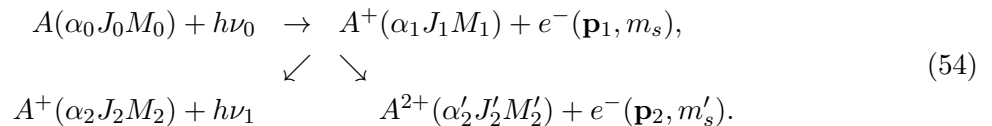
Čia pirmasis sumos narys yra fotojonizacijos diferencialinis skerspjūvis (2.54), o –

$$\begin{aligned} & \frac{dW_{K_1 N_1}^A(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega_2} \\ &= 2\pi \sum_{K', K_2, K'_\lambda, K'_s} \mathcal{A}^a(K_1, K_2, K'_\lambda, K'_s, K') \sum_{N', N_2, N'_\lambda, N'_s} \begin{bmatrix} K'_\lambda & K'_s & K' \\ N'_\lambda & N'_s & N' \end{bmatrix} \\ & \times \begin{bmatrix} K_2 & K' & K_1 \\ N_2 & N' & N_1 \end{bmatrix} T_{N_2}^{K_2}(J_2, J_2, M_2 | \hat{J}_2) T_{N'_s}^{K'_s}(s, s, m_2 | \hat{s}) \sqrt{4\pi} Y_{K'_\lambda N'_\lambda}(\theta_2, \phi_2), \end{aligned} \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^a(K_1, K_2, K'_\lambda, K'_s, K') &= \sum_{\lambda_1, j_1, \lambda_2, j_2} \langle \alpha_2 J_2 \varepsilon_2 \lambda_1(j_1) J_1 || H || \alpha_1 J_1 \rangle \langle \alpha_2 J_2 \varepsilon_2 \lambda_2(j_2) J_1 || H || \alpha_1 J_1 \rangle^* \\ & \times [(2K' + 1)(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2s + 1)/(2K_1 + 1)]^{1/2} \\ & \times \begin{bmatrix} J_2 & j_1 & J_1 \\ J_2 & j_2 & J_1 \\ K_2 & K' & K_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_2 & s & j_2 \\ K'_\lambda & K'_s & K' \\ \lambda_1 & s & j_1 \end{bmatrix} (-1)^{\lambda_2} \begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & K'_\lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (53)$$

Išraiškos (51) ir (52) yra pačios bendriausios fotojonizacijos ir Auger šuolio dviejų stadijų artinyje diferencialinės tikimybės išraiškos. Jos aprašo visų pradinės ir galinės būsenų poliarizacijas, kampinius pasiskirstymus bei fotoelektrono ir Auger elektrono kampines koreliacijas.

Kaip jau buvo minėta, fotojonizacijos (taip pat jonizacijos kitomis dalelėmis) metu atsiradusi vakansija gali išnykti Auger ir radiaciniu būdais. Tuomet galima interferencija tarp šių abiejų procesų. Radiacinio suirimo kanalo buvimas turės įtakos autojonizacijai, o autojonizacijos – spinduliavimui. Pilną proceso aprašymą galima įsivaizduoti šitaip:



Dviejų stadijų artinyje paprasčiausias būdas atsižvelgti į kito kanalo buvimą yra proceso (44) tikimybės (52) padauginimas iš išsišakojimo daugiklio

$$R_a = \frac{\Gamma_a}{\Gamma_r + \Gamma_a}$$

Auger proceso atveju arba iš

$$R_r = \frac{\Gamma_r}{\Gamma_r + \Gamma_a}$$

radiacinio šuolio, nagrinėto 3.1 skirsnyje, atveju.  $\Gamma_r$  ir  $\Gamma_a$  yra radiacinis ir autojonizacinis lygmenų pločiai.

### 3.2.2 Auger proceso pilnutinė tikimybė po nepoliarizuotų atomų fotojonizacijos

Pats paprasčiausias atvejis yra nepoliarizuotų atomų jonizacija nepoliarizuota spinduliuote, kai fotoelektrono ir Auger elektrono bei dvigubo jono galutinės būšemos nėra registruojamos. Proceso (44) pilnutinei tikimybei surasti reikia (51) išraišką sumuoti dvigubo jono ir abiejų elektronų judėjimo kiekio momento projekcijų, integruoti elektronų kampų ir vidurkinti atomo pradinės bei fotono būsenų atžvilgiu. Gauname, kad visi sumavimo parametrai (51)–(3.2.1) išraiškose lygūs nuliui. Belieka užrašyti ieškomą išraišką dipoliniame spinduliuotės artinyje:

$$\begin{aligned} & dW(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) \\ &= \frac{1}{2J_0 + 1} \sum_{M_0, M_1, M_2, m_1, m_2, q} \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \frac{dW(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega_1 d\Omega_2} \\ &= \frac{4\pi}{2J_0 + 1} \mathcal{B}^{ph}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1) 2\pi \mathcal{A}^a(0, 0, 0, 0, 0) = \sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) W^a(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2). \end{aligned} \quad (55)$$

Čia  $\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)$  – fotojonizacijos pilnutinis skerspjūvis dipoliniame artinyje (2.57), o

$$W^a(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) = 2\pi \mathcal{A}^a(0, 0, 0, 0, 0) = 2\pi \sum_{\lambda_1, j_1} |\langle \alpha_2 J_2, \varepsilon_2 \lambda_1(j_1) J_1 || H || \alpha_1 J_1 \rangle|^2 \quad (56)$$

yra nepoliarizuoto jono pilnutinė autojonizacijos tikimybė. Matome, kad šiuo atveju dviejų stadijų proceso pilnutinė tikimybė yra lygi dviejų nepriklausomų procesų pilnutinių tikimybių sandaugai.

Autojonizacinių būsenų energijos ir autojonizacijos tikimybės teoriškai tirtos trielektroniuose Li [119], Be<sup>+</sup> [120], C<sup>3+</sup> [121], nuo B iki Ne [122] jonuose, Ne<sup>+</sup> [123] ir Ne<sup>2+</sup> [124], Na tipo chloro ir argono jonuose [125], K atome [126], žemės šarminiuose Ca, Sr ir Ba atomuose [127, 128, 129, 130].

### 3.2.3 Auger elektronų kampinis pasiskirstymas nepoliarizuotiems atomams

Auger elektronų kampiniam pasiskirstymui po nepoliarizuotų atomų fotojonizacijos aprašyti galima gauti paprastesnę diferencialinės tikimybės išraišką. Tam tikslui reikia bendrąją išraišką (51) sumuoti Auger ir fotoelektronų sukininių ir dvigubai jonizuoto jono judėjimo kiekio momento dedamųjų, vidurkinti atomo judėjimo kiekio momento dedamųjų ir integruoti fotoelektrono kampų atžvilgiu. Gauname, kad  $K_0 = N_0 = K_\lambda = N_\lambda = K_s = N_s = K_2 = N_2 = K'_\lambda = N'_\lambda = 0$ ,  $K_r = K_j = K_1$ . Sutapatinę laboratorinę  $z$  ašį su spinduliuotės kryptimi, gauname, kad  $N_r = N_1 = N_j = 0$ . Įrašius šias reikšmes į (51), ieškoma išraiška yra šitokia:

$$\frac{dW(\alpha_0 J_0 \hat{\epsilon}_q \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2)}{d\Omega_2} = \frac{1}{2J_0 + 1} \sum_{K_1} \mathcal{A}(K_1, 0, K_1, 0, K_1) B(K_1) P_{K_1}(\cos \theta_2), \quad (57)$$

kur  $B(K_1)$  yra (16) išraiška. Nepoliarizuotos elektrinės dipolinės spinduliuotės atveju ( $k = 1$ ,  $q = \pm 1$ ,  $K_1 = 0, 2$ ) (57) formulę galime užrašyti plačiai naudojamu pavidalu:

$$\frac{dW(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2)}{d\Omega_2} = A_0 B_0 [1 + A_2 B_2 P_2(\cos \theta_{p_2})]. \quad (58)$$

Čia  $A_0 B_0$  – pilnoji proceso tikimybė, padalinta iš  $4\pi$ ,

$$\begin{aligned} A_2 &= (-1)^{J_1 + J_2 - s} \sum_{\lambda_1, \lambda_2, j_1, j_2} \langle \alpha_2 J_2 \epsilon_2 \lambda_1(j_1) J_1 || H || \alpha_1 J_1 \rangle \\ &\times \langle \alpha_2 J_2 \epsilon_2 \lambda_2(j_2) J_1 || H || \alpha_1 J_1 \rangle^* [(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)]^{1/2} \\ &\times \begin{Bmatrix} j_2 & J_1 & J_2 \\ J_1 & j_1 & 2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda_2 & j_2 & s \\ j_1 & \lambda_1 & 2 \end{Bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &\times \left[ \sum_{\lambda_1, j_1} |\langle \alpha_2 J_2 \epsilon_2 \lambda_1(j_1) J_1 || H || \alpha_1 J_1 \rangle|^2 \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (59)$$

$$\begin{aligned} B_2 &= \sqrt{\frac{3}{2}} \sum_{\lambda, j, J, J'} (-1)^{J_1 + J_0 + 1 + j + J + J'} (2J + 1)(2J' + 1) \langle \alpha_1 J_1 \epsilon_1 \lambda(j) J || Q^{(1)} || \alpha_0 J_0 \rangle \\ &\times \langle \alpha_1 J_1 \epsilon_1 \lambda(j) J' || Q^{(1)} || \alpha_0 J_0 \rangle^* \begin{Bmatrix} 1 & J' & J_0 \\ J & 1 & 2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_1 & J' & j \\ J & J_1 & 2 \end{Bmatrix} \\ &\times \left[ \sum_{\lambda, j, J} (2J + 1) |\langle \alpha_1 J_1 \epsilon_1 \lambda(j) J || Q^{(1)} || \alpha_0 J_0 \rangle|^2 \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (60)$$

Daugiklis  $A_2 B_2$  yra Auger elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras.  $B_2$  aprašo tarpinio jono rikiavimą, o  $A_2$  priklauso tiksliai nuo jono pradinės ir galinės būsenų parametru. Jo išraiška sutampa su Kabachnik ir Sazhina gauta ja [54].

### 3.2.4 Auger elektronų sukinių poliarizacija nepoliarizuotiems atomams

Norint surasti (44) proceso diferencialinio skerspjūvio formulę tam atvejui, kai nepoliarizuotą atomą jonizuoja poliarizuota spinduliuotė, bet nei fotoelektronai, nei dvigubai jonizuotas atomas neregistruojami, reikia (51) išraišką sumuoti  $M_2$ ,  $m_1$  atžvilgiu, integruoti fotoelektrono kampų ir vidurkinti pradinio atomo būsenų atžvilgiu. Gauname  $K_0 = N_0 = K_s = N_s = K_2 = N_2 = K_\lambda = N_\lambda = 0$ . Įrašome šias vertes į (52) ir (2.54) ir užrašome ieškomo proceso tikimybę:

$$\begin{aligned} \frac{dW(\alpha_0 J_0 \hat{e}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega_2} &= \frac{1}{2J_0 + 1} \sum_{K_1} B(K_1) P_{K_1}(\cos \theta_0) \\ &\times \sum_{K'_\lambda, K'_s, N} A(K'_\lambda, K'_s, K_1) \begin{bmatrix} K'_\lambda & K'_s & K_1 \\ N & -N & 0 \end{bmatrix} Y_{K'_\lambda N}(\theta_2, \phi_2) Y_{K'_s - N}(\theta_s, \phi_s). \end{aligned} \quad (61)$$

Šioje išraiškoje  $P_{K_1}(\cos \theta_0)$  lygus vienetui, kai laboratorinės  $z$  ašies kryptis sutapatinama su nepoliarizuotos ir apskritimiškai poliarizuotos spinduliuotės kryptimi arba su elektrinio vektoriaus kryptimi tiesiškai poliarizuotai spinduliuotei ( $\theta_0 = 0$ ). Tuomet Auger elektrono išlėkimo kampai yra  $\theta_2$  ir  $\phi_2$ , o jo sukinių orientacijos kampai yra  $\theta_s$  ir  $\phi_s$ . Jie matuojami nuo laboratorinės  $z$  ašies.  $A(K'_\lambda, K'_s, K_1)$  išraiška yra šitokia:

$$A(K'_\lambda, K'_s, K_1) = (-1)^{s-m_s} \frac{4\pi}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} s & s & K'_s \\ m'_s & -m'_s & 0 \end{bmatrix} \mathcal{A}(K_1, 0, K'_\lambda, K'_s, K_1). \quad (62)$$

Galime surasti sukinių poliarizacijos laipsnį, kurio išraiška yra:

$$\begin{aligned} P &= \frac{\frac{dW(m_s=+1/2)}{d\Omega} - \frac{dW(m_s=-1/2)}{d\Omega}}{\frac{dW(m_s=+1/2)}{d\Omega} + \frac{dW(m_s=-1/2)}{d\Omega}} \\ &= \frac{\sum_{K'_\lambda, K_1, N} B(K_1) A(K'_\lambda, 1, K_1) \begin{bmatrix} K'_\lambda & 1 & K_1 \\ N & -N & 0 \end{bmatrix} Y_{K'_\lambda N}(\theta_2, \phi_2) Y_{K'_s - N}(\theta_s, \phi_s)}{\sum_{K_1} B(K_1) A(K_1, 0, K_1) Y_{K_1 0}(\theta_2, \phi_2)}. \end{aligned} \quad (63)$$

Paskutinytis (63) narys gautas atsižvelgiant į tą faktą, kad skaitiklyje susiprastina nariai su  $K'_s = 0$ , o vardiklyje –  $K'_s = 1$  ( $K'_s = 0, 1$ ). Įrašius  $\mathcal{A}(K_1, 0, K'_\lambda, K'_s, K_1)$  išraišką į  $A(K'_\lambda, K'_s, K_1)$  formulę (62) ir pakeitus tenzorių rangų jungimo tvarką iš  $K'_\lambda, K'_s, K_1$  į  $K'_s, K'_\lambda, K_1$ , gaunama  $A(K'_\lambda, K'_s, K_1)$  išraiška, sutampanti su Klar straipsnio [24] (13) formule. Auger elektronų sukinių poliarizacijai fiksuotoms kampų reikšmėms aprašyti Klar [24] įvedė parametrus  $\xi_K$ ,  $\gamma_K$ ,  $\beta_K$  ir  $\delta_K$ , kuriuos naudoja ir vėlesni autoriai.

### 3.2.5 Auger elektronų ir fotoelektronų kampinė koreliacija nepoliarizuotiems atomams

Diferencialinės tikimybės bendrosios išraiškos paprastesnis atvejis, patogus nagrinėti kampines koreliacijas tarp foto ir Auger elektronų po nepoliarizuotų atomų jonizacijos poliarizuota spinduliuote gaunamas (51) sumuojant elektronų sukinių ir dvigubo jono dedamųjų bei vidurkinant atomo būsenų atžvilgiu. Ji yra šitokia:

$$\frac{dW(\alpha_0 J_0 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2)}{d\Omega_1 d\Omega_2} = \frac{1}{2J_0 + 1} \sum_{K_1 N_1} \mathcal{A}(K_1, 0, K_1, 0, K_1) \left[ \frac{4\pi}{2K_1 + 1} \right]^{1/2} Y_{K_1 N_1}(\theta_2, \phi_2) \\ \times \sum_{K_r, K_\lambda} B'(K_1, K_\lambda, K_r) \sum_{N_r, N_\lambda} \begin{bmatrix} K_1 & K_\lambda & K_r \\ N_1 & N_\lambda & N_r \end{bmatrix} \frac{4\pi}{\sqrt{2K_r + 1}} Y_{K_r N_r}^*(\theta_0, \phi_0) Y_{K_\lambda N_\lambda}(\theta_1, \phi_1), \quad (64)$$

kur

$$B'(K_1, K_\lambda, K_r) = \frac{1}{2J_0 + 1} \left[ \frac{(2K_1 + 1)(2K_r + 1)}{2k + 1} \right]^{1/2} (-1)^{k-q} \left[ \frac{2K_1 + 1}{2k + 1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} k & k & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \\ \times \mathcal{B}(K_1, 0, K_r, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_1). \quad (65)$$

Čia  $\theta_0$  ir  $\phi_0$  – spinduliuotės,  $\theta_1$  ir  $\phi_1$  – fotoelektrono,  $\theta_2$  ir  $\phi_2$  – Auger elektrono polinis ir azimutinis kampai nuo laboratorinės  $z$  ašies.

Sutapatinus laboratorinę  $z$  ašį su spinduliuotės kryptimi (nepoliarizuotai ir apskritimiškai poliarizuotai) arba su elektrinio lauko kryptimi (tiesiškai poliarizuotai) spinduliuotei, (64) išraiška supaprastėja, nes  $N_r = 0$ . Elektrinio dipolinio artinio atveju galima gauti  $A(K_1)$  ir  $B(K_1, K_\lambda, K_r)$  išraiškas, sutampančias su [133] straipsnyje gautomis  $a$  ir  $b$  koeficientams.

### 3.2.6 Auger elektronų kampinis pasiskirstymas poliarizuotiems atomams

Diferencialinės tikimybės išraišką surasime (51) sumuodami  $m_1$ ,  $m_2$ ,  $M_2$  ir integruodami fotoelektrono kampų atžvilgiu. Įrašę gautas  $K_s = K'_s = K_2 = K_\lambda = 0$  reikšmes į (51), surandame šią išraišką:

$$\frac{dW(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2)}{d\Omega_2} = \sum_{K_1 N_1} \left[ \frac{4\pi}{2K_1 + 1} \right]^{1/2} \mathcal{A}(K_1, 0, K_1, 0, K_1) Y_{K_1 N_1}(\theta_2, \phi_2) \\ \times \sum_{K_r, K_0} B''(K_0, K_r, K_1) \sum_{N_r, N_0} \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ N_0 & N_r & N_1 \end{bmatrix} 4\pi Y_{K_0 N_0}^*(\theta_A, \phi_A) Y_{K_r N_r}^*(\theta_0, \phi_0), \quad (66)$$

kur

$$B''(K_0, K_r, K_1) = (-1)^{J_0 - M_0 + k - q} \left[ \frac{2K_1 + 1}{(2J_0 + 1)(2k + 1)} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} k & k & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} \\ \times \mathcal{B}(K_1, K_0, K_r, 0, 0, 0, K_1). \quad (67)$$

Čia  $\theta_0$  ir  $\phi_0$ ,  $\theta_2$  ir  $\phi_2$ ,  $\theta_A$  ir  $\phi_A$  yra atitinkamai spinduliuotės, Auger elektrono ir atomo pilnutinio judėjimo kiekio momento  $\mathbf{J}_0$  orientacijos kampai atžvilgiu  $z$  ašies.

Auger elektronų kampinio pasiskirstymo magnetinio dichroizmo (MDAD) laipsnis yra apibrėžiamas formule

$$a = \frac{I(J_0 M_0) - I(J_0 - M_0)}{I(J_0 M_0) + I(J_0 - M_0)}, \quad (68)$$

kur  $I(J_0 M_0) = dW(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2) / d\Omega_2$ . Į (68) įrašius į (67) ir atlikus veiksmus, gaunama, kad skaitiklyje lieka nariai su  $K_0$  nelyginėmis vertėmis, o vardiklyje – lyginėmis. Tuomet

$$a = \left\{ \sum_{K_1 N_1} (2K_1 + 1)^{-1/2} A(K_1) Y_{K_1 N_1}(\theta_2, \phi_2) \sum_{K_r, K_0 = \text{odd}} B(K_0, K_r, K_1) \sum_{N_r, N_0} \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ N_0 & N_r & N_1 \end{bmatrix} \right. \\ \left. \times Y_{K_0 N_0}^*(\theta_A, \phi_A) Y_{K_r N_r}^*(\theta_0, \phi_0) \right\} \left\{ \sum_{K_1 N_1} (2K_1 + 1)^{-1/2} A(K_1) Y_{K_1 N_1}(\theta_2, \phi_2) \sum_{K_r, K_0 = \text{even}} B(K_0, K_r, K_1) \right. \\ \left. \times \sum_{N_r, N_0} \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ N_0 & N_r & N_1 \end{bmatrix} Y_{K_0 N_0}^*(\theta_A, \phi_A) Y_{K_r N_r}^*(\theta_0, \phi_0) \right\}^{-1}. \quad (69)$$

Auger elektronų MDAD laipsnio(69) išraiška supaprastėja, parinkus atomo pilnutinio judėjimo kiekio momento kryptį išilgai spinduliuotės krypties, kuri sutampa su  $z$  ašimi. Tuomet  $N_1 = N_r = N_0 = 0$ , ir

$$a = \frac{\sum_{K_1} A(K_1) P_{K_1}(\theta) \sum_{K_0 = \text{odd}} B(K_0, 1, K_1) [(2K_r + 1)(2K_0 + 1)]^{1/2} \begin{bmatrix} K_0 & 1 & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}{\sum_{K_1} A(K_1) P_{K_1}(\theta) \sum_{K_r = 0, 2, K_0 = \text{even}} B(K_0, K_r, K_1) \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}. \quad (70)$$

Čia  $K_0 \leq 2L_0$ ,  $0 \leq K_1 \leq \min(2J_1, 2\lambda_{max})$ , kur  $\lambda_{max}$  yra didžiausia  $\lambda_1$  vertė.

Šitaip parinkus atomo pilnutinio judėjimo kiekio momento kryptį, tikrai Auger elektronų apskritiminis MDAD (CMDAD) nelygus nuliui. Ši išvada seka iš Klebšo ir Gordano koeficientų, kurie nelygūs nuliui tikrai esant lyginei  $K_0 + K_r + K_1$  sumai. Nepoliarizuotai ir tiesiškai poliarizuotai šviesai  $K_r = 0, 2$ , o apskritiminės poliarizacijos – galimas ir  $K_r = 1$ , dėl kurio (70) nelygus nuliui. Magnetinis dichroizmas plačiau nagrinėtas [131] darbe.

### 3.2.7 Auger elektronų ir fotoelektronų kampinė koreliacija poliarizuotiems atomams

Kampinei koreliacijai tarp foto ir Auger elektronų po poliarizuotų atomų fotojonizacijos aprašyti galima surasti paprastesnę už (51) formulę. Reikia (51) sumuoti abiejų elektronų sukinio dedamųjų  $m_1$  ir  $m_2$  atžvilgiu. Įrašome  $K_s = K'_s = 0$  į (51) ir gauname šią išraišką:

$$\begin{aligned} \frac{dW(\alpha_0 J_0 M_0 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{P}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{P}_2)}{d\Omega_1 d\Omega_2} &= \sum_{K_1 N_1} \left[ \frac{4\pi}{2K_1 + 1} \right]^{1/2} Y_{K_1 N_1}(\theta_2, \phi_2) \mathcal{A}(K_1, 0, K_1, 0, K_1) \\ &\times \sum_{K_0, K_r, K_\lambda, K} B'''(K_0, K_r, K_\lambda, K_1, K) \sum_{N_0, N_r, N_\lambda, N} \begin{bmatrix} K_1 & K_\lambda & K \\ N_1 & N_\lambda & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_0 & K_r & K \\ N_1 & N_r & N \end{bmatrix} \\ &\times 4\pi \left[ \frac{4\pi}{2K_r + 1} \right]^{1/2} Y_{K_r N_r}^*(\theta_0, \phi_0) Y_{K_0 N_0}^*(\theta_A, \phi_A) Y_{K_\lambda N_\lambda}(\theta_1, \phi_1), \end{aligned} \quad (71)$$

kur

$$\begin{aligned} B'''(K_0, K_r, K_\lambda, K_1, K) &= (-1)^{J_0 - M_0 + k - q} \left[ \frac{2K_1 + 1}{(2J_0 + 1)(2k + 1)} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} k & k & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} \mathcal{B}(K_1, K_0, K_r, K_\lambda, 0, K_\lambda, K). \end{aligned} \quad (72)$$

### 3.2.8 Kompiuterinė programa

Auger elektronų po atomo fotojonizacijos kampinio pasiskirstymo ir poliarizacijos bei kampinės koreliacijos tarp foto ir Auger elektronų parametrus skaičiuoja programa, kurios blokinė schema parodyta 23 pav. Ši programa, naudodama iš duomenų bylos perskaitytus submatricinius elementus ir sklaidos fazes, apskaičiuoja tarpinio ryšio artinio fotojonizacijos submatricinius elementus (paprogramė MATRJ aprašyta programoje PHOTO 2 skyriuje) ir nustato sumavimo parametrus  $K_1$ ,  $K_0$ ,  $K_r$ ,  $K_\lambda$ ,  $K_s$ ,  $K_j$ ,  $K$  (paprogramė GENKA). Toliau ji kreipiasi į paprogrames šiems parametrų apskaičiuoti:

- Auger elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras (62) (paprogramė BETAA su orientacijos ir rikiavimo parametrais iš ALIGNJ) nepoliarizuotiems atomams;
- Auger elektronų spektro, suintegruoto pagal visus elektrono išspinduliavimo kampus, apskritiminės magnetinės asimetrijos parametras (paprogramės PCMDAS ir BCMDAS)

$$\alpha = \frac{B''(1, 1, 1)}{B''(0, 0, 0) + B''(2, 2, 0)}.$$



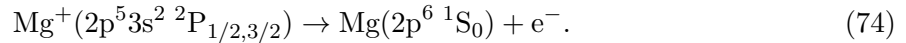
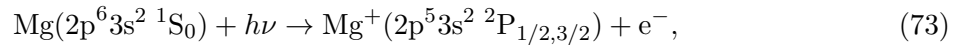
Sumos (70) narius, reikalingus apskaičiuoti Auger elektronų kampinio pasiskirstymo magnetinio dichroizmo laipsniui, kai atomo pilnutinis judėjimo kiekio momentas lygiagretus spinduliuotės kryptiai (paprogramės ACMD ir BCMDAS);

- Sumos (64) narius, reikalingus apskaičiuoti kampinės koreliacijos tarp foto ir Auger elektronų (paprogramės ANGCOR ir BCOR).

Visos minėtos paprogramės naudoja AKA ir BKA paprogrames, atitinkamai skaičiuojančias  $\mathcal{A}^a$  (3.2.1) ir  $\mathcal{B}^{ph}$  (2.53) parametrus, ir paprogrames Klebšo ir Gordano bei  $3nj$  koeficientams surasti. Tais atvejais, kai skerspjūvis priklauso nuo daugiau nei viena sferinės funkcijos, jo vertes pageidaujamiems kampų verčių rinkiniams turi skaičiuoti kitos programos.

### 3.2.9 Auger elektronų kampinis pasiskirstymas Mg atomui

Gautųjų formulių ir programos AUGER praktiniam pritaikymui parodyti apskaičiuotas Auger elektronų po Mg atomo fotojonizacijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos koeficientas. Po Mg atomo fotojonizacijos sekantis Auger procesas dviejų stadijų artinyje gali būti užrašytas šitaip:



Pasirinktas pavyzdys gerai tinka pilnai informacijai iš eksperimento išgauti, nes Mg atveju galima surasti du fotojonizacijos submatricinius elementus ir skaidos fazių skirtumą, pamatavus pilnutinį ir diferencialinį fotojonizacijos skerspjūvius bei Auger elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametą [132].

Iš (73) ir (74) matyti, kad , jonizuojant Mg atomą pagrindinėje būsenoje, sukuriamas  $\text{Mg}^+$  išrikiuotoje būsenoje  $^2P_{3/2}$ , o jis išspinduliuoja Auger elektroną. Kadangi  $K_1 = 0, 2$ , (58) išraišką patogiau užrašyti šitaip:

$$\frac{dW(J_0 \rightarrow J_1 \rightarrow J_2 \mathbf{p}_2)}{d\Omega_2} = \frac{\sigma(J_0 \rightarrow J_1)}{4\pi} \frac{W^A(J_1 \rightarrow J_2)}{2\pi} (1 + \beta_A P_2(\cos\theta)), \quad (75)$$

kur Auger elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras yra:

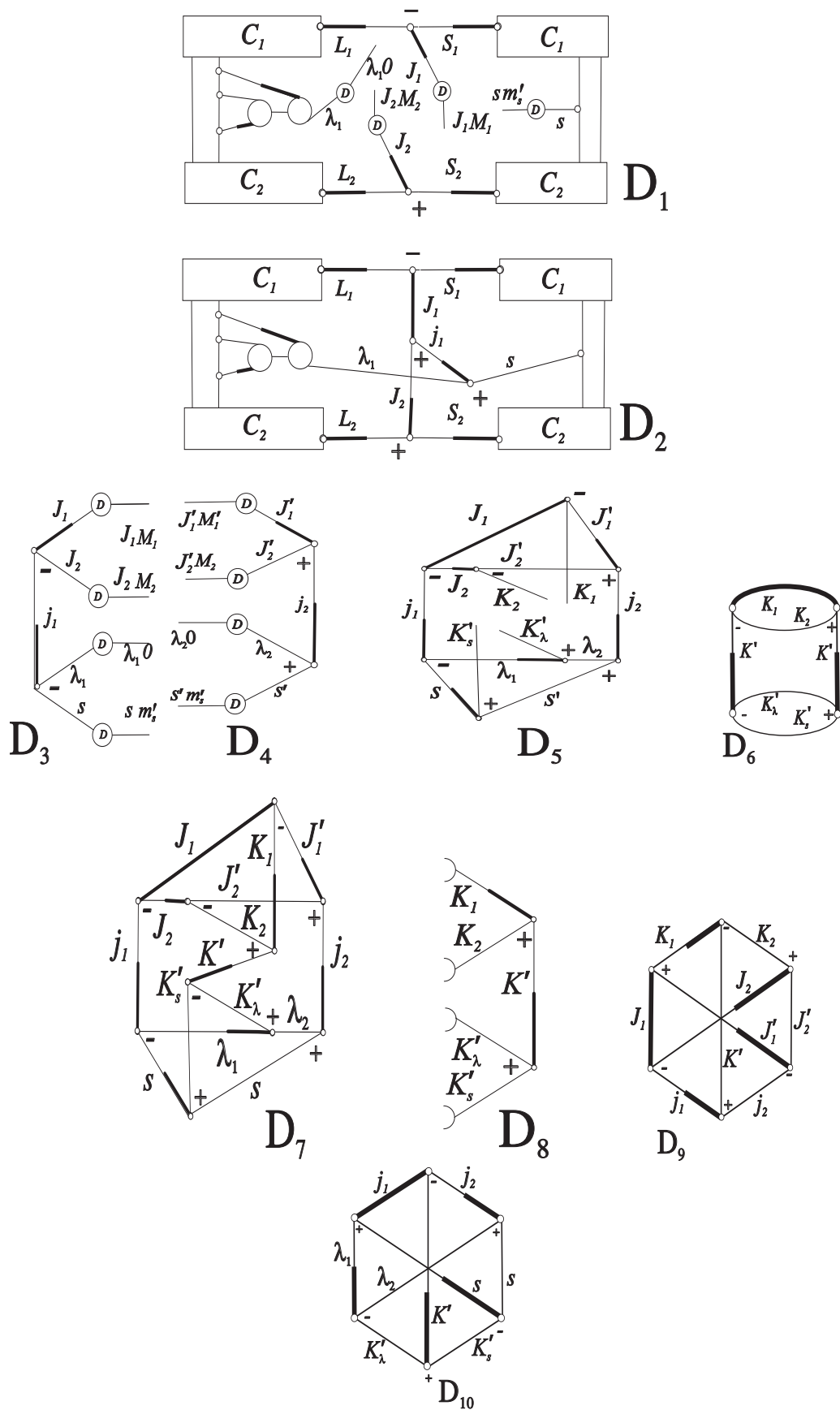
$$\beta_A = \alpha_2 A_2, \quad (76)$$

$$\alpha_2 = \frac{\mathcal{A}(2, 0, 2, 0, 2)}{\mathcal{A}(0, 0, 0, 0, 0)}, \quad (77)$$

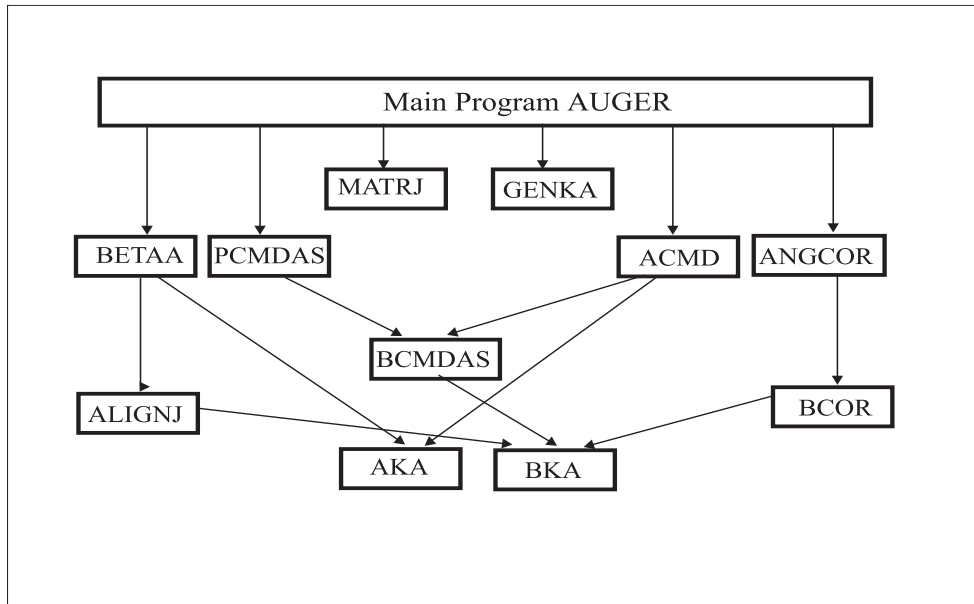
$$A_2 = \frac{B(2)}{B(0)}. \quad (78)$$

Čia  $A_2$  yra fotojono rikiavimo parametras,  $\sigma(J_0 \rightarrow J_1)$  – pilnutinis fotojonizacijos skerspjūvis,  $W^A(J_1 \rightarrow J_2)$  – pilnutinė Auger šuolio tikimybė, kampas  $\theta$  matuojamas nuo spinduliuotės krypties. Parametras  $\alpha_2$  nepriklauso nuo energijos, todėl visa energetinė priklausomybė persiduoda iš rikiavimo parametro  $A_2$ .

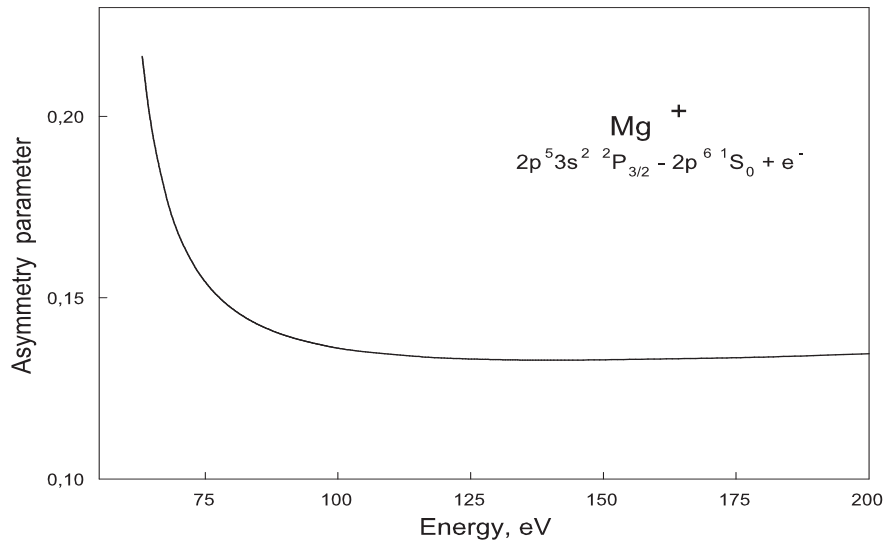
Auger elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras  $\beta_A$ , apskaičiuotas, kai  $\text{Mg}^+$  tarpinė būena yra  $2p^5 3s^2 \ ^2P_{1/2}$  ir  $\ ^2P_{3/2}$ . Pirmuoju atveju  $\beta_A = 0$ .  $2p^5 3s^2 \ ^2P_{3/2}$  atvejui apskaičiuotas  $\beta_A$  pateiktas 24 pav. Iš 24 pav. rezultatų matyti, kad parametro  $\beta_A$  vertės mažėja nuo 0,24 iki 0,13, didėjant fotono energijai.  $\beta_A$  vertė ties 80 eV ( $\beta_A = 0,148$ ) panaudota Auger elektronų iš Mg atomo santykiniams intensyvumams surasti. Apskaičiuotos intensyvumo vertės normuotos į vienetą ties magiškuoju kampu  $\theta = 54^\circ 44'$ , kad jas būtų galima palyginti su išmatuotomis [132]. Iš 25 pav. pateiktų Auger elektronų intensyvumo rezultatų matyti, kad apskaičiuotos vertės labai gerai dera su eksperimento duomenimis [132]. Kadangi eksperimentinę intensyvumo priklausomybę gerai aprašo  $\beta_A = 0,148$  vertė, galima daryti išvadą, kad eksperimentas darytas naudojant tiesinės poliarizacijos spinduliuotę. Apskritiminės poliarizacijos spinduliuotei  $\beta_A = 0,296$ , t.y. du kartus didesnis. Šiuo atveju intensyvumo priklausomybė nuo kampo būtų daug stipresnė.



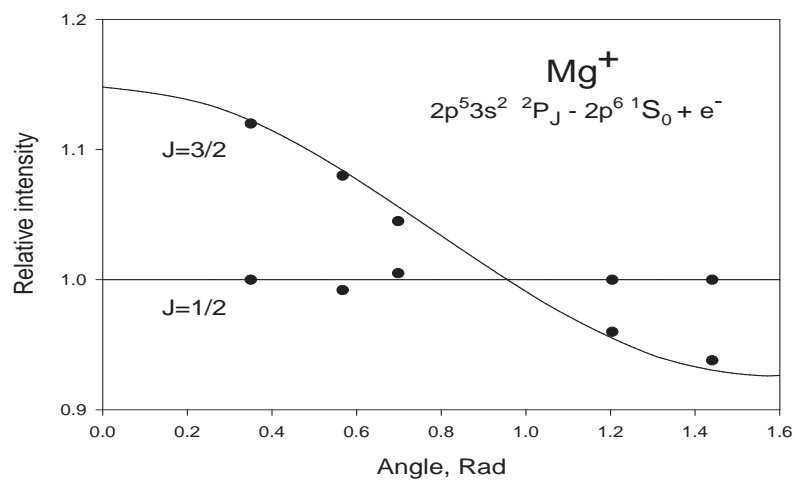
22 pav. Judėjimo kiekio momento diagramos, naudotos Auger šuolio tikimybės išraiškai surasti.



23 pav. Programos Auger elektronų po atomo fotojonizacijos kampinio pasiskirstymo ir poliarizacijos parametrus skaičiuoti blokinė schema.



24 pav. Auger elektronų iš  $\text{Mg}^+ 2p^5 3s^2 \ ^2P_{3/2}$  kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametro priklausomybė nuo fotono energijos po Mg atomo pagrindinėje būsenoje fotojonizacijos.



25 pav. Auger elektronų po Mg atomo fotojonizacijos 80 eV energijos fotonais intensyvumo priklausomybė nuo kampo, kuris matuojamas nuo spinduliuotės elektrinio lauko krypties. Intensyvumas normuotas į vienetą, padalinant iš intensyvumo reikšmės ties magiškuoju kampu  $\theta = 54^{\circ}44'$ . Eksperimentiniai taškai paimti iš [132].

## 4 Atomų sąveika su elektronais

Atomų sąveikos su elektronais procesas priklauso nuo elektrono energijos. Pagal šios sąveikos skerpjūvių didžiausias vertes priklausomai nuo elektrono energijos didėjimo procesus galima išrikiuoti šitaip: fotorekombinacija, atomų sužadinimas, dvielektronė rekombinacija, jonizacija. Tokia tvarka šiuos procesus ir nagrinėsime šiame skyriuje.

### 4.1 Jono ir elektrono rekombinacija ir fluorescencija

Fotorekombinacija (FR) – vienas iš svarbiausių procesų, nulėmiančių jonų jonizacijos laipsnio sumažėjimą plazmoje [76]. Ji vyksta, kai jonas A, kurio krūvis  $n+$ , pagauna laisvą elektroną, o energijos perteklius išspinduliuojamas rekombinacijos elektromagnetinės spinduliuotės pavidalu:

$$e^-(\mathbf{p}m_s) + A^{n+}(\alpha_0 J_0 M_0) \rightarrow A^{(n-1)+}(\alpha_1 J_1 M_1) + h\nu_1(\hat{\epsilon}_1 \mathbf{k}_{01}). \quad (1)$$

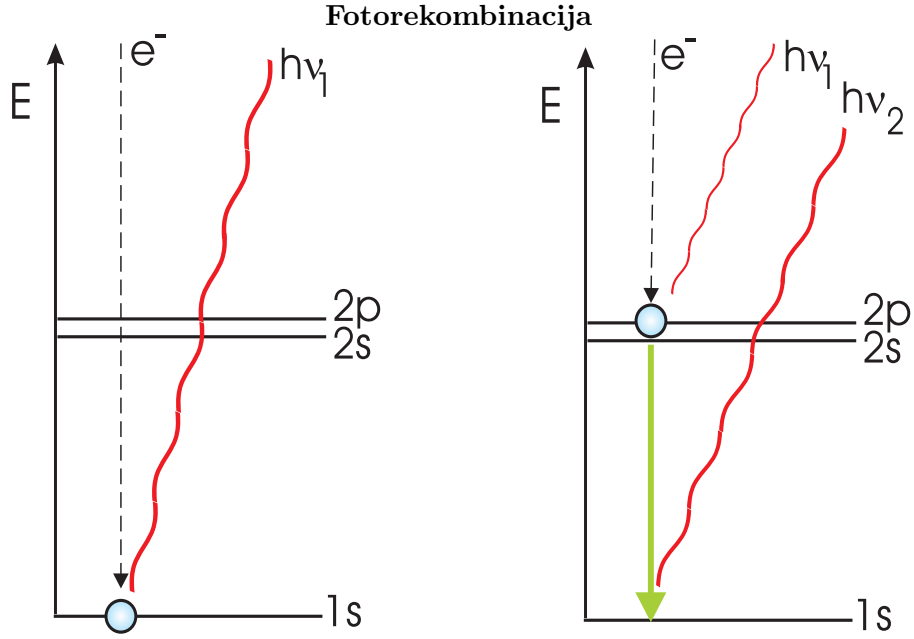
Čia  $\mathbf{p}$  – elektrono judėjimo kiekis ( $p = m_e v = \sqrt{2\varepsilon m_e}$ , kur  $\varepsilon$  – elektrono energija,  $m_e$  – elektrono masė),  $m_s$  – jo sukinio projekcija į parinktą  $z$  ašį,  $\hat{\epsilon}_1$  – spinduliuotės poliarizacijos vienetinis vektorius,  $\mathbf{k}_{01}$  – spinduliuotės banginis vektorius ( $k_{01} = \frac{h\nu_1}{c} = \frac{\hbar\omega_1}{c}$ ). Kai atomo branduolio sukiny  $I \neq 0$  ir hipersmulkioji sandara svarbi, jono būseną aprašoma  $\alpha_i J_i I F_i M_i$ , kur  $F_i$  – pilnasis atomo branduolio ir elektronų apvalkalo judėjimo kiekio momentas. Sklaidos dydžių matavimo tikslumas nėra toks geras, kad būtų iškiriami šuoliai iš hipersmulkiosios sandaros lygmenų, todėl dažniausiai pakanka daleles aprašyti  $J$  kvantiniu skaičiumi.

FR procesas yra vienintelis, kai elektroną pagauna plikas branduolys. FR spinduliuotės spektras  $h\nu_1$  yra tolydinis (žr. diagramą 26 pav. ir 27 pav. kairėje). Jeigu elektronas pagaunamas į sužadintą lygmenį (žr. diagramą 26 pav. dešinėje ir 27 pav. viduryje), išspinduliuojamas antrasis fotonas  $h\nu_2$ , kurio energija lygi skirtumui tarp rekombinavusio jono lygmenų, todėl šis spektras yra diskretinis. Kadangi antrasis fotonas atsiranda antrosios stadijos proceso pasėkoje (jį sužadina elektronas), tokia spinduliuotė dar vadinama fluorescencija. Fluorescencijos, išspinduliuotos po FR, (FRF) šuolių galima užrašyti:

$$A^{(n-1)+}(\alpha_1 J_1 M_1) \rightarrow A^{(n-1)+}(\alpha_2 J_2 M_2) + h\nu_2(\hat{\epsilon}_2 \mathbf{k}_{02}), \quad (2)$$

kur  $\hat{\epsilon}_2$  – fluorescencijos spinduliuotės poliarizacijos vienetinis vektorius.

Kai prieš FR jonas jau turi vieną ar daugiau elektronų, galimas ir kitas 27 pav. dešinėje pavaizduotas procesas, kurio metu laisvasis elektronas pagaunamas į diskretinį jono lygmenį, o



26 pav. Atomo pliko branduolio ir elektrono fotorekombinacija.

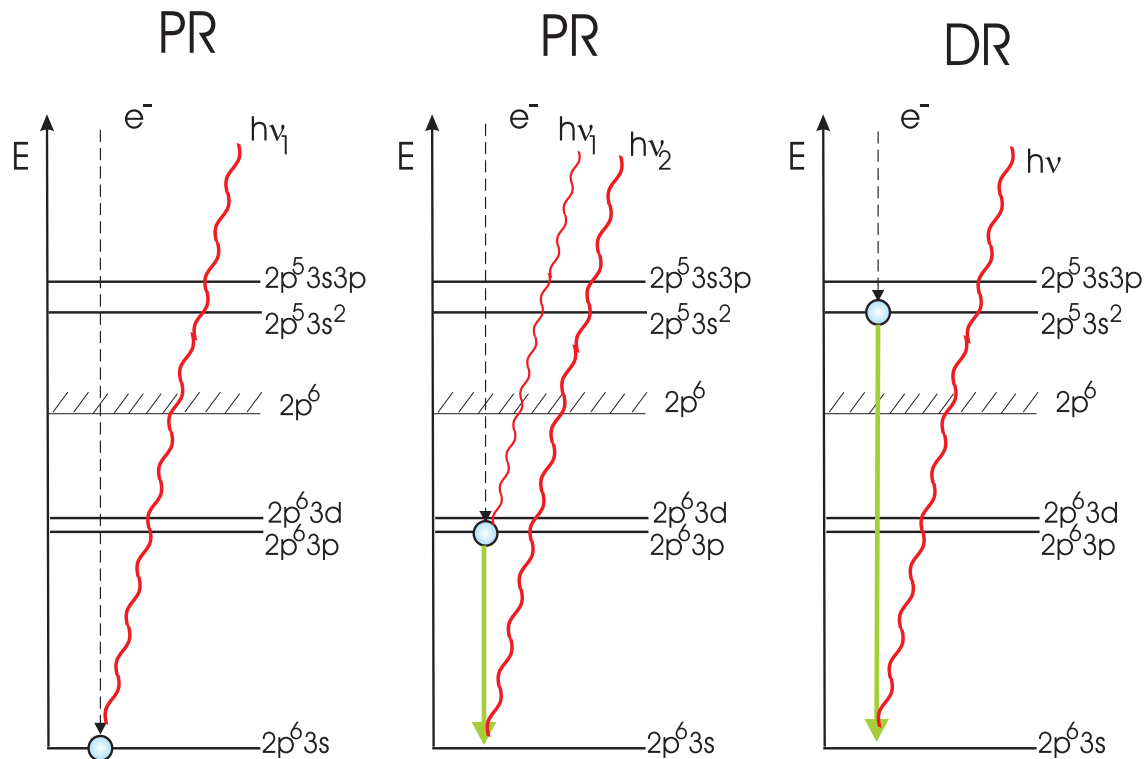
jo energija sunaudojama jau buvusiam diskretiniame lygmenyje elektronui sužadinti. Atsiranda rekombinavusio jono dvigubai sužadinta būseną, kuri nėra stabili, todėl per labai trumpą laiką suyra išspinduliuodama fotoną arba elektroną:

$$e^-(\mathbf{p}m_s) + A^{n+}(\alpha_0 J_0 M_0) \rightarrow A^{*(n-1)+}(\alpha_1 J_1 M_1) \rightarrow \begin{cases} A^{(n-1)+}(\alpha_3 J_3 M_3) + h\nu(\hat{\mathbf{e}}_2 \mathbf{k}_{02}), \\ A^{n+}(\alpha'_0 J'_0 M'_0) + e^-(\mathbf{p}'m'_s). \end{cases} \quad (3)$$

Šis procesas vadinamas dvielektrone rekombinacija (DR) [134] ir galimas ne bet kokioms laisvojo elektrono vertėms. Jo energija turi būti lygi energijai, reikalingai diskretiniam elektronui sužadinti,  $\Delta E$ , tiksliau  $\Delta E \pm \delta$ , kur  $\delta$  – dvigubai sužadintos būseno lygmens energetinis plotis. DR spektras yra diskretinis ir susideda iš atskirų smailių.

