

# Задержка электронов при фотоионизации $2s$ - и $2p$ -оболочек Ne с учетом рассеяния фотоэлектронов

Л. В. Чернышева<sup>1)</sup>, В. Г. Яржемский\*

<sup>+</sup> Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

\* Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 12 июня 2024 г.

После переработки 5 июля 2024 г.

Принята к публикации 9 июля 2024 г.

Приведены формулы для расчета задержки фотоионизации атома с учетом взаимодействия между каналами и рассеяния фотоэлектрона. Рассчитана разность задержек фотоионизации  $2p$ - и  $2s$ -оболочек атома Ne для энергий фотона до 200 эВ. Полученная величина задержки при энергии фотона 105 эВ, равная 18.5 ас ( $1 \text{ ас} = 10^{-18} \text{ с}$ ), примерно на 8 ас превышает полученные ранее эти разности задержек, рассчитанные с учетом только взаимодействий между каналами, и с точностью до ошибки эксперимента согласуется с двумя имеющимися экспериментальными величинами.

DOI: 10.31857/S0370274X24080043, EDN: UIXFVG

**Введение.** Последние достижения в области генерации ультракоротких лазерных импульсов позволили разрешить процесс фотоионизации атомных оболочек во времени [1]. Время задержки фотоионизации содержит структурную и динамическую информацию об атомах и молекулах, включающую также корреляционные эффекты [2]. Для времени задержки при ионизации фотоном 104 эВ  $2p$ -оболочки Ne относительно  $2s$ -оболочки были получены два результата:  $21 \pm 5 \text{ ас}$  ( $1 \text{ ас} = 10^{-18} \text{ с}$ ) [3] и  $11 \pm 7 \text{ ас}$  [4], а задержка фотоэлектронов из  $3p$ -оболочки относительно  $3s$ -оболочки Ag зависит от энергии фотона и может достигать 100 ас [5], наблюдаются большие изменения задержки вблизи куперовского минимума [6].

Согласно работам Вигнера [7] и Смита [8] эта задержка определяется производной по энергии фазы рассеяния электрона, образующегося при фотоионизации. Поскольку эксперименты проводятся на разреженных газах, рассеянием вылетающего электрона на других атомах обычно пренебрегают и рассматривают рассеяние фотоэлектрона на ионизируемом атоме. Задержки времени фотоэлектронов рассчитывались методами ПСФО (приближение случайных фаз с обменом) [9–14], R-матрицы [15], МЧТВ (многочастичной теории возмущений) [16], ВК (взаимодействия конфигураций) [17] и ЗВХФ (зависящим от времени методом Хартри–Фока) [18]. Расчеты времен задержки ионизации валентных оболочек атомов

инертных газов и изоэлектронных отрицательных ионов галогенов релятивистским методом ПСФО [19] показали, что, кроме отличий, связанных с изменением энергии связи в отрицательных ионах вблизи порога ионизации задержки отрицательны и составляют  $-50$ – $-100 \text{ ас}$  [20]. Анизотропия углового распределения времени задержки фотоэлектронов может быть вызвана взаимодействиями между каналами вблизи резонансов Фано [21], а также двухфотонным [3, 22] или многофотонным [24] характером ионизации. В работах [9–18, 20] учитывалось влияние взаимодействий между частично-дырочными парами в различных каналах на задержку времени фотоионизации, в частности в случае ионизации атома Ne это каналы  $2s \rightarrow \epsilon p$ ,  $2p \rightarrow \epsilon s$  и  $2p \rightarrow \epsilon d$ . Кроме того, на задержку процесса влияет релаксация дырки, приводящая к появлению сателлитов встряски (shake-off) [25] и рассеяние фотоэлектрона на электронах атома [26]. Сателлиты встряски сдвинуты относительно основной линии на несколько десятков эВ и не влияют на ее время задержки. Рассеяние фотоэлектронов приводит к появлению сопряженных сателлитов встряски и уменьшению интенсивности основной линии. Именно эти процессы соответствуют теории Вигнера [7], однако их влияние на задержку фотоионизации основной линии не исследовалось. Целью настоящей работы является определение вкладов этих трех процессов в задержку во времени процесса фотоионизации и расчет задержки фотоионизации  $2s$ - и  $2p$ -оболочек Ne.