Jeigu DR galima, jos tikimybė daug didesnė už FR tikimybę, ir pastaroji gali pasireikšti tikrai truputį pakeisdama DR smailių kontūrus [135]. Tačiau FR skerspjuvį (tikimybę) galima išmatuoti tokioms laisvojo elektrono energijoms, kurios skiriasi nuo reikalingų DR įvykti energijų.

Tankioje plazmoje elektronų susidūrimai su jonais vyksta labai dažnai, ir dvigubai sužadinti jonai jonizuojami daug greičiau už esančius pagrindinėje ar vieną kartą sužadintoje būsenoje. Čia DR nevaizina svarbaus vaidmens formuojant jonų būsenų užpildą, ir į ją neatsižvelgiama. Reikalingi FR spartos koeficientai, kurie surandami vidurkinant FR skerspjuvius su elektronų pasiskirstymo pagal greičius funkcija. Plazmoje, esančioje termodinaminėje pusiausvyroje, galioja Maksvelo pasiskirstymas pagal greičius [76]. Kadangi procesams plazmoje modeliuoti reikalingi



27 pav. Jono ir elektrono fotorekombinacija (PR) ir dvielektronė rekombinacija (DR).

FR spartos koeficientai, daugiausia teorinių ir eksperimentinių darbų skiriama FR spartos koeficientams apskaičiuoti ir išmatuoti [136, 137, 138, 139, 140].

Procesuose su elektronų pluoštais elektrono judėjimo kryptis ir greitis yra apibrėžti, todėl vidurkinti elektronų pasiskirstymo pagal greičius atžvilgiu nereikia. Čia galima išmatuoti FR skerspjūvį, todėl reikalingos ir teorinės skerspjūvio vertės. Atsiveria galimybė tirti elektronų ir jonų poliarizacijos įtaką FR proceso tikimybei.

Pastaraisiais metais susidomėjimas FR labai padidėjo Darmštato greitintuve pradėjus eksperimentus su sunkių jonų (Xe, Au, Pb, U) branduoliais [63, 64, 65, 141]. Jų metu matuojamos FR ir fluorescencijos spinduliuočių kampinės priklausomybės ir nustatomi jų asimetrijos parametrai. Pradžioje tirta FR spinduliuotės kampinė priklausomybė [141], kai sunkus branduolys atima elektroną iš lengvo atomo. Kadangi atominio elektrono ryšio energija labai maža, lyginant su sunkaus atomo vandeniliško jono elektrono ryšio energija, galima laikyti, kad atominis elektronas kvazilaisvas. Į jo buvimą atome galima atsižvelgti per jo krūvio pasiskirstymą (Komptono profilį) [135, 142].

Jeigu pagaunamas kvazilaisvas elektronas iš atomo ar nuo kietojo kūno paviršiaus, FR skers-



pjūvį galima užrašyti:

$$\frac{d\sigma(E, \theta)}{d\Omega dE} = \frac{d\sigma(E, \theta)}{d\Omega} \frac{J(P_z)}{v_p + P_z}. \quad (4)$$

Čia  $J(P_z)$  – taikinio elektronų Komptono profilis,  $P_z$  – jų judėjimo kiekio dedamoji sunkaus atomo branduolio ar jono judėjimo kryptimi,  $v_p$  – pagaunamo elektrono greitis dėl jono judėjimo  $v_p$  greičiu (laikoma, kad juda sunkūs daugiakrūviai jonai),  $J(P_z)/(v_p + P_z)$  – tikimybė, kad elektrono energija bus tinkama,  $d\sigma/d\Omega$  – FR diferencialinis skerspjūvis, kai laisvas elektronas rekombinuoja su laisvu jonu.

Kai jono krūvis  $Z$  daug didesnis už taikinio krūvį  $Z_t$ , bespindulinis elektrono pagavimas nevaicina vaidmens, todėl galima nagrinėti tikrai FR ir DR procesų indėlį. Informacijos apie šių procesų pasėkoje atsirandančią daugiakrūvio jono magnetinių lygmenų, aprašomų projekcija  $M_i$ , užpildą gaunama arba iš FR (FRF) spinduliuotės kampinio pasiskirstymo arba matuojant jos poliarizaciją [141]. Tačiau, kai fotono energija yra apie 100 keV, jo poliarizacijos beveik neįmanoma išmatuoti dėl techninių kliūčių. Belieka pasinaudoti FR arba FRF, kuri įvyksta per  $\approx 10^{-17}$  s (pvz.,  $U^{91+} L_{\alpha_1}$  šuolis  $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ ), spinduliuočių kampiniu pasiskirstymu. Kadangi procese dalyvaujančių dalelių tarpusavio judėjimo kryptis yra fiksuota, rekombinavusio jono būsenų užpildą aprašo parametras, vadinamas rikiavimu, t.y. dėl ašinės simetrijos jono būsenos, aprašomos vienodų verčių, bet priešingų krypčių projekcijomis  $M_i$ , užpildomos vienodai (žr. 1.14 skirsnį). Rikiavimas ir orientacija yra atskiri poliarizacijos atvejai. Nuo rekombinavusio jono poliarizacijos priklauso ir tolimesnių procesų produktų (fluorescencijos ir jono) būsenų charakteristikos.

Nagrinėjant sunkius atomus reikia atsižvelgti į reliatyvistinius efektus. Jie darosi svarbūs atomams, kurių branduolio krūvis  $Z > 20$ , kai nagrinėjami vidiniai 1s, 2s, 2p sluoksniai, ir  $Z > 40$ , kai tiriami išoriniai sluoksniai [3]. Branduolių nuo  $Xe^{54+}$  iki  $U^{92+}$  FR aprašyti buvo sukurta teorija [63, 64, 65, 141], naudojantis kvantinės elektrodinamikos metodais. Joje fotonai, elektronai ir vandeniliški jonai aprašomi reliatyvistiniame artinyje. Procese dalyvaujančių dalelių poliarizacijai aprašyti naudotas tankio matricos [5] formalizmas [63, 65]. Kituose darbuose [141, 64] tankio matricos formalizmas nebuvo naudojamas. Iki šiol eksperimentuose išmatuoti FR ir FRF spinduliuočių kampiniai pasiskirstymai atskirai, laikant, kad nei elektronas nei branduolys nėra poliarizuoti. Teoriškai išnagrinėta nepoliarizuotų jonų rekombinacija su nepoliarizuotais [63, 64, 65, 141] ir poliarizuotais [65] elektronais. Taip pat surastos rikiavimo ir nepoliarizuotų FR [64] ir FRF fotonų kampinio pasiskirstymo [141, 63, 65] bei kampinės koreliacijos tarp FR ir FRF fotonų [65, 141] parametrų išraiškos.

Šiame darbe formuluojama FR (1) ir FRF (2) procesų nereliatyvistiniame artinyje bendra

teorija, leidžianti nagrinėti poliarizuotų elektronų FR su poliarizuotais jonais ir surasti jonų rikiavimo, FR ir FRF spinduliuočių kampinio pasiskirstymo ir poliarizacijos bei jų tarpusavio kampinės koreliacijos parametrus. Laikoma, kad elektronas pirma pagaunamas į surištą būseną, o po to įvyksta šuolis tarp diskretinių rekombinavusio jono lygmenų. Šiuo atveju galima taikyti dviejų stadijų artinį. Išraiškoms surasti nenaudojamas tankio matricos formalizmas. Naudojami įprastiniai izoliuoto atomo teorijos metodai ir judėjimo kiekio momento teorijos grafinė technika [1].

#### 4.1.1 Bendroji skerspūvio išraiška

Nagrinėjami FR (1) ir rekombinavusio jono spinduliuavimo (2) procesai dviejų stadijų artinyje. FR yra atvirkščias fotojonizacijai (FJ) procesas. Iš detalaus balanso sąryšio seka, kad FR skerspjuvis  $\sigma_{f \rightarrow i}^{FR}(\varepsilon)$  susijęs su FJ skerspjuviu  $\sigma_{i \rightarrow f}^{FJ}(E)$  Milno sąryšiu [76]

$$\sigma_{f \rightarrow i}^{FR}(\varepsilon) = \frac{(\alpha E)^2}{2\varepsilon} \frac{g_i}{g_f} \sigma_{i \rightarrow f}^{FJ}(E). \quad (5)$$

Čia  $E$  – fotono, o  $\varepsilon$  – elektrono energija ( $\varepsilon = p^2/2m_e$ ),  $g_i$  ir  $g_f$  – būsenų statistiniai svoriai. Energija matuojama Rydbergo vienetais (Ry) (1 a.v.=2 Ry = 27,2116 eV).

Kadangi rekombinavusio jono būseną  $M_2$  nėra stebima, (1) ir (2) procesų diferencialinį skerspjuvį dviejų stadijų artinyje galime užrašyti (2.23):

$$\begin{aligned} & \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p} m_s \rightarrow \alpha_2 J_2 \hat{\epsilon}_{q_1} \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_1 d\Omega_2} \\ &= \sum_{M_2} \frac{d\sigma^{FR}(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p} m_s \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{\epsilon}_{q_1} \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_1} \cdot \frac{dW(\alpha_2 J_2 M_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_2}. \end{aligned} \quad (6)$$

Praktiniams taikymams (6) išraišką patogiau užrašyti sferinių multipolių skleidiniu, pasinaudojant 2.1.2 skirsnio formulėmis:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p} m_s \rightarrow \alpha_2 J_2 \hat{\epsilon}_{q_1} \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_1 d\Omega_2} \\ &= \sum_{K_2 N_2} \frac{d\sigma_{K_2 N_2}^{FR}(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p} m_s \rightarrow \alpha_2 J_2 \hat{\epsilon}_{q_1} \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_1} \cdot \frac{dW_{K_2 N_2}(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Čia  $d\sigma_{K_1 N_2}^{FR}/d\Omega_1$  atstovauja FR diferencialinio skerspjuvio,  $dW_{K_2 N_2}/d\Omega_2$  – fluorescencijos diferencialinės tikimybės (2.7) multipolinio skleidimo nariams, tiksliai (2.7) išraiškoje reikia vietoje  $J_2 M_2$  rašyti  $J_3 M_3$ ,  $J_1 - J_2$ ,  $K_1 N_1 - K_2 N_2$ , o  $K_2 N_2 - K_3 N_3$ .

FR diferencialinio skerspjūvio išraišką galima užrašyti pasinaudojant FJ diferencialinio skerspjūvio išraišką (2.54) ir Milno sąryšiu (5):

$$\begin{aligned}
& \frac{d\sigma_{K_2 N_2}^{FR}(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p} m_s \rightarrow \alpha_2 J_2 \hat{\epsilon}_{q_1} \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_1} \\
&= \sqrt{4\pi} C \sum_{K_1, K_r, K_\lambda, K_s, K_j, K, k_1, k'_1} \mathcal{B}^{ph}(K_2, K_1, K_r, K_\lambda, K_s, K_j, K, k_1, k'_1) \\
&\times [2K_2 + 1]^{1/2} \sum_{N_1, N_r, N_\lambda, N_s, N_j, N} \begin{bmatrix} K_1 & K_j & K \\ N_1 & N_j & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_\lambda & K_s & K_j \\ N_\lambda & N_s & N_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_2 & K_r & K \\ N_2 & N_r & N \end{bmatrix} Y_{K_\lambda N_\lambda}^*(\hat{p}) \\
&\quad \times T_{N_1}^{*K_1}(J_1, J_1, M_1 | \hat{J}_1) T_{N_s}^{*K_s}(s, s, m_s | \hat{s}) T_{N_r}^{K_r}(k_1, k'_1, q_1 | \hat{k}_{01}). \tag{8}
\end{aligned}$$

Čia  $C = (\pi a_0^2 \alpha^2 E^2) / \varepsilon$ , jeigu skerspjūvis matuojamas ploto vienetais.

(7), (8) ir (3.7) yra bedriausios nereliatyvistiniame artinyje FRF diferencialinio skerspjūvio išraiškos. Jos aprašo poliarizuoto jono rekombinaciją su poliarizuotu elektronu ir rekombinacijos bei fluorescencijos fotonų kampinius pasiskirstymus, poliarizacijas ir kampines koreliacijas. Taip pat galima surasti parametrus, aprašančius rekombinavusio jono tarpinės ir galinės būsenų poliarizaciją. Matavimai dažniausiai atliekami rekombinuojant nepoliarizuoties jonams su nepoliarizuotais elektronais, kai rekombinavusio jono būsena nėra registruojama. Šiuo atveju (7), (8) ir (3.7) formules galima supaprastinti, jas vidurkinant pradinių elektrono ir jono bei sumuojant galinių rekombinavusio jono būsenų atžvilgiu. Sumavimui ir integravimui naudojamos šios formulės [18]:

$$\sum_M T_N^K(J, J, M | \hat{J}) = \delta(K, 0) \delta(N, 0), \tag{9}$$

$$\int d\Omega Y_{KN}(\theta, \phi) = \sqrt{4\pi} \delta(K, 0) \delta(N, 0). \tag{10}$$

Iš (9) ir (10) seka, kad tais atvejais, kai dydis nematuojamas, iš multipolionio skleidinio belieka tiksliai vienas narys  $K = 0$ . Kai  $kr \ll 1$ , galioja dipolinis artinys. Jis dažniausiai tinka optinio ir vakuuminio ultravioleto diapazono spinduliuotei.

#### 4.1.2 Nepoliarizuoto atomo ir nepoliarizuoto elektrono fotorekombinacija

Bendrąją skerspjūvio išraišką galima pritaikyti paprastesniems atvejams, kurie dažniausiai tiriama eksperimentiškai, nagrinėti. Jeigu dalelės būsena neregistruojama, tiksliai sferiškai simetriškas multipolinio skleidimo narys atneša indėlių, t.y.  $K = 0$ , dėl ko bendroji išraiška supaprastėja.

Dažniausiai sutinkama nepoliarizuotų elektrono ir jono rekombinacija. Dėl to užrašysime fluorescencijos rekombinuojant jonui ir elektronui diferencialinio skerspjūvio (6) bendrosios išraiškos

atskirą atvejį, kai rekombinuoja nepoliarizuotas jonas ir nepoliarizuotas elektronas, o galutinė rekombinavusio jono būseną ir spinduliuočių poliarizacijos neregistruojamos, kadangi Rentgeno ir gama spinduliuočių poliarizaciją sunku pamatuoti dėl techninių problemų. Šiuo atveju (6) reikia sumuoti galinių ir vidurkinti pradinių būsenų atžvilgiu, panaudojant (9) formulę. Gauname, kad  $K_s = N_s = K_1 = N_1 = K_3 = N_3 = 0$ ,  $K'_r = K_2$  ir  $K_j = K = K_\lambda$ . Vidurkinant elektrono ir jono pradinės būsenos atžvilgiu ateina daugiklis  $1/[2(2J_1 + 1)]$ . Sumuojant spinduliuotės poliarizacijos atžvilgiu reikia sumuoti pagal  $q \pm 1$ , nes  $q = 0$  negalima. Gauname, kad  $K_r = K'_r = 0, 2$  ir daugiklis 4. Įrašome gautąsias vertes į (7), (8) ir (3.7) ir parenkame koordinatinių sistemos  $z$  ašį išilgai rekombinuojančių elektronų judėjimo krypties  $\mathbf{p}$  ( $N_\lambda = 0$ ). Atlikę supaprastinimo veiksmus dipoliniame artinyje gauname:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_3 J_3 \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_1 d\Omega_2} &= \frac{2C}{2J_2 + 1} \sum_{K_2, N_2} (-1)^{K_2} \mathcal{A}(K_2, K_2, 0, 1, 1) T_{-N_2}^{K_2}(1, 1, 1 | \hat{k}_{02}) \\ &\times \frac{(2K_2 + 1)^{1/2}}{2J_1 + 1} \sum_{K_\lambda, K_r=0,2} (2K_\lambda + 1)^{1/2} \mathcal{B}^{ph}(K_2, 0, K_r, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_\lambda, 1, 1) \begin{bmatrix} K_2 & K_r & K_\lambda \\ N_2 & -N_2 & 0 \end{bmatrix} \\ &\times T_{N_2}^{*K_r}(1, 1, 1 | \hat{k}_{01}), \end{aligned} \quad (11)$$

Šią išraišką suintegravus  $d\Omega_1$  ir  $d\Omega_2$  atžvilgiu gaunama:

$$\begin{aligned} \int \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_3 J_3 \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_1 d\Omega_2} d\Omega_1 d\Omega_2 &= \sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3) \\ &= \frac{4\pi}{3} \frac{2}{2J_2 + 1} \mathcal{A}(0, 0, 0, 1, 1) \frac{4\pi C}{3} \frac{1}{2J_1 + 1} \mathcal{B}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1) \\ &= W(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3) \sigma^{FR}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2). \end{aligned} \quad (12)$$

(12) formulė skiriasi daugikliu  $(4\pi)^2$  nuo tos, kurią gautume į (11) įrašę  $K_2 = K_r = K_\lambda = 0$ :

$$\begin{aligned} &\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_3 J_3 \mathbf{k}_{02})|_{K_2=K_r=K_\lambda=0} \\ &= \frac{2}{3} \frac{1}{2J_2 + 1} \mathcal{A}(0, 0, 0, 1, 1) \frac{C}{3(2J_1 + 1)} \mathcal{B}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1) \\ &= \frac{W(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3)}{4\pi} \frac{\sigma^{FR}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)}{4\pi}. \end{aligned} \quad (13)$$

Čia dipoliniame artinyje

$$\mathcal{A}(0, 0, 0, 1, 1) = 2k_{02}^3 |\langle \alpha_3 J_3 || Q^{(1)} || \alpha_2 J_2 \rangle|^2, \quad (14)$$

$$\mathcal{A}(2, 2, 0, 1, 1) = 2k_{02}^3 |\langle \alpha_3 J_3 || Q^{(1)} || \alpha_2 J_2 \rangle|^2 \left[ \frac{3(2J_2 + 1)}{5} \right]^{1/2} (-1)^{J_2 + J_3 + 1} \begin{Bmatrix} J_2 & J_2 & 2 \\ 1 & 1 & J_3 \end{Bmatrix}, \quad (15)$$

$$\mathcal{B}^{ph}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1) = 2k_{01} \sum_{\lambda, j, J} (2J + 1) |\langle \alpha_2 J_2 || Q^{(1)} || \alpha_1 J_1, \varepsilon \lambda(j) J \rangle|^2, \quad (16)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}^{ph}(2, 0, 0, 2, 0, 2, 2, 1, 1) &= 2k_{01} \sum_{\lambda, j, \lambda', j', J} (2J+1) \langle \alpha_2 J_2 || Q^{(1)} || \alpha_1 J_1, \varepsilon \lambda(j) J \rangle \\
&\times \langle \alpha_2 J_2 || Q^{(1)} || \alpha_1 J_1, \varepsilon \lambda'(j') J \rangle^* \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda & 2 \\ 0 & 0_2 & 0 \end{bmatrix} (-1)^{J_2+j+j'+J+s} \\
&\times \left[ \frac{(2J_2+1)(2\lambda+1)(2\lambda'+1)(2j+1)(2j'+1)}{5} \right]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} J_1 & J_1 & 2 \\ j & j' & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda' & \lambda & 2 \\ j & j' & s \end{matrix} \right\}, \quad (17)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}^{ph}(0, 0, 2, 2, 0, 2, 2, 1, 1) &= 2k_{01} \sum_{\lambda, j, \lambda', j', J} (2J+1)(2J'+1) \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
&\times \langle \alpha_2 J_2 || Q^{(1)} || \alpha_1 J_1, \varepsilon \lambda(j) J \rangle \langle \alpha_2 J_2 || Q^{(1)} || \alpha_1 J_1, \varepsilon \lambda'(j') J \rangle^* \\
&\times (-1)^{J_1-J_2+s+1} \left[ \frac{3(2\lambda+1)(2\lambda'+1)(2j+1)(2j'+1)}{5} \right]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ J & J' & J_2 \end{matrix} \right\} \\
&\left\{ \begin{matrix} j' & j & 2 \\ J & J' & J_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda' & \lambda & 2 \\ j & j' & s \end{matrix} \right\}. \quad (18)
\end{aligned}$$

Pastarosios išraiškos tinka kampinei koreliacijai tarp rekombinacijos ir fluorescencijos fotonų aprašyti, kai rekombinuoja nepolarizuotas jonas ir elektronas, o nepolarizuotai spinduliuotei galioja dipolinis artinys. Jas galima dar supaprastinti, jeigu rekombinacijos arba fluorescencijos spinduliuotės neregistruojamos.

### 4.1.3 Rekombinacijos ir fluorescencijos fotonų kampinė koreliacija nepolarizuotiems jonams ir elektronams

Elektrinės dipolinės elektromagnetinės spinduliuotės artinyje kampinę koreliaciją tarp nepoliarizuotų rekombinacijos ir fluorescencijos fotonų aprašančio diferencialinio skerspūvio išraišką surasime į (11) formulę įrašę tenzorių  $T_N^K$  išraiškas ir panaudoję (13). Gauname šią išraišką:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 \sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_3 J_3 \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_1 d\Omega_2} &= \frac{\sigma^{FR}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)}{4\pi} \frac{W(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3)}{4\pi} \\
&\times \left[ 1 + a_2 \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \sum_{N_2=-2}^2 Y_{2N_2}(\theta_2, \phi_2) \sum_{K_r=0,2} \sqrt{\frac{4\pi}{2K_r+1}} A(2, K_r, N_r) Y_{K_r N_r}^*(\theta_1, \phi_1) \right]. \quad (19)
\end{aligned}$$

Čia kampai  $\theta_1$ ,  $\phi_1$  ir  $\theta_2$ ,  $\phi_2$  matuojami nuo elektrono krypties.

Išraiškoje (19)

$$a_2 = \frac{5}{\sqrt{2}} \frac{\mathcal{A}(2, 2, 0, 1, 1)}{\mathcal{A}(0, 0, 0, 1, 1)}, \quad (20)$$

$$A(2, K_r, N_r) = \frac{D(2, K_r, N_r, 1, 1)}{D(0, 0, 0, 1, 1)}, \quad (21)$$

$$D(K_2, K_r, N_r) = \frac{\sqrt{2K_r + 1}}{2J_1 + 1} \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 & 1 & K_r \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \sum_{K_\lambda = \text{even}} \sqrt{2K_\lambda + 1} \begin{bmatrix} K_2 & K_r & K_\lambda \\ N_r & -N_r & 0 \end{bmatrix} \\ \times \mathcal{B}^{ph}(K_2, 0, K_r, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_\lambda, 1, 1). \quad (22)$$

Jeigu (19) išraiškoje antrąją sumą pažymėtume

$$A_{2N_2}(\theta_1 \phi_1) = \sum_{K_r=0,2} \sqrt{\frac{4\pi}{2K_r + 1}} A(2, K_r, N_r) Y_{K_r N_r}^*(\theta_1, \phi_1), \quad (23)$$

tuomet (19) formulė  $a_2$  daugiklio tikslumu sutaptų su (24) formule, gauta Surzhykov ir *kt* [65] straipsnyje.

Iš (19) formulės matyti, kad rekombinavusio jono rikiavimą aprašo penki nariai ( $N_r = -2, -1, 0, 1, 2$ ), iš kurių tik trys yra nepriklausomi, nes  $Y_{22}(\theta, \phi_1) = -Y_{2-2}(\theta, \phi_1)$  ir  $Y_{21}(\theta, \phi_1) = -Y_{2-1}(\theta, \phi_1)$ . Todėl  $A_{22}(\theta, \phi_1) = -A_{2-2}(\theta, \phi_1)$  ir  $A_{21}(\theta, \phi_1) = -A_{2-1}(\theta, \phi_1)$ . Narys, kurio  $N_r = 0$ ,  $A_{20}(\theta, \phi_1)$  vadinamas diferencialiniu rikiavimo parametru. Jis rodo, kad rekombinavusio jono rikiavimas priklauso tiksliai nuo polinio kampo  $\theta_1$ , kuriuo stebimas rekombinacijos fotonas.

#### 4.1.4 Fluorescencijos spinduliuotės kampinis pasiskirstymas

Kai rekombinacijos fotonas neregistruojamas, (11) formulę galima panaudoti nepoliarizuotos fluorescencijos spinduliuotės kampiniam pasiskirstymui aprašyti. Šiuo atveju reikia (11) išraišką integruoti rekombinacijos fotono kampų atžvilgiu. Gauname, kad  $K_r = N_2 = 0$  ir  $K_2 = K_\lambda$ , kurias įrašome į (11). Šių veiksmų rezultatas yra:

$$\frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_2} = \int d\Omega_1 \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_3 J_3 \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_1 d\Omega_2} \\ = \frac{2C}{2J_2 + 1} \sum_{K_2=0,2} \mathcal{A}(K_2, K_2, 0, 1, 1) T_0^{K_2}(1, 1, 1 | \hat{k}_{02}) \frac{4\pi(2K_2 + 1)}{3(2J_1 + 1)} \mathcal{B}^{ph}(K_2, 0, 0, K_2, 0, K_2, K_2, 1, 1) \\ = \sigma^{FR}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) \frac{W(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3)}{4\pi} [1 + \beta P_2(\cos \theta_2)], \quad (24)$$

$$\beta = \alpha A_2, \quad (25)$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{5(2J_2 + 1)}{2}} \frac{\mathcal{A}(2, 2, 0, 1, 1)}{\mathcal{A}(0, 0, 0, 1, 1)} = (-1)^{J_2 + J_3 + 1} \left[ \frac{3(2J_2 + 1)}{2} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} J_2 & J_2 & 2 \\ 1 & 1 & J_3 \end{bmatrix}, \quad (26)$$

$$A_2 = \frac{5}{\sqrt{2J_2 + 1}} \frac{\mathcal{B}^{ph}(2, 0, 0, 2, 0, 2, 2, 1, 1)}{\mathcal{B}^{ph}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1)}. \quad (27)$$

Fluorescencijos kampiniame pasiskirstyme galima tikėtis stiprios priklausomybės nuo elektrono energijos. Ją nulemia sumavimo pagal  $\lambda, \lambda'$  interferenciniai nariai, kurie ateina iš Klebšo

ir Gordano koeficiento  $\begin{bmatrix} \lambda & \lambda' & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ . Interferencijos nebuvo fotojonizacijos atveju, nes ten buvo  $\lambda = \lambda'$ . Šią priklausomybę atnešė fotorekombinacijos rikiavimo parametras  $A_2$ .

#### 4.1.5 Fotorekombinacijos spinduliuotės kampinis pasiskirstymas

Norint surasti rekombinacijos spinduliuotės, kai rekombinuoja nepoliarizuotas elektronas su nepoliarizuotu elektronu, kampinį pasiskirstymą aprašančio diferencialinio skerspjuvio išraišką, reikia (11) formulę integruoti fluorescencijos kampų atžvilgiu. Iš (10) seka, kad  $K_2 = N_2 = 0$ . Tuomet  $K_\lambda = K_r$ . Įrašome šias vertes į (11) ir gauname išraišką:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_3 J_3)}{d\Omega_1} &= \int d\Omega_2 \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_3 J_3 \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_1 d\Omega_2} \\ &= \frac{2C}{2J_2 + 1} \frac{4\pi}{3} \mathcal{A}(0, 0, 0, 1, 1) \sum_{K_\lambda=0,2} \frac{\sqrt{2K_\lambda + 1}}{2J_1 + 1} \mathcal{B}^{ph}(0, 0, K_\lambda, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_\lambda, 1, 1) \\ &= W(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3) \frac{\sigma^{FR}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)}{4\pi} \left[ 1 - \frac{1}{2} \beta P_2(\cos \theta_1) \right]. \end{aligned} \quad (28)$$

Ši formulė tinka nepoliarizuotos fotorekombinacijos spinduliuotės atveju. Tuomet

$$\beta = 5\sqrt{2} \frac{\mathcal{B}^{ph}(0, 0, 2, 2, 0, 2, 2, 1, 1)}{\mathcal{B}^{ph}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1)} \quad (29)$$

yra fotorekombinacijos spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras. Kampas  $\theta_1$  matuojamas nuo elektrono skriejimo krypties.

#### 4.1.6 Fluorescencijos kampinis pasiskirstymas poliarizuotiems atomams

Tuo atveju, kai rekombinuoja poliarizuoti jonai su nepoliarizuotais elektronais, galima gauti šitokią fluorescencijos kampinį pasiskirstymą aprašančio diferencialinio skerspjuvio išraišką:

$$\begin{aligned} &\frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_2} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{M_3, m_s, q_1, q_2} \int d\Omega_1 \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p} m_s \rightarrow \alpha_2 J_2 \hat{e}_{q_1} \mathbf{k}_{01} \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{e}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega_1 d\Omega_2} \\ &= (2J_1 + 1) \sigma^{FR}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) \frac{W(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3)}{4\pi} \left[ 1 + \sum_{K_2 > 0, N_2} \beta_{K_2} Y_{K_2 N_2}(\theta_2, \phi_2) A_{K_2 N_2}(\theta_A, \phi_A) \right]. \end{aligned} \quad (30)$$

Čia laboratorinė  $z$  ašis lygiagreči elektronų krypčiai. (30) išraiškoje

$$\beta_{K_2} = \sum_{k_2, k'_2} (-1)^{k'_2 - q_2} \left[ \frac{4\pi}{2k_2 + 1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} k_2 & k'_2 & K_2 \\ q_2 & -q_2 & 0 \end{bmatrix} \frac{\mathcal{A}(2, 2, 0, k_2, k'_2)}{\mathcal{A}(0, 0, 0, k_2, k'_2)}, \quad (31)$$

o diferencialinis rikiavimas apibrėžtas šitaip:

$$A_{K_2 N_2}(\theta_A, \phi_A) = \sum_{K_1, K_\lambda, k_1} (-1)^{K_2 - N_2 + J_1 - M_1} \left[ \frac{4\pi(2K_2 + 1)(2K_\lambda + 1)}{2J_1 + 1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K_1 \\ M_1 & -M_1 & 0 \end{bmatrix} \\ \times \frac{1}{2k_2 + 1} \begin{bmatrix} K_1 & K_\lambda & K_2 \\ N_2 & 0 & N_2 \end{bmatrix} \frac{\mathcal{B}^{ph}(K_2, K_1, 0, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_2, k_1, k_1)}{\mathcal{B}^{ph}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, k_1, k_1)} Y_{K_1 N_2}^*(\theta_A, \phi_A). \quad (32)$$

Kampai (30) ir (32) formulėse matuojami nuo elektronų krypties.

Elektriniame dipoliniame artinyje  $k_2 = k'_2 = 1$ ,  $K_2 = 0, 2$ , ir  $\beta_2$  (31) išraiška sutampa su (26).

#### 4.1.7 Programa ir skaičiavimo pavyzdžiai

Kompiuterinės programos, skaičiuojančios fotorekombinacijos ir fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos ir kampinių korelacijų parametrus, blokinė schema pavaizduota 28 pav. Ši programa naudoja rogramos PHION apskaičiuotus fotojonizacijos proceso, kuris yra atvirkščias fotorekombinacijai, submatricinius elementus termams  $LS$ . Paprogramė MATRJ suranda elektrinio dipolinio šuolio operatoriaus submatricinius elementus būsenoms  $LSJ$  tarpiniame ryšyje, analogiškai, kaip buvo aprašyta 2.2.9 skyriuje. Kitos paprogramės skaičiuoja šiuos parametrus:

fotorekombinacijos spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametą  $\beta$  (28) (RBE-TAR);

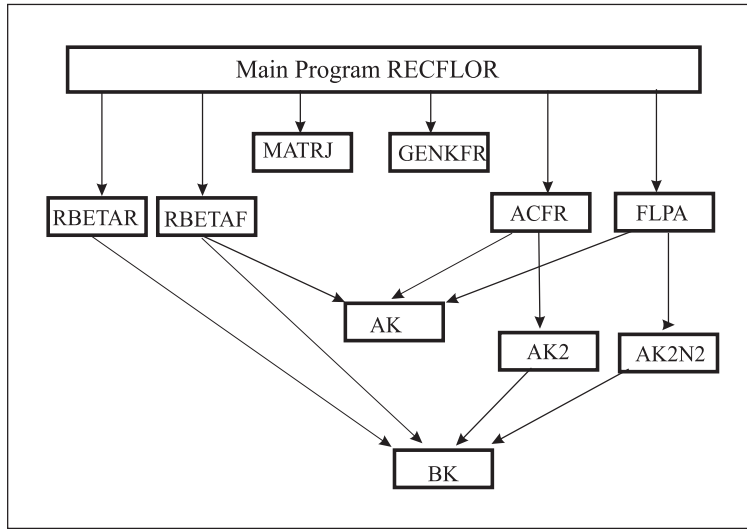
fluorescencijos spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametą  $\beta$  (25) (RBETAF);

fotorekombinacijos ir fluorescencijos spinduliuočių kampinės korelacijos parametrus  $\alpha_2$  (20) ir  $A(2, K_r, N_r)$  (21) (ACFR ir A2K);

fluorescencijos spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrus  $\beta_{K_2}$  (31) ir  $A_{K_2 N_2}$  (32) (FLPA ir AK2N2).

Pateikiami du skaičiavimo pavyzdžiai. Apskaičiuotas fluorescencijos, išspinduliuotos po He, F ir Ar atomų plikų barnduolių ir nepoliarizuotų neoniškų  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{Ar}^{8+}$ ,  $\text{Fe}^{16+}$  ir  $\text{Zn}^{20+}$  jonų fotorekombinacijos su nepoliarizuotais elektronais, kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras  $\beta$  (25). Parinktos laisvojo elektrono energijos nuo 0 iki 450 eV, kad fotorekombinacijos spinduliuotei galiotų dipolinis artinys. Kadangi fotorekombinacijos spinduliuotės energija sunkiausiems nagrinėtiems jonams  $\text{Ar}^{18+}$  ir  $\text{Zn}^{20+}$ , esant elektrono energijai 450 eV,



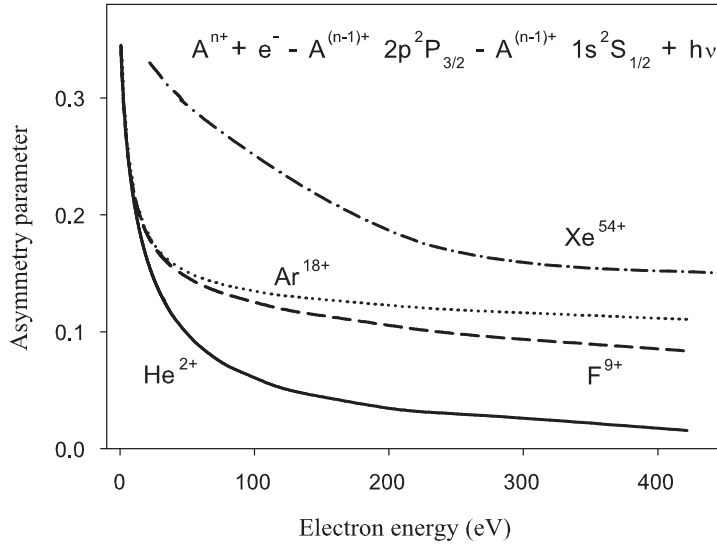


28 pav. Fotorekombinacijos ir fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos ir kampinių koreliacijų parametrų skaičiavimo programos blokinė schema.

neviršija 1,5 keV, galima tikėtis, kad aukštesnių už dipolinius skleidinio narių indėlis neviršys 2% [99].

29 pav. pavaizduota fluorescencijos spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametro  $\beta$  (25) priklausomybė nuo elektronų energijos, kai elektroną pagauna Ne, F ir Ar branduoliai į sužadintą būseną  $2p^2P_{3/2}$ , o fluorescencijos fotonas išspinduliuojamas šiam elektronui peršokant į  $1s^2S_{1/2}$ . Taip pat 29 pav. pateikti reliatyvistinio skaičiavimo rezultatai  $Xe^{54+}$  [63]. Iš 29 pav. rezultatų matyti, kad artimoms nuliui elektronų energijoms  $\beta$  vertės labai panašios ir lygios 0,34. Jos mažėja, kai elektronų energija didėja. Didesnėms elektronų energijoms  $\beta$  vertės yra didesnės tiems branduoliams, kurių krūvis didesnis.

Neoniškuose jonuose, vykstant šuoliui  $2p^6^1S_0 \rightarrow 2p^63p^2P_{3/2} \rightarrow 2p^63s^2S_{1/2}$ , apskaičiuotas išspinduliuotos fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras  $\beta$  pavaizduotas 30 pav. Iš šio paveikslėlio rezultatų matyti, kad mažos jonizacijos jonams parametras  $\beta$  labai stipriai kinta, didėjant elektronų energijai. Stipriai jonizuotiems jonams ši priklausomybė nuo elektronų energijos labai susilpnėja.  $Na^+$  ir  $Mg^{2+}$  jonams pastebimas  $\beta$  parametrų priklausomybė nuo elektronų energijos minimumas. Jis sutampa su Cooper minimumu fotojonizacijos proceso, kuris yra atvirščias fotorekombinacijai, skerspjūviuose. Stiprios  $\beta$  priklausomybės nuo elektronų energijos priežastis yra rekombinavusio jono rikiavimas  $A_2$ , kuriame ir yra minimumas. Jis atsiranda dėl  $\lambda$  ir  $\lambda'$  dalinių bangų interferencijos, skaičiuojant  $\mathcal{B}^{ph}(2, 0, 0, 2, 0, 2, 2, 1, 1)$ .



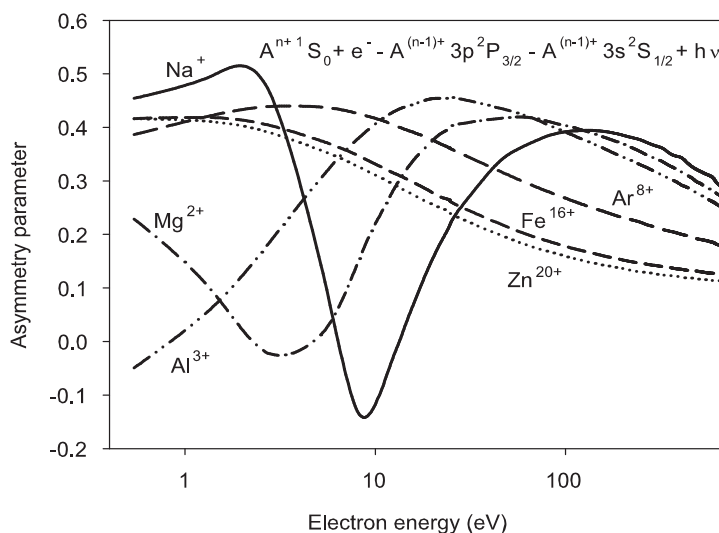
29 pav. Fluorescencijos  $2p^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2S_{1/2}$  kampinio pasiskirtymo asimetrijos parametras  $\beta_2$  po pliko branduolio ir laisvojo elektrono fotorekombinacijos. Skaičiavimo rezultatai  $Xe^{54+}$  paimti iš [63].

## 4.2 Atomų sužadimas elektronais

Elektronai atomus sužadina tuomet, kai jų energija  $\epsilon$  būna didesnė už pradinės 0 ir galinės 1 būsenų energijų skirtumą  $\Delta_{01}$ , t.y.  $\epsilon > \Delta_{01}$ . Šį procesą galima užrašyti šitaip:

$$A(\alpha_0 J_0 M_0) + e^-(\mathbf{p}_1 m_1) \rightarrow A(\alpha_1 J_1 M_1) + e^-(\mathbf{p}_2 m_2). \quad (33)$$

Čia  $\mathbf{p}_1 m_1$  ir  $\mathbf{p}_2 m_2$  – elektrono prieš susidūrimą su atomu ir po jo judėjimo kiekis ir sukinių projekcija. Pastaroji gali būti nustatoma skirtingų kvantavimo ašių atžvilgiu. Sklaidos dydžių matavimo tikslumas nėra toks geras, kad būtų iškiriami šuoliai iš hipersmulkiosios sandaros lygmenų, todėl dažniausiai pakanka daleles aprašyti elektronų apvalkalo pilnutinio judėjimo kiekio momento kvantiniu skaičiumi  $J$ . Iš (33) matyti, kad atomas ir elektronas gali būti poliarizuoti. Taip pat galima išmatuoti išsklaidyto elektrono kampinį pasiskirstymą ir sukinių poliarizaciją. Norint nustatyti sužadinto atomo būsenos poliarizaciją reikėtų atlikti antrosios stadijos eksperimentą, t.y. pamatuoti produktų (spinduliuotės, elektronų), išspinduliuotų jam peršokant į žemesnę būseną, kampinį pasiskirstymą ar kitus parametrus. Pavyzdžiui, matuo-



30 pav. Fluorescencijos  $3p \ ^2P_{3/2} \rightarrow 3s \ ^2S_{1/2}$  kampinio pasiskirtymo asimetrijos parametras  $\beta_2$  po neoniško jono ir laisvojo elektrono fotorekombinacijos.

jant Auger elektronų kampinį pasiskirstymą po atomų vidinių sluoksnių sužadavimo, galima nustatyti sužadinto atomo rikiavimo parametro vertes [143]. Galima tirti sužadintos elektronais fluorescencijos spinduliuotės ir išsklaidyto elektrono kampines koreliacijas [144] arba dviejų vienas po kito išspinduliuotų fluorescencijos fotonų kampines koreliacijas [145]. McFarlane [49], nenaudodamas tankio matricos metodo, surado atomų, sužadintų elektronais, spinduliuotės poliarizaciją. Atomų sužadavimo į fiksuotas pilnutinio judėjimo kiekio momento būsenas diferencialiniai skerspjūviai buvo apskaičiuoti Bethe ir pirmajame Borno artiniuose. Daug teorinių darbų skirta šarminių metalų atomų, sužadintų į autojonizacinę  $nl^{4l+1}(n+1)s^2 \ ^2l_{1/2,3/2}$  būsenas, rikiavimo parametrą apskaičiuoti [146, 143, 147]. Theodosiou [146] diferencialinį atomo sužadavimo skerspjūvį skaičiavo pirmajame Borno, Pantangiwar [147] – iškraipytųjų bangų, o Grum-Grzhimailo ir kt. [143] –  $R$ -matricos metodais.

#### 4.2.1 Bendroji diferencialinio skerspjūvio išraiška

Sužadavimo iš būsenos  $i$  į  $f$  diferencialinis skerspjūvis yra [148]:

$$\frac{d\sigma(i \rightarrow f)}{d\Omega} = \frac{1}{j_0} \frac{d\Lambda(i \rightarrow f)}{d\Omega}. \quad (34)$$

Čia  $d\Lambda(i \rightarrow f)/d\Omega$  – atomo šuolio iš būsenos  $i$  į  $f$  per laiko vienetą tikimybė, padalinta iš išlėkusios dalelės vienetinio erdvinio kampo,  $\mathbf{j}_0$  – sužadavimo dalelių srauto tankis, surandamas pagal formulę

$$\mathbf{j}_0(\mathbf{r}) = \frac{-i\hbar}{2\mu} (\phi_i^* \nabla \phi_i - \phi_i \nabla \phi_i^*), \quad (35)$$

kur  $\phi_i$  – sistemos iš atomo ir dalelės pradinės būsenos banginė funkcija,  $\mu$  – žadinančios dalelės masė.

Žemiausiame trikdžių teorijos artinyje, kai veikia nuo laiko nepriklausantis trikdys, sistemos perėjimo iš  $i$  į  $f$  būseną spartos tankis yra apibrėžiamas šitaip [148]:

$$\frac{d\Lambda(i \rightarrow f)}{d\gamma} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f^{(0)} | H' | \psi_i^{(0)} \rangle|^2 \rho(E_f, \gamma) \Big|_{E_f=E_i}. \quad (36)$$

Čia  $H'$  – sąveikos tarp žadinančios dalelės ir atomo operatorius,  $\gamma$  – visuma kvantinių skaičių, kurie kartu su energija pilnai aprašo nesutrikdytos sistemos galinę būseną ( $f = \{E_f, \gamma\}$ ), o bangines funkcijas galima užrašyti:

$$\psi_i^{(0)} = \psi_{i, \mathbf{k}_i}^{(0)}(\mathbf{r}, \xi) = e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} \phi_{0i}(\xi), \quad (37)$$

$$\psi_f^{(0)} = \psi_{f, \mathbf{k}_f}^{(0)}(\mathbf{r}, \xi) = e^{i\mathbf{k}_f \mathbf{r}} \phi_{0f}(\xi), \quad (38)$$

kur  $\mathbf{k}_i = \mathbf{p}_i/\hbar$  ir  $\mathbf{k}_f = \mathbf{p}_f/\hbar$  – krentančios ir išsklaidytos dalelių banginiai vektoriai, o  $\mathbf{p}_i$  ir  $\mathbf{p}_f$  – jų judėjimo kiekiai. Energijai galioja tvermės dėsnis

$$E_f = \frac{p_f^2}{2\mu} + \varepsilon_f, \quad E_i = \frac{p_i^2}{2\mu} + \varepsilon_i, \quad \frac{p_f^2}{2\mu} + \Delta E = \frac{p_i^2}{2\mu}, \quad (39)$$

o  $\Delta E = \varepsilon_f - \varepsilon_i$  – sužadavimo energija,  $\psi_{0i}$  ir  $\psi_{0f}$  atomo pradinės ir galinės būsenų banginės funkcijos.

Formulėje (36) kvantiniai skaičius  $\gamma$  vaidina išsklaidytos dalelės krypties, kurią nurodo vienetinis vektorius  $\hat{k}_f = \mathbf{k}_f/|\mathbf{k}_f|$ , vaidmenį. Todėl vietoje  $\gamma$  įrašome erdvinio kampo elementą  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ , kur  $\theta$  ir  $\phi$  – polinis ir azimutinis kampai. Dabar šuolio spartos tankį galima užrašyti šitaip:

$$\frac{d\Lambda(i \rightarrow f)}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f^{(0)} | H' | \psi_i^{(0)} \rangle|^2 \rho(E_f, \mathbf{k}_f). \quad (40)$$

Būsenų tankis  $\rho(E_f, \mathbf{k}_f)$  (40) išraiškoje priklauso tiktai nuo to, kaip parinktas sistemos galinės būsenos funkcijos normavimas. (38) matome, kad dešinėje pusėje prieš sandaugą jokio daugiklio nėra. Atsižvelgus į (38) tenkinamą pilnumo sąlygą

$$\sum \int \psi_{f, \mathbf{k}_f}^{(0)}(\mathbf{r}, \xi) \psi_{f, \mathbf{k}_f}^{(0)*}(\mathbf{r}, \xi) \rho(E_f, \mathbf{k}_f) dE_f d\Omega = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\varepsilon - \varepsilon') \quad (41)$$

ir įrašius (38) išraišką, būsenų tankis gaunamas šitoks:

$$\rho(E_f, \mathbf{k}_f) \rightarrow \rho(\mathbf{k}_f) = \frac{\mu p_f}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (42)$$

Į (35) įrašius (37) surandamas ir žadinančios dalelės srauto tankis

$$\mathbf{j}_0 = \hbar \mathbf{k}_i / \mu = \mathbf{v}_i, \quad (43)$$

kur  $\mathbf{v}_i$  – žadinančios dalelės greičio vektorius.

Belieka užrašyti atomo sužadavimo elektronais diferencialinio skerspjuvio išraišką:

$$\frac{d\sigma(i \rightarrow f)}{d\Omega} = \frac{p_f}{p_i} \frac{1}{(2\pi)^2} \langle \psi_f^{(0)} | H | \psi_i^{(0)} \rangle \langle \psi_f^{(0)} | H | \psi_i^{(0)} \rangle^*. \quad (44)$$

Šioje išraiškoje bendrumo dėlei (36) esantis kvadratas pakeistas matricinio ir kompleksiskai jungtinio matricinio sandauga, panaudota atominė vienetų sistema ( $\mu = \hbar = e = 1$ ), o  $H = |r_{12}|^{-1}$  – elektrostatinės sąveikos tarp elektronų operatorius.

Atomų sužadintų elektronais diferencialinio skerspjuvio (44) išraišką galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega_2} &= \frac{p_2}{p_1 (2\pi)^2} \langle \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 | H | \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rangle \\ &\times \langle \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 | H | \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rangle^* \delta(E_0 - E_1). \end{aligned} \quad (45)$$

Čia  $H$  – elektrostatinės sąveikos tarp elektronų operatorius,  $E_0$  ir  $E_1$  – sistemos atomas+elektronas energija pradinėje ir galinėje būsenose.

Laisvojo elektrono banginę funkciją skleidžiame dalinėmis bangomis (2.46). Radialiosios dalinės bangos funkcijos, normuotos į  $\delta(\varepsilon - \varepsilon')$ , asimptotika, kai  $r \rightarrow \infty$ , yra

$$P(\varepsilon\lambda|r \rightarrow \infty) \sim (\pi p)^{-1/2} \sin(pr - \lambda\pi/2 + \delta_\lambda), \quad (46)$$

jeigu sužadinamas neutralus atomas, ir (2.48), jeigu sužadinamas jonas. (46) formulėje  $\delta_\lambda$  yra sklaidos fazė,  $p = \sqrt{2\varepsilon}$ .

Įrašę laisvųjų elektronų bangines funkcijas dalinėmis bangomis ir transformavę visų proceso pradinės ir galinės būsenos dalyvių bangines funkcijas prie vienos koordinačių sistemos, galime perrašyti atskiro matricinio elemento (45) išraišką šitaip:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_1 m_1 | H | \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rangle &= \sum_{\substack{\tilde{M}_0, \tilde{M}_1, \tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \\ \lambda_1, \mu_1, \lambda_2, \mu_2}} [(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)]^{1/2} \\ &\times \langle \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 \varepsilon_1 \lambda_1 \mu_2 \tilde{m}_1 | H | \alpha_0 J_0 \tilde{M}_0 \varepsilon_1 \lambda_1 \mu_1 \tilde{m}_1 \rangle D_{\tilde{M}_0 M_0}^{J_0}(\hat{J}_0) D_{\tilde{M}_1 M_1}^{*J_1}(\hat{J}_1) D_{\mu_1 0}^{\lambda_1}(\hat{p}_1) \end{aligned}$$

$$\times D_{\mu_2 0}^{*\lambda_2}(\hat{p}_2) D_{\tilde{m}_1 m_1}^s(\hat{s}) D_{\tilde{m}_2 m_2}^{*s}(\hat{s}). \quad (47)$$

Šio matricinio elemento kampinė dalis pavaizduota 31 pav. diagrama E<sub>1</sub>. Joje elektrosstatinės sąveikos operatorius  $H$  išskleistas multipoliais (1.111):

$$H = \sum_k \frac{r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} (C_1^{(k)} C_2^{(k)}),$$

kur 1 nurodo atomo elektroną, o 2 – sklaidomą elektroną.  $C_2^{(k)}$  atėjo iš sklaidomo elektrono funkcijos skleidinio multipoliais.

Nupjovus Vignerio posūkių matricas, elektronų orbitinio judėjimo kiekio ir sukinių momentus susiejus  $\lambda_1 + \mathbf{s} = \mathbf{j}_1$  ir  $\lambda_2 + \mathbf{s} = \mathbf{j}_2$  bei atviras linijas uždarius apibendrintu Klebšo ir Gordano koeficientu, gaunama diagrama E<sub>2</sub>, kuri vaizduoja submatricinį elementą. Šiuos veiksmus galima užrašyti šitaip:

$$E_1 = \sum_{j_1, j_2, J} (2J + 1) E_2 E_3', \quad (48)$$

kur E<sub>3</sub>' yra E<sub>3</sub> diagramos dešinėje pavaizduotas apibendrintas Klebšo ir Gordano koeficientas, o  $(2J + 1)$  ateina todėl, kad atsiranda pilnai pastorinta linija, pažymėta  $J$ . E<sub>3</sub> diagramoje pavaizduoti du apibendrinti Klebšo ir Gordano koeficientai, nes (45) skerspjūvio išraiškoje yra matricinis ir jam kompleksškai jungtinis matricinis elementai. Galutinis tikslas yra diferencialinį skerspjūvį užrašyti daugialype multipolių suma, todėl, panaudojant abu apibendrintus Klebšo ir Gordano koeficientus ir po vieną Klebšo ir Gordano koeficientą iš dviejų Vignerio posūkių matricių skleidimo multipoliais kiekvienam  $J_0, J_1, \lambda_1, \lambda_2, s$  judėjimo kiekio momentui, galima (47) išraiškoje susumuoti  $\tilde{M}_0, \tilde{M}'_0, \tilde{M}_1, \tilde{M}'_1, \mu_1, \mu_2, \tilde{m}_1, \tilde{m}'_1, \tilde{m}_2, \tilde{m}'_2$ , atžvilgiu. Gaunama pavaizduota 32 pav. diagrama E<sub>4</sub>. Uždarius jos atviras linijas, gaunama invariantiška posūkių erdvėje diagrama E<sub>5</sub> (32 pav.) ir priklausanti nuo judėjimo kiekio momentų orientacijos erdvėje diagrama E<sub>6</sub>, kurioje prie atvirų linijų galų prijungti iš skleidinių (1.152) ir (1.153) atėję tenzoriai  $T_N^K$ . Naudojant E<sub>2</sub>, E<sub>5</sub> ir E<sub>6</sub> diagramas, galima ieškomo diferencialinio skerspjūvio išraišką užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned} & \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega} \\ &= 4\pi C \sum_{\substack{K, K_0, K'_0, K_{\lambda_1}, K_{s_1}, K_1 \\ K'_1, K_{\lambda_2}, K_{s_2}}} \mathcal{B}^{ex}(K_0, K'_0, K_1, K'_1, K_{\lambda_1}, K_{s_1}, K_{\lambda_2}, K_{s_2}, K) \\ & \times \sum_{\substack{N_0, N'_0, N_{\lambda_1}, N_{s_1}, N_1 \\ N'_1, N_{\lambda_2}, N_{s_2}, N}} \begin{bmatrix} K_{\lambda_1} & K_{s_1} & K'_0 \\ N_{\lambda_1} & N_{s_1} & N'_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_0 & K'_0 & K \\ N_0 & N'_0 & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_1 & K'_1 & K \\ N_1 & N'_1 & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{\lambda_2} & K_{s_2} & K'_1 \\ N_{\lambda_2} & N_{s_2} & N'_1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times Y_{K_{\lambda_1 N_{\lambda_1}}}^* (\hat{p}_1) Y_{K_{\lambda_2 N_{\lambda_2}}} (\hat{p}_2) T_{N_0}^{*K_0} (J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) T_{N_1}^{K_1} (J_1, J_1, M_1 | \hat{J}_1) T_{N_{s_1}}^{*K_{s_1}} (s, s, m_1 | \hat{s}) \\ & \times T_{N_{s_2}}^{K_{s_2}} (s, s, m_2 | \hat{s}), \end{aligned} \quad (49)$$

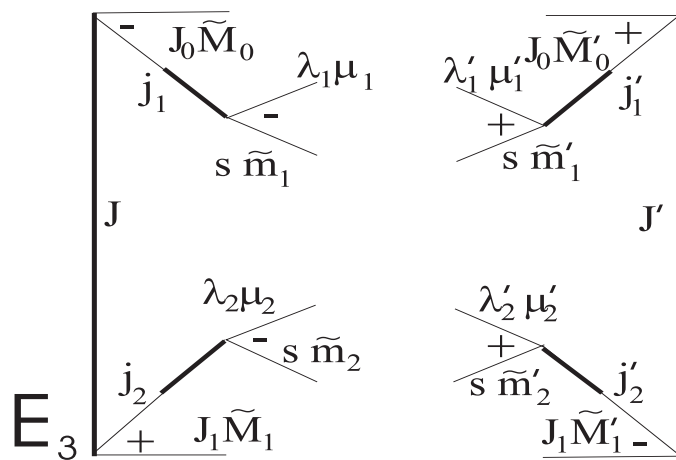
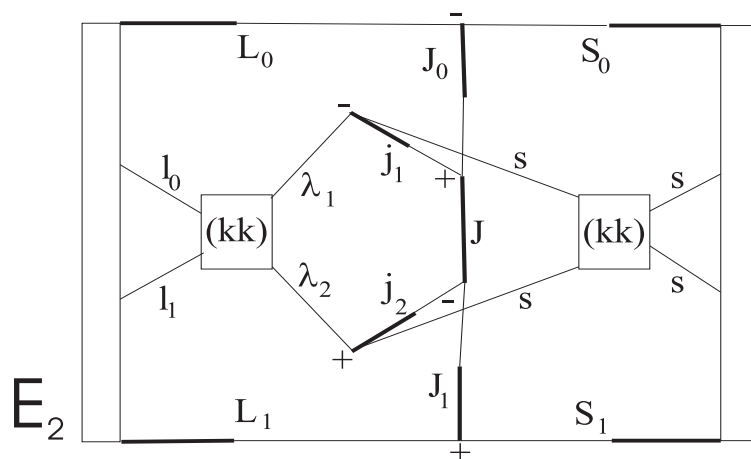
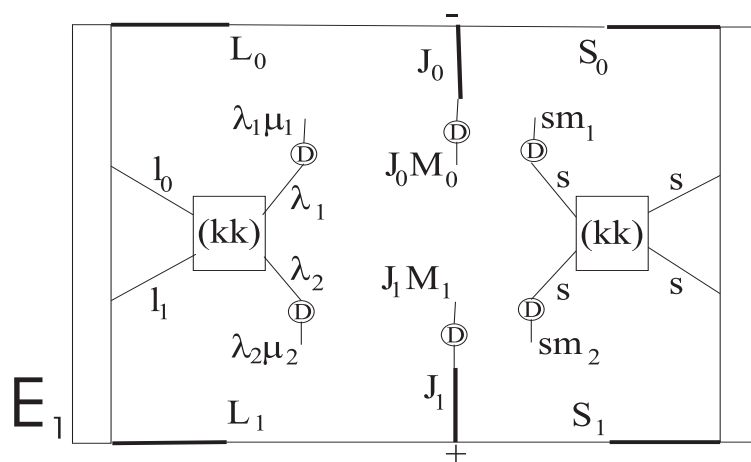
$$\begin{aligned} \mathcal{B}^{ex} (K_0, K'_0, K_1, K'_1, K_{\lambda_1}, K_{s_1}, K_{\lambda_2}, K_{s_2}, K) &= \sum_{\lambda_1, \lambda'_1, \lambda_2, \lambda'_2, j_1, j'_1, j_2, j'_2, J, J'} (2J+1)(2J'+1)(2s+1)(-1)^{\lambda'_1 + \lambda'_2} \\ & \times \langle \alpha_1 J_1, \varepsilon_2 \lambda_2 (j_2) J || H || \alpha_0 J_0, \varepsilon_1 \lambda_1 (j_1) J \rangle \langle \alpha_1 J_1, \varepsilon_2 \lambda'_2 (j'_2) J' || H || \alpha_0 J_0, \varepsilon_1 \lambda'_1 (j'_1) J' \rangle^* \\ & \times [(2\lambda_1 + 1)(2\lambda'_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)(2\lambda'_2 + 1)(2j_1 + 1)(2j'_1 + 1)(2j_2 + 1)(2j'_2 + 1) \\ & \times (2J_0 + 1)(2J_1 + 1)(2K'_0 + 1)(2K'_1 + 1)]^{1/2} \begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda'_1 & K_{\lambda_1} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_2 & \lambda'_2 & K_{\lambda_2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ & \times \begin{Bmatrix} J_0 & K_0 & J_0 \\ j'_1 & K'_0 & j_1 \\ J' & K & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda'_1 & K_{\lambda_1} & \lambda_1 \\ s & K_{s_1} & s \\ j'_1 & K'_0 & j_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda_2 & K_{\lambda_2} & \lambda_2 \\ s & K_{s_2} & s \\ j'_2 & K'_1 & j_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_1 & K_1 & J_1 \\ j'_2 & K'_1 & j_2 \\ J' & K & J \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (50)$$

Konstanta  $C$  (49) formulėje priklauso nuo daugiklio prieš sinusą asimptotikos išraiškoje. Kartais asimptotikos formulėje daugiklio  $\pi^{-1/2}$  nebūna, tuomet  $C = 4/\pi^2 p_1^2$ . Priešingu atveju  $C = 4/p_1^2$ .

Atomų sužadimas elektronais dažnai būna naudojamas atomų išrikiuotai būsenai paruošti. Šiuo atveju sužadimas yra pirmosios stadijos procesas, todėl reikalinga atitinkama diferencialinio skerspjūvio išraiška. Jai surasti pasinaudosime 2.1.4 skirsnio rekomendacijomis. Sužadinto atomo rikiavimą aprašanti diferencialinio skerspjūvio išraiška yra šitokia:

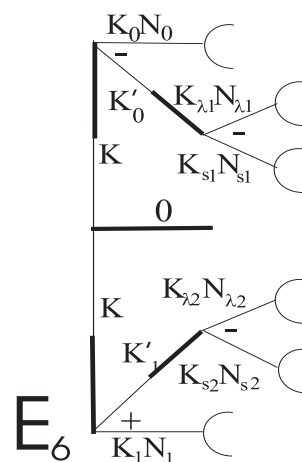
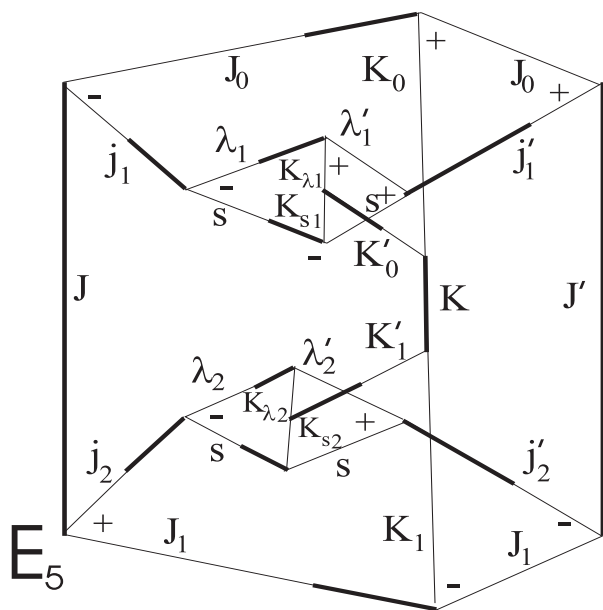
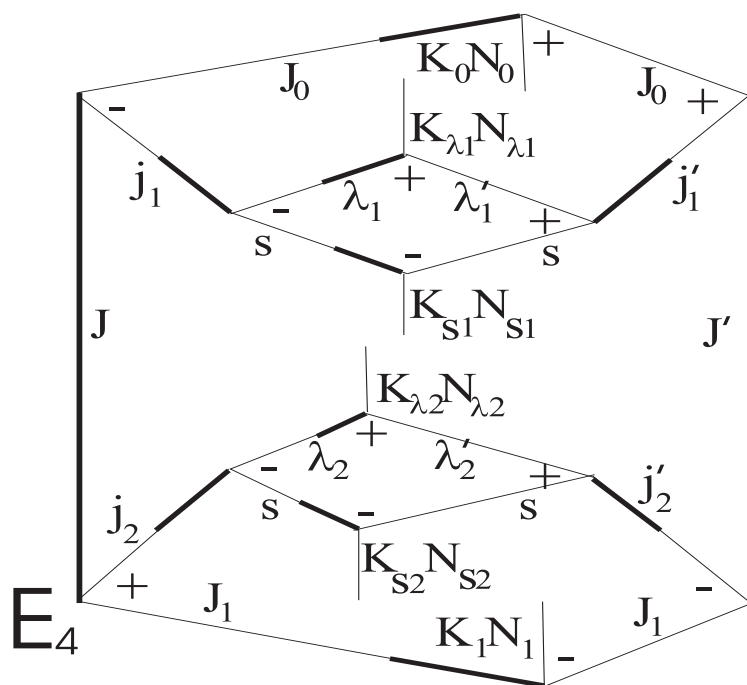
$$\begin{aligned} & \frac{d\sigma_{K_1 N_1} (\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega} \\ &= 4\pi C [2K_1 + 1]^{1/2} \sum_{\substack{K, K_0, K'_0, K_{\lambda_1}, K_{s_1} \\ K'_1, K_{\lambda_2}, K_{s_2}}} \mathcal{B}^{ex} (K_0, K'_0, K_1, K'_1, K_{\lambda_1}, K_{s_1}, K_{\lambda_2}, K_{s_2}, K) \\ & \times \sum_{\substack{N_0, N'_0, N_{\lambda_1}, N_{s_1} \\ N'_1, N_{\lambda_2}, N_{s_2}, N}} \begin{bmatrix} K_{\lambda_1} & K_{s_1} & K'_0 \\ N_{\lambda_1} & N_{s_1} & N'_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_0 & K'_0 & K \\ N_0 & N'_0 & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_1 & K'_1 & K \\ N_1 & N'_1 & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{\lambda_2} & K_{s_2} & K'_1 \\ N_{\lambda_2} & N_{s_2} & N'_1 \end{bmatrix} \\ & \times Y_{K_{\lambda_1 N_{\lambda_1}}}^* (\hat{p}_1) Y_{K_{\lambda_2 N_{\lambda_2}}} (\hat{p}_2) T_{N_0}^{*K_0} (J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) T_{N_{s_1}}^{*K_{s_1}} (s, s, m_0 | \hat{s}) T_{N_{s_2}}^{K_{s_2}} (s, s, m_1 | \hat{s}). \end{aligned} \quad (51)$$

Toliau surasime paprastesnius atvejus aprašančias diferencialinio skerspjūvio išraiškas. Jos bus atskiri bendrosios (49) formulės atvejai.



32 pav. Judėjimo kiekio momento diagramos, naudotos atomo sužadavimo elektronais diferencialinio skerspjūvio išraiškai surasti.





33 pav. Judėjimo kiekio momento diagramos, naudotos atomo sužadavimo elektronais diferencialinio skerspjūvio išraiškai surasti.

### 4.2.2 Atomų sužadavimo elektronais pilnutinis skerspjūvis.

Iš bendrosios formulės lengva surasti nepoliarizuoto atomo sužadavimo nepoliarizuotais elektronais pilnutinį skerspjūvį, kai detektorius neįtrauktas išsklaidyto elektrono sukinio poliarizacijai ir sužadinto atomo pilnutinio judėjimo kiekio momento orientacija neregistrojama. Tam tikslui reikia (49) išraišką sumuoti atomo galinėje būsenoje ir išsklaidyto elektrono sukinio būsenų atžvilgiu, vidurkinti atomo ir elektrono sukinio būsenų atžvilgiu ir integruoti pagal visus nukreipiančio elektrono kampus. Atlikus šiuos veiksmus, gaunama gerai žinoma pilnutinio skerspjūvio formulė:

$$\begin{aligned}\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) &= \frac{1}{2(2J_0 + 1)} \int d\Omega \sum_{M_0, m_1, M_1, m_2} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega} \\ &= \frac{4\pi}{(2J_0 + 1)\varepsilon_1} \mathcal{B}^{ex}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0),\end{aligned}\quad (52)$$

kur

$$\mathcal{B}^{ex}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) = \sum_{\lambda_1, j_1, \lambda_2, j_2, J} (2J + 1) |\langle \alpha_1 J_1, \varepsilon_2 \lambda_2(j_2) J || H || \alpha_0 J_0, \varepsilon_1 \lambda_1(j_1) J \rangle|^2. \quad (53)$$

Pilnutinis jonų sužadavimo elektronais Kulono ir Borno artinyje teoriškai nagrinėtas darbuose [163, 164].

### 4.2.3 Elektronų kampinis pasiskirstymas po nepoliarizuotų atomų sužadavimo nepoliarizuotais elektronais

Nepoliarizuotų atomų sužadavimas nepoliarizuotais elektronais yra dažniausiai pasitaikantis ir pats paprasčiausias atvejis. Surasime išsklaidytų elektronų kampinį pasiskirstymą aprašančio diferencialinio skerspjūvio išraišką.  $z$  ašimi pasirenkame žadinančio elektrono kryptį. Šiuo atveju (49) formulę reikia sumuoti sužadinto atomo ir išsklaidyto elektrono sukinio bei vidurkinti atomo ir žadinančio elektrono sukinio būsenų atžvilgiu. Gauname, kad  $K_0 = N_0 = K_{s1} = N_{s1} = K_{s2} = N_{s2} = K_1 = N_1 = 0$ ,  $K_{\lambda_1} = K'_0 = K = K'_1 = K_{\lambda_2}$ . Įrašome šias reikšmes į (49) ir surandame išsklaidytų elektronų kampinį pasiskirstymą aprašančio diferencialinio skerspjūvio išraišką:

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2)}{d\Omega} &= \frac{1}{2(2J_0 + 1)} \sum_{M_0, m_1, M_1, m_2} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega} \\ &= \frac{\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)}{4\pi} \left[ 1 + \sum_{K>0} \beta_K P_K(\cos \theta) \right].\end{aligned}\quad (54)$$

Čia  $\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)$  – pilnutinis atomų sužadavimo elektronais skerspjuvis, o elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrai  $\beta_K$  yra:

$$\beta_K = \frac{(2K+1)\mathcal{B}^{ex}(0, K, 0, K, K, 0, K, 0, K)}{\mathcal{B}^{ex}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)}, \quad (55)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^{ex}(0, K, 0, K, K, 0, K, 0, K) &= \sum_{\lambda_1, \lambda'_1, \lambda_2, \lambda'_2, j_1, j'_1, j_2, j'_2, J, J'} (2J+1)(2J'+1) \\ &\times \langle \alpha_1 J_1, \varepsilon_2 \lambda_2(j_2) J || H || \alpha_0 J_0, \varepsilon_1 \lambda_1(j_1) J \rangle \langle \alpha_1 J_1, \varepsilon_2 \lambda'_2(j'_2) J' || H || \alpha_0 J_0, \varepsilon_1 \lambda'_1(j'_1) J' \rangle^* \\ &\times [(2\lambda_1+1)(2\lambda'_1+1)(2\lambda_2+1)(2\lambda'_2+1)(2j_1+1)(2j'_1+1)(2j_2+1)(2j'_2+1)]^{1/2} \\ &\times (-1)^{j_1+j'_1+j_2+j'_2+J_0+J_1+2J'+1} \begin{Bmatrix} j'_1 & j_1 & K \\ J & J' & J_0 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j'_2 & j_2 & K \\ J & J' & J_1 \end{Bmatrix} \\ &\times \begin{Bmatrix} \lambda'_1 & \lambda_1 & K \\ j_1 & j'_1 & s \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda'_2 & \lambda_2 & K \\ j_2 & j'_2 & s \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (56)$$

(54) formulėje  $K$  gali įgyti  $\max\{|\lambda_1 - \lambda'_1|, |\lambda_2 - \lambda'_2|\} \leq K \leq \min\{\lambda_1 + \lambda'_1, \lambda_2 + \lambda'_2\}$  vertes kiekvienam dalinių bangų judėjimo kiekio momentų rinkiniui. Reikia nepamiršti, kad  $\lambda_1$  ir  $\lambda_2$  vertės priklauso nuo elektrono energijos ir gali būti labai didelės (siekti 100 ir daugiau). Kelių dalinių bangų pakanka tikrai labai mažoms žadinančio elektrono energijoms.

#### 4.2.4 Elektronų kampinis pasiskirstymas po poliarizuotų atomų sužadavimo nepoliarizuotais elektronais

Jeigu prieš sužadimą atomai paruošiami poliarizuotoje būsenoje, tai diferencialinio skerspjuvio, aprašančio išsklaidyto elektrono kampinį pasiskirstymą, išraiškai surasti reikia (49) išraišką sumuoti sužadinto atomo ir išsklaidyto elektrono sukinio bei vidurkinti žadinančio elektrono sukinio projekcijų atžvilgiu. Gauname, kad  $K_1 = N_1 = K_{s1} = N_{s1} = K_{s2} = N_{s2} = 0$ ,  $K_{\lambda_1} = K'_0$ ,  $K'_1 = K = K'_1 = K_{\lambda_2}$ . Įrašome šias reikšmes į (49),  $z$  ašį sutapatiname su žadinančio elektrono judėjimo kryptimi ir surandame šitokią išraišką:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2)}{d\Omega} &= \frac{1}{2} \sum_{m_1, M_1, m_2} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega} \\ &= \frac{C\sqrt{4\pi}}{2} \sum_{K_{\lambda_1}, K_0, K_{\lambda_2}, N_0} [2K_{\lambda_1} + 1]^{1/2} \mathcal{B}^{ex}(K_0, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_2}, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_2}, 0, K_{\lambda_2}) \\ &\times \begin{bmatrix} K_0 & K_{\lambda_1} & K_{\lambda_2} \\ N_0 & 0 & N_0 \end{bmatrix} Y_{K_{\lambda_2} N_0}(\hat{p}_2) \left[ \frac{4\pi}{2J_0 + 1} \right]^{1/2} (-1)^{J_0 - M_0} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_0 N_0}^*(\hat{J}_0). \end{aligned} \quad (57)$$

Šią išraišką galima būtų padaryti paprastesnę specialiai parenkant eksperimento geometriją. Pavyzdžiui, atomus poliarizuojant išilgai žadinančio elektrono krypties,  $N_0 = 0$ ,  $M_0 = J_0$ , iš  $Y_{K_0 N_0}^*(0, 0)$  beliktų  $\sqrt{(2K_0 + 1)/4\pi}$ , o  $-Y_{K_{\lambda_2} N_0}(\hat{p}_2) = \sqrt{(2K_{\lambda_2} + 1)/4\pi} P_{K_{\lambda_2}}(\cos \theta)$ , kur kampas  $\theta$  būtų matuojamas nuo žadinančio elektrono krypties. Tuomet (57) išraiška pavirstų į

$$\frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 = J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2)}{d\Omega} = \frac{\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)}{4\pi} \left[ 1 + \sum_{K_{\lambda_2} > 0} B_{K_{\lambda_2}} P_{K_{\lambda_2}}(\cos \theta) \right]. \quad (58)$$

Čia

$$B_{K_{\lambda_2}} = \mathcal{B}^{ex}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^{-1} \sum_{K_0, K_{\lambda_1}} \begin{bmatrix} K_0 & K_{\lambda_1} & K_{\lambda_2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ J_0 & -J_0 & 0 \end{bmatrix} \\ \times [(2J_0 + 1)(2K_0 + 1)(2K_{\lambda_1} + 1)(2K_{\lambda_2} + 1)]^{1/2} \mathcal{B}^{ex}(K_0, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_2}, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_2}, 0, K_{\lambda_2}) \quad (59)$$

yra išklaidyto elektrono kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras. Galima surasti ir sužadavimo diferencialinių skerspjuvių, pamatuotų priešingomis  $\mathbf{J}_0$  kryptims, skirtumą, kuris aprašo sužadavimo proceso magnetinį dichroizmą.

#### 4.2.5 Poliarizuotų atomų sužadavimo nepoliarizuotais elektronais pilnutinio skerspjuvio magnetinis dichroizmas

Diferencialinio skerspjuvio (57) išraišką suintegravus išklaidyto elektrono krypčių atžilgiu ( $K_{\lambda_2} = N_{\lambda_2} = 0$ ,  $K_0 = K_{\lambda_1}$ ), gaunamas poliarizuoto atomo sužadavimo nepoliarizuotais elektronais pilnutinis skerspjuvis. Jis priklauso nuo atomo poliarizacijos krypties ir yra šitoks:

$$\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 \rightarrow \alpha_1 J_1) = 2\pi C \sum_{K_0, N_0} \frac{1}{[(2J_0 + 1)(2K_0 + 1)]^{1/2}} (-1)^{K_0 + J_0 - M_0} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} \\ \times \mathcal{B}^{ex}(K_0, K_0, 0, 0, K_0, 0, 0, 0, 0) Y_{K_0 N_0}(\hat{p}_1) Y_{K_0 N_0}^*(\hat{J}_0). \quad (60)$$

$z$  ašį sutapatinus su žadinančio elektrono kryptimi, (60) formulė supaprastėja:

$$\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) = 2\pi C \sum_{K_0} (-1)^{K_0 + J_0 - M_0} \left[ \frac{2K_0 + 1}{2J_0 + 1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} \\ \times \mathcal{B}^{ex}(K_0, K_0, 0, 0, K_0, 0, 0, 0, 0) P_{K_0}(\cos \theta), \quad (61)$$

o kampas  $\theta$  matuojamas nuo elektrono krypties.

Magnetinis dichroizmas apibrėžiamas (3.68) formule, kur mūsų atveju reikia įrašyti  $I = \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)$ . Įrašome (61) į (3.68), atsižvelgiame į tai, kad skaitiklyje lieka nariai su  $K_0$

nelyginėmis, o vardiklyje – lyginėmis reikšmėmis, ir užrašome magnetinio dichroizmo parametro formulę:

$$a = \frac{\sum_{K_0=nelyg.} B(K_0)P_{K_0}(\cos \theta)}{\sum_{K_0=lyg.} B(K_0)P_{K_0}(\cos \theta)}, \quad (62)$$

$$B(K) = (-1)^K \sqrt{2K+1} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K \\ J_0 & -J_0 & 0 \end{bmatrix} \mathcal{B}^{ex}(K, K, 0, 0, K, 0, 0, 0, 0). \quad (63)$$

Čia  $\max\{0, |\lambda_1 - \lambda'_1|\} \leq K_0 \leq \min\{2J_0, \lambda_1 + \lambda'_1, 2\lambda_2\}$ .

Jeigu atomo pilnutinis judėjimo kiekio momentas  $J_0$  nukreipiamas išilgai ir priešinga sklaidomojo elektrono kryptimis, tuomet  $M_0 = J_0$ ,  $P_{K_0}(0) = 1$ , ir magnetinio dichroizmo parametras pasidaro paprastesnis:

$$a = -\frac{\sum_{K_0=nelyg.} B(K_0)}{\sum_{K_0=lyg.} B(K_0)}. \quad (64)$$

Kaip pavyzdį pateiksime magnetinio dichroizmo parametro išraiškas mažoms pilnutinio judėjimo kiekio momento  $J_0$  reikšmėms. Kai  $J_0 = 1/2$ , jis yra šitoks:

$$a = -\sqrt{3} \frac{\mathcal{B}^{ex}(1, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0)}{\mathcal{B}^{ex}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)}. \quad (65)$$

$J_0 = 1$  atveju, magnetinio dichroizmo parametro išraiška yra:

$$a = \frac{-(3/\sqrt{2})\mathcal{B}^{ex}(1, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0)}{\mathcal{B}^{ex}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) + \sqrt{5/2}\mathcal{B}^{ex}(2, 2, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 0)}. \quad (66)$$

#### 4.2.6 Elektronais sužadinto atomo rikiavimas

Sužadinto atomo rikiavimas nulemia fluorescencijos spinduliuotės ir Auger elektronų, išspinduliuotų suyrant sužadintai būsenai, kampinį pasiskirstymą ir poliarizaciją. Surasime rikiavimo parametą, aprašantį atomo būseną, kai nepoliarizuoti atomai sužadinami nepoliarizuotais elektronais. Jai surasti reikia (51) formulę vidurkinti atomo ir žadinančio elektrono sukiniu, sumuoti išsklaidyto elektrono sukiniu būsenų ir integruoti išsklaidyto elektrono kampų atžvilgiu:

$$\begin{aligned} \sigma_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 \mathbf{p}_1 \rightarrow \alpha_1 J_1) &= \frac{1}{2(2J_0 + 1)} \int d\Omega \sum_{M_0, m_1, m_2} \frac{d\sigma_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega} \\ &= \frac{4\pi C}{2(2J_0 + 1)} [4\pi(2K_1 + 1)]^{1/2} \mathcal{B}^{ex}(0, K_1, K_1, 0, K_1, 0, 0, 0, K_1) Y_{K_1 N_1}(\hat{p}_1). \end{aligned} \quad (67)$$

Sutapatiname  $z$  ašį su  $\mathbf{p}_1$  kryptimi ir gauname, kad

$$\sigma_{K_1 0}(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) = \frac{4\pi C}{2(2J_0 + 1)} (2K_1 + 1) \mathcal{B}^{ex}(0, K_1, K_1, 0, K_1, 0, 0, 0, K_1)$$

$$= \sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)[1 + A]. \quad (68)$$

$K_1$  gali įgyti vertes nuo 0 iki  $2J_1$ , todėl sužadinto atomo rikiavimo parametras galime apibrėžti šitaip:

$$A = \frac{\sum_{K_1 > 0} (2K_1 + 1) \mathcal{B}^{ex}(0, K_1, K_1, 0, K_1, 0, 0, 0, K_1)}{\mathcal{B}^{ex}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)}. \quad (69)$$

Kai  $J_1 = 0$ , sužadintas atomas negali būti išrikiuotas.  $J_1 = 1/2$  atveju sužadintas atomas gali būti orientuotas:

$$A = \frac{3\mathcal{B}^{ex}(0, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 1)}{\mathcal{B}^{ex}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)}. \quad (70)$$

Kai  $J_1 = 1$ , sužadinto atomo rikiavimo parametras yra lygus:

$$A = \frac{3\mathcal{B}^{ex}(0, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 1) + 5\mathcal{B}^{ex}(0, 2, 2, 0, 2, 0, 0, 0, 2)}{\mathcal{B}^{ex}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)}. \quad (71)$$

#### 4.2.7 Išklaidytų elektronų sukinio poliarizacija

Diferencialinio skerspjuvio, aprašančio nepoliarizuotais atomais išklaidytų nepoliarizuotų elektronų sukinio poliarizaciją, galima surasti bendrąją išraišką (49) sumuojant sužadinto atomo ir visurkinant atomo bei elektrono sukinio pradineje būsenoje projekcijų atžvilgiu:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 \mathbf{p}_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega} &= \frac{1}{2(2J_0 + 1)} \sum_{M_0, m_1, M_1} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega} \\ &= \frac{2\pi C}{2J_0 + 1} \sum_{K_{\lambda_1}, K_{\lambda_2}, K_{s_2}, N_{\lambda_1}, N_{\lambda_2}, N_{s_2}} \mathcal{B}^{ex}(0, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_1}, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_2}, K_{s_2}, K_{\lambda_1}) \begin{bmatrix} K_{\lambda_2} & K_{s_2} & K_{\lambda_1} \\ N_{\lambda_2} & N_{s_2} & N_{\lambda_1} \end{bmatrix} \\ &\quad \times Y_{K_{\lambda_1} N_{\lambda_1}}^*(\hat{p}_1) Y_{K_{\lambda_2} N_{\lambda_2}}(\hat{p}_2) T_{N_{s_2}}^{K_{s_2}}(s, s, m_2 | \hat{s}). \end{aligned} \quad (72)$$

Išklaidyto elektrono sukinio poliarizacija charkterizuojama poliarizacijos laipsniu

$$P = \frac{\sigma(m_2) - \sigma(-m_2)}{\sigma(m_2) + \sigma(-m_2)}, \quad (73)$$

kur  $\sigma(m_2) = d\sigma((\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2)/d\Omega$ .

Sakysime, kad išsklaidyto elektrono kryptis nustatoma sklaidomojo elektrono judėjimo krypties atžvilgiu. Tuomet  $Y_{K_{\lambda_1} N_{\lambda_1}}(0, 0) = [(2K_{\lambda_1} + 1)/4\pi]^{1/2} \delta(N_{\lambda_1}, 0)$ , and  $N_{\lambda_1} = N_{s_2}$ , o skerspjuvio išraiška yra šitokia:

$$\frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega} = \frac{2\pi C}{2J_0 + 1} \sum_{K_{\lambda_1}, K_{\lambda_2}, K_{s_2}, N} \mathcal{B}^{ex}(0, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_1}, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_2}, K_{s_2}, K_{\lambda_1})$$

$$\times \left[ \frac{2K_{\lambda_1} + 1}{2} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} K_{\lambda_2} & K_{s2} & K_{\lambda_1} \\ N & -N & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s & s & K_{s2} \\ m_2 & -m_2 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_{\lambda_2}N}(\hat{p}_2) Y_{K_{s2}-N}(\hat{s}). \quad (74)$$

poliarizacijos laipsnį aprašo formulė

$$P = \left[ \sum_{K_{\lambda_1}} \frac{2K_{\lambda_1} + 1}{4\pi} \mathcal{B}^{ex}(0, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_1}, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_1}) P_{K_{\lambda_1}}(\cos \theta_p) \right]^{-1} \\ \times \sum_{K_{\lambda_1}, K_{\lambda_2}, N} \begin{bmatrix} K_{\lambda_2} & 1 & K_{\lambda_1} \\ N & -N & 0 \end{bmatrix} \sqrt{2K_{\lambda_1} + 1} \mathcal{B}^{ex}(0, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_1}, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_2}, 1, K_{\lambda_1}) \\ \times Y_{K_{\lambda_2}N}(\hat{p}_2) Y_{1-N}(\hat{s}). \quad (75)$$

Išsklaidyto elektrono sukinio kampas pažymėkime  $s$ , o jo judėjimo krypties kampas  $-p$ . Tuomet poliarizacijos laipsnį galima nustatyti, parenkant sukinio orientaciją sklaidos plokštumos atžvilgiu visai taip pat, kaip jis buvo nustatomas fotoelektronams [20, 102]: a) skersinė poliarizacija, statmena reakcijos plokštumai ( $\theta_p = \theta$ ,  $\theta_s = \pi/2$ ,  $\phi_p = \pi/2$ ,  $\phi_s = \pi$ ); b) skersinė poliarizacija, lygiagrečiai reakcijos plokštumai ( $\theta_p = \theta$ ,  $\theta_s = \theta + \pi/2$ ,  $\phi_p = \pi/2$ ,  $\phi_s = \pi/2$ ); c) išilginė poliarizacija sklaidos plokštumoje ( $\theta_p = \theta_s = \theta$ ,  $\phi_p = \phi_s = \pi/2$ ). Įrašius į (73) nurodytus kampus, kiekvienam matavimui galima gauti atskirų parametrų išraiškas.

### 4.3 Atomų sužadavimo nagrinėjimas Borno artinyje.

Kai sužadinančio elektrono energija daug didesnė už energijų skirtumą tarp atomo pradinės ir galinės būenų, elektronų sukinio kryptis nefisuoja, o elektronai galinėje būsenoje neregistruojami, sužadavimo procesui aprašyti gerai tinka plokščiabangis Borno artinys. Sistemos iš atomo ir elektrono pradinę ir galinę būsenas aprašo (37) ir (38) funkcijos. Jeigu žadinančio elektrono banginė funkcija normuota į vienetinį srautą

$$\phi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}_e) = \frac{1}{\sqrt{k_1}} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_e}, \quad (76)$$

o išsklaidyto elektrono – į  $\delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2)$

$$\phi_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_e) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_e}, \quad (77)$$

tuomet sužadavimo tikimybė lygi sužadavimo skerspjūviui. Patogiau naudoti (76) ir (77) eksponentes be daugiklių, tuomet diferencialinio skerspjūvio išraiška bus (44). Iš žadinančio elektrono elektrostatinės sąveikos su atomo elektronais

$$H' = \sum_{k=1}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_e|} - \frac{Z}{r_e} \quad (78)$$

lieka tiksliai pirmasis narys nes antrasis narys duoda indėlių tiksliai elastinei sklaidai. Sužadavimo skerspjūvyje jo indėlis lygus nuliui dėl atomo radialiųjų orbitalių ortogonalumo. (78) formulėje  $Z$  yra atomo branduolio krūvis, o  $N$  – elektronų skaičius. Dabar (44) išraiškoje esantį matricinį elementą galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_2^{(0)} | H | \Psi_1^{(0)} \rangle &= \langle e^{-i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_e} \psi_{02}(\mathbf{r}) \left| \sum_k \frac{1}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_e|} \right| e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_e} \psi_{01}(\mathbf{r}) \rangle \\ &= \langle \psi_{02}(\mathbf{r}) \left| \sum_k \int d\mathbf{r}_e e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_e} \frac{1}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_e|} \right| \psi_{01}(\mathbf{r}) \rangle, \end{aligned} \quad (79)$$

kur  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$  – perduotas judėjimo kiekis. (79) galima suintegruoti, panaudojant gerai žinomą formulę:

$$\int d\mathbf{r}_e e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_e} \frac{1}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_e|} = \frac{4\pi}{q^2} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_k}. \quad (80)$$

Tuomet matricinis elementas (79) išraiškoje įgyja šitokią pavidalą:

$$\langle \Psi_2^{(0)} | H | \Psi_1^{(0)} \rangle = \frac{4\pi}{q^2} \langle \psi_{02}(\mathbf{r}) \left| \sum_k e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_k} \right| \psi_{01}(\mathbf{r}) \rangle. \quad (81)$$

Atomų sužadavimo ir jonizacijos elektronais matriciniame elemente  $\langle \Psi_2 | B^{r,\nabla} | \Psi_1 \rangle$  operatorius Borno artinyje gali būti ilgio ir greičio formos [168]:

$$B^r = e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (82)$$

$$B^\nabla = \frac{1}{2\Delta E} \left\{ e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} [\mathbf{q}\nabla] - [\nabla\mathbf{q}] e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \right\}. \quad (83)$$

Čia  $\Delta E = k_1^2/2 - k_2^2/2$  – elektrono prarasta energija,  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$  – perduotas judėjimo kiekis.

Sakysime, kad atomas pradinėje būsenoje aprašomas  $\alpha_0 J_0 M_0$ , o galinėje –  $\alpha_1 J_1 M_1$  kvantiniais skaičiais. (81) išraiškoje esančią eksponentę galima išskleisti multipoliais:

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} &= 4\pi \sum_{t=0}^{\infty} i^t j_t(qr) \sum_{p=-t}^t Y_{tp}^*(\hat{q}) Y_{tp}(\hat{r}) \\ &= \sum_{t=0}^{\infty} \sqrt{(2t+1)} \sum_{p=-t}^t Q_p^{(t)}(q\mathbf{r}) D_{p,0}^t(\hat{q}). \end{aligned} \quad (84)$$

Čia  $j_t(qr)$  – sferinė Beselio funkcija,  $C_p^{(t)}$  – sferinės funkcijos operatorius (1.48). Padarykime dar vieną prielaidą, kad  $J_0, J_1$  ir  $t$  projekcijas galima apibrėžti į skirtingas kvantavimo ašis. Tuomet (81) galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1 J_1 M_1 | H(\mathbf{q}) | \alpha_0 J_0 M_0 \rangle &= \frac{4\pi}{q^2} \sum_{t, \tilde{M}_0, \tilde{M}_1, p} \sqrt{2t+1} \\ &\times \langle \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 | Q_p^{(t)}(q\mathbf{r}) | \alpha_0 J_0 \tilde{M}_0 \rangle D_{\tilde{M}_0 M_0}^{J_0}(\hat{J}_0) D_{\tilde{M}_1 M_1}^{*J_1}(\hat{J}_1) D_{p0}^{*t}(\hat{q}), \end{aligned} \quad (85)$$



o submatriciniame elemente esantis operatorius yra šitoks:

$$Q_p^{(t)}(q\mathbf{r}) = i^t j_t(qr) C_p^{(t)}(\hat{r}) \sqrt{2t+1}. \quad (86)$$

Irašome (85) į skerspjūvio išraišką(44) ir gauname

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1) \mathbf{q}}{d\Omega_q} &= \frac{4k_2}{k_1 q^4} \sum_{t,t',\tilde{M}_0,\tilde{M}'_0,\tilde{M}_1,\tilde{M}'_1,p,p'} \langle \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 | Q_p^{(t)} | \alpha_0 J_0 \tilde{M}_0 \rangle \\ &\times \langle \alpha_1 J_1 \tilde{M}'_1 | Q_{p'}^{(t')} | \alpha_0 J_0 \tilde{M}'_0 \rangle^* D_{\tilde{M}_0 M_0}^{J_0}(\hat{J}_0) D_{\tilde{M}_1 M_1}^{*J_1}(\hat{J}_1) D_{p0}^{*t}(\hat{q}) \\ &\times D_{\tilde{M}'_0 M_0}^{*J_0}(\hat{J}_0) D_{\tilde{M}'_1 M_1}^{J_1}(\hat{J}_1) D_{p'0}^{t'}(\hat{q}). \end{aligned} \quad (87)$$

Ši išraiška analogiška (2.17) skerspjūvio išraiškai, todėl galima panaudoti 11 pav. pavaizduotas judėjimo kiekio momento diagramas, vietoje  $k, k'$  įrašius  $t, t'$ . Surandama analogiška (2.17) atomo sužadavimo elektronais Borno artinyje skerspjūvio išraiška:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{q} \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1)}{d\Omega_q} &= \frac{4k_2}{k_1 q^4} \sum_{K_0, K_t, K_1} \frac{1}{2K_1 + 1} \mathcal{B}^{exB}(K_0, K_t, K_1) \sum_{N_0, N_t, N_1} \begin{bmatrix} K_0 & K_t & K_1 \\ N_0 & N_t & N_1 \end{bmatrix} \\ &\times T_{N_0}^{*K_0}(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) T_{N_1}^{K_1}(J_1, J_1, M_1 | \hat{J}_1) \sqrt{4\pi} Y_{K_t N_t}^*(\hat{q}), \end{aligned} \quad (88)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^{exB}(K_0, K_t, K_1) &= \sum_{t,t'} [(2J_0 + 1)(2J_1 + 1)(2K_1 + 1)(2t + 1)(2t' + 1)]^{1/2} (-1)^{t'} \begin{bmatrix} t & t' & K_t \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &\times \left\{ \begin{array}{ccc} J_0 & K_0 & J_0 \\ t & K_t & t' \\ J_1 & K_1 & J_1 \end{array} \right\} (\alpha_1 J_1 || Q^{(t)}(q) || \alpha_0 J_0) (\alpha_1 J_1 || Q^{(t')}(q) || \alpha_0 J_0)^*. \end{aligned} \quad (89)$$

(89) išraiškoje panaudotas sąryšis:

$$(\alpha_1 J_1 || Q^{(t)}(q) || \alpha_0 J_0) = [2J_1 + 1]^{1/2} \langle \alpha_1 J_1 || Q^{(t)}(q) || \alpha_0 J_0 \rangle. \quad (90)$$

Šis submatricinis elementas užrašomas submatriciniais, apskaičiuotais termams  $LS$  šitaip:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1 L_1 S_1 J_1 || Q^{(t)}(q) || \alpha_0 L_0 S_0 J_0 \rangle &= (-1)^{L_1 + S_1 + J_0 + t} [(2J_0 + 1)(2J_1 + 1)]^{1/2} \\ &\times \langle \alpha_1 L_1 S_1 || Q^{(t)}(q) || \alpha_0 L_0 S_0 \rangle \left\{ \begin{array}{ccc} L_1 & J_1 & S_0 \\ J_0 & L_0 & t \end{array} \right\}. \end{aligned} \quad (91)$$

Jeigu atomo sužadinimas elektronu būtų pirmoji dviejų stadijų proceso pakopa, tuomet analogiškai (2.27) taip pat galėtume užrašyti reikalingą išraišką:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{q} \rightarrow \alpha_1 J_1)}{d\Omega_q} &= \frac{4k_2}{k_1 q^4} \sum_{K_0, K_t} \mathcal{B}^{exB}(K_0, K_t, K_1) \frac{1}{\sqrt{2K_1 + 1}} \\ &\sum_{N_0, N_t} \begin{bmatrix} K_0 & K_t & K_1 \\ N_0 & N_t & N_1 \end{bmatrix} T_{N_0}^{*K_0}(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) \sqrt{4\pi} Y_{K_t N_t}^*(\hat{q}). \end{aligned} \quad (92)$$

### 4.3.1 Pilnutinis nepoliarizuotų atomų sužadavimo skerspjūvis.

Borno artinyje diferencialinis skerspjūvis nuo išsklaidyto elektrono kampų priklauso per perduotą judėjimo kiekį, todėl integravimą kampų atžvilgiu galima pakeisti integravimu pagal perduotą judėjimo kiekį. Diferencialinį skerspjūvį (88) sumuojame  $J_1$ , vidurkiname  $J_0$  projekcijų ir integruojame kampų atžvilgiu. Žinant, kad  $d\Omega_q = \sin\theta_q d\phi_q d\theta_q$  ir  $q^2 = (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)^2 = k_1^2 + k_2^2 - 2k_1k_2 \cos\theta_q$ , galima surasti  $\sin\theta_q d\theta_q$  išraišką per  $q$ :

$$2qdq = 2k_1k_2 \sin\theta_q d\theta_q, \quad (93)$$

$$\sin\theta_q d\theta_q = \frac{qdq}{k_1k_2}, \quad (94)$$

$$d\Omega_q = \frac{qdq}{k_1k_2} d\phi_q, \quad (95)$$

$$q_{\min} \leq q \leq q_{\max}, \quad (q_{\min} = k_1 - k_2, \quad q_{\max} = k_1 + k_2). \quad (96)$$

Pilnutinis nepoliarizuotų atomų sužadavimo skerspjūvis yra:

$$\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) = \frac{8\pi}{(2J_0 + 1)k_1^2} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{dq}{q^3} \mathcal{B}^{exB}(0, 0, 0), \quad (97)$$

kur  $k_1^2 = 2\varepsilon_1$ , o  $K_t = N_t = 0$ .