<sup>1)</sup> e-mail: Larissa.chernysheva@mail.ioffe.ru

**Метод расчета.** Задержка в фотоионизации выражается через фазу рассеяния  $\eta$  следующей формулой [7, 8]:

$$\tau = \hbar d\eta/dE. \quad (1)$$

Возможные типы рассеяния частично-дырочной пары  $i^{-1}p$ , возникающей при фотоионизации атома показаны на рис. 1 в виде диаграмм Фейнмана, где линия, идущая слева направо (справа налево), соответствует частице (дырке), пунктирная линия соответствует взаимодействию электрона с фотоном, а волнистая линия – кулоновскому взаимодействию между электронами. Обменные диаграммы на рис. 1 для краткости не показаны, но в расчетах учитываются также и обменные члены. Диаграмма 1a изображает фотоионизацию, а диаграмма 1b – рассеяние частично дырочной пары  $i^{-1}p$  на частично-дырочной паре  $j^{-1}q$ . На рисунке 1c показаны диаграмма с обращением времени по отношению к диаграмме 1b, которая учитывает корреляции в основном состоянии. Влияние процессов 1b и c на задержку при фотоионизации учитывалось методом ПСФО [9–14, 20] и другими методами [15–18].

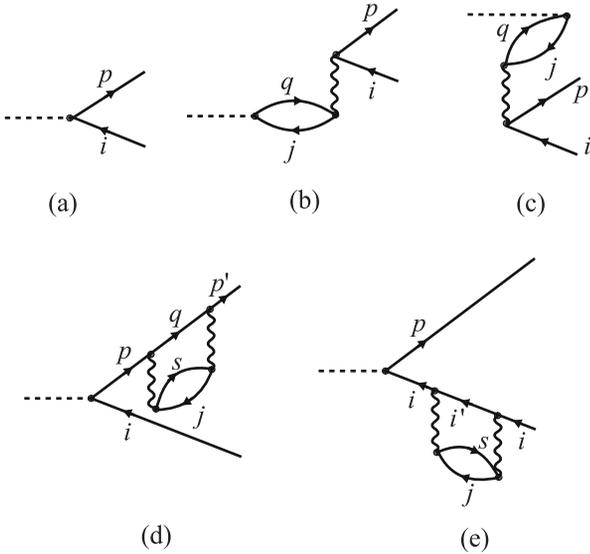


Рис. 1. Диаграммы Фейнмана для многоэлектронных процессов при фотоионизации (a) – фотоионизация в одноэлектронном приближении; (b) – взаимодействие между частично-дырочными парами; (c) – диаграмма с обращением времени по отношению к диаграмме (b); (d) – рассеяние фотоэлектрона на электронах атома; (e) – релаксация вакансии. Обменные диаграммы здесь не показаны, но учитывались в расчетах

Диаграмма 1d изображает рассеяние фотоэлектрона на том же атоме с образованием частично дырочной пары  $j^{-1}s$ . Такое рассеяние приводит к

уменьшению сечения фотоионизации основной линии ( $E_p = \omega + E_i$ ) и появлению дополнительной фазы [26], что соответствует вигнеровскому члену. Процессы рассеяния фотоэлектронов на электронах ионизируемого атома проявляются также в фотоэлектронных спектрах атомов в виде сопряженных сателлитов встряски (conjugate shake-up, shake-off) при энергиях фотоэлектрона  $E_q = \omega + E_i + E_j - E_s$  [27, 28]. Диаграмма 1e соответствует монополюной ( $i = i'$ ) релаксации основной вакансии или ее Оже-распаду  $i \neq i'$ . Монополюная релаксация приводит к появлению дискретных сателлитов встряски shake-up и континуума shake-off [27–30]. Задержка фотоионизации для континуума shake-off была выражена через функцию Грина вакансии [25]. Однако, при энергии связи, соответствующей основной линии, и отсутствии Оже-распада мнимая часть СЭЧ (собственно) функции Грина дырки  $i^{-1}$  равна нулю и также, согласно формуле (1), равен нулю вклад диаграммы 1e в задержку фотоионизации. Поскольку в настоящей работе мы рассматриваем задержку только для основных линий, мы ограничимся расчетом только диаграмм 1b, c и d. Для диаграммы 1d рассчитывается также диаграмма, соответствующая обращению времени (на рис. 1 она для краткости не показана). Учитываются также обменные диаграммы.