### 4.3.2 Pilnutinis poliarizuotų atomų sužadavimo skerspjūvis.

Jam surasti panaudosime sužadavimo diferencialinio skerspjūvio bendrąją išraišką (88), kurią integruosime išsklaidyto elektrono kampų atžvilgiu pakeisdami integravimu pagal perduotą judėjimo kiekį ir sumuosime sužadinto atomo pilnutinio judėjimo kiekio momento projekcijų atžvilgiu. Gauname šitokią išraišką:

$$\begin{aligned} \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) &= \sum_{K_0, N_0} \frac{8\pi}{k_1^2} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{dq}{q^3} \mathcal{B}^{exB}(K_0, K_0, 0) (-1)^{J_0 - M_0 + K_0} \\ &\times \frac{4\pi}{[(2J_0 + 1)(2K_0 + 1)]^{1/2}} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_0, N_0}^*(\hat{J}_0) \sqrt{4\pi} Y_{K_0 - N_0}(\hat{q}). \end{aligned} \quad (98)$$

Čia

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^{exB}(K_0, K_0, 0) &= \sum_{t, t'} \left[ \frac{(2J_0 + 1)(2t + 1)(2t' + 1)}{2K_0 + 1} \right]^{1/2} (-1)^{2J_0} \begin{bmatrix} t & t' & K_0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} t & t' & K_0 \\ J_0 & J_0 & J_1 \end{Bmatrix} \\ &\times (\alpha_1 J_1 || Q^{(t)} || \alpha_0 J_0) (\alpha_1 J_1 || Q^{(t')} || \alpha_0 J_0)^*. \end{aligned} \quad (99)$$

Poliarizuoto atomo pilnutinio sužadavimo skerspjūvio magnetinis dichroizmas apibrėžiamas šitaip:

$$\Delta = \frac{\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) - \sigma(\alpha_0 J_0 - M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)}{\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) + \sigma(\alpha_0 J_0 - M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)}. \quad (100)$$

Įrašome (98) į (100). Atsižvelgiame į tai, kad dėl Klebšo ir Gordano koeficientų simetrijos skaitiklyje indėlių atneša nariai, kurių  $K_0$  nelyginis, o vardiklyje –  $K_0$  lyginis. Koordinačių sistemos  $z$  ašį nukreipame  $\mathbf{q}$  kryptimi ir užrašome magnetinį dichroizmą charakterizuojantį parametą:

$$\Delta = \frac{\sum_{K_0=\text{nelyg}} B^{exB}(K_0)(-1)^{K_0} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_0 0}^*(\hat{J}_0)}{\sum_{K_0=\text{lyg}} B^{exB}(K_0) \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} P_{K_0}(\hat{J}_0)}, \quad (101)$$

kur

$$B^{exB}(K_0) = \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{dq}{q^3} \mathcal{B}^{exB}(K_0, K_0, 0). \quad (102)$$

Tuo atveju, kai  $\mathbf{J}_0$  kryptis sutampa su  $z$  ašimi,  $M_0 = J_0$ ,  $Y_{K_0 0}(0, 0) = \sqrt{2K_0 + 1}/(4\pi)$ , ir (101) išraiška pasidaro paprastesnė:

$$\Delta = - \frac{\sum_{K_0=\text{nelyg}} \sqrt{2K_0 + 1} B^{exB}(K_0) \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ J_0 & -J_0 & 0 \end{bmatrix}}{\sum_{K_0=\text{lyg}} \sqrt{2K_0 + 1} B^{exB}(K_0) \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ J_0 & -J_0 & 0 \end{bmatrix}}. \quad (103)$$

Kai  $J_0 = 1/2$ ,

$$\Delta = \frac{\sqrt{3} B^{exB}(1) \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & 1 \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{bmatrix}}{B^{exB}(0) \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{bmatrix}} = \frac{-\sqrt{3} B^{exB}(1)}{B^{exB}(0)}. \quad (104)$$

$J_0 = 1$  atveju

$$\Delta = \frac{3 B^{exB}(1)}{\sqrt{2} B^{exB}(0) + \sqrt{5} B^{exB}(2)}. \quad (105)$$

Galima surasti poliarizuoto atomo sužadavimo elektronais pilnutinio skerspjūvio magnetinį dichroizmą ir didesnęms  $J_0$  reikšmėms.

### 4.3.3 Sužadinto atomo rikiavimas.

Kadangi atomo sužadavimo elektronais procesui būdinga ašinė simetrija, sužadinto atomo poliarizacijos būseną aprašo rikiavimo parametras. Surasime skerspjūvio, aprašančio sužadinto

atomo poliarizaciją, išraišką. Kai nepoliarizuoti atomai sužadunami nepoliarizuotais elektronais ir išsklaidyti elektronai neregistruojami, sužadinto atomo skerspjuvį (91) reikia vidurkinti pradines būsenos projekcijų atžvilgiu ir integruoti išvssklaidyto elektrono kampais:

$$\sigma^A(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) = \frac{1}{2J_0 + 1} \sum_{M_0} \int d\Omega_e \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{q} \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p})}{d\Omega_e} = \frac{8\pi}{k_1^2(2J_0 + 1)} \times \sum_{K_1, N_1} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \frac{dq}{q^3} \mathcal{B}(0, K_1, K_1) \left[ \frac{4\pi}{2K_1 + 1} \right]^{1/2} Y_{K_1, N_1}^*(\hat{q}) = \sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) \left[ 1 + \sum_{K_1} A_{K_1} \right] \quad (106)$$

kur

$$A_{K_1} = \frac{\int_{q_{min}}^{q_{max}} \frac{dq}{q^3} \mathcal{B}(0, K_1, K_1) P_{K_1}(\cos \theta)}{\int_{q_{min}}^{q_{max}} \frac{dq}{q^3} \mathcal{B}(0, 0, 0)} \quad (107)$$

yra rikiavimo parametras,  $\theta$  yra kampas, matuojamas nuo sklaidomojo elektrono krypties

$$\cos \theta = \frac{q^2 + k_1^2 - k_2^2}{2qk_1} = \frac{1}{[2\mu\varepsilon_1]^{1/2}} \left( \frac{q}{2} + \frac{\mu\Delta E}{q} \right), \quad (108)$$

o –

$$\mathcal{B}^{exB}(0, K_1, K_1) = \sum_{t, t'} (-1)^{J_0 + J_1 + K_1 + t + t'} \begin{Bmatrix} t & t' & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_1 & J_1 & K_1 \\ t' & t & J_0 \end{Bmatrix} \times [(2J_1 + 1)(2t + 1)(2t' + 1)]^{1/2} (\alpha_1 J_1 || Q^{(t)} || \alpha_0 J_0) (\alpha_1 J_1 || Q^{(t')} || \alpha_0 J_0)^*. \quad (109)$$

#### 4.3.4 Skaičiavimo programos ir pavyzdžiai

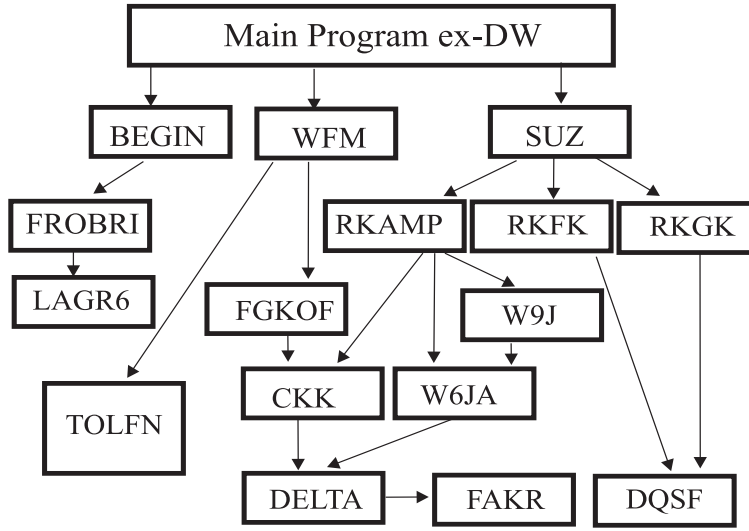
Skerspjuviams skaičiuoti Borno ir iškraipytų bangų artiniuose parašytos dvi atskiros programos. Jų blokinės schemas pavaizduotos 33 ir 34 paveikslėliuose. Naudojamas tarpinio ryšio vienkonfigūracinis artinys. Borno artinio atveju skerspjuviai skaičiuojami termams  $LS$ , o iškraipytų bangų artinyje – būsenai  $LSJ$ . Borno atveju į tarpinį ryšį atsižvelgiama poliarizacijos parametru skaičiavimo programoje.

Kadangi daugelio paprogramių funkcijos abeiose programose panašios, jas aprašysime kartu. Ankstesniuose skyriuose paašškintų paprogramių neaptarsime.

Paprogramė SUZ apskaičiuoja pilnutinį sužadavimo skerspjuvį ir į bylą ANGLE.REZ įrašo sumbatricinių elenentų vertes bei papildomą informaciją, kuri bus naudojama poliarizaciją ir rikiavimą aprašantiems dydžiams apskaičiuoti.

Paprogramė BESJ apskaičiuoja sferinės Beselio funkcijos reikšmes.

Paprogramė AKOEF suranda submatricinio elemento kampinius koeficientus Borno artinyje.



34 pav. Skerspjuvių skaičiavimo iškraipytų bangų artinyje programos blokinė schema

Paprogramė WFM valdo elektrono tolydinio spektro funkcijų dalinių bangų reikšmių pradinėje ir galinėje būsenose skaičiavimą.

Paprogramė RKAMP suranda submatricinio elemento kampinius koeficientus iškraipytų bangų artinyje.

Paprogramės RKFK ir RKGK apskaičiuoja tiesioginio ir pamaininio narių radialiuose integralus.

Skerspjuvių vertės surašomos į bylą SIGMA.REZ, o papildoma informacija – į bylas SKL.OUT ir FUNBAN.REZ atitinkamai iškraipytų bangų ir Borno artiniuose.

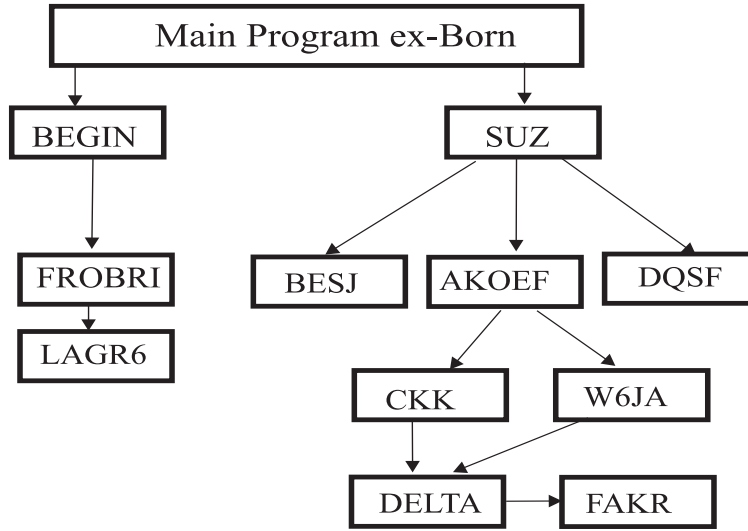
Toliau pateiksime submatricinių lementų kampinių koeficientų išraiškas. Jos priklauso nuo šuolio tarp konfigūracijų. Iškraipytų bangų artinio atveju submatricinį elementą formulėje (50) galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned}
 & [\alpha_1 L_1 S_1 J_1 \varepsilon_2 \lambda_2(j_2) J] \| H \| [\alpha_0 L_0 S_0 J_0 \varepsilon_1 \lambda_1(j_1) J] \\
 & = \sum_k f_k(J_1, J_0) R_k(n_1 l_1 n_2 l_2, \varepsilon_1 \lambda_1 \varepsilon_2 \lambda_2) + \sum_k g_k(J_1, J_0) R_k(n_1 l_1 \varepsilon_2 \lambda_2, n_2 l_2 \varepsilon_1 \lambda_1). \quad (110)
 \end{aligned}$$

Čia

$$\begin{aligned}
 f_k(J_1, J_0) & = (\lambda_2 \| C^{(k)} \| \lambda_1) f_k(L_1 S_1, L_0 S_0) [(2L_1 + 1)(2J_0 + 1)(2J_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)]^{1/2} \\
 & \times \delta(S_1, S_0) (-1)^{L_1 + S_0 + 2J_0 + \lambda_1 + s + j_1 + j_2 + J} \begin{Bmatrix} L_0 & k & L_1 \\ J_1 & S_0 & J_0 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda_2 & k & \lambda_1 \\ j_1 & s & j_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_0 & k & J_1 \\ j_2 & J & j_1 \end{Bmatrix}, \quad (111)
 \end{aligned}$$

$$g_k(J_1, J_0) = \sum_{L,S} g_k(LS) (2L + 1)(2S + 1) [(2J_0 + 1)(2J_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)]^{1/2}$$



35 pav. Skerspjuvių skaičiavimo Borno artinyje programos blokinė schema

$$\times \begin{Bmatrix} s & S_1 & S \\ \lambda_2 & L_1 & L \\ j_2 & J_1 & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} s & S_0 & S \\ \lambda_1 & L_0 & L \\ j_1 & J_0 & J \end{Bmatrix}. \quad (112)$$

Koeficientai  $f_k$  ir  $g_k$  priklauso nuo konkrečių konfigūracijų.

1. Vienelektronis šuolis  $n_1 l_1 \rightarrow n_2 l_2$ :

$$f_k = (l_2 \| C^{(k)} \| l_1) / [2l_2 + 1]^{1/2}, \quad (113)$$

$$g_k = (-1)^S (l_2 \| C^{(k)} \| \lambda_1) (l_2 \| C^{(k)} \| \lambda_2) \begin{Bmatrix} \lambda_1 & k & l_2 \\ \lambda_2 & L & l_1 \end{Bmatrix}. \quad (114)$$

2. Vienas elektronas virš užpildyto elektronų sluoksnio  $n_a l_a^{N_a} (L_a S_a) n_1 l_1 L_0 S_0 \rightarrow n_a l_a^{N_a} (L'_a S'_a) n_2 l_2 L_1 S_1$ :

$$f_k(L_1 S_1, L_0 S_0) = \delta(S_0, S_1) \delta(L_a, L'_a) \delta(S_a, S'_a) (-1)^{L_1 + l_2 + L_a} (l_2 \| C^{(k)} \| l_1) \\ \times [2L_0 + 1]^{1/2} \begin{Bmatrix} l_1 & k & l_2 \\ L_1 & L_a & L_0 \end{Bmatrix}, \quad (115)$$

$$g_k(LS) = (l_2 \| C^{(k)} \| \lambda_1) (l_1 \| C^{(k)} \| \lambda_2) \delta(L_a, L'_a) \delta(S_a, S'_a) (-1)^{S_0 + S_1} \\ \times [(2L_0 + 1)(2L_1 + 1)(2S_0 + 1)(2S_1 + 1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} k & l_2 & \lambda_1 \\ l_1 & L_a & L_0 \\ \lambda_2 & L_1 & L \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S_a & s & S_1 \\ S & s & S_0 \end{Bmatrix}. \quad (116)$$

3. Elektrono šuolis iš ekvivalentinių elektronų sluoksnio  $n_0 l_0^{N_0} L_0 S_0 \rightarrow n_0 l_0^{N_0 - 1} (L_a S_a) n_1 l_1 L_1 S_1$ :

$$f_k(L_1 S_1, L_0 S_0) = \delta(S_0, S_1) (-1)^{L_1 + l_2 + L_a} (l_0 \| C^{(k)} \| l_1) [N_0 (2L_0 + 1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} l_0 & k & l_1 \\ L_1 & L_a & L_0 \end{Bmatrix}, \quad (117)$$

$$g_k(LS) = (l_0 \| C^{(k)} \| \lambda_2) (l_1 \| C^{(k)} \| \lambda_1) (-1)^{S_0 + S_1}$$

$$\times [N_0(2L_0 + 1)(2L_1 + 1)(2S_0 + 1)(2S_1 + 1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} k & l_1 & \lambda_1 \\ l_0 & L_a & L_0 \\ \lambda_2 & L_1 & L \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S_a & s & S_1 \\ S & s & S_0 \end{Bmatrix}. \quad (118)$$

4. Šuolis tarp dviejų sluoksnių, kurių pirmasis užpildytas  $n_0 l_0^{4l_0+2} n_1 l_1^N L_0 S_0 \rightarrow n_0 l_0^{4l_0+1} n_1 l_1^{N+1} (L_a S_a) L_1 S_1$ :

$$f_k(L_1 S_1, L_0 S_0) = \delta(S_0, S_1) \delta(L_0, l_1) (-1)^{L_0+l_1+L_a} (l_0 \| C^{(k)} \| l_1) (l_1^N (L_a S_a) l_1 \| l_1^{N+1} L_1 S_1) \\ \times \left[ \frac{(N+1)(2L_a+1)(2S_a+1)}{2S_0+1} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} L_a & l_1 & l_1 \\ k & L_1 & l_0 \end{Bmatrix}, \quad (119)$$

$$g_k(LS) = (l_1 \| C^{(k)} \| \lambda_1) (l_0 \| C^{(k)} \| \lambda_2) (-1)^{L_0+\lambda_1+L+1} \delta(S_a, S) (l_1^N (L_a S_a) l_1 \| l_1^{N+1} L_1 S_1) \\ \times \left[ \frac{(N+1)(2l_0+1)(2L_0+1)(2L_1+1)(2S_1+1)(2L_a+1)}{2S_a+1} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} l_0 & k & \lambda_2 \\ L & L_1 & L_a \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & k & \lambda_1 \\ L & L_0 & S_a \end{Bmatrix}. \quad (120)$$

5. Šuolis  $n_0 l_0^{4l_0+2} n_1 l_1 L_0 S_0 \rightarrow n_0 l_0^{4l_0+1} n_1 l_1^2 (L_a S_a) L_1 S_1$ :

$$f_k(L_1 S_1, L_0 S_0) = \delta(S_0, S_1) \delta(L_1, l_0) \delta(L_0, l_1) (-1)^{L_0+l_1+L_a} (l_0 \| C^{(k)} \| l_1) \\ \times \left[ \frac{2(2L_a+1)(2S_a+1)}{2S_0+1} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} L_a & l_1 & l_1 \\ k & L_1 & l_0 \end{Bmatrix}, \quad (121)$$

$$g_k(LS) = (l_1 \| C^{(k)} \| \lambda_1) (l_0 \| C^{(k)} \| \lambda_2) (-1)^{L_1+l_0} \delta(S_a, S) \delta(L_0, l_1) (l_1^N (L_a S_a) l_1 \| l_1^{N+1} L_1 S_1) \\ \times \left[ \frac{2(2L_1+1)(2L_a+1)(2S_1+1)}{2S_a+1} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} l_0 & k & \lambda_2 \\ L & L_1 & L_a \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & k & \lambda_1 \\ L & L_0 & L_a \end{Bmatrix}. \quad (122)$$

6. Šuolis  $n_0 l_0^{4l_0+2} n_1 l_1 L_0 S_0 \rightarrow n_0 l_0^{4l_0+1} (n_1 l_1 n_2 l_2 L_a S_a) L_1 S_1$ :

$$f_k(L_1 S_1, L_0 S_0) = \delta(S_0, S_1) \delta(L_1, l_0) \delta(L_0, l_1) (-1)^{L_0+l_1+L_a} (l_0 \| C^{(k)} \| l_1) \\ \times \left[ \frac{(2L_a+1)(2S_a+1)}{2S_0+1} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} L_a & l_2 & l_1 \\ k & L_1 & l_0 \end{Bmatrix}, \quad (123)$$

$$g_k(LS) = (l_1 \| C^{(k)} \| \lambda_1) (l_0 \| C^{(k)} \| \lambda_2) (-1)^{L_1+l_0} \delta(S_a, S) \delta(L_0, l_1) (l_1^N (L_a S_a) l_1 \| l_1^{N+1} L_1 S_1) \\ \times \left[ \frac{(2L_1+1)(2L_a+1)(2S_1+1)}{2S_a+1} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} l_0 & k & \lambda_2 \\ L & L_1 & L_a \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_2 & k & \lambda_1 \\ L & L_0 & L_a \end{Bmatrix}. \quad (124)$$

Borno artinyje submatricinį elementą (91) galima užrašyti šitaip:

$$(\alpha_1 L_1 S_1 \| Q^{(k)} \| \alpha_0 L_0 S_0) = \delta(S_0, S_1) f_k (l_1 \| C^{(k)} l_0) (n_1 l_1 | j_k(qr) | n_0 l_0). \quad (125)$$

Koeficientai  $f_k$  priklauso nuo konfigūracijos ir yra:

1. Vieno elektrono sužadinimas  $n_0 l_0 \rightarrow n_1 l_1$ :

$$f_k = [2k+1]^{1/2}; \quad (126)$$

2. Vienas elektronas virš užpildyto elektronų sluoksnio  $n_a l_a^{N_a} n_0 l_0 L_0 S_0 \rightarrow n_a l_a^{N_a} n_1 l_1 L_1 S_1$ :

$$f_k = (-1)^{L_1+l_1+L_a} [(2k+1)(2L_0+1)(2L_1+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} l_0 & k & l_1 \\ L_1 & L_a & L_0 \end{Bmatrix}; \quad (127)$$

3. Elektrono šuolis iš ekvivalentinių elektronų sluoksnio  $n_0 l_0^{N_0} L_0 S_0 \rightarrow n_0 l_0^{N_0-1} (L_a S_a) n_1 l_1 L_1 S_1$ :

$$f_k = \delta(S_0, S_1) (-1)^{L_1+l_1+L_a} [N_0(2L_0+1)(2k+1)(2L_1+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} l_0 & k & l_1 \\ L_1 & L_a & L_0 \end{Bmatrix}; \quad (128)$$

4. Šuolis tarp dviejų sluoksnių, kurių pirmasis užpildytas  $n_0 l_0^{4l_0+2} n_1 l_1^N L_0 S_0 \rightarrow n_0 l_0^{4l_0+1} n_1 l_1^{N+1} (L_a S_a) L_1 S_1$ :

$$f_k = \delta(L_0, l_1) (-1)^{L_0+l_1+L_a} (l_1^N (L_a S_a) l_1 || l_1^{N+1} L_1 S_1) \\ \times \left[ \frac{(N+1)(2k+1)(2L_a+1)(2S_a+1)(2L_1+1)}{2S_0+1} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} L_a & l_1 & l_1 \\ k & L_1 & l_0 \end{Bmatrix}; \quad (129)$$

5. Šuolis  $n_0 l_0^{4l_0+2} n_1 l_1 L_0 S_0 \rightarrow n_0 l_0^{4l_0+1} n_1 l_1^2 (L_a S_a) L_1 S_1$ :

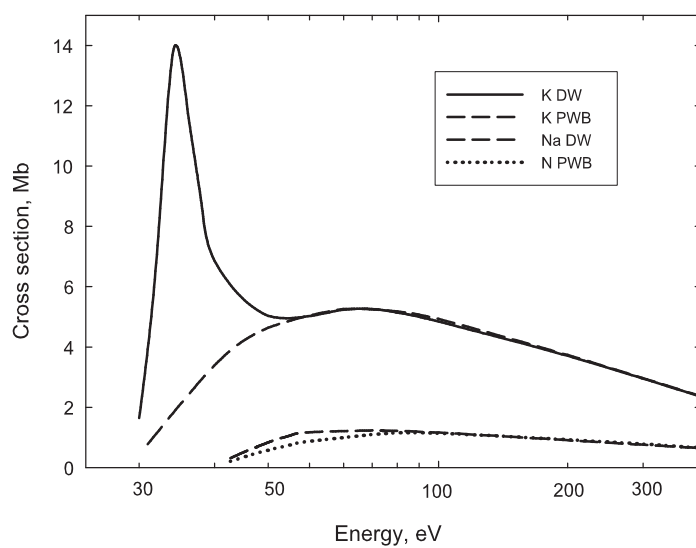
$$f_k = \delta(L_0, l_1) \delta(L_1, l_0) (-1)^{L_0+l_1+L_a} \\ \times \left[ \frac{2(2k+1)(2L_a+1)(2S_a+1)(2L_1+1)}{2S_0+1} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} L_a & l_1 & l_1 \\ k & L_1 & l_0 \end{Bmatrix}; \quad (130)$$

6. Šuolis  $n_0 l_0^{4l_0+2} n_1 l_1 L_0 S_0 \rightarrow n_0 l_0^{4l_0+1} (n_1 l_1 n_2 l_2 L_a S_a) L_1 S_1$ :

$$f_k = \delta(L_1, l_0) \delta(L_0, l_1) (-1)^{L_0+l_1+L_a} \\ \times \left[ \frac{(2k+1)(2L_1+1)(2L_a+1)(2S_a+1)}{2S_0+1} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} L_a & l_2 & l_1 \\ k & L_1 & l_0 \end{Bmatrix}. \quad (131)$$

Iškraipytų bangų (DW) ir Borno (PWB) artiniuose apskaičiuoti Na ir K atomų sužadavimo elektronais iš pagrindinės į atitinkamai  $2p^5 3s^2 {}^2P_{3/2}$  ir  $3p^5 4s^2 {}^2P_{3/2}$  būsenas pavaizduoti 36 pav. Čia matome, kad didėjant elektrono energijai, abiem metodais apskaičiuoti skerpjūviai susilieja. Arti sužadavimo sleksčio jie stipriai skiriasi.





36 pav. Elektronais sužadintų Na į  $2p^5 3s^2 \ ^2P_{3/2}$  ir K į  $3p^5 4s^2 \ ^2P_{3/2}$  būsenas skerspjūviai, apskaičiuoti iškraipytų bangų (DW) ir Borno (PWB) artiniuose

#### 4.4 Dvielektronė rekombinacija

Kai elektrono energija yra lygi energijų skirtumi tarp kokių nors dviejų jono lygmenų, jis gali būti pagaunamas į sistemos jonas+elektronas vieną iš sužadintų būsenų, o atsilaisvinusi energija perduodama vienam iš jono surišusių elektronų, kuris perskoka į aukštesnį lygmenį. Susidaro nestabili atomo sužadinta būseną, todėl atomas pereina į pagrindinę ar mažiau sužadintą būseną, išspinduliuodamas fotoną, arba į jono pagrindinę ar mažiau sužadintą būseną, išspinduliuodamas elektroną. Visą procesą galima užrašyti (3) sąryšiu. Dvielektronė rekombinacija įvyksta tuomet, kai išspinduliuojamas fotonas. Elektrono išspinduliuavimo atveju turime rezonansinę sklaidą. Dvielektronės rekombinacijos procesą aprašančią (3) formulę perrašome šitaip:

$$A^+(\alpha_0 J_0 M_0) + e^-(\mathbf{p}m) \rightarrow A^{**}(\alpha_1 J_1) \rightarrow \begin{cases} A(\alpha_2 J_2 M_2) + h\nu(\epsilon_q, \mathbf{k}_0), \\ A^+(\alpha_3 J_3 M_3) + e^-(\mathbf{p}_1 m_1). \end{cases} \quad (132)$$

Teoriškai parodyta [150] ir eksperimentiškai aptikta [151], kad dvielektronės rekombinacijos fotonas gali būti poliarizuotas ir išspinduliuotas asimetriškai jono judėjimo krypties atžvilgiu. Spinduliuotės poliarizaciją ir kampinio pasiskirstymo asimetriją galima paaiškinti susidariusių autojonizacinių būsenų rikiavimu, t.y. magnetinių lygmenų nevienoda užpilda [134]. Jeigu rekombinavęs atomas po fotono išspinduliuavimo pereina ne į pagrindinę, bet į sužadintą būseną, gali būti išspinduliuojama antras ir daugiau fotonų, kol jis pasiekia pagrindinę būseną. Todėl galima nagrinėti antrojo ir tolimesnių fotonų kampinio pasiskirstymo asimetriją [134, 152].

Plačiau tyrinėti poliarizacijos reiškiniai, kai daugiakrūvis jonas pagauna ne laisvą elektroną, o atima jį iš neutralaus atomo, molekulės ar kietojo kūno. Tuomet atomo elektroną galima laikyti kvazilaisvu jono elektronų atžvilgiu ir jam aprašyti naudoti impulsinį artinį [153]. Laikant, kad atomas nejuda ir yra koordinatinių sistemos centre, kvazilaisvo atomo (molekulės, kietojo kūno) elektrono pasiskirstymą pagal energijas  $\epsilon$  galima užrašyti šitaip [153]:

$$n(\epsilon) = \int d\mathbf{p}_e |\phi(\mathbf{p}_e)|^2 \delta(\epsilon - T_r - \frac{p_r p_e}{m} + E_e), \quad (133)$$

kur  $|\phi(\mathbf{p}_e)|^2$  – elektrono judėjimo kiekio  $\mathbf{p}_e$  pasiskirstymo atome funkcija,  $\epsilon$  – jo energija atome,  $T_r = (1/2m)(\mathbf{p}_r + \mathbf{p}_e)^2$  – jono kinetinė energija atomo atžvilgiu,  $\mathbf{p}_r = m\mathbf{r}_r$  – jono elektronų judėjimo kiekis atomo atžvilgiu. Elektronų atome pasiskirstymo funkcijos maksimumas yra ties  $T_r - E_e$  energija, kur  $E_e$  – atomo elektrono ryšio energija. Funkcija  $n(\epsilon)$  priklauso nuo atomo ir jono judėjimo kiekių tarpusavio orientacijos.

Po rezonansinio elektrono atėmimo, sužadinant joną, iš atomo (molekulės, kietojo kūno)

mažiau jonizuotas jonas atsiranda autojonizacinėje būsenoje visiškai taip pat, kaip ir dvielektronės rekombinacijos atveju. Jo nestabili būseną išnyksta, išspinduliudama fotoną arba elektroną. Spinduliuotės asimetriją teoriškai nagrinėjo Badnell [154], Bhatia [155] ir Gail ir kt. [70], o Auger elektronų – Badnell [156] ir Bhatia [155].

2002 m. Schippers ir kt. [135] eksperimentiškai ir teoriškai tyrė fotorekombinacijos įtaką dvielektronės rekombinacijos linijų profilių asimetrijai, kai elektroną rezonansiškai pagauna  $\text{Sc}^{3+}(3s^23p^6)$  jonas. Yra darbų [66, 157, 67], kuriuose nagrinėjama nerezonansinio apsikeitimo elektronu procese atomo būsenos rikiavimo įtaka skerspjūviui [157], Auger elektrono kampiniam pasiskirstymui [66] ir spinduliuotės kampiniam pasiskirstymui [67].

Balašovas ir kt. [152] dvielektronės rekombinacijos spinduliuotės poliarizacijai ir kampinio pasiskirstymo tikimybės išraiškoms surasti naudojo tankio matricos metodą. Zakowicz ir kt. grynai reliatyvistiniame artinyje šias išraiškas surado be tankio matricos pagalbos. Jie naudojo projekcinius operatorius [158]. Šiame darbe bus surasta dvielektronės rekombinacijos diferencialinio skerspjūvio bendroji išraiška, kai rekombinuoja poliarizuotas jonas su poliarizuotu elektronu. Ji bus panaudota paprastesnius atvejus aprašantiems skerspjūviams surasti.

#### 4.4.1 Dvielektronės rekombinacijos skerspjūvis.

Kai galimi abu fotorekombinacijos ir dvielektronės rekombinacijos procesai, jie gali tarpusavyje interferuoti. Kadangi fotorekombinacijos skerspjūvis daug mažesnis už dvielektronės rekombinacijos skerspjūvį, fotorekombinacijos poveikis pasireiškia dvielektronės rekombinacijos skerspjūvyje, kuris yra atskirų smailių pavidalo, rezonanso formos pasikeitimu.

Dvielektronės rekombinacijos skerspjūviui surasti tinka tas pats Milno sąryšis tarp fotojonizacijos ir fotorekombinacijos skerspjūvių. Pagal diskretinio ir tolydinio spektro konfigūracijų superpozicijos teoriją [159] ir panaudojant fotojonizacijos skerspjūvio išraišką, kurioje atsižvelgiama į interferenciją tarp rezonanso ir fono žemiausiame trikdžių teorijos artinyje, fotorekombinacijos skerspjūvis gali būti užrašytas šitaip [135]:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p} m \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega} &= C \left| \langle \alpha_2 J_2 M_2 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_1 | H' | \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p} m \rangle \right. \\ &\times \left( 1 - i \sum_{\alpha_1 J_1 M_1} \frac{A_a(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p} m)}{2(\Delta(\alpha_1 J_1 M_1) + \frac{i}{2}\Gamma(\alpha_1 J_1 M_1)\eta(\alpha_1 J_1 M_1))} \right) \\ &+ \sum_{\alpha_1 J_1 M_1} \left. \frac{\langle \alpha_2 J_2 M_2 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 | H' | \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p} m \rangle \langle \alpha_1 J_1 M_1 | r_{12}^{-1} | \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p} m \rangle}{\Delta(\alpha_1 J_1 M_1) + \frac{i}{2}\Gamma(\alpha_1 J_1 M_1)\eta(\alpha_1 J_1 M_1)} \right|^2. \end{aligned} \quad (134)$$

Čia  $H'$  – spinduliuotės sąveikos su atomo elektronais operatorius,  $\Delta(\alpha_1 J_1 M_1) = \varepsilon - E_{\alpha_1 J_1 M_1}$  – rezonanso energijos nuokrypis, lygus elektrono energijos ir autojonizacinės būsenos energijos nuo jonizacijos ribos skirtumui,  $\Gamma(\alpha_1 J_1 M_1)$  – autojonizacinio lygmens plotis lygus autojonizacinio ir radiacinio lygmenų pločių sumai,  $A_a(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}m)$  – elektrono rezonansinio pagavimo tikimybė, kuri sutampa su autojonizacijos tikimybė,  $C = \pi\alpha^2 E^2/\varepsilon$ , kur  $\alpha$  yra smulkiosios sandaros konstanta, o  $\varepsilon$  ir  $E$  – pagaunamo elektrono ir išspinduliuoto fotono energijos.

Kadangi fotorekombinacijos indėlis yra labai mažas, (134) išraiškoje galima palikti tik tai paskutinią narių ir nagrinėti tik tai vieną rezonansą, t.y. iš sumos pagal  $\alpha_1 J_1 M_1$  palikti tik tai vieną narių. Dviejų stadijų artinyje izoliuoto rezonanso atveju dvielektronės rekombinacijos diferencialinis skerspjūvis įgyja šitokią pavidalą [160]:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}m \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \epsilon_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega} &= C \sum_{M_1, M_1'} \langle \alpha_2 J_2 M_2 \epsilon_q \mathbf{k}_0 | H' | \alpha_1 J_1 M_1 \rangle \\ &\times \langle \alpha_2 J_2 M_2 \epsilon_q \mathbf{k}_0 | H' | \alpha_1 J_1 M_1' \rangle^* \langle \alpha_1 J_1 M_1 | H^e | (\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}m) \rangle \langle \alpha_1 J_1 M_1' | H^e | (\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}m) \rangle^* \\ &\times [(E - E_1)^2 + \Gamma^2/4]^{-1}. \end{aligned} \quad (135)$$

Čia  $H^e$  ir  $H'$  žymi atitinkamai elektrostatinės sąveikos tarp elektronų ir radiacinio šuolio operatorius,  $E_1$  ir  $E$  yra tarpinės būsenos  $\alpha_1 J_1$  ir sistemos iš jono ir elektrono pradinės būsenos energijos,  $\Gamma$  reiškia tarpinės būsenos pilnutinį lygmens plotį, lygų radiacinio ir autojonizacinio pločių sumai.

Dviejų stadijų artinyje laikoma, kad  $E \approx E_1$ , todėl (134) patogiau užrašyti tarpinės būsenos multipoliniu skleidiniu (žr. 2.1.2 skirsnį):

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}m \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \epsilon_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega} &= C \sum_{K_1, N_1} W_{K_1 N_1}^c(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}m \rightarrow \alpha_1 J_1) \\ &\times \frac{dW_{K_1 N_1}^r(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \epsilon_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega} [(E - E_1)^2 + \Gamma^2/4]^{-1}. \end{aligned} \quad (136)$$

Rezonansinio elektrono pagavimo tikimybė  $W^c$  yra lygi atvirkščio proceso autojonizacijos tikimybei (3.52). Ją perrašome dėl žymėjimų suvienodinimo:

$$\begin{aligned} W_{K_1 N_1}^c(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}m) &= \sum_{K, K_0, K_\lambda, K_s} \mathcal{A}^a(K_1, K_0, K_\lambda, K_s, K) \sum_{N, N_0, N_\lambda, N_s} \begin{bmatrix} K_\lambda & K_s & K \\ N_\lambda & N_s & N \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} K_0 & K & K_1 \\ N_0 & N & N_1 \end{bmatrix} T_{N_0}^{*K_0}(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) T_{N_s}^{*K_s}(s, s, m | \hat{s}) \sqrt{4\pi} Y_{K_\lambda N_\lambda}^*(\theta_1, \phi_1), \end{aligned} \quad (137)$$

kur

$$\mathcal{A}^a(K_1, K_0, K_\lambda, K_s, K) = 2\pi \sum_{\lambda_1, j_1, \lambda_2, j_2} \langle \alpha_0 J_0 \varepsilon \lambda_1(j_1) J_1 || H || \alpha_1 J_1 \rangle \langle \alpha_0 J_0 \varepsilon \lambda_2(j_2) J_1 || H || \alpha_1 J_1 \rangle^*$$

$$\begin{aligned} & \times (2J_1 + 1) [(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2J_0 + 1)(2s + 1)(2K + 1)]^{1/2} \\ & \times \begin{Bmatrix} J_0 & j_1 & J_1 \\ J_0 & j_2 & J_1 \\ K_0 & K & K_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda_2 & s & j_2 \\ K_\lambda & K_s & K \\ \lambda_1 & s & j_1 \end{Bmatrix} (-1)^{\lambda_2} \begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & K_\lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (138)$$

Radiacinio šuolio tikimybės multipolinio skleidimo nario  $dW_{K_1 N_1}^r/d\Omega$  išraiška sutampa su (3.7).

#### 4.4.2 Dvielektronės rekombinacijos skerspjūvio atskiri atvejai.

Surasime dvielektronės rekombinacijos spinduliuotės kampinį pasiskirstymą aparašančią išraišką, kai nepoliarizuoti elektronai rekombinuoja su nepoliarizuotais jonais. Šiuo atveju reikia bendrąją skerspjūvio išraišką visurkinti jono ir elektrono sukinių projekcijų bei sumuoti spinduliuotės poliarizacijos ir atomo projekcijų atžvilgiu. Laboratorinę  $z$  ašį parinkę elektrono judėjimo kryptimi, gauname šią gerai žinomą išraišką:

$$\frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_0)}{d\Omega} = \frac{\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)}{4\pi} \left[ 1 + \sum_{K_1 > 0, k, k'} \beta_{K_1} P_{K_1} \cos(\theta) \right]. \quad (139)$$

Čia  $\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)$  – dvielektronės rekombinacijos skerspjūvis, o spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras yra:

$$\beta_{K_1} = (-1)^{k-q} \sqrt{(2k+1)(2K_1+1)} \begin{bmatrix} k & k' & K_1 \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \frac{\mathcal{A}^a(K_1, 0, K_1, 0, K_1) \mathcal{A}^r(K_1, K_1, 0)}{\mathcal{A}^a(0, 0, 0, 0, 0, k, k') \mathcal{A}^r(0, 0, 0, k, k')}. \quad (140)$$

Spinduliuotės dipoliniame artinyje  $k = k' = 1$  (140) sutampa su [161] darbo (9) formule.

Poliarizuotų jonų dvielektronės rekombinacijos su nepoliarizuotais elektronais atveju reikia vidurkinti elektrono sukinių ir sumuoti atomo ir spinduliuotės poliarizacijos būsenų atžvilgiu. Gauname, kad  $K_s = N_s = K_2 = N_2 = 0$ ,  $K_\lambda = K = \text{lyginis}$ ,  $K_1 = K_r$ . Parinkus  $z$  ašį išilgai elektrono krypties ( $N_\lambda = 0$ ), galima užrašyti skerspjūvio išraišką:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_0)}{d\Omega} &= \frac{C}{2[(E - E_1)^2 + \Gamma^2/4]} \sum_{K_1, N_1, k, k'} \mathcal{A}^r(K_1, K_1, 0, k, k') T_{-N_1}^{*K_1}(k, k', q | \mathbf{k}_0) \\ &\times \sum_{K_0, K_\lambda} \mathcal{A}^a(K_1, K_0, K_\lambda, 0, K_\lambda) \begin{bmatrix} K_1 & K_0 & K_\lambda \\ -N_1 & N_1 & 0 \end{bmatrix} T_{N_1}^{*K_0}(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0). \end{aligned} \quad (141)$$

Kai rekombinuoja poliarizuoti elektronai su nepoliarizuotais jonais, vidurkinama jono būsenų ir sumuojama atomo ir spinduliuotės poliarizacijos būsenų atžvilgiu. Parinkus  $z$  ašį išilgai

elektrono krypties ( $N_\lambda = 0$ ), galima užrašyti šitokią skerspjūvio išraišką:

$$\frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 m \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_0)}{d\Omega} = \frac{C}{(2J_0 + 1)[(E - E_1)^2 + \Gamma^2/4]} \sum_{K_1, N_1, k, k'} \mathcal{A}^r(K_1, K_1, 0) \\ \times T_{-N_1}^{K_1}(k, k', q|\mathbf{k}_0) \sum_{K_s, K_\lambda} \mathcal{A}^a(K_1, 0, K_\lambda, K_s, K_1, k, k') \begin{bmatrix} K_s & K_1 & K_\lambda \\ N_1 & -N_1 & 0 \end{bmatrix} T_{N_1}^{*K_s}(s, s, m|\hat{s}). \quad (142)$$

$C^{4+}$  rezonansinės linijos dvielektronės rekombinacijos satelitų santykiniai intensyvumai teoriškai tirti Kupliausio ir kt. darbe [162].

## 4.5 Atomų jonizacija elektronais

Jeigu taikinių ir sklaidomų elektronų būsenas aprašančių kvantinių skaičių projekcijos nėra išskiriamos, atomų jonizacijos diferencialiniai skerspjuviai yra skaliarai sistemos iš atomo ir elektrono posūkių erdvėje atžvilgiu. Ši simetrija išnykta, kai fiksuojama atomo pilnutinio judėjimo kiekio momento orientacija erdvėje. Pradinė taikinio orientacija ir rikiavimas gali suteikti daugiau informacijos apie elementarius procesus tokiose svarbiose srityse, kaip elektros išlydžio [149] ir lazerinėje plazmoje [165], termobranduolinės sintezės, žvaigždžių ir Žemės atmosferos viršutinių sluoksnių fizikoje ir chemijoje. Poliarizuotų atomų jonizacijos elektronais eksperimentų duomenims [165, 166] interpretuoti reikalingos diferencialinių skerspjuvių išraiškos, kurios būtų tinkamos atsižvelgti į visų procese dalyvaujančių dalelių poliarizaciją.

Naudojant tankio matricos formalizmą ir plokščiabangį Borno artinį, buvo surastos jonizuoto jono rikiavimą aprašančios išraiškos, kai jonizuojami nepoliarizuoti jonai nepoliarizuotais greitais krūvininkais [53, 60]. Nepoliarizuotų atomų jonizacijos trigubas diferencialinis skerspjuvis nagrinėtas iškraipytų bangų artinyje [61]. Taip pat apskaičiuotas lėtesniojo elektrono kampinis pasiskirstymas po H, He, Li ir Mg jonizacijos [61]. Atomų jonizacija elektronais taip pat naudojama sužadintiems jonams poliarizuotoje būsenoje sukurti [40, 167]. Informacijos apie atomo poliarizacijos būvį galima sužinoti tiriant jonų, kurie po atomo jonizacijos atsirado sužadintoje būsenoje, spinduliuotės ir Auger elektronų kampinį pasiskirstymą ir poliarizaciją bei vieno iš išlekiančių elektronų ir spinduliuotės kampines koreliacijas [169]. Šie parametrai stipriai priklauso nuo jonizuoto atomo rikiavimo [170, 171]. Auger šuolio buvimo įtaka fluorescencijos spinduliuotei po atomo jonizacijos protonais taip pat buvo tirta eksperimentiškai [172]. Surasime poliarizuotų atomų jonizacijos poliarizuotais elektronais diferencialinio skerspjuvio bendriausią išraišką, naudodami atomo teorijos metodus.