Вклад диаграмм 1a, b и c рассчитывается как решение  $\langle i|D(\omega)|p\rangle$  интегрального уравнения:

$$\langle i|D(\omega)|p\rangle = \langle i|d|p\rangle + \quad (2)$$

$$+ \left( \sum_{j < F, q \geq F} - \sum_{j > F, q \leq F} \frac{\langle i|D(\omega)|p\rangle \langle q|U|j\rangle}{\hbar\omega - E_j + E_q + i\eta(1 - 2n_j)} \right),$$

где  $\langle i|d|p\rangle$  – дипольный матричный элемент. Кулоновский матричный элемент можно представить в виде

$$\langle iq|U|pj\rangle = \sum_{\lambda} \alpha_{iqpj}^{\lambda} V_{iqpj}^{\lambda} - \sum_{\lambda'} \beta_{iqjp}^{\lambda'} V_{iqjp}^{\lambda'}, \quad (3)$$

а кулоновские и обменные интегралы представляются в виде:

$$V_{iqpj}^{\lambda} = [l_i l_p l_j l_q] \begin{pmatrix} l_i & \lambda & l_p \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_j & \lambda & l_q \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} R_{iqpj}^{\lambda}, \quad (4)$$

здесь  $[ab] = \sqrt{(2a+1)(2b+1)} \dots$ , выражения в круглых скобках обозначают 3j-символы, а радиальные кулоновские интегралы рассчитываются по обычной формуле:

$$R_{iqpj}^{\lambda} = \int_0^{\infty} P_i(r) P_p(r) dr \int_0^{\infty} \frac{r_{<}^{\lambda}}{r_{>}^{\lambda+1}} P_q(r') P_j(r') dr'. \quad (5)$$

Волновые функции основного и возбужденных состояний  $P_j(r)$  рассчитывались методом Хартри–Фока [31, 32]. Для получения дополнительных весовых множителей в формуле (3) надо каждой диаграмме Фейнмана сопоставить топологически эквивалентную моментную и спиновую (в которой удалены линии взаимодействия) диаграммы [33]. Применяя методы расчета моментных диаграмм [34], получаем следующие формулы для расчета множителей перед кулоновским и обменным интегралами в (3):

$$\alpha_{i q p j}^{\lambda} = \frac{2}{3} \delta(\lambda, 1), \quad (6)$$

$$\beta_{i q p j}^{\lambda'} = (-1)^{\lambda+\lambda'} \left\{ \begin{matrix} l_i & \lambda & l_p \\ l_q & \lambda' & l_j \end{matrix} \right\} \delta(\lambda, 1), \quad (7)$$

где фигурные скобки обозначают  $6j$ -символ. Отметим, что формулы (6) и (7) отличаются от соответствующих формул [35] множителем  $1/3$ , поэтому множитель  $1/3$  опущен в формуле (2).

Вклад диаграммы 1d удобно описывать при помощи функции Грина фотоэлектрона, собственно энергетическая часть которой дается формулой:

$$\langle p | \Sigma(\omega) | p' \rangle = \frac{1}{(2l_p + 1)} \left[ \sum_{\substack{E_s, E_q > F \\ E_j \leq F}} - \sum_{\substack{E_s, E_q \leq F \\ E_j > F}} \frac{\sum_{\lambda, \lambda'} \tilde{U}_{pp'qjs}^{\lambda, \lambda'}}{\omega - E_q - E_s + E_j + i\delta(1 - 2n_q)} \right], \quad (8)$$

где  $n_\nu$  – ступенька Ферми, связанная с энергией Ферми  $F$  соотношением:

$$n_\nu = \begin{cases} 1, & \nu \leq F, \\ 0, & \nu > F. \end{cases} \quad (9)$$

Суммирование в формуле (8) включает также интеграл по непрерывному спектру, который включает интеграл в смысле главного значения и вычет в полюсе.