### 4.5.1 Diferencialinio skerspjuvio išraiška.

Atomo  $A$  būsenoje  $\alpha_0 J_0 M_0$  jonizacijos elektronais, kurių judėjimo kiekis  $\mathbf{p}_0$  ir sukinio projekcija  $m_0$ , procesą galime užrašyti šitaip:

$$A(\alpha_0 J_0 M_0) + e^-(\mathbf{p}_0 m_0) \rightarrow A^+(\alpha_1 J_1 M_1) + e^-(\mathbf{p}_2 m_2) + e^-(\mathbf{p}_1 m_1). \quad (143)$$

Po jonizacijos turime joną  $A^+$  būsenoje  $\alpha_1 J_1 M_1$  ir du elektronus, kurių judėjimo kiekiai ir sukinio projekcijos yra  $\mathbf{p}_1$ ,  $m_1$  ir  $\mathbf{p}_2$ ,  $m_2$ . Į hipersmulkiąją sandarą neatsižvelgsime.

Iš kvantinės sklaidos teorijos žinome, kad proceso (96) tikimybę galime užrašyti šitokiu pavidalu:

$$\frac{dW(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2} = C \langle \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1 | H | \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rangle \times \langle \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1 | H | \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rangle^* \delta(E_1 - E_2). \quad (144)$$

Čia naudojama atominė vienetų sistema,  $H$  – elektrostatinės sąveikos tarp elektronų operatorius,  $E_1$  ir  $E_2$  – sistemos atomas+elektronas pradinėje ir atomas+du elektronai galinėje būsenose energijos. Skerspjūvis lygus tikimybei, kai sklaidomojo elektrono banginė funkcija  $|\mathbf{p}_0\rangle$  normuota į vienetinį elektronų srautą, o elektronų galinėje būsenoje banginės funkcijos  $|\mathbf{p}_1\rangle$  ir  $|\mathbf{p}_2\rangle$  yra normuotos atitinkamai  $\delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1)$  ir  $\delta(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_2)$  sąlygomis. Tuomet konstanta  $C = p_1 p_2 / p_0 (2\pi)^5$  ( $p_i = |\mathbf{p}_i|$ ), bet jos išraiška taip pat priklauso ir nuo to, kaip normuotos radialiosios tolydinio spektro funkcijos.

Prieš imantis skaičiuoti matricinį elementą  $\langle \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1 | H | \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rangle$  reikia laisvų elektronų bangines funkcijas  $|\mathbf{p}m\rangle$  išskleisti dalinėmis bangomis, naudojantis (2.46) formule. Jų asimptotinės išraiškos yra (2.48), kai elektronas juda jono lauke, ir (46), kai elektronas juda neutralaus atomo lauke. Perrašome šuolio matricinį elementą, transformuodami (96) proceso visų dalelių pradinėje ir galinėje būsenose bangines funkcijas į bendrą koordinačių sistemą pagal (1.149) formulę:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1 | H | \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rangle &= (4\pi)^{3/2} \sum_{\tilde{M}_0, \tilde{M}_1, \tilde{m}_0, \tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \lambda_0, \tilde{\mu}_0, \lambda_1, \tilde{\mu}_1, \lambda_2, \tilde{\mu}_2} [ (2\lambda_0 + 1)(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1) ]^{1/2} \\ &\times \langle \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 \varepsilon_2 \lambda_2 \tilde{\mu}_2 \tilde{m}_2 \varepsilon_1 \lambda_1 \tilde{\mu}_1 \tilde{m}_1 | H | \alpha_0 J_0 \tilde{M}_0 \varepsilon_0 \lambda_0 \tilde{\mu}_0 \tilde{m}_0 \rangle D_{\tilde{M}_0 M_0}^{J_0}(\hat{J}_0) D_{\tilde{M}_1 M_1}^{*J_1}(\hat{J}_1) D_{\tilde{\mu}_0 0}^{\lambda_0}(\hat{p}_0) \\ &\times D_{\tilde{\mu}_1 0}^{*\lambda_1}(\hat{p}_1) D_{\tilde{\mu}_2 0}^{*\lambda_2}(\hat{p}_2) D_{\tilde{m}_0 m_0}^s(\hat{s}) D_{\tilde{m}_1 m_1}^{*s}(\hat{s}) D_{\tilde{m}_2 m_2}^{*s}(\hat{s}). \end{aligned} \quad (145)$$

Iš (145) formulės matyti, kad elektronų dalinių bangų judėjimo kiekio momento projekcijos bendroje koordinačių sistemoje nelygios nuliui. Jos būna lygios nuliui tiksliai koordinačių sistemoje, kurios  $z$  ašis nukreipta elektrono judėjimo kryptimi.

Matricinio elemento  $\langle \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1 | H | \alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rangle$  kampinės dalies ir skerspjūvio išraiškoms surasti naudosime judėjimo kiekio momento grafinę techniką. Šio matricinio elemento kampinė dalis fiksuotoms  $\lambda_0$ ,  $\lambda_1$  ir  $\lambda_2$  vertėms pavaizduota 37 pav.  $F_1$  diagrama, kurioje kvadratai su  $kk$  viduje vaizduoja orbitinę ir sukininę sąveikos operatoriaus dalis.

Neredukuotinis matricinis (submatricinis) elementas  $F_2$  gautas iš diagramos  $F_1$ , nupjovus Vignerio baigtinių posūkių matricias, parinkus judėjimo kiekio momentų jungimo schemas  $J_0, \lambda_0 s(j_0)J$



ir  $J_1, \lambda_2 s(j_2), \lambda_1 s(j_1)j, J$ . Minėta procedūra gali būti užrašyta šitaip:

$$F_1 = \sum_{j_0, j_1, j_2, j, J} (2J+1) F_2 \cdot F_3'. \quad (146)$$

Čia  $F_2$  yra submatricinis elementas  $\langle \alpha_1 J_1, \lambda_2(j_2) \lambda_1(j_1) j, J || H || \alpha_0 J_0, \lambda_0 s(j_0) J \rangle$ , o  $F_3'$  – apibendrintas Klebšo ir Gordano koeficientas [1], kurį vaizduoja  $F_3$  kairėje esanti diagrama. Dešinėje  $F_3$  pavaizduota diagrama ateina iš kompleksiškaai jungtinio matricinio elemento (144).  $F_3$  išraiška dar gali būti supaprastinta. Tam tikslui panaudosime dviejų Vignerio posūkių matricių pakeitimo viena formulėmis (1.152) ir (1.153) visiems  $J_0, J_1, s, \lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$  judėjimo kiekio momentams. Gauname aštuonis Klebšo ir Gordano koeficientus, kuriuos panaudojame  $F_3$  diagramų sumavimui pagal projekcijas, (145) formulėje pažymėtas vingele. Sumavimo rezultatas pavaizduotas 38 pav.  $F_4$  diagrama, kurioje dar yra atvirų linijų. Šias linijas vėl uždarome Klebšo ir Gordano koeficientų suma ir gauname posūkių erdvėje atžvilgiu invariantišką diagramą  $F_5$ . Atvirų linijų  $F_4$  diagramoje uždarymo metu ateina dar vienas apibendrintas Klebšo ir Gordano koeficientas  $F_6$ , prie kurio linijų prijungiamo pažymėtus lankais tenzorius iš (1.152) ir (1.153) formulių ir sferines funkcijas. Diagramą  $F_5$  galima supjaustyti per linijas  $[J, K, J']$ ,  $[j_1, K'_1, j'_1]$ ,  $[j_2, K'_2, j'_2]$   $[j, K', j']$  ir  $[j_0, K'_0, j'_0]$  į šešis  $9j$  koeficientus, o  $F_6$  – į aštuonis Klebšo ir Gordano koeficientus.

Galutinė diferencialinio skerserspjūvio (144) išraiška užrašoma, panaudojant  $F_2, F_5$  ir  $F_6$  diagramas, ir yra šitokia:

$$\begin{aligned} & \frac{d^3 \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_1 m_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2} = C_2 (4\pi)^{3/2} \\ & \times \sum_{\substack{K, K_0, K'_0, K_{\lambda_0}, K_{s_0}, K', K_1 \\ K'_1, K'_2, K_{\lambda_1}, K_{s_1}, K_{\lambda_2}, K_{s_2}}} \mathcal{B}^{jon}(K_0, K'_0, K, K_{\lambda_0}, K_{s_0}, K_1, K', K_{\lambda_1}, K_{s_1}, K'_1, K_{\lambda_2}, K_{s_2}, K'_2) \\ & \times \sum_{\substack{N, N_0, N'_0, N_{\lambda_0}, N_{s_0}, N', N_1 \\ N'_1, N'_2, N_{\lambda_1}, N_{s_1}, N_{\lambda_2}, N_{s_2}}} \begin{bmatrix} K_{\lambda_0} & K_{s_0} & K'_0 \\ N_{\lambda_0} & N_{s_0} & N'_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_0 & K'_0 & K \\ N_0 & N'_0 & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_1 & K' & K \\ N_1 & N' & N \end{bmatrix} \\ & \times \begin{bmatrix} K'_2 & K'_1 & K' \\ N'_2 & N'_1 & N' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{\lambda_1} & K_{s_1} & K'_1 \\ N_{\lambda_1} & N_{s_1} & N'_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{\lambda_2} & K_{s_2} & K'_2 \\ N_{\lambda_2} & N_{s_2} & N'_2 \end{bmatrix} Y_{K_{\lambda_0} N_{\lambda_0}}^*(\hat{p}_0) Y_{K_{\lambda_1} N_{\lambda_1}}(\hat{p}_1) \\ & \times Y_{K_{\lambda_2} N_{\lambda_2}}(\hat{p}_2) T_{N_0}^{*K_0}(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) T_{N_1}^{K_1}(J_1, J_1, M_1 | \hat{J}_1) T_{N_{s_0}}^{*K_{s_0}}(s, s, m_0 | \hat{s}) \\ & \times T_{N_{s_1}}^{K_{s_1}}(s, s, m_1 | \hat{s}) T_{N_{s_2}}^{K_{s_2}}(s, s, m_2 | \hat{s}), \end{aligned} \quad (147)$$

kur  $C_2 = 2k_1 k_2 / \pi^2 k_0$

$$\mathcal{B}^{jon}(K_0, K'_0, K, K_{\lambda_0}, K_{s_0}, K_1, K', K_{\lambda_1}, K_{s_1}, K'_1, K_{\lambda_2}, K_{s_2}, K'_2)$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\substack{\lambda_0, \lambda'_0, \lambda_1, \lambda'_1, \lambda_2, \lambda'_2, j_0, j'_0 \\ j_1, j'_1, j_2, j'_2, J, J', j, j'}} (2J+1)(2J'+1)(2s+1)(-1)^{\lambda'_0+\lambda'_1+\lambda'_2} \\
&\quad \times \langle \alpha_1 J_1, \varepsilon_2 \lambda_2(j_2) \varepsilon_1 \lambda_1(j_1) j, J || H || \alpha_0 J_0, \varepsilon_0 \lambda_0(j_0) J \rangle \\
&\quad \times \langle \alpha_1 J_1, \varepsilon_2 \lambda'_2(j'_2) \varepsilon_1 \lambda'_1(j'_1) j', J' || H || \alpha_0 J_0, \varepsilon_0 \lambda'_0(j'_0) J' \rangle^* \\
&\quad \times [(2s+1)(2\lambda_0+1)(2\lambda'_0+1)(2\lambda_1+1)(2\lambda'_1+1)(2\lambda_2+1)(2\lambda'_2+1)(2j_0+1)(2j'_0+1) \\
&\quad \times (2j_1+1)(2j'_1+1)(2j_2+1)(2j'_2+1)(2j+1)(2j'+1)(2J_0+1)(2J_1+1)(2K'_0+1)(2K'_1+1) \\
&\quad \times (2K'+1)(2K'_2+1)]^{1/2} \begin{bmatrix} \lambda_0 & \lambda'_0 & K_{\lambda_0} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda'_1 & K_{\lambda_1} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_2 & \lambda'_2 & K_{\lambda_2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
&\quad \times \left\{ \begin{matrix} J_0 & K_0 & J_0 \\ j'_0 & K'_0 & j_0 \\ J' & K & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda'_0 & K_{\lambda_0} & \lambda_0 \\ s & K_{s0} & s \\ j'_0 & K'_0 & j_0 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J_1 & K_1 & J_1 \\ j & K' & j' \\ J & K & J' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda'_1 & K_{\lambda_1} & \lambda_1 \\ s & K_{s1} & s \\ j'_1 & K'_1 & j_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda'_2 & K_{\lambda_2} & \lambda_2 \\ s & K_{s2} & s \\ j'_2 & K'_2 & j_2 \end{matrix} \right\} \\
&\quad \times \left\{ \begin{matrix} j'_2 & K'_2 & j_2 \\ j'_1 & K'_1 & j_1 \\ j' & K' & j \end{matrix} \right\}. \tag{148}
\end{aligned}$$

Elektrostatinės sąveikos atveju submatricinis elementas (148) išraiškoje yra operatoriaus  $H^{kk0,000}$  tiesioginio ir pamaininio narių suma. Jį patogiu užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned}
&\langle \alpha_1 J_1, \varepsilon_2 \lambda_2(j_2) \varepsilon_1 \lambda_1(j_1) j, J || H || \alpha_0 J_0, \varepsilon_0 \lambda_0(j_0) J \rangle \\
&= \sum_k \left[ \langle \alpha_1 J_1, \varepsilon_2 \lambda_2(j_2) \varepsilon_1 \lambda_1(j_1) j, J || H^{(kk0,000)} || \alpha_0 J_0, \varepsilon_0 \lambda_0(j_0) J \rangle^{direct} \right. \\
&\quad \left. - \sum_{k'} (-1)^{k+k'+\lambda_1+\lambda_2} \left[ \frac{(2\lambda_1+1)(2\lambda_2+1)}{2k+1} \right]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} \lambda_0 & k' & \lambda_2 \\ l_0 & k & \lambda_1 \end{matrix} \right\} \right. \\
&\quad \left. \times \langle \alpha_1 J_1, \varepsilon_2 \lambda_2(j_2) \varepsilon_1 \lambda_1(j_1) j, J || H^{(k'k'0,000)} || \alpha_0 J_0, \varepsilon_0 \lambda_0(j_0) J \rangle^{exchange} \right]. \tag{149}
\end{aligned}$$

Tiesioginei ir pamaininei dalims apskaičiuoti gali būti naudojamos [2] darbo 13 skyriaus formulės, kuriose radialieji integralai yra

$$R_k(n_0 l_0 \varepsilon_2 \lambda_2, \varepsilon_0 \lambda_0 \varepsilon_1 \lambda_1) (l_0 || C^{(k)} || \lambda_2) (\lambda_0 || C^{(k)} || \lambda_1)$$

ir

$$R_{k'}(n_0 l_0 \varepsilon_1 \lambda_1, \varepsilon_0 \lambda_0 \varepsilon_2 \lambda_2) (l_0 || C^{(k')} || \lambda_1) (\lambda_0 || C^{(k')} || \lambda_2)$$

atitinkamai tiesioginei ir pamaininei dalims. Čia pirmųjų dviejų elektronų koordinatė yra  $r_1$ , o antrųjų –  $r_2$ , kaip ir [2] darbe.

(147) išraiška yra bendriausias poliarizuotų atomų jonizacijos poliarizuotais elektronais skerspjūvio atvejis. Iš jos galima surasti paprastesnius poliarizacijos atvejus aprašančias formules. Po nedidelių pakeitimų (147) ir (148) formulės tinka ir tais atvejais, kai svarbi lygmenų hipersmulkiųjų sandara. Tam tiksliai reikia (148) išraiškoje atomo ir jono būsenas pakeisti į  $\alpha_0 J_0(I)F_0 M_0$  ir  $\alpha_1 J_1(I)F_1 M_1$ , kur  $I$  yra branduolio sukiny. Tuomet (148) išraiškoje esantis submatricinis elementas pakeičiamas į

$$\langle \alpha_1 J_1(I)F_1, \varepsilon_2 \lambda'_2(j'_2) \varepsilon_1 \lambda'_1(j'_1) j', F || H || \alpha_0 J_0(I)F_0, \varepsilon_0 \lambda'_0(j'_0) F \rangle,$$

submatricinį elementą, kvantiniai skaičiai  $J_0, J_1, J, J'$  pakeičiami į  $F_0, F_1, F, F'$ , o kampai (147) išraiškoje rodo naujų judėjimo kiekio momentų kryptis.

#### 4.5.2 Nepoliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais pilnutinis skerspjūvis.

Dažnai matuojamas pilnutinis atomų jonizacijos elektronais skerspjūvis. Pavyzdžiui, Kupliauskienė ir Maknickas [173] skaičiavo He atomo pagrindinėje būsenoje jonizacijos sužadinant joną skerspjūvį. Pilnutiniam nepoliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais skerspjūviui surasti reikia (147) išraišką integruoti abiejų nulekiančių elektronų kampų, vidurkinti atomo ir jonizuojančio elektrono sukinių, sumuoti jono ir nulekiančių elektronų sukinių būsenų atžvilgiu. Parinkus laboratorinės koordinačių sistemos  $z$  ašį išilgai jonizuojančio elektrono judėjimo krypties, gaunama šitokia pilnutinio jonizacijos skerspjūvio išraiška:

$$\begin{aligned} & \sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) \\ &= \frac{1}{2(2J_0 + 1)} \int d\varepsilon_2 \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \sum_{M_0, M_1, m_0, m_1, m_2} \frac{d^3 \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2} \\ &= \frac{8}{\varepsilon_0 (2J_0 + 1)} \int d\varepsilon_2 \mathcal{B}^{jon}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0). \end{aligned} \quad (150)$$

Įrašius  $K_i$  ir  $N_i$  sumavimo parametrų nulines reikšmes į (148),  $\mathcal{B}^{jon}$  išraiška yra:

$$\begin{aligned} & \mathcal{B}^{jon}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \\ &= \sum_{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, j_0, j_1, j_2, j, J} (2J + 1) \langle \alpha_1 J_1, \varepsilon_2 \lambda_2(j_2) \varepsilon_1 \lambda_1(j_1) j, J || H || \alpha_0 J_0, \varepsilon_0 \lambda_0(j_0) J \rangle^2. \end{aligned} \quad (151)$$

Konstanta (150) surandama, atsižvelgiant į elektrono tolydiniame spektre radialiųjų orbitalių normavimą ir koeficientą prie asimptotikos sinuso. Kai  $P(\varepsilon \lambda | r)$  normuota į  $\delta(\varepsilon - \varepsilon')$  ir

$$P(\varepsilon \lambda | r \rightarrow \infty) = \frac{1}{\sqrt{p}} \sin(pr - \pi \lambda / 2 + \delta_\lambda),$$

$C = (8)/(\varepsilon_0)$ , ir, kai

$$P(\varepsilon\lambda|r \rightarrow \infty) = \frac{1}{\pi\sqrt{p}} \sin(pr - \pi\lambda/2 + \delta_\lambda).$$

### 4.5.3 Elektronų po nepoliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais kampinis pasiskirstymas

Kai nepoliarizuoti atomai jonizuojami nepoliarizuotais elektronais, o nukeliančių elektronų sukinių ir jono būsenos neregistruojamos, galima surasti vieno iš elektronų kampinį pasiskirstymą aprašančio skerspjūvio išraišką. Sakysime, kad bus matuojamas lėtesniojo elektrono kampinis pasiskirstymas. Tuomet (147) išraišką reikia suintegruoti greitesniojo elektrono, sakysime jo judėjimo kiekis yra  $\mathbf{p}_1$ , kampų, sumuoti nematuojamų jono ir elektronų sukinių būsenų bei vidurkinti atomo ir jonizuojančio elektrono sukinių būsenų atžvilgiu. Šiuo atveju, supatinus laboratorinės koordinatų sistemos  $z$  ašį su jonizuojančio elektrono kryptimi, gaunama diferencialinio skerspjūvio išraiška:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_2} &= \frac{1}{2(2J_0 + 1)} \int d\Omega_1 \sum_{M_0, M_1, m_0, m_1, m_2} \frac{d^3\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2} \\ &= \frac{2\pi C_2}{2J_0 + 1} \sum_K \mathcal{B}^{jon}(0, K, K, K, 0, 0, K, 0, 0, 0, K, 0, K) P_K(\cos \theta) \end{aligned} \quad (152)$$

$$= \frac{2\pi C_2}{2J_0 + 1} B(0) \left[ 1 + \sum_{K>0} \beta_K P_K(\cos \theta) \right]. \quad (153)$$

Čia kampas  $\theta$  yra tarp jonizuojančio ir nukeliančio elektronų kryptių,  $C_2 = 2/\pi\varepsilon$ , o

$$\beta_K = \frac{(2K + 1)B(K)}{B(0)} \quad (154)$$

yra registruojamo išlekiančio elektrono kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras

$$B(K) = \mathcal{B}(0, K, K, K, 0, 0, K, 0, 0, 0, K, 0, K). \quad (155)$$

I (153) panašią išraišką naudojo Pan ir Starace [61] vieno iš išlekiančių elektronų po Li ir Mg atomų jonizacijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrai  $\beta_k$  skaičiuoti.

### 4.5.4 Elektronų kampinis pasiskirstymas po poliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais

Poliarizuoto atomo jonizacijos nepoliarizuotais elektronais atplėštojo elektrono kampinį pasiskirstymą aprašančio skerspjūvio išraiškai surasti reikia (147) formulę integruoti vieno iš elektronų

kampų, vidurkinti jonizuojančio elektrono sukinių, sumuoti nukeliančių elektronų sukinių ir jono būsenų atžvilgiu. Gauname šitokią išraišką:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2)}{d\varepsilon_2 d\Omega_2} &= \frac{1}{2} \int d\Omega_1 \sum_{M_1, m_0, m_1, m_2} \frac{d^3\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2} \\
&= \frac{(4\pi)^2 C_2}{2} \sum_{K_0, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_2}} \mathcal{B}^{jon}(K_0, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_2}, K_{\lambda_0}, 0, 0, K_{\lambda_2}, 0, 0, 0, K_{\lambda_2}, 0, K_{\lambda_2}) \\
&\times \sum_{N_0, N_{\lambda_0}, N_{\lambda_2}} \begin{bmatrix} K_0 & K_{\lambda_0} & K_{\lambda_2} \\ N_0 & N_{\lambda_0} & N_{\lambda_2} \end{bmatrix} Y_{K_{\lambda_0} N_{\lambda_0}}^*(\hat{p}_0) Y_{K_{\lambda_2} N_{\lambda_2}}(\hat{p}_2) T_{N_0}^{*K_0}(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0). \quad (156)
\end{aligned}$$

Šią išraišką galima supaprastinti, sutapatinant jonizuojančio elektrono kryptį su laboratorinės koordinatų sistemos  $z$  ašimi. Tuomet  $N_{\lambda_0} = 0$ ,  $N_{\lambda_2} = N_0$ . Įrašę tenzoriaus  $T_{N_0}^{K_0}$  išraišką, gauname šitokią formulę:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2)}{d\varepsilon_2 d\Omega_2} &= \frac{(4\pi)^2 C_2}{2} \\
&\times \sum_{K_0, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_2}} \mathcal{B}^{jon}(K_0, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_2}, K_{\lambda_0}, 0, 0, K_{\lambda_2}, 0, 0, 0, K_{\lambda_2}, 0, K_{\lambda_2}) \sum_N \begin{bmatrix} K_0 & K_{\lambda_0} & K_{\lambda_2} \\ N & 0 & N \end{bmatrix} \\
&\times (-1)^{J_0 - M_0} \left[ \frac{2K_{\lambda_0} + 1}{2J_0 + 1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_0 N}^*(\theta_A, \phi_A) Y_{K_{\lambda_2} N}(\theta_2, \phi_2). \quad (157)
\end{aligned}$$

(157) formulė panaši į [55] darbo (5) formulę, kuri buvo surasta, naudojant tankio matricos metodą ir tiesiogiai sumuojant judėjimo kiekio momentų projekcijų atžvilgiu.

#### 4.5.5 Kampinė koreliacija tarp dviejų išlekiančių elektronų po nepoliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais

Dorn ir kt. [165] eksperimentiškai tyrė kampines koreliacijas tarp išlekiančių elektronų po Na atomo jonizacijos. Šiuos eksperimentus aprašančio diferencialinio skerspjūvio išraišką galima surasti (147) formulę vidurkinant atomo ir jonizuojančio elektrono sukinių būsenų ir sumuojant jono pilnutinio judėjimo kiekio momento būsenų atžvilgiu. Gaunama šitokia išraiška:

$$\begin{aligned}
\frac{d^3\sigma(\alpha_0 J_0 \mathbf{p}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_2 d\Omega_1} &= \frac{1}{2(2J_0 + 1)} \sum_{M_0, M_1, m_0, m_1, m_2} \frac{d^3\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2} \\
&= \frac{(4\pi)^{3/2} C_2}{2(2J_0 + 1)} \sum_{K_{\lambda_0}, K_{\lambda_2}, K_{\lambda_1}} \mathcal{B}^{jon}(0, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_0}, 0, 0, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_1}, K_{\lambda_2}, 0, K_{\lambda_2}) \\
&\times \sum_{N_{\lambda_0}, N_{\lambda_2}, N_{\lambda_1}} \begin{bmatrix} K_{\lambda_2} & K_{\lambda_1} & K_{\lambda_0} \\ N_{\lambda_2} & N_{\lambda_1} & N_{\lambda_0} \end{bmatrix} Y_{K_{\lambda_0} N_{\lambda_0}}^*(\hat{p}_0) Y_{K_{\lambda_2} N_{\lambda_2}}(\hat{p}_2) Y_{K_{\lambda_1} N_{\lambda_1}}(\hat{p}_1). \quad (158)
\end{aligned}$$

Ši išraiška pasidaro paprastesnė laboratorinę  $z$  ašį sutapatinus su jonizuojančio elektrono judėjimo kryptimi:

$$\begin{aligned} \frac{d^3\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_2 d\Omega_1} &= \frac{2\pi C_2}{2J_0 + 1} \sum_{K_{\lambda_0}, K_{\lambda_2}, K_{\lambda_1}, N} \begin{bmatrix} K_{\lambda_2} & K_{\lambda_1} & K_{\lambda_0} \\ N & -N & 0 \end{bmatrix} \sqrt{2K_{\lambda_0} + 1} \\ &\times \mathcal{B}^{jon}(0, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_0}, 0, 0, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_1}, K_{\lambda_2}, 0, K_{\lambda_2}) Y_{K_{\lambda_2} N_{\lambda_2}}(\theta_2, \phi_2) Y_{K_{\lambda_1} N_{\lambda_1}}(\theta_1, \phi_1). \end{aligned} \quad (159)$$

Kampai  $\theta_1$ ,  $\phi_1$ ,  $\theta_2$  ir  $\phi_2$  matuojami nuo jonizuojančio elektrono judėjimo krypties.

#### 4.5.6 Kampinė koreliacija tarp dviejų išlekiančių elektronų po poliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais

Diferencialinis skerspjūvis, aprašantis kampinę koreliaciją po poliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais, surandamas (147) išraišką sumuojant jono ir nuklekiančių elektronų sukinų būsenų atžvilgiu ( $s = 1/2$ ):

$$\begin{aligned} &\frac{d^3\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_2 d\Omega_1} \\ &= \frac{d^3\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2} = \frac{(4\pi)^{5/2} C_2}{\sqrt{(2s+1)(2J_0+1)}} \sum_{M_0, M_1, m_0, m_1, m_2} \\ &\times \sum_{K, K_0, K'_0, K_{\lambda_0}, K_{s_0}, K_{\lambda_2}, K_{\lambda_1}} \mathcal{B}^{jon}(K_0, K'_0, K, K_{\lambda_0}, K_{s_0}, 0, K, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_1}, K_{\lambda_2}, 0, K_{\lambda_2}) \\ &\times \sum_{N, N_0, N'_0, N_{\lambda_0}, N_{s_0}, N_{\lambda_2}, N_{\lambda_1}} \begin{bmatrix} K_{\lambda_0} & K_{s_0} & K'_0 \\ N_{\lambda_0} & N_{s_0} & N'_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_0 & K'_0 & K \\ N_0 & N'_0 & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{\lambda_2} & K_{\lambda_1} & K \\ N_{\lambda_2} & N_{\lambda_1} & N \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s & s & K_{s_0} \\ m_0 & -m_0 & 0 \end{bmatrix} (-1)^{J_0 - M_0 + s - m_0} Y_{K_0 N_0}^*(\theta_A, \phi_A) Y_{K_{\lambda_0} N_{\lambda_0}}^*(\hat{p}_0) \\ &\times Y_{K_{s_0} N_{s_0}}^*(\theta_{s_0}, \phi_{s_0}) Y_{K_{\lambda_2} N_{\lambda_2}}(\hat{p}_2) Y_{K_{\lambda_1} N_{\lambda_1}}(\hat{p}_1). \end{aligned} \quad (160)$$

Ši išraiška gali būti panaudota teoriškai paaiškinant [165, 166] eksperimento rezultatus, kur lazerio spinduliuote orientuoti atomai buvo jonizuojami poliarizuotais elektronais. Išmatuotas magnetinis dichrozimas stipriai priklauso nuo jonizacijos proceso dinamikos ir nuo atomo pilnutinio judėjimo kiekio momento  $\mathbf{F}$  ir elektrono sukinio tarpusavio orientacijos.

#### 4.5.7 Magnetinis dichroizmas, jonizuojant poliarizuotus atomus nepoliarizuotais elektronais

Šiuo atveju jonų būsenos ir išlekiantys elektronai neregistruojami, todėl integruojame neregistruojamų elektronų kampų, sumuojame elektronų sukinių būsenų ir vidurkiname jonizuojančio elektrono sukinių būsenų atžvilgiu. Parenkame  $z$  ašį išilgai jonizuojančio elektrono krypties ir gauname šią išraišką:

$$\begin{aligned} \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) &= \frac{1}{2} \int d\varepsilon_2 \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \sum_{M_1, m_0, m_1, m_2} \frac{d^3 \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2} \\ &= \frac{(4\pi)^2 C_2}{2} \sum_{K_0} (-1)^{K_0} \mathcal{B}^{jon}(K_0, K_0, 0, K_0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} P_{K_0}(\cos \theta) \end{aligned} \quad (161)$$

Magnetinis dichroizmas apibreziamas šitaip:

$$\Delta = \frac{\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) - \sigma(\alpha_0 J_0 - M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)}{\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) + \sigma(\alpha_0 J_0 - M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)}. \quad (162)$$

Irašome (161) į (162) ir surandame magnetinio dichroizmo jonizuojant poliarizuotus atomus nepoliarizuotais elektronais išraišką:

$$\Delta = \frac{\sum_{K_0=nelyg} (-1)^{K_0} \mathcal{B}^{jon}(K_0, 0, K_0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} P_{K_0}(\cos \theta)}{\sum_{K_0=lyg} (-1)^{K_0} \mathcal{B}^{jon}(K_0, 0, K_0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} P_{K_0}(\cos \theta)}. \quad (163)$$

Galima parinkti atomo pilnutinio judėjimo kiekio momento kryptį, sutampančią su elektrono judėjimo kryptimi, t.y.  $\mathbf{J} \parallel \mathbf{p}_0$ . Tuomet

$$\Delta = \frac{\sum_{K_0=nelyg} (-1)^{K_0} \mathcal{B}^{jon}(K_0, 0, K_0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix}}{\sum_{K_0=lyg} (-1)^{K_0} \mathcal{B}^{jon}(K_0, 0, K_0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix}}. \quad (164)$$

Čia

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^{jon}(K_0, 0, K_0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) &= \sum_{\lambda_0, \lambda'_0, j_0, j'_0, \lambda_1, \lambda_2, j_1, j_2, j, J} (2J+1) \\ &\times \left[ \frac{2\lambda_0 + 1}{2K_0 + 1} (2\lambda'_0 + 1) (1j_0 + 1) (2j'_0 + 1) (2J_0 + 1) \right]^{1/2} (-1)^{J_0 + j_0 + j'_0 + J + s} \begin{Bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ j_0 & j'_0 & J \end{Bmatrix} \\ &\times \begin{Bmatrix} \lambda'_0 & \lambda_0 & K_0 \\ j_0 & j'_0 & s \end{Bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_0 & \lambda'_0 & K_0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \langle \alpha_1 J_1, \varepsilon_2 \lambda_2(j_2) \varepsilon_1 \lambda_1(j_1) j, J || H || \alpha_0 J_0, \varepsilon_0 \lambda_0(j_0) \rangle \end{aligned}$$

$$\langle \alpha_1 J_1, \varepsilon_2 \lambda_2(j_2) \varepsilon_1 \lambda_1(j_1) j, J || H || \alpha_0 J_0, \varepsilon_0 \lambda'_0(j'_0) \rangle^*. \quad (165)$$

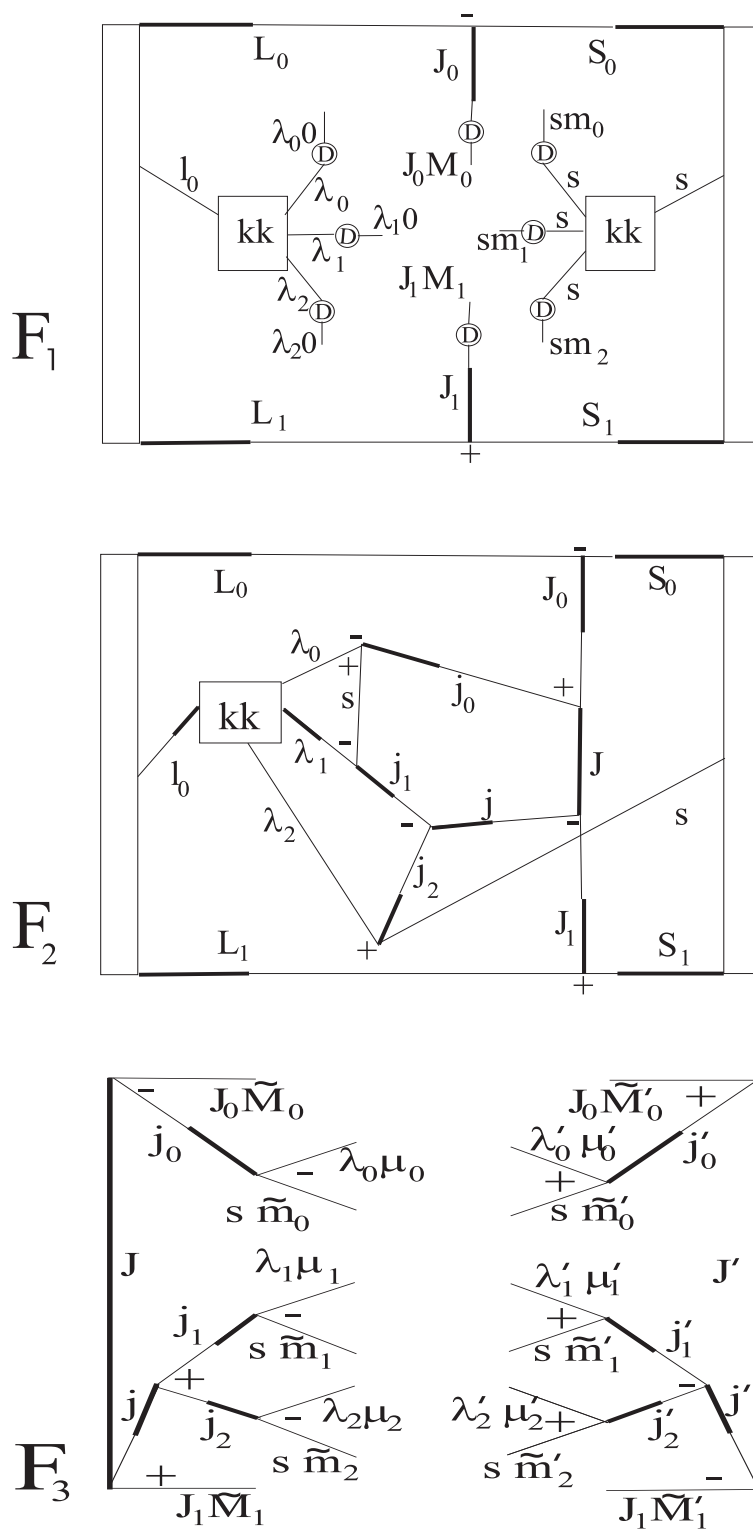
#### 4.5.8 Magnetinis dichroizmas, jonizuojant poliarizuotus atomus poliarizuotais elektronais

Norint surasti magnetinį dichroizmą, kai jonizuojami poliarizuoti atomai poliarizuotais elektronais ir neregistruojami išlekiantys elektronai, reikia (147) išraišką sumuoti jono ir neregistruojamų elektronų sukinių būsenų atžvilgiu bei integruoti pagal neregistruojamų elektronų kampus. Parenkame laboratorinės koordinatinių sistemos  $z$  ašį, sutampančią su jonizuojančio elektrono judėjimo kryptimi, ir gauname skerspjūvio išraišką:

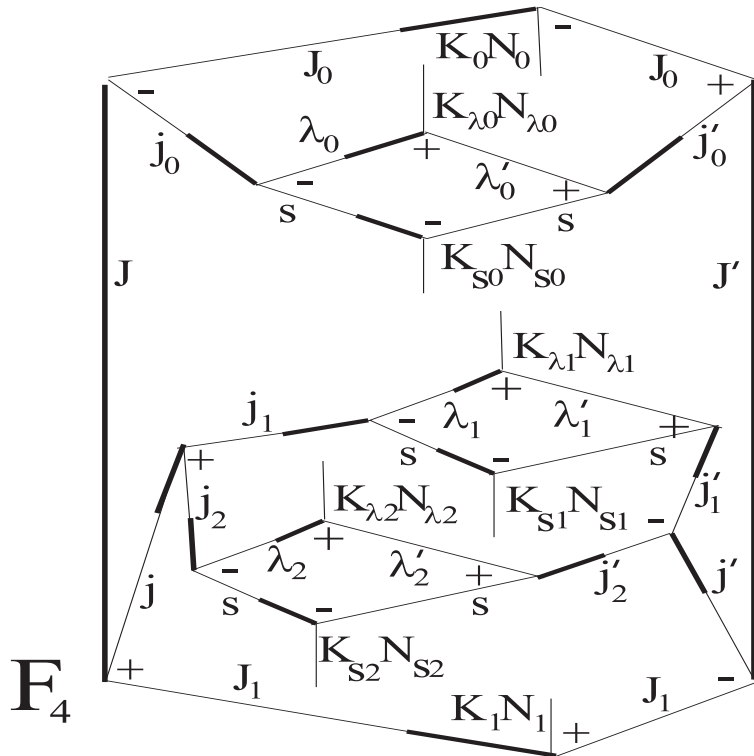
$$\begin{aligned} & \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 m_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) = \\ & \int d\varepsilon_2 \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \sum_{M_1, m_1, m_2} \frac{d^3 \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2} \\ & = C_2 (4\pi)^2 \sum_{K_0, K_{\lambda_0} K_{s_0}, N_{s_0}} (-1)^{J_0 - M_0 + s - m_0} \mathcal{B}^{jon}(K_0, K_0, 0, K_0, K_{\lambda_0}, K_{s_0}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \\ & \times \frac{1}{[(2J_0 + 1)(2s + 1)]^{1/2}} \begin{bmatrix} K_{\lambda_0} & K_{s_0} & K_0 \\ 0 & N_{s_0} & N_{s_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s & s & K_0 \\ m_0 & -m_0 & 0 \end{bmatrix} \\ & \times Y_{K_0 N_{s_0}}(\theta_A, \phi_A) Y_{K_{s_0} N_{s_0}}(\theta_s, \phi_s). \end{aligned} \quad (166)$$

Atomo pilnutinio judėjimo kiekio momento krypties kampai  $\theta_A, \phi_A$  ir elektrono sukinių krypties kampai  $\theta_s, \phi_s$  matuojami nuo jonizuojančio elektrono judėjimo krypties.

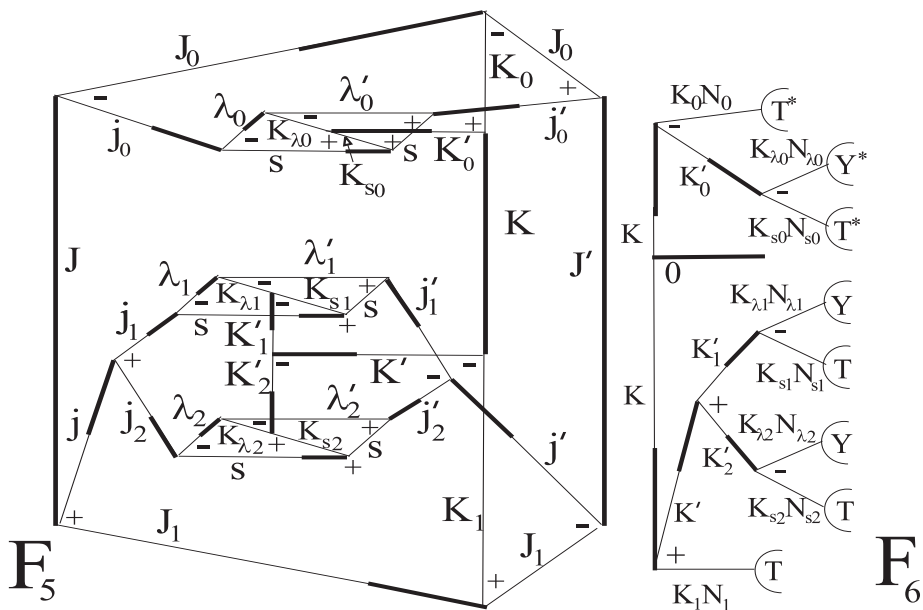




37 pav. Judėjimo kiekio momento diagramos, naudotos atomo jonizacijos elektronais diferencialinio skerspjūvio išraiškai surasti.



**F<sub>4</sub>**



**F<sub>5</sub>**

**F<sub>6</sub>**

38 pav. Judėjimo kiekio momento diagramos, naudotos atomo jonizacijos elektronais diferencialinio skerspjūvio išraiškai surasti.

## 4.6 Atomų jonizacijos nagrinėjimas Borno artinyje.

Plokščiabangį Borno artinį atomo jonizacijai elektronais tirti galima taikyti tais atvejais, kai jonizuojantis elektronas yra labai greitas. Tuomet tikimybė, kad išsklaidytas elektronas bus daug greitesnis už atplėštąjį, yra labai didelė. Šiuos greitus elektronus galima aprašyti plokščiomis bangomis. Jeigu greitieji elektronai nėra registruojami, galima integruoti jų kampų ir sumuoti sukinio projekcijų atžvilgiu.

### 4.6.1 Atomų jonizacijos skerspjūvio bendrosios išraiškos suradimas.

Uždavinį sprendžiame analogiškai atomo sužadinimo elektronais Borno artinyje uždaviniui. Jonizacijos proceso

$$A(\alpha_1 J_1 M_1) + e^-(\mathbf{p}_1 m_1) \rightarrow A^+(\alpha_2 J_2 M_2) + e^-(\mathbf{p} m) + e^-(\mathbf{p}_2 m_2). \quad (167)$$

jonizuojantį elektroną  $\mathbf{p}_1$  aprašysime (76) plokščia banga, normuota į vienetinių elektronų srautą, o išsklaidytą – (77) plokščia banga, normuota į  $\delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2)$ , kad jonizacijos tikimybė būtų lygi skerspjūviui. Atplėštąjį elektroną  $\mathbf{p}$  aprašysime iškraipytomis dalinėmis bangomis kuloniniame lauke pagal (2.46) formulę. Skerspjūvio vidurkinimas ir sumavimas elektrono sukinio projekcijų atžvilgiu atneša tiksliai daugiklį  $1/2$ , todėl sukinio projekcijų nerašysime, o į daugiklį atsižvelgsime, užrašydami skerspjūvio išraišką. Naudosime tiksliai eksponentes, o į jų normavimą atsižvelgsime per išsklaidyto elektrono būsenų tankį. Eksponentes įrašome į (145) matricinio elemento išraišką:

$$\begin{aligned} \langle (\alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p} m) \mathbf{p}_2 | H | \alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_1 \rangle &= \langle (\alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p} m) e^{-i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_e} | \sum_j \frac{1}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_e|} | \alpha_1 J_1 M_1 e^{\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_e} \rangle \\ &= \langle \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p} m | \sum_j e^{\mathbf{q} \mathbf{r}_e} \frac{1}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_e|} | \alpha_1 J_1 M_1 \rangle = \frac{4\pi}{q^2} \langle \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p} m | \sum_j e^{\mathbf{q} \mathbf{r}_j} | \alpha_1 J_1 M_1 \rangle. \end{aligned} \quad (168)$$

Čia  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ . Dabar eksponentę skleidžiame eilute pagal (84) formulę, o atplėštojo elektrono – pagal (2.46) formulę ir gauname:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p} m \mathbf{q} | H | \alpha_1 J_1 M_1 \rangle &= \frac{(4\pi)^2}{q^2} \sum_{t=0}^{\infty} \sum_{\lambda=0}^{\infty} [(2\lambda + 1)(2t + 1)]^{1/2} \\ &\times \sum_{m_t, \mu} \langle \alpha_2 J_2 M_2 \varepsilon \lambda | \sum_{j'} i^t j_t(qr) C_{m_t}^{(t)}(\hat{r}_{j'}) | \alpha_1 J_1 M_1 \rangle Y_{t0}(\hat{q}) Y_{\lambda 0}^*(\hat{p}). \end{aligned} \quad (169)$$

$Y_{t0}(\hat{q})$  ir  $Y_{\lambda 0}^*(\hat{p})$  projekcijos lygios nuliui todėl, kad sferinių funkcijų bazėje skleidėme, parinkę kvantavimo ašis, sutampančias su atitinkamai perduoto judėjimo kiekio ir atplėštojo elektrono

juėjimo kryptimis. Judėjimo kiekio momentų  $J_1$  ir  $J_2$  projekcijos taip pat buvo nustatomos kažkokių laisvai parenkamų ašių atžvilgiu. Matriciniam elementui skaičiuoti parenkame bendrą koordinačių sistemą, todėl visas funkcijas transformuojame į ją (1.149) formulės pagalba:

$$\begin{aligned} \langle (\alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p} m) \mathbf{q} | H | \alpha_1 J_1 M_1 \rangle &= \frac{(4\pi)^2}{q^2} \sum_{t=0}^{\infty} \sum_{\lambda} [(2\lambda + 1)(2t + 1)]^{1/2} \\ &\times \sum_{\tilde{M}_1, \tilde{M}_2, m_t, \mu, \tilde{m}} \langle \alpha_2 J_2 \tilde{M}_2 \varepsilon \lambda \mu | i^t j_t(qr) C_{m_t}^{(t)}(\hat{r}) | \alpha_1 J_1 \tilde{M}_1 \rangle D_{\tilde{M}_1 M_1}^{J_1}(\hat{J}_1) \\ &D_{\tilde{M}_2 M_2}^{*J_2}(\hat{J}_2) D_{m_t 0}^t(\hat{q}) D_{\mu 0}^{*\lambda}(\hat{p}) D_{\tilde{m} m}^{*s}(\hat{s}). \end{aligned} \quad (170)$$

Kadangi operatoriaus kampinė dalis sutampa su fotojonizacijos operatoriaus kampine dalimi, galima panaudoti fotojonizacijos matricinio elemento judėjimo kiekio momento diagramas atomo jonizacijos Borno artinyje diferencialinio skerspjūvio išraiškai užrašyti:

$$\begin{aligned} \frac{d^3\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p} m)}{d\Omega d\Omega_q d\varepsilon} &= \frac{C k_2 k}{q^4 k_1} \sum_{K_1, K_2, K_q, K_\lambda, K_s, K_j, K} \mathcal{B}^{Bjon}(K_1, K_2, K_q, K_\lambda, K_s, K_j, K) \\ &\times \sum_{N_1, N_2, N_q, N_\lambda, N_s, N_j, N} \begin{bmatrix} K_1 & K_q & K \\ N_1 & N_q & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_\lambda & K_s & K_j \\ N_\lambda & N_s & N_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_2 & K_j & K \\ N_2 & N_j & N \end{bmatrix} \\ &\times \sqrt{4\pi} Y_{K_\lambda N_\lambda}(\hat{p}) \sqrt{4\pi} Y_{K_q N_q}(\hat{q}) T_{N_1}^{*K_1}(\hat{J}_1) T_{N_2}^{K_2}(\hat{J}_2) T_{N_s}^{K_s}(\hat{s}), \end{aligned} \quad (171)$$

kur  $k = p/\hbar$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^{Bjon}(K_1, K_2, K_q, K_\lambda, K_s, K_j, K) &= \sum_{\lambda, j, J, \lambda', j', J', t, t'} (2J + 1)(2J' + 1)(-1)^{\lambda' + t'} \\ &\times \langle \alpha_2 J_2 \varepsilon \lambda(j) J | | Q^{(t)} | | \alpha_1 J_1 \rangle \langle \alpha_2 J_2 \varepsilon \lambda'(j') J' | | Q^{(t')} | | \alpha_1 J_1 \rangle^* \begin{bmatrix} t & t' & K_q \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda & \lambda' & K_\lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &[(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)(2K_j + 1)(2s + 1)(2\lambda + 1)(2\lambda' + 1)(2j + 1)(2j' + 1)(2t + 1)(2t' + 1)]^{1/2} \\ &\times \left\{ \begin{matrix} J_1 & K_1 & J_1 \\ t' & K_q & t \\ J' & K & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J_2 & K_2 & J_2 \\ j' & K_j & j \\ J' & K & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda' & K_\lambda & \lambda \\ s & K_s & s \\ j' & K_j & j \end{matrix} \right\}. \end{aligned} \quad (172)$$

Sumatriciniame elemente esantis operatorius yra:

$$Q_{m_t}^{(t)} = i^t j_t(qr) C_{m_t}^{(t)}(\hat{r}), \quad (173)$$

kur  $C_{m_t}^{(t)}(\hat{r})$  – sferinės funkcijos operatorius, o konstanta  $C = 1/\pi$ . Atsižvelgta į  $1/2$ , iš vidurkinimo pagal jonizuojančio elektrono sukinio projekcijas. Tolydinio elektrono radialiosios funkcijos išraiška yra (2.47).

Kai išsklaidytas greitasis elektronas nematuojamas, galima suintegruoti jo kampų atžvilgiu. Integravimą kampų atžvilgiu galima pakeisti integravimu pagal perduotą judėjimo kiekį (žr. (93–96) formules). Tuomet

$$\begin{aligned}
& \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}m)}{d\Omega d\varepsilon} = \int dq \frac{d^3\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2)}{d\Omega d\Omega_q d\varepsilon} \\
& = \frac{2\pi kC}{k_1^2} \sum_{K_1, K_2, K_q, K_\lambda, K_s, K_j, K} B^{Bjon}(K_1, K_2, K_q, K_\lambda, K_s, K_j, K) \sum_{N_1, N_2, N_q, N_\lambda, N_s, N_j, N} 4\pi Y_{K_\lambda N_\lambda}(\hat{p}) \\
& \quad \times Y_{K_q N_q}(\hat{q}) \begin{bmatrix} K_1 & K_q & K \\ N_1 & N_q & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_\lambda & K_s & K_j \\ N_\lambda & N_s & N_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_2 & K_j & K \\ N_2 & N_j & N \end{bmatrix} \\
& \quad \times T_{N_1}^{*K_1}(\hat{J}_1) T_{N_2}^{K_2}(\hat{J}_2) T_{N_s}^{K_s}(\hat{s}), \tag{174}
\end{aligned}$$

kur

$$B^{Bjon}(K_1, K_2, K_q, K_\lambda, K_s, K_j, K) = \int_{q_{min}}^{q_{max}} \frac{dq}{q^3} B^{Bjon}(K_1, K_2, K_q, 0, K_\lambda, K_s, K_j, K), \tag{175}$$

$$q_{max} = (2\varepsilon_1)^{1/2} + [2(\varepsilon_1 - I_p - \varepsilon)]^{1/2}, \tag{176}$$

$$q_{min} = (2\varepsilon_1)^{1/2} - [2(\varepsilon_1 - I_p - \varepsilon)]^{1/2}. \tag{177}$$

Kai ieškomas pilnutinis atomo jonizacijos skerspjūvis, reikia integruoti atplėštojo elektrono kampų ir energijų atžvilgiu nuo 0 iki  $\varepsilon_1 - I_p$ , kur  $I_p$  - atomo jonizacijos potencialas.

#### 4.6.2 Nepoliarizuotų atomų pilnutinis jonizacijos skerspjūvis.

Kai atomai ir sklaidomi elektronai nepoliarizuoti bei jonas ir atplėstas elektronas neregistruojami, galima surasti nepoliarizuotų atomų pilnutinį jonizacijos skerspjūvį. Tam tikslui reikia (174) išraišką sumuoti jono ir atplėštojo elektrono sukinių būsenų, vidurkinti atomo būsenų bei integruoti atplėštojo elektrono kampų atžvilgiu. Gauname diferencialinio atplėštojo elektrono energijų atžvilgiu Borno artinyje jonizacijos skerspjūvio išraišką:

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \varepsilon)}{d\varepsilon} &= \frac{1}{2J_1 + 1} \int d\Omega \sum_{M_1, M_2, m} \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}m)}{d\Omega d\varepsilon} \\
&= \frac{4\pi^2 kC}{\varepsilon_1 (2J_1 + 1)} B^{Bjon}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0), \tag{178}
\end{aligned}$$

kur

$$B^{Bjon}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) = \int_{q_{min}}^{q_{max}} \frac{dq}{q^3} \sum_{\lambda, j, J, t} (2J + 1) |\langle \alpha_2 J_2 \varepsilon \lambda(j) J || Q^{(t)} || \alpha_1 J_1 \rangle|^2. \tag{179}$$

Dažnai matuojamas pilnutinis jonizacijos skerspjūvis, suintegruotas atplėštojo elektrono energijų atžvilgiu:

$$\begin{aligned}\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) &= \int_0^{\varepsilon_1 - I_p} d\varepsilon \frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{4\pi}{\varepsilon_1(2J_1 + 1)} \int_0^{\varepsilon_1 - I_p} d\varepsilon B^{Bjon}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \\ &= \frac{4\pi}{\varepsilon_1(2J_1 + 1)} \int_0^{\varepsilon_1 - I_p} d\varepsilon \int_{q_{min}}^{q_{max}} \frac{dq}{q^3} \sum_{\lambda, j, J, t} (2J + 1) |\langle \alpha_2 J_2 \varepsilon \lambda(j) J || Q^{(t)} || \alpha_1 J_1 \rangle|^2.\end{aligned}\quad (180)$$

Čia  $I_p$  – jonizacijos energija, o integravimas pagal  $dk$  pakeistas integravimu pagal  $d\varepsilon = k dk$ .

### 4.6.3 Lėtojo elektrono, atplėšto nuo nepoliarizuoto atomo, kampinis pasiskirstymas.

Norint surasti lėtojo elektrono iš nepoliarizuoto atomo kampinį pasiskirstymą aprašanti skerspjūvį, kai elektrono sukinio ir jono poliarizacija nematuojamos, reikia (174) vidurkinti atomo, sumuoti jono ir elektrono sukinio būsenų atžvilgiu:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 \hat{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p})}{d\varepsilon d\Omega} &= \frac{1}{2J_1 + 1} \sum_{M_1, M_2, m} \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p} m)}{d\Omega d\varepsilon} \\ &= \frac{\pi k C}{\varepsilon_1(2J_1 + 1)} \sum_{K_\lambda} B^{Bjon}(0, 0, K_\lambda, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_\lambda) \\ &\quad \times \sum_{N_\lambda} 4\pi Y_{K_\lambda N_\lambda}(\hat{p}) Y_{K_\lambda N_\lambda}(\hat{q}).\end{aligned}\quad (181)$$

Atsižvelgus į ašinę simetriją ir parinkus laboratorinės koordinatų sistemos  $z$  ašį, sutampantią su perduoto judėjimo kiekio  $\mathbf{q}$  kryptimi, gauname, kad  $N_\lambda = 0$ . Tuomet (181) formulę galima užrašyti šitaip:

$$\frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p})}{d\varepsilon d\Omega} = \frac{1}{4\pi} \frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \varepsilon)}{d\varepsilon} \left[ 1 + \sum_{K_\lambda > 0} \beta_{K_\lambda} P_{K_\lambda}(\cos \theta) \right], \quad (182)$$

kur atplėštojo elektrono kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras

$$\beta_{K_\lambda} = \frac{(2K_\lambda + 1) B^{Bjon}(0, 0, K_\lambda, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_\lambda)}{B^{Bjon}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)}.\quad (183)$$

Kampas  $\theta$  matuojamas nuo perduoto judėjimo kiekio  $\mathbf{q}$  krypties. Esant elektrono pradinei energijai, išsklaidyto elektrono kampas  $\theta$  susijęs su perduotu judėjimo kiekiu  $q$  šitokiu sąryšiu:

$$\cos \theta = \frac{2\varepsilon_1 - \Delta E - q^2}{2[\varepsilon_1(\varepsilon_1 - \Delta E)]^{1/2}}, \quad (184)$$

kur  $\Delta E$  – sklaidomojo elektrono prarasta energija. Šį sąryšį galima panaudoti ieškant, įrairių dydžių priklausomybės nuo išsklaidyto elektrono krypties.

#### 4.6.4 Poliarizuotų atomų jonizacijos skerspjūvis

Šiuo atveju pilnutinio jonizacijos skerspjūvio išraiška yra šitokia:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 \varepsilon)}{d\varepsilon} &= \int d\Omega \sum_{M_2, m} \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}m)}{d\Omega d\varepsilon} \\ &= \frac{4\pi^2 kC}{\varepsilon_1} \sum_{K, N} B^{Bjon}(K, 0, K, 0, 0, 0, 0) (-1)^{K-N} \left[ \frac{4\pi}{2K+1} \right]^{1/2} Y_{KN}(\theta_q, \phi_q) T_N^{*K}(\hat{J}_1). \end{aligned} \quad (185)$$

Sutapatinus koordinačių sistemos  $z$  ašį su perduoto judėjimo kiekio  $\mathbf{q}$  kryptimi, gaunama  $N = 0$  ir

$$\begin{aligned} &\frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \varepsilon)}{d\varepsilon} \\ &= \frac{4\pi^2 kC}{\varepsilon_1} \sum_K B^{Bjon}(K, 0, K, 0, 0, 0, 0) (-1)^{J_1 - M_1 + K} \left[ \frac{4\pi}{2J_1 + 1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K \\ M_1 & -M_1 & 0 \end{bmatrix} Y_{K0}^*(\theta, \phi) \\ &= \frac{4\pi^2 kC}{\varepsilon_1} \sum_K B^{Bjon}(K, 0, K, 0, 0, 0, 0) (-1)^{J_1 - M_1 + K} \left[ \frac{2K+1}{2J_1 + 1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K \\ M_1 & -M_1 & 0 \end{bmatrix} P_K(\cos \theta). \end{aligned} \quad (186)$$

Kampas  $\theta$  matuojamas nuo  $\mathbf{q}$  krypties.

Pagal apibrėžimą magnetinį dichroizmą galima užrašyti, pažymint  $\sigma(JM) = d\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \varepsilon)/d\varepsilon$ , šitai:

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{\sigma(JM) - \sigma(J-M)}{\sigma(JM) + \sigma(J-M)} \\ &= \frac{\sum_{K=nelyg} B^{Bjon}(K, 0, K, 0, 0, 0, 0) (-1)^{J_1 - M_1 + K} \sqrt{2K+1} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K \\ M_1 & -M_1 & 0 \end{bmatrix} P_K(\cos \theta)}{\sum_{K=lyg} B^{Bjon}(K, 0, K, 0, 0, 0, 0) (-1)^{J_1 - M_1 + K} \sqrt{2K+1} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K \\ M_1 & -M_1 & 0 \end{bmatrix} P_K(\cos \theta)}. \end{aligned} \quad (187)$$

Išraiška (187) supaprastėja, kaip buvo ir fotojonizacijos atveju, jeigu atomai bus poliarizuoti išilgai  $z$  ašies, t.y. perduoto judėjimo kiekio kryptimi. Tuomet  $P_K(0) = 1$ , ir

$$\Delta = \frac{\sum_{K=nelyg} B^{Bjon}(K, 0, K, 0, 0, 0, 0) (-1)^K \sqrt{2K+1} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K \\ J_1 & -J_1 & 0 \end{bmatrix}}{\sum_{K=lyg} B^{Bjon}(K, 0, K, 0, 0, 0, 0) \sqrt{2K+1} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K \\ J_1 & -J_1 & 0 \end{bmatrix}}. \quad (188)$$

Galime surasti magnetinio dichroizmo išraiškas atskiroms  $J_1$  vertėms. Kai  $J_1 = 1/2$ ,

$$\Delta = \frac{B^{Bjon}(1, 0, 1, 0, 0, 0, 0) \sqrt{3} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & 1 \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{bmatrix}}{B^{Bjon}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) 2^{-1/2}} = \frac{\sqrt{3} B^{Bjon}(1, 0, 1, 0, 0, 0, 0)}{B^{Bjon}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)}. \quad (189)$$

$J = 1$  atveju

$$\Delta = \frac{-3B^{Bjon}(1, 0, 1, 0, 0, 0, 0)}{\sqrt{2}B^{Bjon}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) + \sqrt{5}B^{Bjon}(2, 0, 2, 0, 0, 0, 0)}. \quad (190)$$

#### 4.6.5 Elektrono po poliarizuoto atomo jonizacijos kampinis pasiskirstymas.

Diferencialinį skerspjūvį, aprašantį elektrono kampinį pasiskirstymą po poliarizuoto atomo jonizacijos greitaisiais elektronais, galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p})}{d\varepsilon d\Omega} &= \sum_{M_2, m} \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p} m)}{d\Omega d\varepsilon} \\ &= \frac{\pi k C}{\varepsilon_1} \sum_{K_1, K_q, K_\lambda} B^{Bjon}(K_1, 0, K_q, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_\lambda) \sum_{N_\lambda, N_1, N_q} 4\pi \begin{bmatrix} K_1 & K_q & k_\lambda \\ N_1 & N_q & N_\lambda \end{bmatrix} \\ &\quad \times Y_{K_\lambda, N_\lambda}(\hat{p}) Y_{K_q, N_q}(\hat{q}) T_{N_1}^{*K+1}(\hat{J}_1). \end{aligned} \quad (191)$$

Parinkus laboratorinės koordinatų sistemos  $z$  ašį išilgai perduoto judėjimo kiekio  $\mathbf{q}$  krypties, iš (191) gaunama:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p})}{d\varepsilon d\Omega} &= \frac{4\pi^2 k C}{\varepsilon_1} \sum_{K_1, K_q, K_\lambda, N} \begin{bmatrix} K_1 & K_q & K_\lambda \\ N & 0 & N \end{bmatrix} Y_{K_\lambda, N}(\hat{p}) Y_{K_1, N}^*(\hat{J}_1) \\ &\quad \times \left[ \frac{2K_q + 1}{2J_1 + 1} \right]^{1/2} (-1)^{J_1 - M_1} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K_1 \\ M_1 & -M_1 & 0 \end{bmatrix} B^{Bjon}(K_1, 0, K_q, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_\lambda) \\ &= \frac{4\pi^2 k C}{\varepsilon_1} \sum_{K_\lambda, N} \beta_{K_\lambda, N}(\hat{J}_1) \left[ \frac{4\pi}{2K_\lambda + 1} \right]^{1/2} Y_{K_\lambda, N}(\hat{p}), \end{aligned} \quad (192)$$

kur

$$\begin{aligned} \beta_{K_\lambda, N}(\hat{J}_1) &= \sum_{K_1, K_q} B^{Bjon}(K_1, 0, K_q, K_\lambda, 0, K_\lambda, K_\lambda) \left[ \frac{4\pi(2K_\lambda + 1)(2K_q + 1)}{2J_1 + 1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} K_1 & K_q & K_\lambda \\ N & 0 & N \end{bmatrix} \\ &\quad \times (-1)^{J_1 - M_1} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K_1 \\ M_1 & -M_1 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_1, N}^*(\hat{J}_1) \end{aligned} \quad (193)$$

yra atplėštojo elektrono kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrai, kuriuose atsizvelgta į atomo poliarizaciją.



#### 4.6.6 Jonizuoto atomo rikiavimas.

Jonizuoto atomo rikiavimas aprašo jo poliarizaciją ir gali būti išmatuotas, tiriant antrosios stadijos procesus, kurie seka po atomo jonizacijos. Dažnai jonizuoto atomo rikiavimas stipriai keičia fluorescencijos ar Auger elektronų kampinius pasiskirstymus ir poliarizacijos parametrus. Užrašysime (174) diferencialio skerspjūvio išraišką jonizuotos būsenos skleidinio multipoliais pavidalu. Pagal (2.1.2) skirsnio metodiką (174) multipolinio skleidimo atskirą narį galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma_{K_2N_2}(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}m)}{d\Omega d\varepsilon} &= \frac{\pi kC}{\varepsilon_1} \sum_{K_1, K_q, K_\lambda, K_s, K_j, K} B^{Bjon}(K_1, K_2, K_q, K_\lambda, K_s, K_j, K) \\ &\times \sqrt{2K_2 + 1} \sum_{N_1, N_q, N_\lambda, N_s, N_j, N} \begin{bmatrix} K_1 & K_q & K \\ N_1 & N_q & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_\lambda & K_s & K_j \\ N_\lambda & N_s & N_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_2 & K_j & K \\ N_2 & N_j & N \end{bmatrix} \\ &\times \sqrt{4\pi} Y_{K_\lambda N_\lambda}(\hat{p}) \sqrt{4\pi} Y_{K_q N_q}(\hat{q}) T_{N_1}^{K_1}(\hat{J}_1) T_{N_s}^{K_s}(\hat{s}). \end{aligned} \quad (194)$$

Iš (194) surasime nepoliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais diferencialinio skerspjūvio, aprašančio jonizuoto atomo rikiavimą, išraišką:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 \hat{q} \rightarrow \alpha_1 J_2 \varepsilon)}{d\varepsilon} &= \sum_{K_2, N_2} \frac{1}{2J_1 + 1} \int d\Omega \sum_{M_1, m} \frac{d^2\sigma_{K_2N_2}(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}m)}{d\Omega d\varepsilon} \\ &= \frac{4\pi^2 kC}{\varepsilon_1 (2J_1 + 1)} \sum_{K_2, N_2} \sqrt{2K_2 + 1} B^{Bjon}(0, K_2, K_2, 0, 0, 0, K_2) \sqrt{4\pi} Y_{K_2 N_2}(\hat{q}). \end{aligned} \quad (195)$$

Koordinatių sistemos  $z$  ašį nukreipiame  $\mathbf{q}$  kryptimi. Tuomet

$$\frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_1 J_2 \varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{4\pi^2 kC}{\varepsilon_1 (2J_1 + 1)} \sum_{K_2} (2K_2 + 1) B^{Bjon}(0, K_2, K_2, 0, 0, 0, K_2). \quad (196)$$

Apžiūrėjus  $B^{Bjon}$  išraišką (172) matyti, kad  $K_2$  gali įgyti tiksliai lygines reikšmes. Rikiavimą aprašo  $K_2 = 2$  ir aukštesni nariai. Todėl (196) galima perrašyti:

$$\frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_1 J_2 \varepsilon)}{d\varepsilon} = \sigma_0(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_1 J_2 \varepsilon) \left[ 1 + \sum_{K_2 > 0, lygin} A_{K_2} \right], \quad (197)$$

kur

$$A_{K_2} = \frac{(2K_2 + 1) B^{Bjon}(0, K_2, K_2, 0, 0, 0, K_2)}{B^{Bjon}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)}, \quad (198)$$

$$\sigma_0(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_1 J_2 \varepsilon) = \frac{4\pi^2 kC}{\varepsilon_1 (2J_1 + 1)} B^{Bjon}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0).$$

Panašiai išvedama ir jono po poliarizuoto atomo jonizacijos rikiavimo išraiška. Šiuo atveju diferencialinį skerspjūvį galima užrašyti šitaip:

$$\frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{q} \rightarrow \alpha_1 J_2 \varepsilon)}{d\varepsilon} = \sum_{K_2, N_2} \int d\Omega \sum_m \frac{d^2\sigma_{K_2N_2}(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}m)}{d\Omega d\varepsilon} = \frac{4\pi^2 kC}{\varepsilon_1}$$

$$\begin{aligned}
& \times \sum_{K_2, N_2, K_1, N_1, K_q, N_q} \sqrt{2K_2 + 1} B^{Bjon}(K_1, K_2, K_q, 0, 0, 0, K_2) \begin{bmatrix} K_1 & K_q & K_2 \\ N_1 & N_q & N_2 \end{bmatrix} \\
& \quad \times \sqrt{4\pi} Y_{K_q, N_q}(\hat{q}) T_{N_1}^{*K_1}(\hat{J}_1). \tag{199}
\end{aligned}$$

Ši išraiška supaprastėja, kai koordinatų sistemos  $z$  ašį nukreipiame  $\mathbf{q}$  kryptimi:

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_1 J_2 \varepsilon)}{d\varepsilon} &= \frac{4\pi^2 kC}{\varepsilon_1} \sum_{K_2, K_1, K_q, N} \sqrt{2K_2 + 1} B^{Bjon}(K_1, K_2, K_q, 0, 0, 0, K_2) \\
& \times \begin{bmatrix} K_1 & K_q & K_2 \\ N & 0 & N \end{bmatrix} \left[ \frac{(2K_q + 1)4\pi}{2J_1 + 1} \right]^{1/2} (-1)^{J_1 - M_1} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K_1 \\ M_1 & -M_1 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_1 N}^*(\hat{J}_1) \\
& = \frac{4\pi^2 kC}{\varepsilon_1} \sum_{K_2} A_{K_2}(\hat{J}_1), \tag{200}
\end{aligned}$$

kur

$$\begin{aligned}
A_{K_2}(\hat{J}_1) &= \sum_{K_1, K_q, N} B^{Bjon}(K_1, K_2, K_q, 0, 0, 0, K_2) (-1)^{J_1 - M_1} Y_{K_1 N}^*(\hat{J}_1) \\
& \times \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K_1 \\ M_1 & -M_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_1 & K_q & K_2 \\ N & 0 & N \end{bmatrix} \left[ \frac{(2K_1 + 1)(2K_q + 1)4\pi}{2J_1 + 1} \right]^{1/2} \tag{201}
\end{aligned}$$

yra jonizuoto atomo rikiavimo parametras, priklausantis nuo atomo poliarizacijos.

## 5 Elektronais ir fotonais sužadintų atomų spinduliuotė

### 5.1 Elektronais sužadintų atomų elektromagnetinė spinduliuotė.

Nagrinėsime dviejų stadijų procesą, kai atomas sužadinamas elektronais ir registruojama spinduliuotė, kuri dar vadinama fluorescencija. Kadangi elektronų pluoštelis pasižymi ašine simetrija, sužadintų atomų būseną būna išrikiuota. Dėl šio rikiavimo fluorescencijos spinduliuotė būna poliarizuota, ir ji išspinduliuojama asimetriškai.

Fluorescencijos spinduliuotės iš Li, Na, K, Rb ir Cs atomų poliarizaciją po  $np$  elektrono sužadinimo į  $(n+1)s^2$  lygmenį sutrikdytų bangų artinyje apskaičiavo Pantangiwar ir Sriwastava [147] 1987 metais. Theodosiou [146] ir Grum-Grzhimailo ir kt. [143] teoriškai tyrė tų pačių būsenų rikiavimą atitinkamai Na, K, Rb ir Cs ir Na atomams.

Nagrinėjamą procesą galima užrašyti šitaip:

$$A(\alpha_0 J_0 M_0) + e(\mathbf{p}_1 m_1) \rightarrow A^*(\alpha_1 J_1 M_1) + e(\mathbf{p}_2 m_2) \rightarrow A(\alpha_2 J_2 M_2) + e(\mathbf{p}_2 m_2) + h\nu(\hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_{01}). \quad (1)$$

Kadangi tarpinė sužadinto atomo būseną nematuojama, šio proceso diferencialinį skerspjūvį dviejų stadijų artinyje pagal 2.1.4 skirsnio metodiką galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_e d\Omega_f} = \\ & = \sum_{K_1 N_1} \frac{d\sigma_{K_1 N_1}^{ex}(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega_e} \frac{dW_{K_1 N_1}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_f}. \end{aligned} \quad (2)$$

Čia  $d\Omega_e$  ir  $d\Omega_f$  žymi atitinkamai išsklaidyto elektrono ir fluorescencijos fotono erdvinius kampus, o pati išraiška (2) yra dviejų stadijų proceso skerspjūvio skleidimas multipoliais pagal sužadinto atomo neregistruojamas tarpines būsenas. Atomo sužadinimo diferencialinio skerspjūvio multipolio  $d\sigma^{ex}/d\Omega_e$  išraiška yra (4.51) sutrikdytų bangų artinyje ir (4.86) – Borno artinyje, o fluorescencijos diferencialinės tikimybės atskiro multipolinio skleidimo narį aprašo (3.7) formulė. Kadangi (1) proceso diferencialinio skerspjūvio bendroji išraiška bus naudojama atskiriems poliarizacijos atvejams aprašyti, patogumo dėlei jas perrašome, suvienodindami žymėjimus:

$$\begin{aligned} & \frac{d\sigma_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega} \\ & = 4\pi C [2K_1 + 1]^{1/2} \sum_{\substack{K, K_0, K'_0, K_{\lambda 1}, K_{s1} \\ K'_1, K_{\lambda 2}, K_{s2}}} \mathcal{B}^{ex}(K_0, K'_0, K_1, K'_1, K_{\lambda 1}, K_{s1}, K_{\lambda 2}, K_{s2}, K) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \sum_{\substack{N_0, N'_0, N_{\lambda 1}, N_{s1} \\ N'_1, N_{\lambda 2}, N_{s2}, N}} \begin{bmatrix} K_{\lambda 1} & K_{s1} & K'_0 \\ N_{\lambda 1} & N_{s1} & N'_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_0 & K'_0 & K \\ N_0 & N'_0 & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_1 & K'_1 & K \\ N_1 & N'_1 & N \end{bmatrix} \\
& \times \begin{bmatrix} K_{\lambda 2} & K_{s2} & K'_1 \\ N_{\lambda 2} & N_{s2} & N'_1 \end{bmatrix} Y_{K_{\lambda 1} N_{\lambda 1}}^*(\hat{p}_1) Y_{K_{\lambda 2} N_{\lambda 2}}(\hat{p}_2) T_{N_0}^{*K_0}(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) T_{N_{s1}}^{*K_{s1}}(s, s, m_0 | \hat{s}) \\
& \times T_{N_{s2}}^{K_{s2}}(s, s, m_1 | \hat{s}) \tag{3}
\end{aligned}$$

sutrikdytų bangų artinyje ir

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma_{K_1 N_1}(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{q} \rightarrow \alpha_1 J_1)}{d\Omega_q} &= \frac{4k_2}{k_1 q^4} \sum_{K_0, K_t} \mathcal{B}^{exB}(K_0, K_t, K_1) \frac{1}{\sqrt{2K_1 + 1}} \\
& \sum_{N_0, N_t} \begin{bmatrix} K_0 & K_t & K_1 \\ N_0 & N_t & N_1 \end{bmatrix} T_{N_0}^{*K_0}(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) \sqrt{4\pi} Y_{K_t N_t}^*(\hat{q}) \tag{4}
\end{aligned}$$

Borno artinyje. Spontaninio radiacinio šuolio tkimybės multipolionio skleidinio atskiras narys yra:

$$\begin{aligned}
\frac{dW_{K_1 N_1}^r(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{e}_q \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_2} &= \frac{1}{2\pi} \sum_{K'_r, K_2, k_1, k'_1} \mathcal{A}(K_1, K'_r, K_2, k_1, k'_1) \\
& \times \sum_{N'_r, N_2} \begin{bmatrix} K_1 & K'_r & K_2 \\ N_1 & N'_r & N_2 \end{bmatrix} T_{N_2}^{K_2}(J_2, J_2, M_2 | \hat{J}_2) T_{N'_r}^{*K'_r}(k_1, k'_1, q | \hat{\mathbf{k}}_{01}). \tag{5}
\end{aligned}$$

Parametro  $\mathcal{B}^{ex}(K_0, K'_0, K_1, K'_1, K_{\lambda 1}, K_{s1}, K_{\lambda 2}, K_{s2}, K)$  yra (4.50), parametro  $\mathcal{B}^{exB}(K_0, K_t, K_1)$  – (4.89) o  $\mathcal{A}(K_1, K'_r, K_2, k_1, k'_1)$  – (3.8) išraiškos. Dviejų stadijų proceso (1) diferencialinio skerspjuvio (2) išraiška aprašo visų procese dalyvaujančių dalelių poliarizaciją ir reakcijos produktų kampinį pasiskirstymą. Ji yra labai bendra. Paprastai eksperimente dalis, o kartais ir visos dalelės būna nepoliarizuotos. Tiems atvejams aprašyti galima taikyti paprastesnes formules, kurias lengvai galima surasti iš bendrosios formulės.

### 5.1.1 Atskiri atvejai sutrikdytų bangų artinyje.

Pradžioje surasime pačio paprasčiausio proceso, t.y. fluorescencijos, išspinduliuotos po nepoliarizuoto atomo sužadavimo nepoliarizuotais elektronais, pilnutinę tikimybę, kai išsklaidyti elektronai bei fluorescencijos poliarizacija neregistruojami. Paprastai matuojamas fluorescencijos intensyvumas magiškuoju kampu ( $54^\circ 44'$ ). Šiuo atveju reikia (2) išraišką vidurkinti atomo ir žadinančio elektrono sukinio būsenų atžvilgiu, sumuoti pagal atomo galinės būsenos ir išsklaidyto elektrono sukinio projekcijas bei integruoti elektrono ir išspinduliuoto fotono kampais:

$$\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) = \frac{1}{2(2J_0 + 1)}$$

$$\begin{aligned}
& \times \int d\Omega_e \int d\Omega_f \sum_{M_0, M_2, q, m_1, m_2} \frac{d^2\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_e d\Omega_f} = \\
& = \frac{4\pi C}{2(2J_0 + 1)} \mathcal{B}^{ex}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \sum_k \frac{2}{2k + 1} \mathcal{A}(0, 0, 0, k, k) \\
& = \sigma^{ex}(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) W(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2), \tag{6}
\end{aligned}$$

kur  $\sigma^{ex}(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)$  – atomo sužadavimo elektronais pilnutinis skerspjūvis (4.52), o  $W(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)$  – radiacinio šuolio tarp  $\alpha_1 J_1$  ir  $\alpha_2 J_2$  lygmenų pilnutinė tikimybė (3.10).

Fluorescencijos spinduliuotės kampiniam pasiskirstymui dipoliniame artinyje ( $k_1 = k'_1 = 1$ ,  $q = \pm 1$ ) po nepoliarizuotų atomų sužadavimo nepoliarizuotais elektronais, kai išsklaidyto elektrono ir atomo galinė būsenos neregistruojamos, aprašyti gaunama šitokia diferencialinio skerspjūvio formulė:

$$\begin{aligned}
& \sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01}) = \frac{1}{2(2J_0 + 1)} \\
& \times \int d\Omega_e \sum_{M_0, M_2, q, m_1, m_2} \frac{d^2\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_e d\Omega_f} = \\
& = \frac{\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)}{4\pi} [1 + \beta P_2(\cos \theta)]. \tag{7}
\end{aligned}$$

Čia laboratorinės koordinatinių sistemos  $z$  ašis sutapatinta su žadinančio elektrono kryptimi, o spinduliuotės registracijos kampas  $\theta$  matuojamas nuo  $z$  ašies. (7) formulėje  $\beta$  yra fluorescencijos spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras

$$\beta = A_2 \alpha, \tag{8}$$

kur  $A_2$  – sužadinto atomo rikiavimo parametras (4.69), o  $\alpha$  apibrėžtas (3.21) formule.

Žinant asimetrijos parametą  $\beta$ , galima lengvai surasti ir fluorescencijos spinduliuotės poliarizaciją, kuri apibrėžiama (3.23)–(3.26) formulėmis.

Diferencialinio skerspjūvio, aprašančio elektrono ir fluorescencijos fotono kampines koreliacijas po nepoliarizuotų atomų sužadavimo nepoliarizuotais elektronais, formulei surasti reikia (2) išraišką vidurkinti atomo ir elektrono sukinio būsenų, sumuoti atomo galinės ir išsklaidyto elektrono sukinio būsenų bei fluorescencijos poliarizacijos atžvilgiu. Gauname, kad  $K_0 = K_{s1} = K_{s2} = K_2 = 0$ ,  $K_{\lambda_2} = K'_1$ ,  $K_{\lambda_1} = K'_0 = K$  ir  $K_1 = K'_r$ , ir užrašome šią išraišką:

$$\begin{aligned}
& \frac{\sigma(\alpha_0 J_0 \mathbf{p}_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_e d\Omega_f} = \frac{1}{2(2J_0 + 1)} \\
& \times \sum_{M_0, M_2, q, m_1, m_2} \frac{d^2\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_e d\Omega_f} = \frac{4C}{2J_0 + 1}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \sum_{K_1, K_{\lambda_1}, K_{\lambda_2}, K', k_1, k'_1} [2K_1 + 1]^{1/2} \mathcal{B}^{ex}(0, K_{\lambda_1}, K_1, K_{\lambda_2}, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_2}, 0, K_{\lambda_1}) \mathcal{A}(K_1, K_1, 0, k_1, k'_1) \\
& \times \left[ \frac{4\pi}{2k_1 + 1} \right]^{1/2} (-1)^{k_1-1} \begin{bmatrix} k_1 & k'_1 & K_1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \sum_{N_1, N_{\lambda_1}, N_{\lambda_2}, N'} \begin{bmatrix} K_1 & K' & K_{\lambda_1} \\ N_1 & N' & N_{\lambda_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_1 & K_{\lambda_2} & K_{\lambda_1} \\ N_1 & N_{\lambda_2} & N_{\lambda_1} \end{bmatrix} \\
& \times Y_{K_1 N_1}^*(\hat{k}_{01}) Y_{K_{\lambda_1} N_{\lambda_1}}^*(\hat{p}_1) Y_{K_{\lambda_2} N_{\lambda_2}}(\hat{p}_2). \tag{9}
\end{aligned}$$

Sutapatinus laboratorinės koordinacių sistemos  $z$  ašį su žadinančio elektrono kryptimi, gaunama, kad  $N_{\lambda_1} = 0$ , nes  $p_1$  kampai lygūs nuliui. Įrašius į (9)  $Y_{K_{\lambda_1} N_{\lambda_1}}(0, 0)$  išraišką ir apsiribojus dipoliniu artiniu, gaunama paprastesnė formulė:

$$\begin{aligned}
& \frac{d^2\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_e d\Omega_f} = \frac{4C}{(2J_0 + 1)[2\pi]^{1/2}} \sum_{K_1, K_{\lambda_1}, K_{\lambda_2}, K'} (2K_1 + 1) \\
& \times \mathcal{B}^{ex}(0, K_{\lambda_1}, K_1, K_{\lambda_2}, K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_2}, 0, K_{\lambda_1}) \mathcal{A}(K_1, K_1, 0, k_1, k'_1) \\
& \times \begin{bmatrix} 1 & 1 & K_1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \sum_{N_1} \begin{bmatrix} K_1 & K' & K_{\lambda_1} \\ N_1 & -N_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_1 & K_{\lambda_2} & K_{\lambda_1} \\ N_1 & -N_1 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_1 N_1}^*(\hat{k}_{01}) Y_{K_{\lambda_2} - N_1}(\hat{p}_2). \tag{10}
\end{aligned}$$

Fluorescencijos spinduliuotės magnetinis dichrozimas – tai spinduliavimo tikimybės priklausomybė nuo atomų poliarizacijos. Jos išraiška surandama (2) integruojant išsklaidytų elektronų kampų atžvilgiu, sumuojant atomo galinės būsenos ir išsklaidyto elektrono sukinio projekcijų atžvilgiu ir vidurkinant žadinančio elektrono sukinio būsenų atžvilgiu. Sutapatinus koordinacių sistemos  $z$  ašį su žadinančio elektrono judėjimo kryptimi gauname, kad  $K_{s_1} = K_{s_2} = K_2 = K'_1 = 0$ ,  $K_{\lambda_1} = K'_0$ ,  $K_1 = K = K'_r$ ,  $N_{\lambda_1} = 0$  ir

$$\begin{aligned}
& \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_f} \\
& = \frac{1}{2} \int d\Omega_e \int \sum_{M_2, m_1, m_2} \frac{d^2\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \hat{e}_q \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_e d\Omega_f} \\
& = 2\pi \sum_{K_{\lambda_1}, K'_0, K_1, N_0} \begin{bmatrix} K_0 & K_{\lambda_1} & K_1 \\ N_0 & 0 & N_0 \end{bmatrix} \sqrt{2K_{\lambda_1} + 1} \mathcal{B}^{ex}(K_0, K_{\lambda_1}, K_1, 0, K_{\lambda_1}, 0, 0, 0, K_{\lambda_1}) \\
& \times T_{N_0}^{*K_0}(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) \left[ \frac{1}{2\pi} (-1)^{K_1 - N_1} \frac{1}{[2K_1 + 1]^{1/2}} \sum_{k, k'} \mathcal{A}(K_1, K_1, 0, k, k') T_{N_1}^{*K_1}(k, k', q | \hat{\mathbf{k}}_0) \right]. \tag{11}
\end{aligned}$$

Šią išraišką suintegravus visais kampais, spinduliuotės iš atomų, sužadintų elektronais, tikimybė atrodo šitaip:

$$\begin{aligned}
& \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) = \int d\Omega_f \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2)}{d\Omega_f} \\
& = W(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) (2\pi C) \sum_{K_0} (-1)^{J_0 - M_0 + K_0} \left[ \frac{2K_0 + 1}{2J_0 + 1} \right]^{1/2} \mathcal{B}^{ex}(K_0, K_0, K_0, 0, K_0, 0, 0, 0, K_0)
\end{aligned}$$

$$\times \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K_0 \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} P_{K_0}(\cos \theta_A) \quad (12)$$

Čia  $K_0 = K_{\lambda_1}$ . Matome, kad dichroizmą lemia pirmasis procesas. Kampas  $\theta_A$  matuojamas nuo žadinančio elektrono judėjimo krypties.

### 5.1.2 Atskiri atvejai Borno artinyje.

Proceso (1) pilnutinio skerspjūvio Borno artinyje išraiškai surasti reikia (2) formulę, į kurią įrašomos (4) ir (5) išraiškos, vidurkinti atomo pradinės ir sumuoti galinės būsenų projekcijų  $M_0$  ir  $M_2$  atžvilgiu, integruoti išsklaidyto elektrono ir fluorescencijos spinduliuotės kampų atžvilgiu:

$$\begin{aligned} \sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) &= \frac{1}{2J_0 + 1} \int d\Omega_q \int d\Omega_2 \sum_{M_0, M_2} \frac{d^2 \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_q d\Omega_2} \\ &= \sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) W(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2). \end{aligned} \quad (13)$$

Čia  $\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1)$  – pilnutinis atomų sužadimo elektronais skerspjūvis (4.97), o  $W(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)$  – sužadinto atomo spontaninio šuolio pilnutinė tikimybė (3.10).

Fluorescencijos spinduliuotės iš nepoliarizuotais elektronais sužadintų nepoliarizuotų atomų, kai išsklaidyti elektronai ir atomai galinėje būsenoje neregistruojami, kampinio pasiskirstymo asimetrija aprašančią formulę galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_2} &= \frac{1}{2J_0 + 1} \int d\Omega_q \int \sum_{M_0, M_2} \frac{d^2 \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_q d\Omega_2} \\ &= \frac{\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)}{4\pi} [1 + \beta P_2(\cos \theta)], \end{aligned} \quad (14)$$

kur

$$\beta = A_2 \alpha. \quad (15)$$

Čia  $A_2$  – sužadinto atomo rikiavimo parametras (4.107), o  $\alpha$  išraiška priklauso nuo fluorescencijos spinduliuotės poliarizacijos. Kai spinduliuotė poliarizuota tiesiškai,  $\alpha$  yra (3.20), o nepoliarizuotos ir apskritimiškai poliarizuotos spinduliuotės atveju – (3.21) formulės.

Jeigu atomo pradinė būsena poliarizuota, tuomet fluorescencijos kampinį pasiskirstymą aprašantis skerspjūvis įgyja šitokią išraišką:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_2} &= \int d\Omega_q \int \sum_{M_2} \frac{d^2 \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{q} \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_q d\Omega_2} \\ &= \frac{4\pi}{\varepsilon_0} \sum_{K, N, k_1, k'_1} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{dq}{q^3} \mathcal{B}^{exB}(K, 0, K) T_N^K(J_0, J_0, M_0 | \hat{J}_0) \frac{1}{2\pi} \mathcal{A}(K, K, 0, k_1, k'_1) T_{-N}^K(k_1, k'_1, \lambda | \hat{\mathbf{k}}_{01}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2}{\varepsilon_0} \sum_{K,N,k_1,k'_1} B^{exB}(K) \mathcal{A}(K, K, 0, k_1, k'_1) (-1)^{J_0 - M_0 + k'_1 - \lambda} \frac{4\pi}{[(2J_0 + 1)(2k_1 + 1)]^{1/2}} \\
&\quad \times \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K \\ M_0 & -M_0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_1 & k'_1 & K \\ \lambda & -\lambda & 0 \end{bmatrix} Y_{KN}(\theta_A, \phi_A) Y_{K-N}(\theta_2, \phi_2). \quad (16)
\end{aligned}$$

Atomo pilnutinį judėjimo kiekio momentą nukreipus sklaidomojo elektrono kryptimi ( $\theta_A = \phi_A = 0$ ,  $N = 0$ ,  $M_0 = J_0$ ), (16) pereina į šitokią formulę:

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{k}_{01})}{d\Omega_2} &= \frac{2\pi}{\varepsilon_0} \sum_{K,k_1,k'_1} B^{exB}(K) \mathcal{A}(K, K, 0, k_1, k'_1) (-1)^{k'_1 - \lambda} \\
&\quad \times \frac{2K + 1}{[(2J_0 + 1)(2k_1 + 1)]^{1/2}} \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & K \\ J_0 & -J_0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_1 & k'_1 & K \\ \lambda & -\lambda & 0 \end{bmatrix} P_K(\cos \theta_2). \quad (17)
\end{aligned}$$

Užrašysime fluorescencijos spinduliuotės dipoliniame artinyje magnetinio dichroizmo laipsnio išraišką:

$$\Delta = \frac{\Delta_1}{\Delta_2}, \quad (18)$$

kur

$$\Delta_1 = 3B^{exB}(1) \mathcal{A}(1, 1, 0, 1, 1) \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & 1 \\ J_0 & -J_0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} P_1(\cos \theta_2), \quad (19)$$

$$\begin{aligned}
\Delta_2 &= 3B^{exB}(0) \mathcal{A}(0, 0, 0, 1, 1) \frac{1}{[3(2J_0 + 1)]^{1/2}} \\
&\quad + 5B^{exB}(2) \mathcal{A}(2, 2, 0, 1, 1) \begin{bmatrix} J_0 & J_0 & 2 \\ J_0 & -J_0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} P_2(\cos \theta_2). \quad (20)
\end{aligned}$$

Matome, kad fluorescencijos spinduliuotės dipoliniame artinyje kampinio pasiskirstymo ir magnetinio dichroizmo atveju, iš visų sužadinto atomo tarpinės būsenos multipolių duoda indėlių tiksliai  $K = 0, 1, 2$ . Aukštesni multipoliai nepasireiškia.

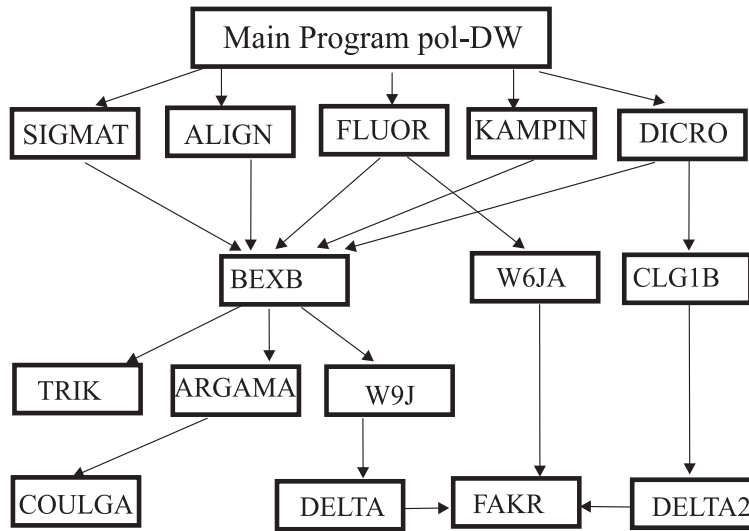
### 5.1.3 Programos ir taikymo pavyzdžiai.

5.1.1 ir 5.1.2 skyreliuose aprašytus parametrus skaičiuoja programos, kurių blokinės schemas pavaizduotos 39 ir 40 pav. Sutrikdytų bangų artiniui skirta 39 pav., o Borno – 40 pav. pavaizduota programa. Kadangi paprogramių pavadinimai ir paskirtis daugeliu atvejų sutampa, abi programas aptarsime kartu. Ankstesniuose skyriuose aprašytų paprogramių neaiškinsime.

Paprogramė SIGMAT skaičiuoja pilnutinį sužadavimo skerspįvį pagal formules (4.52) ir (4.97) atitinkamai sutrikdytų bangų ir Borno artiniuose.

Paprogramė ALIGN skaičiuoja sužadinto atomo rikiavimo parametrus  $A_K$  pagal formules (4.69) ir (4.107) atitinkamai sutrikdytų bangų ir Borno artiniuose.





39 pav. Poliarizacijos parametrų skaičiavimo sutrikdytų bangų artinyje programos blokinė schema

Paprogramė FLUOR skaičiuoja fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrus pagal formules (8) ir (15) atitinkamai sutrikdytų bangų ir Borno artiniuose.

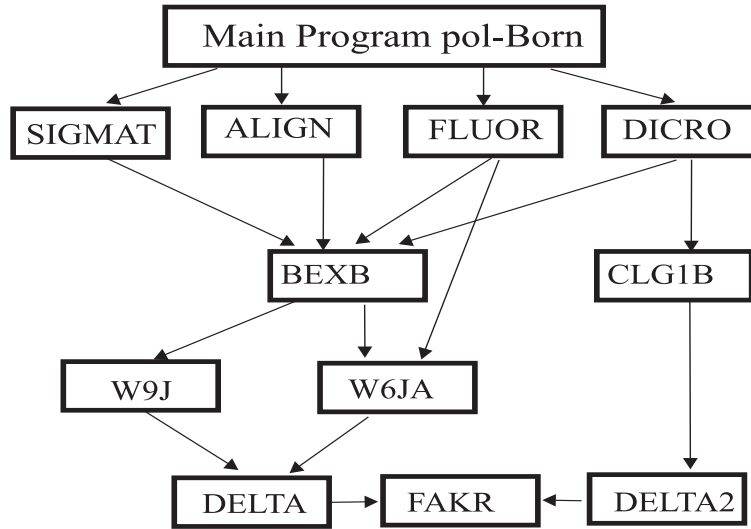
Paprogramė KAMPIN skaičiuoja išsklaidyto elektrono kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrus pagal formules (4.59) sutrikdytų bangų artinyje.