Кулоновский матричный элемент в (8) включает также вклады с обменом частиц на рис. 2d в первой

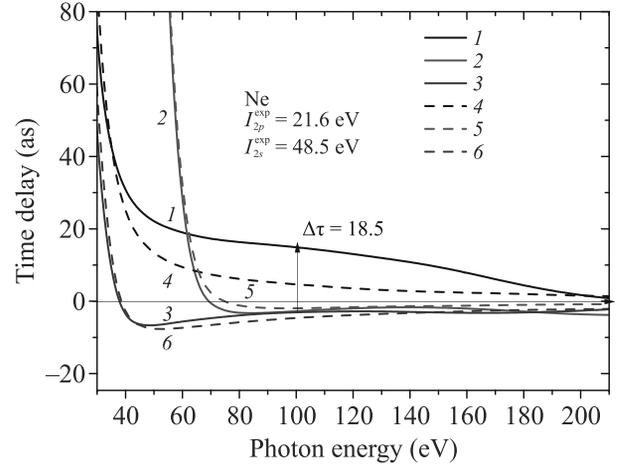


Рис. 2. (Цветной онлайн) Времена задержки в Ne для переходов:  $2p$ - $ed$  (1),  $2s$ - $ep$  (2),  $2p$ - $es$  (3) в фотоионизации с учетом взаимодействий между переходами и рассеяния, а также для переходов  $2p$ - $ed$  (4),  $2s$ - $ep$  (5),  $2p$ - $es$  (6) в фотоионизации с учетом только взаимодействий между переходами

вершине, во второй вершине и в двух вершинах одновременно. Применяя технику расчета моментных диаграмм [34], получаем:

$$\tilde{U}_{pp'qjs}^{\lambda\lambda'} = \frac{2V_{pjqs}^{\lambda} V_{p'jqs}^{\lambda} + 2V_{pjsq}^{\lambda'} V_{p'jsq}^{\lambda'}}{2\lambda + 1} - (-1)^{\lambda+\lambda'} \times \left\{ \begin{matrix} l_p & \lambda & l_q \\ l_s & \lambda' & l_j \end{matrix} \right\} (V_{pjqs}^{\lambda} V_{p'jsq}^{\lambda'} + V_{p'jsq}^{\lambda} V_{pjqs}^{\lambda'}). \quad (10)$$

Следует отметить, что при выводе этой формулы угловые моменты в петле не связывались в полный момент. Возможен также подход, в котором моменты в петле связываются в полный момент и производится суммирование по всем промежуточным полным моментам [36, 37].

Вклад диаграммы рис. 1d будем выражать через собственно энергетическую часть функции Грина, которая дается решением интегрального уравнения:

$$\langle p' | \tilde{\Sigma}(\omega) | p \rangle = \langle p' | \Sigma(\omega) | p \rangle + \int_{E''} \frac{\langle p'' | \Sigma(\omega) p' \rangle \langle p | \tilde{\Sigma}(\omega) | p'' \rangle dE_{p''}}{E_p - E_{p''} + i\delta}. \quad (11)$$

Здесь  $\langle p' | \tilde{\Sigma}(\omega) | p \rangle$  есть неприводимая собственно-энергетическая часть одноэлектронной функции Грина (8).

Тогда амплитуда фотоионизации с учетом как процессов рассеяния частично-дырочных пар (формула (2) и рис. 1b и с), так и с учетом рассеяния электронов через собственно-энергетическую часть

функции Грина (формула (8) и рис. 1d) сводится к решению следующего уравнения:

$$\langle i|D^\Sigma(\omega)|p\rangle = \langle i|D(\omega)|p\rangle + \int_{E'} \frac{\langle i|D(\omega)|p'\rangle \langle p'|\tilde{\Sigma}(\omega)|p\rangle dE_{p'}}{E_p - E_{p'} + i\delta}, \quad (12)$$

где  $\langle i|D(\omega)|p\rangle$  – дипольные матричные элементы (2), а  $\langle p'|\tilde{\Sigma}(\omega)|p\rangle$  – СЭЧ (8).