Paprogramė DICRO skaičiuoja poliarizuotų atomų sužadavimo nepoliarizuotais elektronais pilnutinio skerspjuvio magnetinio dichroizmo laipsnį pagal formules (4.18) ir (4.100) atitinkamai sutrikdytų bangų ir Borno artiniuose.

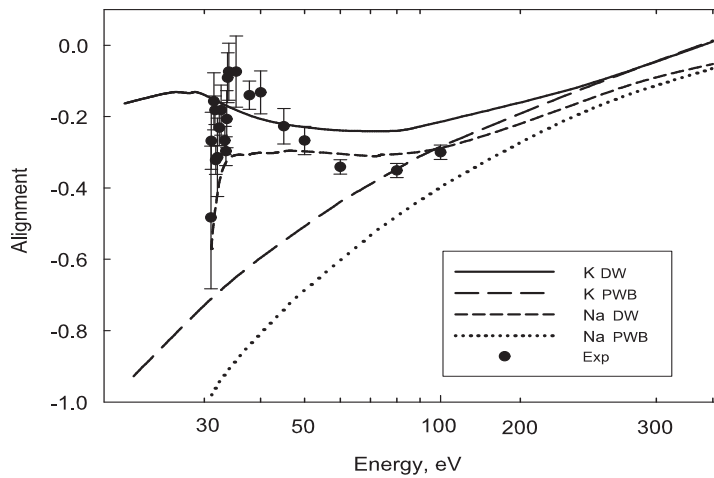
Paprogramė BEXB skaičiuoja dydžius  $\mathcal{B}^{ex}$  ir  $\mathcal{B}^{exB}$  pagal formules (4.50) ir (4.89) atitinkamai sutrikdytų bangų ir Borno artiniuose.

Paprogramės ARGAMA ir COULGA skaičiuoja sklaidos kuloninę fazę (2.49), o TRIK nustato, ar galioja trikampio sąlyga.

Šios programos panaudotos H šuolio  $1s \rightarrow 2p \ ^2P_{3/2}$ , Na šuolio  $2p^6 3s \ ^2S_{1/2} \rightarrow 2p^5 3s^2 \ ^2P_{3/2}$  ir K šuolio  $3p^6 4s \ ^2S_{1/2} \rightarrow 3p^5 4s^2 \ ^2P_{3/2}$  rikiavimo ir fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametrams apskaičiuoti. Jų priklausomybė nuo žadinančio elektrono energijos pavaizduota 41-44 pav.



40 pav. Poliarizacijos parametų skaičiavimo Borno artinyje programos blokinė schema



41 pav. Sužadintų Na į  $2p^5 3s^2 \ ^2P_{3/2}$  ir K į  $3p^5 4s^2 \ ^2P_{3/2}$  būseną rikiavimo parametras, apskaičiuotas sutrikdytų bangų ir Borno artiniuose. Taškais pažymėtos experimentinės vertės, paimtos iš [143] darbo.

## 5.2 Autojonizacijos ir Auger elektronai iš elektronais sužadintų atomų

Dviejų stadijų artinyje Auger elektronų išspinduliavimo propesą po atomų sužadavimo elektronais galima užrašyti šitaip:

$$A(\alpha_0 J_0 M_0) + e^-(\mathbf{p}_0, m_0) \rightarrow A(\alpha_1 J_1 M_1) + e^-(\mathbf{p}_1, m_1) \rightarrow A^+(\alpha_2 J_2 M_2) + e^-(\mathbf{p}_A, m_A) + e^-(\mathbf{p}_2, m_2). \quad (21)$$

Čia  $\mathbf{p}_0, m_0$  ir  $\mathbf{p}_1, m_1$  yra žadinančio ir išsklaidyto elektrono judėjimo kiekiai ir jų sukinių projekcijos. Atitinkami Auger elektrono parametrai pažymėti  $A$  raide.

Kadangi sužadinto atomo pilnutinio judėjimo kiekio momento projekcija nematuojams, (21) proceso skerspjūvį dviejų stadijų artinyje pagal 2.1.4 skirsnio metodiką galima užrašyti tarpinės būsenos skleidinio multipoliais pavidalu:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_A m_A)}{d\Omega_e d\Omega_A} = \\ & = \sum_{K_1 N_1} \frac{d\sigma_{K_1 N_1}^{ex}(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\Omega_e} \frac{dW_{K_1 N_1}^A(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_A)}{d\Omega_A}. \end{aligned} \quad (22)$$

Čia pirmasis narys aprašo atomo sužadimą elektronais. Jo išraiška priklauso nuo to, ar bus naudojamas Borno (4.86), ar iškraipytų bangų artinys (4.51). Antrasis narys aprašo Auger ar autojonizacijos elektronų išspinduliavimo tikimybę, užrašomą (3.52) ir (3.3.2.1) formulėmis.

(21) formulė yra bendra ir aprašo dalelių poliarizacijos, kampinio pasiskirstymo bei kampinės koreliacijos tarp išsklaidyto ir Auger elektronų atvejį. Iš jos galima išvesti daug formulių, tinkančių paprasteniems arvejams. Pats paprasčiausias atvejis yra nepoliarizuoto atomo sužadimas nepoliarizuotais elektronais, kai išsklaidytas ir Auger elektronai neregistruojami. Pilnutinė tokio proceso tikimybė yra:

$$\begin{aligned} & \sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) = \frac{1}{2(2J_0 + 1)} \\ & \times \int d\Omega_e \int d\Omega_A \sum_{M_0, M_2, m_1, m_2, m_A} \frac{d^2 \sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_A m_A)}{d\Omega_e d\Omega_A} = \\ & = \frac{4\pi C}{2(2J_0 + 1)} \mathcal{B}^{ex}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) 4\pi \mathcal{A}^A(0, 0, 0, 0, 0) \\ & = \sigma^{ex}(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1) W^A(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2), \end{aligned} \quad (23)$$

kur  $W^A(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)$  yra autojoziacijos tikimybė. Įrašę  $\mathcal{A}^A(0, 0, 0, 0, 0)$  išraišką (3.52), gauname gerai pažįstamą autojonizacijos tikimybės formulę:

$$W^A(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) = 2\pi \sum_{\lambda_1, j_1} |\langle \alpha_2 J_2 || H || \alpha_1 J_1 \rangle|^2. \quad (24)$$

Auger elektronų iš sužadintų elektronais nepoliarizuotų atomų kampinį pasiskirstymą iškraipytų bangų artinyje aprašo šitokia formulė:

$$\begin{aligned}
& \frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_A)}{d\Omega_A} \\
&= \frac{1}{2(2J_0 + 1)} \sum_{M_0, M_2, m_1, m_2, m_A} \int d\Omega_e \frac{d^2\sigma(\alpha_0 J_0 M_0 \mathbf{p}_1 m_1 \rightarrow \alpha_1 J_1 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \mathbf{p}_A m_A)}{d\Omega_e d\Omega_A} \\
&= \frac{(4\pi)^2}{2(2J_0 + 1)\varepsilon_1} \sum_{K, N} \mathcal{B}^{ex}(0, K, K, 0, K, 0, 0, 0, K) \mathcal{A}^a(K, 0, K, 0, K) Y_{KN}^*(\hat{p}_1) Y_{KN}(\hat{p}_A). \quad (25)
\end{aligned}$$

Kai Auger elektrono kampas matuojamas nuo žadinančio elektrono krypties, Auger elektronų iš sužadintų elektronais nepoliarizuotų atomų kampinį pasiskirstymą aprašanti skerpjūvį galima užrašyti šitokiu pavidalu:

$$\frac{d\sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_A)}{d\Omega_A} = \sigma(\alpha_0 J_0 \rightarrow \alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) \left[ 1 + \sum_{K>0} \beta_K P_K(\cos \theta_a) \right], \quad (26)$$

kur

$$\beta_K = A_K \alpha_K^A. \quad (27)$$

Čia

$$A_K = \frac{(2K + 1) \mathcal{B}^{ex}(0, K, K, 0, K, 0, 0, 0, K)}{\mathcal{B}^{ex}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)} \quad (28)$$

yra nepoliarizuotais elektronais sužadinto nepoliarizuoto atomo rikiavimo parametras, o

$$\alpha_K^A = \frac{(2K + 1) \mathcal{A}^a(K, 0, K, 0, K)}{\mathcal{A}^a(0, 0, 0, 0, 0)} \quad (29)$$

vadinamas Auger elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametru.

### 5.3 Rezonansinė fotonų sklaida

Atomai fotonus gali sklaidyti tampriai ir netampriai. Pirmuoju atveju turime Relėjaus, o antruoju – Komptono ir rezonansinę fotonų sklaidą [174]. Relėjau ir komptono pilnutinius ir diferencialinius sklaidos skerspjuvius įvairiems atomams ir jonams taip pat skaičiavo Kupliauskienė ir kt. [175, 176]. Kai fotono energija artima energijų skirtumui tarp atomo kokių nors diskretinių būsenų, atomas sugeria fotoną ir pereina į sužadintą būseną. Kadangi jo naujoji būsena nėra stabili, po kurio laiko, jis pereina į žemesnę būseną, išspinduliuodamas ilgesnio ar trumpesnio, jei atomo pradinė būsena buvo sužadinta, bangos ilgio fotoną. Pastarasis procesas vadinamas rezonansine nekoherentine sklaida.

Polarizacijos pasireiškima, tiriant gama spinduliuotės pernašą medžiagoje, tyrė Fernadez ir kt. [177]. Dalinai poliarizuotos šviesos sklaidą orientuotais ir išrikiuotais atomais tyrė Agre [178, 179], naudodamas tankio matricos formalizimą. Khoperskii ir kt. [180] nagrinėjo, kaip pasikeičia nepoliarizuotais atomais nekoherentiškai išsklaidytos nepoliarizuotos Rentgeno spinduliuotės diferencialinis skerspjūvis, kai atsižvelgiama į Auger elektronų išspinduliavimo galimybę.

Rezonansinės fotonų sklaidos atomais procesą galima užrašyti šitaip:

$$h\nu(\hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_1) + A(\alpha_1 J_1 M_1) \rightarrow A(\alpha_2 J_2) \rightarrow A(\alpha_3 J_3 M_3) + h\nu(\hat{\epsilon}_{q'} \mathbf{k}_2). \quad (30)$$

Šį procesą nagrinėsime dviejų stadijų artinyje. Pagal 2.1.4 skirsnio metodiką (30) proceso diferencialinio skerspjūvio išraišką galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned} & \frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_{q'} \mathbf{k}_2)}{d\Omega} \\ &= \sum_{K_2, N_2} W_{K_2, N_2}(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) \frac{dW_{K_2, N_2}(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_{q'} \mathbf{k}_2)}{d\Omega}. \end{aligned} \quad (31)$$

Pirmojo (31) nario  $W_{K_2, N_2}(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)$  išraiška yra (2.27), o antrojo nario – (3.7). Tai – pati bendriausia formulė, aprašanti atvejį, kai atomas ir fotonas pradinėje būsenoje yra poliarizuoti, o detektorius jautrus atomo ir fotono galinėje būsenoje poliarizacijai. Labai dažnai atomai būna nepoliarizuoti, o detektoriai nejautrūs atomo ar fotono poliarizacijai. Tokiais atvejais patogiau naudoti formules, aprašančias konkretaus eksperimento sąlygas. Surasime paprastesnes išraiškas atskiriems poliarizacijos atvejams. Formuliu išvedimui palengvinti ir žymėjimams suvienodinti perrašysime (2.27) ir (3.7) formules:

$$\begin{aligned} W_{K_2 N_2}(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2) &= 2\pi^2 \sum_{K_1, K_r, k, k'} \sqrt{2K_2 + 1} \mathcal{B}^r(K_1, K_r, K_2, k, k') \\ &\times \sum_{N_1, N_r, q} \begin{bmatrix} K_1 & K_r & K_2 \\ N_1 & N_r & N_2 \end{bmatrix} T_{N_1}^{*K_1}(J_1, J_1, M_1 | \hat{J}_1) T_{N_r}^{*K_r}(k, k', q | \hat{k}_0), \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^r(K_1, K_r, K_2, k, k') &= (\alpha_2 J_2 || Q^{(k)} || \alpha_1 J_1) (\alpha_2 J_2 || Q^{(k')} || \alpha_1 J_1)^* \begin{Bmatrix} J_1 & K_1 & J_1 \\ k & K_r & k' \\ J_2 & K_2 & J_2 \end{Bmatrix} \\ &[(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)(2k + 1)(2K_2 + 1)]^{1/2}. \end{aligned} \quad (33)$$

$$\begin{aligned} \frac{dW_{K_2 N_2}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega} &= \frac{1}{2\pi} \sum_{K'_r, K_3, k_2, k'_2} \mathcal{A}(K_2, K'_r, K_3, k_2, k'_2) \\ &\times \sum_{N'_r, N_3} \begin{bmatrix} K_2 & K'_r & K_3 \\ N_2 & N'_r & N_3 \end{bmatrix} T_{N_3}^{K_3}(J_3, J_3, M_3 | \hat{J}_3) T_{N'_r}^{*K'_r}(k_2, k'_2, q_2 | \hat{\mathbf{k}}_{02}), \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(K_2, K'_r, K_3, k_1, k'_2) &= (\alpha_3 J_3 || Q^{(k_2)} || \alpha_2 J_2) (\alpha_3 J_3 || Q^{(k'_2)} || \alpha_2 J_2)^* \\ &\times \left[ \frac{(2K_2 + 1)(2J_3 + 1)(2k_2 + 1)}{(2J_2 + 1)(2K_3 + 1)} \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} J_2 & K_2 & J_2 \\ k_2 & K'_r & k'_2 \\ J_3 & K_3 & J_3 \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (35)$$

Reikia atkreipti dėmesį, kad fotono energija submatricinio elemento  $(\alpha' J' || Q^{(k)} || \alpha J)$  išraiškoje sugerties atveju yra  $E^{k-1/2}$ , o spontaninės emisijos –  $E^{k+1/2}$ .

Nepolarizuotų fotonų rezonansinės sklaidos nepolarizuotais atomais, kai detektorius neįtraus išsklaidytų fotonų poliarizacijai, skerspjūvio išraiška yra:

$$\begin{aligned} \sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3) &= \frac{1}{2J_1 + 1} \sum_{M_1, M_3, q, q'} \int d\Omega \frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_{q'} \mathbf{k}_2)}{d\Omega} \\ &= \frac{2\pi^2}{2J_1 + 1} \sum_k \frac{1}{2k + 1} \mathcal{B}^r(0, 0, 0, k, k) \sum_{k_2} \frac{2}{2k_2 + 1} \mathcal{A}^r(0, 0, 0, k_2, k_2) \\ &= W^{abs}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) \cdot W^{em}(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3). \end{aligned} \quad (36)$$

čia  $W^{abs}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)$  žymi absorbcijos, o  $W^{em}(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3)$  – spontaninės emisijos tikimybes.

Rezonansiškai išsklaidytos spinduliuotės nepolarizuotais atomais kampinių pasiskirstymą aprašanti skerspjūvio formulė gaunama sumuojant (31) atomo galinės ir vidurkinat pradinės būsenų atžvilgiu:

$$\frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\epsilon}_{q'} \mathbf{k}_2)}{d\Omega} = \frac{1}{2J_1 + 1} \sum_{M_1, M_3} \frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_{q'} \mathbf{k}_2)}{d\Omega}. \quad (37)$$

Sumavimo rezultatas yra  $K_1 = N_1 = K_3 = N_3 = 0$ . Įrašome šias reikšmes į atskirus (31) narius ir gauname išraiškas:

$$\begin{aligned} W_{K_2 N_2}(\alpha_1 J_1 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2) &= \frac{2\pi^2}{2J_1 + 1} \sum_{K_r, N_r, k, k'} \mathcal{B}^r(0, K_r, K_2, k, k') [2K_2 + 1]^{1/2} \\ &\times \left[ \frac{4\pi}{2k + 1} \right]^{1/2} (-1)^{k'-1} \begin{bmatrix} k & k' & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} Y_{K_r N_r}(\theta_0, \phi_0) \delta(K_2, K_r) \delta(N_2, N_r), \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \frac{dW_{K_2 N_2}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\epsilon}_{q_2} \mathbf{k}_{02})}{d\Omega} &= \frac{1}{2\pi} \sum_{K'_r, N'_r, k_2, k'_2} \mathcal{A}(K_2, K'_r, 0, k_2, k'_2) (-1)^{k'_2-1+K_2-N_2} \\ &\times \left[ \frac{4\pi}{(2K_2 + 1)(2k_2 + 1)} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} k_2 & k_2 & K_r \\ q' & -q' & 0 \end{bmatrix} Y_{K'_r N'_r}(\theta, \phi) \delta(K_2, K'_r) \delta(N_2, N'_r). \end{aligned} \quad (39)$$

Matome, kad  $K_r = K_2 = K'_r$  ir  $N_r = N_2 = -N'_r$ . Parinę laboratorinę  $z$  ašį, sutampančią su sklaidomos spinduliuotės kryptimi ( $\theta_0 = \phi_0 = 0$ ), galime užrašyti galutinę rezonansinės sklaidos skerspjūvio išraišką:

$$\frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 \hat{\epsilon}_q \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\epsilon}_{q'} \mathbf{k}_2)}{d\Omega}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{K_r} \left[ \frac{2\pi^2}{2J_1 + 1} \sum_{k,k'} \left[ \frac{2K_r + 1}{2k + 1} \right]^{1/2} B^r(0, K_r, K_r, k, k') (-1)^{k'-q} \begin{bmatrix} k & k' & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \right] \\
&\times \left[ \sum_{k_2, k'_2} \frac{1}{2\pi\sqrt{2k_2 + 1}} \mathcal{A}(K_r, K_r, 0, k_2, k'_2) (-1)^{k'_2 - q' + K_r} \begin{bmatrix} k_2 & k'_2 & K_r \\ q' & -q' & 0 \end{bmatrix} \right] P_{K_r} \cos(\theta) \\
&= \frac{\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3)}{4\pi} \left[ 1 + \sum_{K_r > 0} \beta_{K_r} P_{K_r} \cos(\theta) \right]. \tag{40}
\end{aligned}$$

Čia

$$\beta_K = A_K \alpha_K, \tag{41}$$

kur

$$A_K = \frac{\sum_{k,k'} \left[ \frac{2K+1}{2k+1} \right]^{1/2} \mathcal{B}^r(0, K, K, k, k') (-1)^{k'-q} \begin{bmatrix} k & k' & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix}}{\sum_k (-1)^{k-q} \frac{1}{2k+1} \mathcal{B}^r(0, 0, 0, k, k)}, \tag{42}$$

aprašo spinduliuote sužadintų atomų poliarizaciją. Kai  $K$  yra nelyginis, turime orientaciją, o kai  $K$  yra lyginis, – rikiavimą. Antrasis parametras

$$\alpha_K = \frac{\sum_{k_2, k'_2} (2J_2 + 1)^{-1} \left[ \frac{1}{2k_2 + 1} \right]^{1/2} \mathcal{A}(K_r, K_r, 0, k_2, k'_2) (-1)^{k'_2 - q' + K_r} \begin{bmatrix} k_2 & k'_2 & K_r \\ q' & -q' & 0 \end{bmatrix}}{\sum_{k_2} \frac{1}{2k_2 + 1} \mathcal{A}(0, 0, 0, k_2, k_2)} \tag{43}$$

aprašo išsklaidytos spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetriją. Šios išraiškos supaprastėja, kai spinduliuotė aprašoma dipoliniame artinyje. Tuomet  $k = k' = 1$ ,  $K = 0, 1, 2$ , o (42) ir (43) pavirsta į

$$A_K = (2K + 1)\sqrt{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & K \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \mathcal{B}^r(0, K, K, 1, 1) / \mathcal{B}^r(0, 0, 0, 1, 1), \tag{44}$$

$$\alpha_K = (2J_2 + 1)\sqrt{3}(-1)^K \begin{bmatrix} 1 & 1 & K \\ q' & -q' & 0 \end{bmatrix} \mathcal{A}(K, K, 0, 1, 1) / \mathcal{A}(0, 0, 0, 1, 1). \tag{45}$$

Konkrečioms  $K$  reikšmėms apskritiminės poliarizacijos spinduliuotės atveju (44) ir (45) yra:

$$A_1 = \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \mathcal{B}^r(0, 1, 1, 1, 1) / \mathcal{B}^r(0, 0, 0, 1, 1), \tag{46}$$

$$\alpha_1 = -\sqrt{3/2}(2J_2 + 1)^{-1} \mathcal{A}(1, 1, 0, 1, 1) / \mathcal{A}(0, 0, 0, 1, 1), \tag{47}$$

$$A_2 = 5\sqrt{1/2} \mathcal{B}^r(0, 2, 2, 1, 1) / \mathcal{B}^r(0, 0, 0, 1, 1), \tag{48}$$

$$\alpha_2 = \sqrt{1/2}(2J_2 + 1) \mathcal{A}(2, 2, 0, 1, 1) / \mathcal{A}(0, 0, 0, 1, 1). \tag{49}$$

Tuo atveju, kai sklaidoma nepoliarizuota spinduliuotė, ji vaizduojama lygių dalių kairinės ir dešinės apskritiminės poliarizacijos spinduliuočių suma. Iš čia seka, kad  $K$  gali įgyti tiksliai

lygines reikšmes, t.y. sužadinti atomai gali būti tiksliai išrikiuoti. Taigi sklaidomos nepoliarizuotos dipolinės spinduliuotės atveju išsklaidytos spinduliuotės kampiniam pasiskirstymui tinka (48) ir (49) formulės. Iš jų matyti, kad išsklaidyta spinduliuotė bus poliarizuota, o jos kampinis pasiskirstymas bus asimetrinis.

Kai atomas sužadinamas į būseną su vakansija vidiniuose sluoksniuose, į žemesnę būseną jis gali pereiti išspinduliuodamas Auger elektroną. Skaiciuojant fotonų rezonansinės nekoherentinės sklaidos skerspjūvį, šio proceso poveikis gali būti žymus, todėl į jį reikia atsižvelgti [180].

#### 5.4 Autojonizacijos ir Auger elektronai iš atomų, sužadintų spinduliuote

Kai spinduliuotė sužadina elektroną iš vidinių sluoksnių, atomas gali pereiti į žemesnę būseną ne tik išspinduliuodamas fotoną, bet ir elektroną:

$$h\nu(\hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_1) + A(\alpha_1 J_1 M_1) \rightarrow A^*(\alpha_2 J_2) \rightarrow A(\alpha_3 J_3 M_3) + e^-(\mathbf{p}m). \quad (50)$$

Šio proceso pasekoje atsiranda jonas ir laisvas elektronas. Jeigu sužadinto atomo lygmens plotis daug mažesnis už atstumą tarp smulkiosios sandaros lygmenų, (50) procesą galima nagrinėti dviejų stadijų artinyje. Tuomet pagal 2.1.4 skirsnio rekomendacijas, (50) skerspjūvį galima užrašyti tarpinės būsenos, kuri nėra stebima, skleidinio multipoliais pavidalu:

$$\begin{aligned} & \frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \mathbf{p}m)}{d\Omega} \\ &= \sum_{K_2, N_2} W_{K_2 N_2}(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) \frac{dW_{K_2 N_2}^A(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \mathbf{p}m)}{d\Omega}. \end{aligned} \quad (51)$$

(51) išraiškos pirmasis narys yra atomo sužadinimo spinduliuote tikimybė (32), o antrasis – Auger šuolio diferencialinė tikimybė (3.52). Ją perrašome, norėdami suvienodinti žymėjimus:

$$\begin{aligned} & \frac{dW_{K_2 N_2}^A(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \mathbf{p}m)}{d\Omega} = \sum_{K, K_3, K_\lambda, K_s} \mathcal{A}^a(K_2, K_3, K_\lambda, K_s, K) \sum_{N, N_3, N_\lambda, N_s} \begin{bmatrix} K_\lambda & K_s & K \\ N_\lambda & N_s & N \end{bmatrix} \\ & \times \begin{bmatrix} K_3 & K & K_2 \\ N_3 & N & N_2 \end{bmatrix} T_{N_3}^{K_3}(J_3, J_3, M_3 | \hat{J}_3) T_{N_s}^{K_s}(s, s, m | \hat{s}) \sqrt{4\pi} Y_{K_\lambda N_\lambda}(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (52)$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{A}^a(K_2, K_3, K_\lambda, K_s, K) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1, j_1, \lambda_2, j_2} \langle \alpha_3 J_3 \varepsilon \lambda_1(j_1) J_2 || H || \alpha_2 J_2 \rangle \langle \alpha_3 J_3 \varepsilon \lambda_2(j_2) J_2 || H || \alpha_2 J_2 \rangle^* \\ & \times [(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)(2J_2 + 1)(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2J_3 + 1)(2s + 1)(2K + 1)]^{1/2} \\ & \times \begin{bmatrix} J_2 & j_1 & J_2 \\ J_3 & j_2 & J_2 \\ K_3 & K & K_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_2 & s & j_2 \\ K_\lambda & K_s & K \\ \lambda_1 & s & j_1 \end{bmatrix} (-1)^{\lambda_2} \begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & K_\lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (53)$$



(51) išraiška aprašo atsižvelgimo į visų procese dalyvaujančių dalelių poliarizaciją patį bendriausią atvejį. Dažniausiai eksperimente atomai ar spinduliuotė būna nepoliarizuoti, o detektoriai nejautrūs elektrono sukiniui ar jono pilnutinio judėjimo kiekio momento kryptčiai. Todėl reikalingos formulės, tinkančios paprastesniems poliarizacijos atvejams. Surasime jas.

Nepoliarizuoto atomo sužadavimo nepoliarizuota spinduliuote, kai elektronai ir jonai neregistruojami, skerspjūvio išraišką galima surasti sumuojant (51) jono ir Auger elektrono bei jo sukiniui būsenų, vidurkinat atomo būsenų ir integruojant elektrono kampų atžvilgiu:

$$\begin{aligned}\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3) &= \frac{1}{2J_1 + 1} \sum_{M_1, M_3, q, m} \int d\Omega \frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{e}_q \mathbf{k}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \mathbf{p} m)}{d\Omega} \\ &= \frac{2\pi^2}{2J_1 + 1} \sum_k \frac{1}{2k + 1} \mathcal{B}^r(0, 0, 0, k, k) (4\pi) \mathcal{A}^a(0, 0, 0, 0, 0) \\ &= W^{abs}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) \cdot W^A(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3).\end{aligned}\quad (54)$$

Čia  $W^{abs}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)$  yra fotono absorbcijos, o  $W^A(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3)$  – Auger šuolio arba autojonizacijos tikimybės.

Auger elektronų iš sužadintų spinduliuote nepoliarizuotų atomų kampinį pasiskirstymą aprašo formulė:

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \mathbf{p})}{d\Omega} &= \frac{1}{2J_1 + 1} \sum_{M_1, M_3, q, m} \frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \hat{e}_q \mathbf{k}_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \mathbf{p} m)}{d\Omega} \\ &= \frac{2\pi^2}{2J_1 + 1} \sum_{K_r = lyg.} \left[ \sum_{k, k'} \frac{2K_r + 1}{2k + 1} (-1)^{k' - q} \begin{bmatrix} k & k' & K_r \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \mathcal{B}^r(0, K_r, K_r, k, k') \right] \sqrt{2K_r + 1} \\ &\times \mathcal{A}^a(K_r, 0, K_r, 0, K_r) P_{K_r}(\cos \theta) = \frac{\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3)}{4\pi} \left[ 1 + \sum_{K_r > 0, lygin.} \beta_{K_r} P_{K_r}(\cos \theta) \right].\end{aligned}\quad (55)$$

Čia į (51) buvo įrašyta  $K_1 = K_3 = K_0 = 0$ ,  $K = K_r = K_\lambda = K_r$ , o laboratorinė  $z$  ašis parinkta lygiagrečiai spinduliuotės sklaidimo kryptčiai. Indėlių duoda tiksliai lyginiai sklaidimo būsenų multipoliais nariai, nepriklausomai ar spinduliuotė poliarizuota tiesiškai, ar apskritimiškai, nes Auger elektronams nelygūs nuliui tiksliai  $K_\lambda$  lyginiai nariai. Auger elektronų kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras

$$\beta_{K_r} = A_{K_r} \alpha_{K_r}, \quad (56)$$

kur  $A_{K_r}$  yra sužadinto atomo rikiavimo parametras (2.35), o –

$$\alpha_{K_r} = \sqrt{2K_r + 1} \mathcal{A}^a(K_r, 0, K_r, 0, K_r) / \mathcal{A}^a(0, 0, 0, 0, 0). \quad (57)$$

Dipolinės spinduliuotės atveju  $K_r = 2$ .

## 5.5 Jonizuotų elektronais atomų elektromagnetinė spinduliuotė

Dviejų stadijų artinyje nagrinėjamas poliarizuotais elektronais jonizuotų poliarizuotų atomų elektromagnetinės spinduliuotės vyksmas. Sakysime, kad jonizuojantys elektronai nėra tiek lėti, kad galima naudoti sutrikdytų bangų artinį. Jį galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned} A(\alpha_1 J_1 M_1) + e^-(\mathbf{p}_0 m_0) &\rightarrow A^+(\alpha_2 J_2 M_2) + e^-(\mathbf{p}_2 m_2) + e^-(\mathbf{p}_1 m_1) \\ &\rightarrow A^+(\alpha_3 J_3 M_3) + e^-(\mathbf{p}_2 m_2) + e^-(\mathbf{p}_1 m_1) + h\nu(\mathbf{k}_0 q). \end{aligned} \quad (58)$$

Paprastai pirmojoje (58) vyksmo stadijoje jonizuoto atomo poliarizacijos būseną neregistruojama, todėl pagal 2.1.4 skirsnio metodiką šių būsenų atžvilgiu yra sumuojama. Daug patogiau (58) vyksmo skerspjūvį užrašyti tarpinės būsenos skleidiniu multipoliais

$$\begin{aligned} &\frac{d^4 \sigma^{jon}(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_1 m_1 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_{k_0}} = \\ &= \sum_{K_2 N_2} \frac{d^3 \sigma_{K_2 N_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_1 m_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2} \frac{dW_{K_2 N_2}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}}. \end{aligned} \quad (59)$$

Čia  $d\Omega_1$  ir  $d\Omega_2$  žymi atitinkamai išsklaidyto ir atplėšto elektronų, o  $d\Omega_{k_0}$  – fluorescencijos fotono erdvinius kampus, o pati išraiška (59) yra dviejų stadijų proceso skerspjūvio skleidimas multipoliais pagal jonizuoto atomo neregistruojamas tarpinės būsenas. Atomo jonizacijos diferencialinio skerspjūvio multipolio  $d^3 \sigma_{K_2 N_2}^{jon} / d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2$  išraiška sutrikdytų bangų artinyje yra

$$\begin{aligned} &\frac{d^3 \sigma_{K_2 N_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2 m_2 \mathbf{p}_1 m_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2} = C_2 (4\pi)^{3/2} [2K_2 + 1]^{1/2} \\ &\times \sum_{\substack{K, K_0, K'_0, K_{\lambda 0}, K_{s0}, K', \\ K'_1, K'_2, K_{\lambda 1}, K_{s1}, K_{\lambda 2}, K_{s2}}} \mathcal{B}^{jon}(K_0, K'_0, K, K_{\lambda 0}, K_{s0}, K_2, K', K_{\lambda 1}, K_{s1}, K'_1, K_{\lambda 2}, K_{s2}, K'_2) \\ &\times \sum_{\substack{N, N_0, N'_0, N_{\lambda 0}, N_{s0}, N', \\ N'_1, N'_2, N_{\lambda 1}, N_{s1}, N_{\lambda 2}, N_{s2}}} \begin{bmatrix} K_{\lambda 0} & K_{s0} & K'_0 \\ N_{\lambda 0} & N_{s0} & N'_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_0 & K'_0 & K \\ N_0 & N'_0 & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_2 & K' & K \\ N_2 & N' & N \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} K'_2 & K'_1 & K' \\ N'_2 & N'_1 & N' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{\lambda 1} & K_{s1} & K'_1 \\ N_{\lambda 1} & N_{s1} & N'_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{\lambda 2} & K_{s2} & K'_2 \\ N_{\lambda 2} & N_{s2} & N'_2 \end{bmatrix} Y_{K_{\lambda 0} N_{\lambda 0}}^*(\hat{p}_0) Y_{K_{\lambda 1} N_{\lambda 1}}(\hat{p}_1) \\ &\times Y_{K_{\lambda 2} N_{\lambda 2}}(\hat{p}_2) T_{N'_0}^{*K_0}(J_1, J_1, M_1 | \hat{J}_1) T_{N_{s0}}^{*K_{s0}}(s, s, m_0 | \hat{s}) \\ &\times T_{N_{s1}}^{K_{s1}}(s, s, m_1 | \hat{s}) T_{N_{s2}}^{K_{s2}}(s, s, m_2 | \hat{s}). \end{aligned} \quad (60)$$

Fluorescencijos diferencialinės tikimybės atskiro multipolinio skleidimo narių aprašo (3.7) formulė.

Dažnai eksperimentuose tiriami nepoliarizuoti atomai, kurie jonizuojami nepoliarizuotais elektronais, o išsklaidyto ir atplėšto elektronų bei jonizuoto atomo poliarizacijos neregistruojamos. Tuomet (60) ir (3.7) išraiškos supaprastėja, nes  $K_0 = K_{s0} = K_{s1} = K_{s2} = 0$ ,  $K_{\lambda_0} = K'_0 = K$ ,  $K_{\lambda_1} = K'_1$ ,  $K_{\lambda_2} = K'_2$ :

$$\begin{aligned} & \frac{d^3 \sigma_{K_2 N_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 \mathbf{p}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_1)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2} = \frac{C_2 (4\pi)^{3/2} [2K_2 + 1]^{1/2}}{2(2J_1 + 1)} \\ & \times \sum_{K_{\lambda_0}, K', K_{\lambda_1}, K_{\lambda_2}} \mathcal{B}^{jon}(0, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_0}, 0, K_2, K', K_{\lambda_1}, 0, K_{\lambda_1}, K_{\lambda_2}, 0, K_{\lambda_2}) \\ & \times \sum_{N_{\lambda_0}, N', N_{\lambda_1}, N_{\lambda_2}} \begin{bmatrix} K_2 & K'_1 & K_{\lambda_0} \\ N_2 & N'_1 & N_{\lambda_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{\lambda_2} & K_{\lambda_1} & K' \\ N_{\lambda_2} & N_{\lambda_1} & N' \end{bmatrix} Y_{K_{\lambda_0} N_{\lambda_0}}^*(\hat{p}_0) Y_{K_{\lambda_1} N_{\lambda_1}}(\hat{p}_1) \\ & \quad \times Y_{K_{\lambda_2} N_{\lambda_2}}(\hat{p}_2), \end{aligned} \quad (61)$$

$$\begin{aligned} & \frac{dW_{K_2 N_2}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{q} \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}} = \frac{1}{2\pi(2J_2 + 1)} \sum_{k, k'} \left[ \frac{4\pi}{(2k + 1)(2K_2 + 1)} \right]^{1/2} \\ & \quad \times (-1)^{K_2 - N_2 + k' - q} \begin{bmatrix} k & k' & K_2 \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \mathcal{A}^r(K_2, K_2, 0, k, k') Y_{K_2 - N_2}(\hat{k}_0). \end{aligned} \quad (62)$$

Kai  $N_2 = 0$ ,

$$\begin{aligned} & \frac{dW_{K_2 0}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{q} \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}} = \frac{1}{2\pi(2J_2 + 1)} \sum_{k, k'} (-1)^{K_2 + k' - q} \left[ \frac{1}{2k + 1} \right]^{1/2} \\ & \quad \times \begin{bmatrix} k & k' & K_2 \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \mathcal{A}^r(K_2, K_2, 0, k, k') P_{K_2}(\cos \theta_{k_0}). \end{aligned} \quad (63)$$

Atskiriems atvejams nagrinėti patogiu naudoti (61) ir (62) formules.

### 5.5.1 Nepoliarizuotų atomų, jonizuotų nepoliarizuotais elektronais, elektromagnetinė spinduliuotė

Nepoliarizuotų atomų, jonizuotų nepoliarizuotais elektronais fluorescencijos pilnutinis skerspjuvis, kai išsklaidyti ir atplėšti elektronai neregistruojami, turi šitokią pavidalą:

$$\begin{aligned} & \sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3) = \frac{1}{2(2J_1 + 1)} \int d\varepsilon_2 \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \\ & \times \int d\Omega_{k_0} \sum_{M_1, M_3, m_0, m_1, m_2} \frac{d^4 \sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_1 m_1 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{e}_q \mathbf{k}_0)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_{k_0}} \\ & \quad = \sigma^{jon}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) W^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3). \end{aligned} \quad (64)$$

## 5.5.2 Nepoliarizuotų atomų, jonizuotų nepoliarizuotais elektronais, elektromagnetinės spinduliuotės kampinis pasiskirstymas

Šiuo atveju patogiu naudoti (61) ir (62) formules:

$$\begin{aligned} & \frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 \mathbf{p}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}} = \frac{1}{2(2J_1 + 1)} \\ & \times \int d\varepsilon_2 \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \sum_{M_1, M_3, m_0, m_1, m_2} \frac{d^4\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_1 m_1 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_{k_0}} \\ & = \sum_{K_2, N_2} \sigma_{K_2 N_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 \mathbf{p}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2) \frac{dW_{K_2 N_2}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}}. \end{aligned} \quad (65)$$

Čia

$$\begin{aligned} \sigma_{K_2, N_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 \mathbf{p}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2) &= (4\pi)^2 \frac{C_2 [4\pi(2K_2 + 1)]^{1/2}}{2(2J_1 + 1)} Y_{K_2 N_2}^*(\hat{p}_0) \\ &\times \mathcal{B}^{jon}(0, K_2, K_2, K_2, 0, K_2, 0, 0, 0, 0, 0, 0), \end{aligned} \quad (66)$$

o antrasis narys užrašomas (62) formule.

Pasirinkus  $z$  ašį lygiagrečiai  $\mathbf{p}_0$  kryptčiai, fluorescencijos spinduliuotės kampas matuojamas nuo  $\mathbf{p}_0$  kryptties, o  $Y_{K_2, N_2}^*(0, 0) = [(2K_2 + 1)/4\pi]^{1/2} \delta(N_2, 0)$ . Tuomet

$$\sigma_{K_2 0}^{jon}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) = (4\pi)^2 \frac{C_2 (2K_2 + 1)}{2(2J_1 + 1)} \mathcal{B}^{jon}(0, K_2, K_2, K_2, 0, K_2, 0, 0, 0, 0, 0, 0), \quad (67)$$

o fluorescencijos kampinį pasiskirstymą aprašo (63) formulė. Belieka užrašyti nepoliarizuotų atomų, jonizuotų nepoliarizuotais elektronais, elektromagnetinės spinduliuotės kampinį pasiskirstymą aprašančio diferencialinio skerspjūvio išraišką:

$$\frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}} = \frac{\sigma^{jon}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)}{(4\pi)^2} \frac{W^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3)}{4\pi} \left[ 1 + \sum_{K_2} \beta_{K_2} P_{K_2}(\cos \theta) \right], \quad (68)$$

kur

$$\beta_{K_2} = \alpha_{K_2} A_{K_2}. \quad (69)$$

Čia  $A_{K_2}$  yra nepoliarizuotais elektronais jonizuoto nepoliarizuoto atomo rikiavimo parametras

$$A_{K_2} = \frac{(2K_2 + 1) \int d\varepsilon_2 \mathcal{B}^{jon}(0, K_2, K_2, K_2, 0, K_2, 0, 0, 0, 0, 0, 0)}{\int d\varepsilon_2 \mathcal{B}^{jon}(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)}, \quad (70)$$

$\alpha_{K_2}$  – fluorescencijos kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras

$$\alpha_{K_2} = \frac{\sum_{k, k'} (-1)^{K_2 + k' - q} \left[ \frac{1}{2k' + 1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} k & k' & K_2 \\ q & -q & 0 \end{bmatrix} \mathcal{A}^r(K_2, K_2, 0, k, k')}{(-1)^{K_2} \frac{1}{2k + 1} \mathcal{A}^r(0, 0, 0, k, k)}. \quad (71)$$

### 5.5.3 Kampinė koreliacija tarp fluorescencijos spinduliuotės ir atplėštojo elektrono po nepoliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais

Šiuo atveju vienas iš galinės būsenos elektronų neregistruojamas. Sakysime, kad jis yra greitas elektronas  $\mathbf{p}_1$ . Tuomet diferencialinio skerspjūvio išraiškai surasti patogiau naudoti (61) ir (62) formules:

$$\begin{aligned} & \frac{d^3\sigma(\alpha_1 J_1 \mathbf{p}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega \varepsilon_2 d\Omega_2 d\Omega_{k_0}} = \frac{1}{2(2J_1 + 1)} \\ & \times \int d\Omega_1 \sum_{M_1, M_3, m_0, m_1, m_2} \frac{d^4\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_1 m_1 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_{k_0}} \\ & = \sum_{K_2, N_2} \frac{d^2\sigma_{K_2 N_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 \mathbf{p}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2)}{d\Omega \varepsilon_2 d\Omega_2} \frac{dW_{K_2 N_2}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}}. \end{aligned} \quad (72)$$

Šios formulės antrojo nario išraiška yra (62), o pirmojo nario ( $K_{\lambda_1} = 0, K' = K_{\lambda_2}$ ) –

$$\begin{aligned} & \frac{d^2\sigma_{K_2 N_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 \mathbf{p}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2)}{d\Omega \varepsilon_2 d\Omega_2} = \frac{(4\pi)^2 C_2 [2K_2 + 1]^{1/2}}{2(2J_1 + 1)} \\ & \times \sum_{K_{\lambda_0}, K_{\lambda_2}} \mathcal{B}(0, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_0}, 0, K_{\lambda_2}, K_{\lambda_2}, 0, 0, 0, K_{\lambda_2}, 0, K_{\lambda_2}) \\ & \times \sum_{N_{\lambda_0}, N_{\lambda_2}} \begin{bmatrix} K_2 & K_{\lambda_2} & K_{\lambda_0} \\ N_2 & N_{\lambda_2} & N_{\lambda_0} \end{bmatrix} Y_{K_{\lambda_0} N_{\lambda_0}}^*(\hat{p}_0) Y_{K_{\lambda_2} N_{\lambda_2}}(\hat{p}_2). \end{aligned} \quad (73)$$

z ašį sutapatinus su  $\mathbf{p}_0$  kryptimi,  $N_2 = -N_{\lambda_2}$ ,

$$\begin{aligned} & \frac{d^2\sigma_{K_2 N_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2)}{d\Omega \varepsilon_2 d\Omega_2} = \frac{(4\pi)^{3/2} C_2 [2K_2 + 1]^{1/2}}{2(2J_1 + 1)} \sum_{K_{\lambda_0} K_{\lambda_2}} [2K_{\lambda_0} + 1]^{1/2} B^{jon}(K_2, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_2}) \\ & \times \begin{bmatrix} K_2 & K_{\lambda_2} & K_{\lambda_0} \\ N_2 & -N_2 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_{\lambda_2} - N_2}(\hat{p}_2). \end{aligned} \quad (74)$$

Čia

$$B^{jon}(K_2, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_2}) = \mathcal{B}(0, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_0}, K_{\lambda_0}, 0, K_{\lambda_2}, K_{\lambda_2}, 0, 0, 0, K_{\lambda_2}, 0, K_{\lambda_2}). \quad (75)$$

### 5.5.4 Fluorescencijos spinduliuotės magnetinis dichroizmas po poliarizuotų atomų jonizacijos nepoliarizuotais elektronais

Kai išsklaidyti ir atplėšti elektronai neregistruojami, galima surasti nelabai sudėtingą formulę diferencialinio skerspjūvio, aprašančio fluorescencijos spinduliuotės priklausomybę nuo nepoliarizuotais elektronais jonizuojamų atomų poliarizacijos. Ją galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned}
& \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\varepsilon_2 d\Omega_{k_0}} = \frac{1}{2} \\
& \times \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \sum_{M_3, m_0, m_1, m_2} \frac{d^4\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_1 m_1 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_{k_0}} \\
& = \frac{1}{2} \sum_{K_2, N_2} \frac{d\sigma_{K_2 N_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 \mathbf{p}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2)}{d\varepsilon_2} \frac{dW_{K_2 N_2}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}}, \tag{76}
\end{aligned}$$

kur  $K_{s0} = K_{s1} = K_{s2} = K'_2 = K'_1 = K' = K_{\lambda_1} = K_{\lambda_2} = 0$ ,  $K_{\lambda_0} = K'_0$ ,  $K_r = K$ , laboratorinė  $z$  ašis sutapatinta su krentančių elektronų kryptimi ( $N_{\lambda_0} = 0$ ) ir

$$\begin{aligned}
& \frac{d\sigma_{K_2 N_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 \mathbf{p}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2)}{d\varepsilon_2} = \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \sum_{m_0, m_1, m_2} \frac{d^3\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{p}_0 m_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_1 m_1 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\varepsilon_2 d\Omega_1 d\Omega_2} \\
& = C_2 (4\pi)^2 \sum_{K_2, N_2} [(2K_2 + 1)(2K_{\lambda_0} + 1)]^{1/2} B(K_0, K_{\lambda_0}, K_2) \begin{bmatrix} K_0 & K_{\lambda_0} & K_2 \\ N_2 & 0 & N_2 \end{bmatrix} Y_{K_{\lambda_0} N_2}(\hat{J}_0) \\
& \quad \times (-1)^{J_1 - M_1} \left[ \frac{4\pi}{2J_1 + 1} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K_0 \\ M_1 & -M_1 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_0 N_2}(\hat{J}_1). \tag{77}
\end{aligned}$$

Čia

$$B(K_0, K_{\lambda_0}, K_2) = \mathcal{B}(K_0, K_{\lambda_0}, K_2, K_{\lambda_0}, 0, K_2, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \tag{78}$$

Magnetinis dichroizmas yra (77) skerspjūvių skirtumas, kai matuojama esant priešingoms pilnutinio judėjimo kiekio momento  $\mathbf{J}_1$  orientacijos kryptims. Galima parinkti, kad  $\mathbf{J}_1$  būtų lygiagretus ir antilygiagretus  $z$  ašiai. Tuomet  $Y_{K_0 N_2}(0, 0) = Y_{K_0 N_2}(\pi, 0) = [(2K_0 + 1)/4\pi]^{1/2} \delta(N_2, 0)$ . Taip pamatuotų skerspjūvių skirtumą galima užrašyti:

$$\Delta = \sum_{K_2} \frac{d\sigma_{K_2 0}^{jon}(\alpha_1 J_1 M_1 = J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)}{d\varepsilon_2} \frac{dW_{K_2 0}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}}, \tag{79}$$

kur

$$\begin{aligned}
& \frac{d\sigma_{K_2 0}^{jon}(\alpha_1 J_1 M_1 = J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2)}{d\varepsilon_2} = C_2 (4\pi)^2 \sum_{K_{\lambda_0}, K_0} [(2K_{\lambda_0} + 1)(2K_2 + 1)(2K_0 + 1)]^{1/2} B(K_0, K_{\lambda_0 + 1}, K_2) \\
& \quad \times \begin{bmatrix} K_0 & K_{\lambda_0} & K_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K_0 \\ J_1 & -J_1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{80}
\end{aligned}$$

Šią išraišką galima suintegruoti atplėštojo elektrono energijų atžvilgiu:

$$\Delta' = \sum_{K_2} \sigma_{K_2 0}^{jon}(\alpha_1 J_1 M_1 = J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) \frac{dW_{K_2 0}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}}. \tag{81}$$

Iš (79) formulėje esančio Klebšo ir Gordano koeficiento matyti, kad  $K_0 + K_{\lambda_0} + K_2$  turi būti lyginis skaičius. Jeigu spinduliuotę aprašytume dipoliniame artinyje,  $K_2 = 0, 1, 2$ . Žinant, kad

$K_0 \leq 2J_1$ , nelygaus nuliui magnetinio dichroizmo galima tikėtis tiesiškai poliarizuotai šviesai, kai  $J_1 \geq 1$ .

Magnetinis dichroizmas gali pasireikškšti ir tada, kai matuojamas pilnutinis (81) skerspjūvis, suintegruotas fluorescencijos spinduliuotės kampų atžvilgiu ( $K_2 = 0$ ):

$$\begin{aligned}\Delta'' &= \sigma_{00}^{jon}(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) W_{00}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3) \\ &= \frac{1}{(4\pi)^3} \sigma^{jon}(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) W^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3).\end{aligned}\quad (82)$$

Kaip matome iš šios formulės, magnetinis dichroizmas priklauso tikrai nuo pirmojo proceso. Jis išnagrinėtas 4.5.7 skirsnyje.

## 5.6 Greitais elektronais jonizuotų poliarizuotų atomų elektromagnetinė spinduliuotė

Kai jonizuojantys elektronai yra greiti, pirmosios stadijos procesui aprašyti galima naudoti pirmąjį Borno artinį. Tuomet dviejų stadijų artinyje nepoliarizuotais elektronais jonizuotų poliarizuotų atomų elektromagnetinės spinduliuotės vyksmą, kai išklaidytų elektronų poliarizacija neregistruojama, galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned}A(\alpha_1 J_1 M_1) + e^-(\mathbf{p}_0) &\rightarrow A^+(\alpha_2 J_2 M_2) + e^-(\mathbf{p}m) + e^-(\mathbf{p}_1) \\ &\rightarrow A^+(\alpha_3 J_3 M_3) + e^-(\mathbf{p}m) + e^-(\mathbf{p}_1) + h\nu(\mathbf{k}_0q).\end{aligned}\quad (83)$$

Paprastai pirmojoje (83) vyksmo stadijoje jonizuoto atomo poliarizacijos būseną neregistruojama, todėl pagal 2.1.4 skirsnio metodiką šių būsenų atžvilgiu yra sumuojama. Daug patogiau (83) vyksmo skerspjūvį užrašyti tarpinės būsenos skleidiniu multipoliais

$$\begin{aligned}&\frac{d^4 \sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{q}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{e}_q \mathbf{k}_0)}{d\varepsilon d\Omega_{q_0} d\Omega d\Omega_{k_0}} = \\ &= \sum_{K_2 N_2} \frac{d^3 \sigma_{K_2 N_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{q}_0 m_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}m)}{d\varepsilon_2 d\Omega_{q_0} d\Omega} \frac{dW_{K_2 N_2}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{e}_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}}.\end{aligned}\quad (84)$$

Čia  $d\Omega_{q_0}$  ir  $d\Omega$  žymi atitinkamai perduoto judėjimo kiekio  $\mathbf{q}_0 = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1$  ir atplėšto elektrono, o  $d\Omega_{k_0}$  – fluorescencijos fotono erdvinius kampus, o pati išraiška (84) yra dviejų stadijų proceso skerspjūvio skleidimas multipoliais pagal jonizuoto atomo neregistruojamas tarpinės būsenas.

Atomo jonizacijos diferencialinio skerspjūvio multipolio  $d^3 \sigma_{K_2 N_2}^{jon} / d\varepsilon_2 d\Omega_{q_0} d\Omega$  išraiška Borno artinyje yra

$$\frac{d^3 \sigma_{K_2 N_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{q}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}m)}{d\varepsilon_2 d\Omega_{q_0} d\Omega} = \frac{k_1 k}{\pi k_0} [2K_2 + 1]^{1/2}$$

$$\begin{aligned}
& \times \sum_{K_1, K_{q_0}, K, K_j, K_\lambda, K_s} \mathcal{B}^{Bjon}(K_1, K_2, K_{q_0}, K_\lambda, K_s, K_j, K) \\
& \times \sum_{N_1, N_{q_0}, N, N_j, N_\lambda, N_s} 4\pi \begin{bmatrix} K_1 & K_{q_0} & K \\ N_1 & N_{q_0} & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_\lambda & K_s & K_j \\ N_\lambda & N_s & N_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_2 & K_j & K \\ N_2 & N_j & N \end{bmatrix} \\
& \times Y_{K_\lambda N_\lambda}(\hat{p}) Y_{K_{q_0} N_{q_0}}(\hat{q}_0) T_{N_1}^{K_1}(J_1, J_1, M_1 | \hat{J}_1) T_{N_s}^{K_s}(s, s, m | \hat{s}). \tag{85}
\end{aligned}$$

Fluorescencijos diferencialinės tikimybės atskiro multipolinio skleidimo narį aprašo (3.7) formulė.

### 5.6.1 Greitais elektronais jonizuotų nepolarizuotų atomų elektromagnetinė spinduliuotė

Pirma surasime greitais nepolarizuotais elektronais jonizuotų nepolarizuotų atomų elektromagnetinę spinduliuotę aprašantį skerspjūvį, kai išsklaidyti ir atplėsti elektronai neregistruojami. Reikia sumuoti  $M_3$  ir  $m$ , vidurkinti pradinių būsenų, integruoti išsklaidytų ir atplėštų elektronų kampų atžvilgiu. Integravimas išsklaidytų elektronų kampais pakeičiamas integravimu pagal perduotą judėjimo kiekį  $q_0$ . Galima užrašyti skerspjūvio išraišką:

$$\begin{aligned}
& \sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3) \\
& = \frac{1}{2J_1 + 1} \int d\Omega_p \int d\Omega_q \int d\Omega_{k_0} \int d\varepsilon_2 \sum_{M_1, M_3, m} \frac{d^4\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{q}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\varepsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\varepsilon_2 d\Omega_{q_0} d\Omega d\Omega_{k_0}} \\
& = \sigma^{jon}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) W^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3), \tag{86}
\end{aligned}$$

kur jonizacijos skerspjūvio išraiška yra (4.180).

### 5.6.2 Greitais elektronais jonizuotų nepolarizuotų atomų elektromagnetinės spinduliuotės kampinis pasiskirstymas

Šiuo atveju skerspjūvį galima užrašyti šitaip:

$$\begin{aligned}
& \frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\varepsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}} \\
& = \frac{1}{2J_1 + 1} \int d\varepsilon_2 \int d\Omega_p \int d\Omega_q \sum_{M_1, M_3, m} \frac{d^4\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{q}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\varepsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\varepsilon_2 d\Omega_{q_0} d\Omega d\Omega_{k_0}} \\
& = \sum_{K_2} \sigma_{K_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) \frac{W_{K_2}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\varepsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}} \\
& = \frac{\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3)}{4\pi} \left[ 1 + \sum_{K_2} \beta_{K_2} P_{K_2}(\cos \theta) \right]. \tag{87}
\end{aligned}$$



Čia fluorescencijos spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetrijos parametras yra

$$\beta_{K_2} = \alpha_{K_2} A_{K_2}, \quad (88)$$

kur  $A_{K_2}$  – jonizuoto atomo rikiavimo parametras. Šiuo atveju spinduliuotės kampinio pasiskirstymo asimetrija matuojama nuo  $z$  ašies, kuri sutampa su juonizuojančiojo elektrono skriejimo kryptimi.

$$A_{K_2} = \frac{(2K_2 + 1)B^{Bion}(K_2)}{B^{Bion}(0)}, \quad (89)$$

o

$$B^{Bion}(K_2) = \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{dq_0}{q_0^3} \mathcal{B}^{Bion}(0, K_2, K_2, 0, 0, 0, K_2) P_{K_2}(\cos \theta_{q_0}), \quad (90)$$

kur kampas  $\theta_{q_0}$  matuojamas nuo juonizuojančiojo elektrono skriejimo krypties.  $\alpha_2$  išraiška užrašoma (72) formule.

### 5.6.3 Poliarizuotų atomų, jonizuotų nepoliarizuotais elektronais, fluorescencijos kampinio pasiskirstymo magnetinis dichroizmas

Šiuo atveju skerspjūvį galima užrašyti

$$\begin{aligned} & \frac{d\sigma(\alpha_1 J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}} \\ &= \frac{1}{2J_1 + 1} \int d\varepsilon_2 \int d\Omega_p \int d\Omega_q \sum_{M_3, m} \frac{d^4\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \mathbf{q}_0 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2 m_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 M_3 \hat{\epsilon}_q \mathbf{k}_0)}{d\varepsilon_2 d\Omega_{q_0} d\Omega d\Omega_{k_0}} \\ &= \sum_{K_2 N_2} \sigma_{K_2}^{jon}(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_2 J_2) \frac{W_{K_2}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\epsilon}_q \cdot \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}} \end{aligned} \quad (91)$$

Antrasis (5.6.3) narys yra toks pat, kaip ir nepoliarizuotų atomų atveju. Pirmasis narys gaunamas iš (4.194)

$$\begin{aligned} \sigma_{K_2 N_2}(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2) &= \int d\varepsilon_2 \int d\Omega_p \sum_{M_3, m} \frac{d^2\sigma(\alpha_1 J_1 M_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 \mathbf{p}_2 m_2)}{d\varepsilon_2 d\Omega} \\ &= \frac{8\pi a_0^2}{\varepsilon_0} \int d\varepsilon [2K_2 + 1]^{1/2} \sum_{K_1, K_Q, N_1, N_Q} B^{Bjon}(K_1, K_2, K_Q, 0, 0, 0, K_2) \\ &\times \begin{bmatrix} K_1 & K_Q & K_2 \\ N_1 & N_Q & N_2 \end{bmatrix} \left[ \frac{4\pi}{2J_1 + 1} \right]^{1/2} (-1)^{J_1 - M_1} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K_1 \\ M_1 & -M_1 & 0 \end{bmatrix} Y_{K_1 N_1}^*(J_1, J_1, M_1 | \hat{J}_1). \end{aligned} \quad (92)$$

Labai paprastas atvejis gaunamas, kai  $\mathbf{J}_1$  sutapatinamas su  $\mathbf{q}_0$  kryptimi. Tuomet  $M_1 = J_1$ ,  $N_2 = 0$  ir

$$\sigma_{K_2 0}(\alpha_1 J_1 M_1 = J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2) = \frac{8\pi a_0^2}{\varepsilon_0} \sum_{K_1, K_Q} \left[ \frac{(2K_2 + 1)(2K_1 + 1)}{2J_1 + 1} \right]^{1/2} B(K_1, K_Q, K_2)$$

$$\times \begin{bmatrix} K_1 & K_Q & K_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_1 & J_1 & K_1 \\ J_1 & -J_1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (93)$$

kur

$$B(K_1, K_Q, K_2) = \int d\varepsilon B^{Bjon}(K_1, K_2, K_Q, 0, 0, 0, K_2). \quad (94)$$

Spinduliuotės magnetinis dichroizmas yra

$$\Delta = 2 \sum_{K_2} \sigma_{K_2 0}(\alpha_1 J_1 M_1 = J_1 \rightarrow \alpha_2 J_2 M_2) \frac{W_{K_2}^r(\alpha_2 J_2 \rightarrow \alpha_3 J_3 \hat{\varepsilon}_q \cdot \mathbf{k}_0)}{d\Omega_{k_0}}. \quad (95)$$

Jis yra (93) skerspjūvio verčių su  $M_1 = J_1$  ir  $M_1 = -J_1$  skirtumas.

## 5.7 Jonizuotų elektronais atomų Auger elektronų spinduliavimas

$$A(\alpha_0 J_0 M_0) + e^-(\mathbf{p}_0 m_0) \rightarrow A^+(\alpha_1 J_1 M_1) + e^-(\mathbf{p}_2 m_2) + e^-(\mathbf{p}_1 m_1). \quad (96)$$

## References

- [1] A.P. Jucys and A.A. Bandzaitis, *Theory of Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Mintis, Vilnius, 1965), (Mokslas, Vilnius, 1977) (in Russian).
- [2] A.P.Jucys, A.J.Savukynas, *Mathematical Foundations of the Atomic Theory* (Mintis, Vilnius, 1973) (in Russian).
- [3] R.D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California, Berkeley, 1981).
- [4] Z. Rudzikas, *Theoretical Atomic Spectroscopy (Many Electron Atoms)* (Cambridge University, Cambridge, 1997).
- [5] K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications*, 2nd ed. (Plenum, New York, 1996).
- [6] A.T. Ferguson, *Angular Correlation Method in Gamma-Ray Spectroscopy* (North-Holland, Amsterdam, 1965).
- [7] *Theoretical Practicum on Nuclear and Atomic Physics*, Eds. V.V.Balashov *et al* (Energizdat, Moscow, 1984) (in Russian).
- [8] V.V. Balashov, A.N. Grum-Grzhimailo, and N.M. Kabachnik, *Polarization and Correlation Phenomena in Atomic Collisions. A Practical Theory Course* (Kluwer, New York, 2000).
- [9] J.H. Macek, Alignment and orientation: Opening remarks, *Atomic Physics*, vol. 16, ed. W.E. Baylis and G.W.F. Drake (American Institute of Physics, New York, 1999) p. 234-236.
- [10] U. Heinzmann, Experimental determination of the phase difference of continuum wavefunctions describing the photoionization process of xenon atoms. II. Evaluation of the matrix elements and their phase differences and their comparison with data in the discrete spectral range in application of the multichannel quantum defect theory, *J. Phys. B* **13**, 4367-4381 (1980).
- [11] S.A. Kazantsev and J.C. Henoux, *Polarization spectroscopy of ionized atoms* (Kluwer, Dordrecht, Boston, London, 1995).
- [12] A. von dem Borne, T. Dohrmann, A. Verweyen, and B. Sontag, Dichroism in the 3p photoionization of polarized Cr atoms, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4019-4022 (1997).

- [13] A.M. Urnov, Historical overview of plasma polarization spectroscopy, Proceedings of the Japan-US Workshop on Plasma Polarization spectroscopy and the Int. Seminar on Plasma Polarization Spectroscopy (Research International Center, Nagoya, 1998) p. 1-8.
- [14] J.C. Kieffer, J.P. Matte, H. Pèpin, M. Chaker, Y. Beoudain, T.W. Johnston, C.H. Chien, S. Coe, G. Moorou and J. Dubou, Electron distribution anisotropy in laser-produced plasmas from X-ray line polarization measurements, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 480-483 (1992).
- [15] T. Fujimoto, H. Sahara, T. Kawachi, T. Kallstenius, M. Goto, H. Kawase and T. Furukubo, T. Mackawa and Y. Terumichi, Polarization of impurity emission lines from tokamak plasma, *Phys. Rev. E* **54**, R2240-R2243 (1996).
- [16] V.A. Veretennikov, A.E. Gurei, A.N. Dolgov, V.V. Korneev and O.G. Semenov, The polarization of line x-ray radiation from impulse discharge plasma, *Pis'ma v Zh. Exp. Teor. Phys.* **47**, 29-31 (1988).
- [17] A.A. Kazantsev, The application of the self-alignment for the astrophysical and laboratory plasma, *Uspekhi Fiz. Nauk* **139**, 621-666(1983).
- [18] D.A. Varshalovich, A.N. Moskalev, and V.K. Khersonskii, *Quantum theory of Angular Momentum* (Wold Scientific, Singapore, 1988).
- [19] G. Prümper, O. Geßner, B. Zimmermann, J. Viehhaus, R. Hentger, H. Kleinpoppen and U. Becker, Absorption of circularly polarized VUV radiation in polarized iron vapor, *J. Phys. B* **34**, 2707-2714 (2001).
- [20] N.A. Cherepkov, V.V. Kuznetsov and V.A. Verbitskii, Photoionization of polarized atoms, *J. Phys. B* **28**, 1221-1239 (1995).
- [21] U. Fano, Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator technique, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 74-93 (1957).
- [22] V.L. Jacobs, Theory of atomic polarization measurements, *J. Phys. B* **5** 2257-2271 (1972).
- [23] N.M. Kabachnik and I.P. Sazhina, Angular distribution and polarization of photoelectrons in the region of resonances, *J. Phys. B* **9** 1681-1697 (1976).
- [24] H. Klar, Polarization of fluorescence radiation following atomic photoionization, *J. Phys. B* **13**, 2037-2049 (1980).

- [25] H. Klar and H. Kleinpoppen, Angular distribution of photoelectrons from polarized atoms exposed to polarized radiation, *J. Phys. B* **15** 933-950 (1982).
- [26] S. Baier, A.N. Grum-Grzhimailo and N.M. Kabachnik, Angular distribution of photoelectrons in resonant photoionization of polarized atoms, *J. Phys. B* **27** 3363-3388 (1994).
- [27] A.N. Grum-Grzhimailo, K. Bartschat, N. Feuerstein and W. Mehlhorn, Near threshold structure in electron-collision-induced alignment of excited atomic states, *Phys. Rev. A* **60** R1751-R1754 (1994).
- [28] A.N. Grum-Grzhimailo and A.M. Kabachnik, Linear magnetic dichroism in fluorescence spectra, *Phys. Lett. A* **264** 192-197 (1999).
- [29] U. Fano and J.H. Macek, Impact excitation and polarization of the emitted light, *Rev. Mod. Phys.* **45**, 553-573 (1973).
- [30] A. Kupliauskienė, N. Rakštikas, and V. Tutlys, General expression of the photoionization cross section of an atom in polarized *LS* state, *Lithuanian J. Phys.* **40**, 311-320 (2000).
- [31] A. Kupliauskienė, N. Rakštikas, and V. Tutlys, Polarization studies in the photoionization of atoms using a graphical technique, *J. Phys. B* **34**, 1783-1803 (2001).
- [32] I.B. Levinson, Sums of the products of Wigner coefficients and their graphical representation, *Proc. Inst. Phys. Techn.* **2**, 17-29 (1956) (in Russian).
- [33] D.M. Brink, G.R. Satchler, *Angular Momentum*, (Oxford university, Oxford, 1968).
- [34] J.S. Briggs, Evaluation of matrix elements from a graphical representation of the angular integrals, *Rev. Mod. Phys.* **43**, 189-230 (1971).
- [35] E. El-Baz and B. Castel, *Graphical Methods of spin Algebras in Atomic, Nuclear and Particle Physics* (Marcel Dekker, Oxford, 1972).
- [36] Z.I. Kuplyauskis, A.V. Kuplyauskene and V.I. Tutlis, Study of excited states of atoms by means of nonorthogonal radial orbitals, *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Fizika*, No. 3, 7-11 (1981) (in Russian); *Soviet Physics Transactions*, 203-207 (1981).
- [37] Keh-Ning Huang, Graphical evaluation of relativistic matrix elements, *Rev. Mod. Phys.* **51**, 215-236 (1979).

- [38] G. Merkelis, Graphical method of evaluation of matrix elements in the second quantization representation, *Physica Scripta* **63**, 289-305 (2001).
- [39] U. Fano and D. Dill, Angular momentum transfer in the theory of angular distributions, *Phys. Rev. A* **6**, 185-192 (1972).
- [40] B. Cleff and W. Mehlhorn, On the angular distribution of Auger electrons following impact ionization, *J. Phys. B* **7**, 593-604 (1974).
- [41] J. Cooper and R.N. Zare, Angular distribution of photoelectrons, *J. Chem. Phys.* **48**, 942-943 (1968).
- [42] D. Dill, A.F. Starace and S.T. Manson, Effects of anisotropic electron-ion interactions in atomic photoelectron angular distributions, *Phys. Rev. A* **11**, 1596-1606 (1975).
- [43] A.P. Yutsis, I.B. Levinson, and V.V. Vanagas, *The theory of angular momentum* (Vilnius, State Press of political and scientific literature, 1960; Jerusalem, Israel Program for Scientific Translations, 1962).
- [44] A. Kupliauskienė and V. Tutlys, Application of graphical technique for Auger decay following photoionization of atoms, *Physica Scripta* **67**, 290-300 (2003).
- [45] A. Kupliauskienė and V. Tutlys, Angular distribution and polarization of radiation following photoionization of polarized atoms, *Physica Scripta* **70** 241-250 (2004).
- [46] N.A. Cherepkov, Angular distribution of photoelectrons with specific spin orientation, *Zhur. Eksp. Teor. Fiz.* **65**, 933-946 (1973) (in Russian).
- [47] O. Plotzke, G. Prümper, B. Zimmermann, U. Becker and H. Kleinpoppen, Magnetic dichroism in the angular distribution of atomic oxygen 2p photoelectrons, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2642-2645 (1996)
- [48] O. Hemmers *et al*, Dramatic nondipole effects in low-energy photoionization: Experiment and theoretical study of Xe 5s, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 053002 (2003).
- [49] S.C. McFarlane, The polarization of characteristic x radiation excited by electron impact, *J. Phys. B* **5**, 1906-1915 (1972).
- [50] S. Flügge, W. Mehlhorn and V. Schmidt, Angular distribution of Auger electrons following photoionization, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 7-9 (1972).

- [51] N.M. Kabachnik, I.P. Sazhina, and K. Ueda, Angular distribution of Auger electrons and fluorescence in cascades and resonantly enhanced transitions, *J. Phys. B* **32** 1769-1781 (1999).
- [52] E.G. Berezhko, N.M. Kabachnik and V.S.Rostovsky, Potential-barrier effects in inner-shell photoionization and their influence on the anisotropy of x-rays and Auger electrons, *J. Phys. B* **11**, 1749-1758 (1978).
- [53] E.G. Berezhko, N.M.Kabachnik and V.V. Sizov, The theory of coincidence experiments on electron impact ionization of inner atomic shells, *J. Phys. B* **11**, 1819-1832 (1978).
- [54] N.M. Kabachnik and I.P.Sazhina, Angular distribution and spin polarization of Auger electrons, *J. Phys. B* **17**, 1335-1342 (1984).
- [55] V.V. Balashov, A.N. Grum-Grzhimailo and N.M. Kabachnik, Angular distribution of autoionization and Auger electrons ejected by electron impact from laser-excited and polarized atoms, *J. Phys. B* **30**, 1269-1291 (1997).
- [56] K. Ueda, Y. Shimizu, H. Chiba, M. Kitajima, H. Tanaka, S. Fritzsche and N.M.Kabachnik, Experimental and theoretical study of the Auger cascade following  $2p \rightarrow 4s$  photoexcitation in Ar, *J. Phys. B* **34**, 107-119 (2001).
- [57] K. Blum, B. Lohmann and E. Taute, Angular distribution and polarization of Auger electrons, *J. Phys. B* **19**, 3815-3825 (1986).
- [58] U. Kleiman and B. Lohmann, Large dynamic spin polarization parameters for diagram  $L_3M_1M_{4,5}$  Auger transitions, *J. Phys. B* **33**, 2653-2663 (2000).
- [59] K. Bartschat and A.N. Grum-Grzhimailo, Vector  $(e, e'\gamma)$  correlations in ionization-excitation of He by electron impact, *J. Phys. B* **35**, 5035-5050 (2002).
- [60] E.G. Berezhko and N.M. Kabachnik, Theoretical study of inner-shell alignment of atoms in electron impact ionization: angular distribution and polarization of x-rays and Auger electrons, *J. Phys. B* **10**, 2467-2477 (1977).
- [61] C. Pan and A.F. Starace, Angular distributions for near-threshold  $(e, 2e)$  processes for Li and Mg, *Phys. Rev. A* **47**, 2389-2392 (1993).

- [62] M. Streun, G. Bauman, W. Blask, J. Rasch, I. Bray, D.W. Fursa, S. Jones, A.H. Madison, H.R.T. Walters and C.T. Whelan, Spin dependence of (e,2e) collisions on lithium at 54.4 eV, *J. Phys. B* **31**, 4401-4411 (1998).
- [63] J. Eichler, A. Ichihara and T. Shirai, Alignment caused by photoionization and in radiative electron capture into excited states of hydrogenic high-Z ions, *Phys. Rev. A* **58**, 2128-2135 (1998).
- [64] J. Eichler and A. Ichihara, Polarization of photons emitted in radiative electron capture by bare high-Z ions, *Phys. Rev. A* **65**, 052716 (2002).
- [65] A. Surzhykov, S. Fritzsche and Th. Stöhlker, Two-step radiative recombination of polarized electrons into bare, high-Z ions, *Nucl. Instr. Methods in Phys. Res. B* **205**, 391-394 (2003).
- [66] P.D. Fainstein, L. Gulyas, F. Martin and A. Salin, Angular asymmetry of low-energy electron emission in ion-atom collisions, *Phys. Rev. A* **53**, 3243-3246 (1996).
- [67] H. Tanuma, T. Hayakawa, C. Verzani, H. Kano, H. Watanabe, B.D. DePaola and N. Kobayashi, Polarization spectroscopy of  $O^{5+}$  ( $1s^23p$ ) states produced in the collisions of  $O^{6+}$  with He and  $H_2$ , *J. Phys. B* **33**, 5091-5098 (2000).
- [68] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, 2nd ed.* (Pergamon, Oxford,1965).
- [69] A.I. Akhiezer and B.B. Beresteckii, *Quantum Electrodynamics* (Nauka, Moscow, 1969).
- [70] M. Gail, N. Grün and W. Scheid, Angular distribution of radiation emitted after resonant transfer and excitation, *J. Phys. B* **31**, 4645-4654 (1998).
- [71] Ph. Golecki and H. Klar, (e,2e) from laser-excited atoms with spin-polarized electrons, *J. Phys. B*, **32**, 1647-1656 (1999).
- [72] H. Aksela, Resonant Auger spectroscopy of atoms and molecules, *J. Elect. Spectr. Relat. Phenomena*, **72**, 235-242 (1995)
- [73] K. Ueda, Y. Shimizu, H. Chiba, Y. Sato, M. Kitajima, H. Tanaka, and N.M. Kabachnik, Experimental determination of Auger-decay amplitudes from the angular correlations in Auger cascades following the  $2p \rightarrow 4s$  photo excitation of Ar, *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 5463-5466 (1999).



- [74] B. Langer, N. Berrah, A. Farhat, M. Humphrey, D. Cubaynes, A. Menzel, and U. Becker, Angular distributions of resonant and non-resonant Auger electrons as a test case for the validity of spectator model: the argon  $L_2MM$  case, *J. Phys. B*, **30**, 4255-4266 (1977).
- [75] P. O’Keeffe, S. Aloise, M. Meyer, and A.N. Grum-Grzhimailo, Circular polarization of ion fluorescence completing the analysis of resonant  $Xe^* 4d_{5/2}^{-1}6p$  Auger decay, *Phys. Rev. Lett.*, **90**, 023002(4) (2003).
- [76] I.I. Sobelman, *Introduction to the theory of atomic spectra* (Moscow, Nauka, 1977) (in Russian).
- [77] B. Krassing, J.-C. Bilbeux, R.W. Dunford, D.S. Gemmell, S. Hasegawa, E.P. Hanter, S.H. Southworth, L. Young, L.A. LaJohn, and R.H. Prat, Nondipole asymmetries of Kr  $1s$  photoelectrons, *Phys. Rev. A*, **67**, 022707 (2003).
- [78] B. Lohmann, U. Hergenhahn, and N.M. Kabachnik, Spin polarization of Auger electrons from noble gases after photoionization with circularly polarized light, *J. Phys. B*, **26**, 3327-3338 (1993).
- [79] B. Schmidke, M. Drescher, N.A. Cherepkov, and U. Heinzmann, On the impossibility to perform a complete valence-shell photoionization experiment with closed-shell atoms, *J. Phys. B*, **33**, 2451-2465 (2000).
- [80] C.N. Yang, On the angular distribution in nuclear reactions and coincidence measurements, *Phys. Rev.* **74**, 764-772 (1948).
- [81] A.F. Starace, R.H. Rast, and S.T. Manson, Photoelectron angular distributions of  $s$  electrons in open-shell atoms, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 1522-1525 (1977).
- [82] P.C. Deshmukh and S.T. Manson, Photoionization of magnesium in the relativistic random-phase approximation, *Phys. Rev. A*, **28**, 209-217 (1983).
- [83] D.-S. Kim, Y.S. Kim, H.-L. Zhou, and S.T. Manson, Photoelectron angular distribution of the  $2p$  subshell for the  $1s2s2p\ ^4P$  state of  $He^-$ ,  $Li$  and  $Be^+$ , *J. Phys. B*, **30**, 3379-3386 (1977).
- [84] J.P. Connerade and V.K. Dolmatov, Overlapping resonances in the  $\beta$ -parameter spectrum, *J. Phys. B*, **30**, L181-L187 (1997)

- [85] L.Vo Ky, P. Faucher, A. Hibbert, J.-M. Li, Y.-I. Qu, J. Yan, J.C. Chang, and F. Belly-Dubau, Inner-shell photoionization of ground-state lithium: Theoretical calculation in the photon energy region below 130 eV including  $1sln'l'$  Rydberg resonances series, *Phys. Rev. A*, **57**, 1045-1057 (1998).
- [86] K. Glemža and A. Kupliauskienė, 1s-shell photoionization cross sections and asymmetry parameters  $\beta$  of Na atoms in excited states, *Lithuanian J. Phys.* **37**, 384-390 (1997).
- [87] N. Rakštikas and A. Kupliauskienė, Strong dependence of the 2p photoionization cross sections of Na atoms on valence electron state, *Physica Scripta*, **58**, 587-594 (1998).
- [88] A. Kupliauskienė, On the application of relaxed-orbital and sudden perturbation approximations for the photoionization of atoms, *J. Phys. B*, **34**, 345-361 (2001).
- [89] A.K. Jain and K.C. Matur, Multipole interference effect in the photoionization of sodium, *J. Phys. B*, **26**, 433-444 (1993).
- [90] V.K. Dolmatov and S.T. Manson, Enhanced nondipole effects in low energy photoionization, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 939-942 (1999).
- [91] H. Küst, U. Kleiman, and W. Mehlhorn, Alignment after Xe  $L_3$  photoionization by synchrotron radiation, *J. Phys. B*, **36**, 2073-2082 (2003).
- [92] U. Heinzmann, G. Schönhense, and J. Kessler, Polarization of photoelectrons ejected by unpolarized light from xenon atoms, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1603-1605 (1979).
- [93] N.A. Cherepkov and S.K. Semenov, Non-dipole effects in spin polarization of photoelectrons from Xe 4p and 5p shells, *J. Phys. B*, **34**, L211-L217 (2001).
- [94] G. Van der Laan and B.T. Thole, Spin polarization and magnetic dichroism in photoemission from core and valence states in localized magnetic systems. II. Emission from open shells, *Phys. Rev. B*, **48**, 210-223 (1993).
- [95] G. Van der Laan, E. Arenholz, E. Navas, A. Bauer, and G. Kaindl, Magnetic circular dichroism and orbital momentum coupling in 4d photoemission from Cd(0001), *Phys. Rev. B*, **53**, R5998-R6001 (1996).
- [96] G. Prümper *et al*, Magnetic circular dichroism in the ion yield of polarized chromium atoms at the 2p edge, *Phys. Rev. A*, **68**, 032710(6) (2003).

- [97] J. Schulz, Ph. Wernet, K. Godehusen, R. Müller, P. Zimmermann, M. Martins, and B. Sonntag, Linear magnetic dichroism in the 4d photoionization of atomic europium, *J. Phys. B*, **35**, 907-916 (2002).
- [98] A.N. Grum-Grzhimailo, Non-dipole effects in magnetic dichroism in atomic photoionization, *J. Phys. B*, **34**, L359-L365 (2001).
- [99] R. Karazija, *Introduction to the Theory of X-Ray and Spectra of Free Atoms* (Plenum, New York and London, 1996).
- [100] A. Kupliauskienė, Relative intensities of shake-up satellites in photoionization of potassium atoms from  $3p^64s$  and  $3p^64p$ , *J. Phys. B*, **27**, 5647-5660 (1994).
- [101] A. Kupliauskienė, Application of nonorthogonal radial orbitals to atoms, *Lithuanian Journal of Physics*, **35**, 113-121 (1995).
- [102] C.M. Lee, Spin polarization and angular distribution of photoelectrons in the Jacob-Wick helicity formalism. Application to autoionization resonances, *Phys. Rev. A*, **10** 1598 (1974).
- [103] Ch. Froese Fischer, The MCHF atomic-structure package, *Comput. Phys. Commun.*, **64**, 369-398 (1991).
- [104] D. Cubaynes, L. Voky, F.J. Wuilleumier, B. Rouvellou, A. Hibbert, P. Faucher, J.-M. Bizau, L. Journel, H.E. Saraph and F. Bely-Dubau, *Phys. Rev. A*, **57**, 4432 (1998).
- [105] T. Aberg, Theory of X-ray satellites, *Phys. Rev.* **156**, 35-41 (1967).
- [106] B.I. Craig and F.P. Larkins, Photoionization calculations in the 2p subshell of atomic sodium, *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **18** 3569-3580 (1985).
- [107] C.E. Moore, *Atomic Energy Levels*, MBS Circular no. 467, vol. 1 (US Government Printing Office: Washington, DC, 1949).
- [108] T.N. Chang and Y.S. Kim, Photoionization of the 2p subshell of the sodium atom under varying outer-shell environment, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, bf 15 L835-L840 (1982).
- [109] A.M. Isenberg, S.L. Carter, H.P. Kelly and S. Salomonson, Photoionization cross section and resonance structure of atomic sodium, *Phys. Rev. A*, **32**, 1472-1479 (1985).

- [110] N.M. Kabachnik and K.J. Ueda, Theoretical analysis of angular correlation between the photoelectrons and subsequent polarized fluorescence photon in atomic photoionization, *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **28** 5013-5024 (1995).
- [111] P. Strange, P.J. Durham, and B.L. Gyorffy, Dichroic x-ray fluorescence, *Phys. Rev. Lett.*, **67**, 3590-3593 (1991).
- [112] T. Aberg, A scattering approach to the decay of metastable states, *Physica Scripta*, **21**, 495-502 (1980).
- [113] *Atomic Inner-Shell Processes, Ionization and Transition Probabilities*, Ed. B.Crasemann, Vol. 1 (Academic Press, New York, 1975).
- [114] L. Végh, J.H. Macek, Coherences in the decay of autoionizing states in photoionization. I. Exchange effect between photo- and Auger electrons, *Phys. Rev. A*, **50**, 4031-4035 (1994).
- [115] S.A. Sheinerman, V. Schmidt, PCI and interference effects in the energy and angular correlation between the photoelectron and the Auger electron for equal electron energies, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **30**, 1677-1690 (1997).
- [116] N. Scherer, H. Lórch, T. Kerkau, V. Schmidt, Exchange interference between coincident photoelectrons and Auger electrons, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **34**, L339-L344 (2001).
- [117] R. Camilloni et al. Interference effects in the Auger decay of resonantly excited  $2p_{2/3}^{-1}3d$  state of Argon, *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 2646-2645 (1996).
- [118] A.Kupliauskienė, V.Tutlys, Auger decay probability following photoionization of atoms, *Lithuanian J. Phys.*, **43**, 27-34 (2003).
- [119] A.V. Kuplyauskene and Z.I. Kuplyauskis, Doubly excited states of a lithium atom, *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **48**, 237-239 (1980)
- [120] A.V. Kuplyauskene and Z.J. Kuplyauskis, Doubly excited states of  $\text{Be}^+$ , *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **52**, 475-477 (1982).
- [121] A.V. Kuplyauskene and Z.J. Kuplyauskis, Doubly excited states of  $\text{C}^{3+}$  ion, *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **54**, 26-29 (1983).
- [122] A.V. Kuplyauskene, V.E. Briyunas, and A.A. Maknickas, Energies of autoionization states of three-electron ions from boron to neon, *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **64**, 150-152 (1988).

- [123] G.N. Ogurtsov, V.M. Mikishkin, I.P. Flaks, A.V. Kuplyauskene, and Z.I. Kuplyauskis, Experimental and theoretical determination of energies of  $2p^3nl'n'l'$  autoionizing states of Ne II, *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **54**, 230-233 (1983).
- [124] A.V. Kuplyauskene, Autoionization energies of doubly excited states of  $\text{Ne}^{2+}$ , *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **66**, 299-301 (1989).
- [125] A.V. Kuplyauskene and G. Zhukauskas, Spectra of radiative decay of the  $1s^22s^22p^53l'LSJ$  states of sodiumlike ions of chlorine and argon, *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **71**, 8-11 (1991).
- [126] A.V. Kuplyauskene and Z.I. Kuplyauskis, Promising transitions for the construction of VUV potassium vapor lasers, *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **58**, 821-823 (1986).
- [127] A.A. Borovik, I.S. Aleksakhin and A.V. Kuplyauskene, Excitation and electronic decay of autoionization states of alkali-earth atoms (calcium atomic states), *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **51**, 239-242 (1982).
- [128] A.A. Borovik, I.S. Aleksakhin and A.V. Kuplyauskene, Excitation and electronic decay of autoionization states of alkali-earth atoms. Calcium (atomic optically forbidden and ionic states), *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **52**, 254-256 (1982).
- [129] A.A. Borovik, I.S. Aleksakhin, V.F. Bratsev, and A.V. Kuplyauskene, Excitation and electronic decay of autoionization states of alkali-earth atoms: strontium, *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **53**, 583-586 (1983).
- [130] A.A. Borovik, I.S. Aleksakhin, V.F. Bratsev, and A.V. Kuplyauskene, Excitation and electronic decay of autoionization states of alkali-earth atoms. 4: Barium, *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **58**, 601-604 (1985).
- [131] A.Kupliauskienė, V.Tutlys, General study of magnetic dichroism in Auger and fluorescence decay of photoionized atoms, *Lithuanian J. Phys.*, **43**, 35-40 (2003).
- [132] A. Hausmann, B. Kämmerling, H. Kossmann, V. Schmidt, A new approach for a perfect experiment: 2p photoionization of atomic magnesium, *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2669-2671 (1998).
- [133] N.M. Kabachnik, Angular correlation between photoelectron and Auger electron in two-step double photoionization of atoms, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **25**, L389 (1992).

- [134] S. Zakowicz, W. Scheid, N. Grün, Dielectronic recombination into hydrogen-like heavy ions with emission of two photons, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **37**, 131-145 (2004).
- [135] S. Schippers *et al*, Interference effects in the photorecombination of argonlike  $\text{Sc}^{3+}$  ions: Storage-ring experiments and theory, *Phys. Rev. A*, **65**, 042723 (2002).
- [136] Andersen *et al*, Radiative recombination with highly charged  $\text{Si}^{6+}$  and  $\text{Si}^{11+}$  ions. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **26**, 277 (1992).
- [137] H. Gao, D.R. DeWitt, R. Schuch, W. Zong, S Asp and P. Pajek, Observation of enhanced electron-ion recombination rates at very low energies, *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 4381 (1995)
- [138] A. Müller, S. Schennach, M. Wagner, J. Haselbauer, O. Uwira and W. Spies, *Physica Scripta*, **T37**, 62-65 (1991).
- [139] T. Haykawa *et al*, Polarization spectroscopy of  $\text{N}^{4+}(1s^23p)$  states produced in collisions of  $\text{N}^{5+}(1s^2)$  with He and  $\text{H}_2$ , *Physica Scripta*, **T92**, 322-324 (2001).
- [140] R. Kiselyus, A.V. Kuplyauskene, Z.B.Rudzikas, Fitting formula of the radiative recombination rates of electron with ion in the configuration  $1s^22s^{N_1}2p^{N_2}$ . *Optika i spektroskopiya*, **63**, 244-248 (1987); *Opt. Spectrosc.*, **63**, 143-146 (1987).
- [141] Th. Stöhlker *et al*. Strong alignment observed for the time-reversed photoionization process studied in relativistic collisions with bare Uranium ions, *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 3270-3273 (1997).
- [142] A.V. Kupliauskienė, R.L. Furmonavichyute, Cross-sections for resonance charge exchange with electron excitation due to collisions of  $\text{Ca}^{17+}$  with He and  $\text{H}_2$ , *Opt. Spectros. (USSR)*, **71**, 13-15 (1991).
- [143] A.N. Grum-Grzhimailo, K. Bartschat, B.Feurstein, W. Mehlhorn, Near-threshold structures in electron-collision-induced alignment of core-excited atomic states, *Phys. Rev. A*, **60**, R1751-R1754 (1999).
- [144] D.P.Dewangan, A BBK-type theory for angular correlation parameters for electron-impact excitation of  $\text{H}(2p)$ , *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **30**, L467-L473 (1997).
- [145] E.L. Heck, J.P.Gauntlett, Polarization and angular correlation relations in electron-photon-photon coincidence events, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **19**, 3633-3647 (1986).

- [146] C.E. Theodosiou, Collisional excitation and alignment of  $np^5(n+1)s^2$  autoionizing states of the alkali-metal atoms, *Phys. Rev. A*, **36**, 3138-3145 (1987).
- [147] A.W. Pantangiwar and R. Srivastava,  $e^\pm$  impact excitation of autoionizing levels in alkalis: a distorted-wave approach, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **20**, 5881-5902 (1987).
- [148] V.V. Balashov, *Quantum Theory of Scattering* (Moscow, Nauka), 1986, 198 p.
- [149] P. Serapinas and A. Kupliauskienė, On current filament formation in arc cathode plasma, *J. Phys. D*, **27**, 330-337 (1994).
- [150] M.K. Inal and J. Dubau, Polarization of dielectronic recombination satellite lines, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **22**, 3329-3341 (1989).
- [151] T. Kandler et al, Transition selective investigation of the resonant transfer and excitation in  $U^{90+} \rightarrow C$  collisions, *Phys. Lett. A*, **204**, 274-280 (1995)
- [152] V.V. Balashov, I.V. Bondarenko, V.K. Dolinov, and S.I. Strakhova, Angular anisotropy of cascade photons in the process of dielectronic recombination of ions, *Optika i Spektroskopya*, **77**, 891-897 (1994); *Opt. Spectrosc.*, **77**, 801-806 (1994).
- [153] A.R. Sohval, J.P. Delvaille, K. Kalata, K. Kirby-Docken, and H.W. Schnopper, Model for radiative electron capture: an interpretation of the line width, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, **9**, L25-L29 (1976).
- [154] N.R. Badnell, Auger emission following resonant transfer excitation in collisions of  $F^{8+}$  with  $H_2$ , *Phys. Rev. A*, **41**, 3555-3558 (1990).
- [155] C.P. Bhatia, Angular distribution of Auger electrons and photons in resonant transfer and excitation collisions of ions with light targets, *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 1103-1106 (1990).
- [156] N.R. Badnell, Anisotropic radiative emission effects on deduced resonant-transfer-excitation cross sections, *Phys. Rev. A*, **42**, 3795-3800 (1990).
- [157] J.W. Thomson, N. Andersen, D. Doweck, J.C. Houver, J.H.V. Lauritsen, U. Müller, J.O.P. Pedersen, J. Saldago, and A. Svensson, Orbital alignment dependence of electron transfer cross sections. IV: 1-15 keV  $Ne^+$ ,  $Ar^+$ - $Na(3p)$  collisions, *Z. Phys. D*, **37**, 133-139 (1996).

- [158] K.J. LaGatutta, Interference effects in electron-ion recombination. I. Resonance channels only, *Phys. Rev. A*, **36**, 4662-4666 (1987).
- [159] U. Fano, Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator technique, *Rev. Mod. Phys.*, **29**, 74-93 (1957).
- [160] A. Kupliauskienė and V. Tutlys, General expression for the dielectronic recombination cross section of polarized ions with polarized electrons, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* (2005).
- [161] M.H. Chen and J.H. Scofield, Relativistic effects on angular distribution and polarization of dielectronic satellite lines of hydrogenlike ions, *Phys. Rev. A*, **52**, 2057-2061 (1995).
- [162] Z.I. Kuplyauskis, K.K. Glemzha, and A.V. Kuplyauskene, Dielectronic satellites of the  $C^{4+}$  resonance line, *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **56**, 12-15 (1984).
- [163] K.K. Glemzha, A.V. Kuplyauskene and Z.I. Kuplyauskis, Effect of orthogonalization of radial orbitals of free and bound electrons on the electron-impact excitation cross sections of ions, *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **62**, 14-16 (1987).
- [164] K.K. Glemzha, A.V. Kuplyauskene and Z.I. Kuplyauskis, Contribution of high values of the momentum of an incident electron to the electron-impact excitation cross section of ions, *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **63**, 261-262 (1988).
- [165] A. Dorn, A. Elliott, J. Lower, E. Wiegold, J. Berakdar, A. Engelns, and H. Klar, Orientation dichroism in the electron-impact ionization of laser-oriented atomic sodium, *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 257-260 (1998).
- [166] J. Lower, E. Wiegold, J. Berakdar, and S. Mazevet, Magnetic and orbital dichroism in  $(e,2e)$  ionization of sodium, *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 624-627 (2001).
- [167] R.K. Singh and R. Shanker, Polarization of argon  $K$  x radiation following electron-impact ionization, *Phys. Rev. A*, **67**, 012708 (2003).
- [168] A.S. Kheifets, I. Bray, I.E. McCarthy, and Bo Shang, Theoretical triple differential cross section of the helium atom ionization with excitation to the  $n = 2$  ion state, *Phys. Rev. A*, **50**, 4700-4706 (1994)
- [169] K. Bartchat and A.N. Grum-Grzhimailo, Vector  $(e,e'\gamma)$  correlations in ionization-excitation of He by electron impact, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **35**, 5035-5050 (2002).



- [170] V.V. Sizov and N.M. Kabachnik, Inner-shell alignment of atoms in ion-atom collisions. I. Impact ionization, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **13**, 1601- (1980).
- [171] A. Götz, W. Mehlhorn, A. Raeker, and K. Bartschat, Ionization-excitation of He atoms by electron impact: alignment of  $\text{He}^+(2p^2P)$ , *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **29**, 4699-4708 (1996).
- [172] S. Gelfort, H. Kerkow, V.P. Petukhov, and E.A. Romanovskii, Influence of Coster-Kroning transitions on the polarization of *L*-shell X-Rays induced by proton impact, *ZhETF*, **113**, 2005-2010 (1998).
- [173] A.V. Kuplyauskene and A.A. Maknitskas, Theoretical study of the ionization of a helium atom by electrons with excitation of helium ions, *Opt. Spectrosc. (USSR)*, **71**, 127-129 (1992).
- [174] T.Aberg and J.Tulkki, Inelastic X-ray scattering including resonance phenomena, In: *Atomic Inner-Shell Physics*, Ed. B.Crasemann (Plenum Publ., London), 419-463 (2005).
- [175] Z.I.Kuplyauskis and A.V.Kuplyauskiene, Cross sections for coherent scattering of photons by zinc atoms and ions, *Opt. Spectrosc.*, **41**, 399-400 (1976).
- [176] S.L.Ionushauskas, A.V.Kuplyauskene and Z.I.Kuplyauskis, Cross sections of iron atoms and ions for photon scattering, *Opt. Spectrosc.*, **47**, 248-250 (1979).
- [177] J.E.Fernandez, J.H.Hubbell, A.L.Hanson, and L.V.Spencer, Polarization effects on multipole scattering gamma transport, *Radiat. Phys. Chem.*, **41**, 579-630 (1993).
- [178] M.Ya.Agre, Scattering of partially polarized light by oriented atoms, *ZhETF*, **120**, 562-569 (2001) (in Russian).
- [179] M.Ya.Agre, Scattering of partially polarized light by aligned atoms, *Optika i spektroskopija*, **32**, 550-555 (2002) (in Russian).
- [180] A.N.Khoperskii, A.M.Nadolinskii, and V.A.Yavna, Many-particle effects in resonance inelastic scattering of x-ray photons by atoms, *ZhETF*, **128**, 398-413 (2001) (in Russian).