И наконец, через амплитуды фотоионизации, полученные как решения уравнения (12), определяем время задержки в фотоионизации с учетом как взаимодействий между каналами, так и рассеяния фотоэлектронов:

$$\begin{aligned} \text{Im}f_{i \rightarrow p}(\omega) &= \sin(\delta_{\ell_p} - l_p\pi/2) \times \\ &\times \frac{[l_p]}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} l_p & 1 & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{Re}\langle p||D^\Sigma(\omega)||i\rangle + \\ &+ \cos(\delta_{\ell_p} - l_p\pi/2) \frac{[l_p]}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} l_p & 1 & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{Im}\langle p||D^\Sigma(\omega)||i\rangle, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\omega = E_p - E_i, \quad E_p = k^2/2.$$

$$\begin{aligned} \text{Re}f_{i \rightarrow p}(\omega) &= \cos(\delta_{\ell_p} - l_p\pi/2) \times \\ &\times \frac{[l_p]}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} l_p & 1 & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{Re}\langle p||D^\Sigma(\omega)||i\rangle - \\ &- \sin(\delta_{\ell_p} - l_p\pi/2) \frac{[l_p]}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} l_p & 1 & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{Im}\langle p||D^\Sigma(\omega)||i\rangle, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \tau_{n_i l_i}^{RPAE}(\omega) &= \frac{d}{d\omega} \text{arctg} \left( \frac{\text{Im}f(\omega)}{\text{Re}f(\omega)} \right) = \\ &= \frac{\text{Re}f(\omega) * \text{Im}'f(\omega) - \text{Im}f(\omega) * \text{Re}'f(\omega)}{(\text{Re}f(\omega)^2 + \text{Im}f(\omega)^2)}. \end{aligned} \quad (15)$$

В формуле (15) производная по энергии берется как от фазы волновой функции  $\delta_{l_p}$ , так и от дипольного матричного  $\langle p||D^\Sigma(\omega)||i\rangle$  элемента, рассчитанного с учетом взаимодействия между каналами и неупругого рассеяния.

**Результаты и обсуждение.** Волновые функции возбужденных состояний дискретного и непрерывного спектра рассчитывались в поле “замороженной” дырки, т.е. с волновыми функциями основного состояния, где отсутствие электрона учитывалось числом заполнения. В каждом канале учитывалось по три возбужденных состояния и непрерывный спектр. Для трех каналов фотоионизации валентной оболочки атома Ne  $2s \rightarrow \varepsilon p$   $2p \rightarrow \varepsilon d$  и  $2p \rightarrow \varepsilon s$

рассчитывались амплитуды фотоионизации в приближении ПСФО (см. рис. 1a) и с учетом рассеяния (см. рис. 1d). Учитывалось монополярное и дипольное рассеяние фотоэлектронов, сопровождающиеся монополярными и дипольными возбуждениями из 2s- и 2p-оболочек в дискретные возбужденные состояния и непрерывный спектр. Список переходов, включенных в расчеты рассеяния фотоэлектронов, приведен в табл. 1.

**Таблица 1.** Переходы, которые учитывались при расчете рассеяния. Обозначения в первой строке соответствуют рис. 1d

<i>i</i>	<i>p</i>	<i>q</i>	<i>j</i>	<i>s</i>	<i>p'</i>
2p	$\varepsilon d$	$\varepsilon d$	2p	3p, 4p, 5p, $\varepsilon p$	$\varepsilon d$
2p	$\varepsilon d$	$\varepsilon f$	2p	3d, 4d, 5d, $\varepsilon d$	$\varepsilon d$
2p	$\varepsilon d$	$\varepsilon f$	2p	3s, 4s, 5s, $\varepsilon s$	$\varepsilon d$
2p	$\varepsilon d$	$\varepsilon p$	2p	3d, 4d, 5d, $\varepsilon d$	$\varepsilon d$
2p	$\varepsilon d$	$\varepsilon p$	2p	3s, 4s, 5s, $\varepsilon s$	$\varepsilon d$
2p	$\varepsilon d$	$\varepsilon d$	2s	3s, 4s, 5s, $\varepsilon s$	$\varepsilon d$
2p	$\varepsilon d$	$\varepsilon f$	2s	3p, 4p, 5p, $\varepsilon p$	$\varepsilon d$
2p	$\varepsilon d$	$\varepsilon p$	2s	3p, 4p, 4p, $\varepsilon p$	$\varepsilon d$
2p	$\varepsilon s$	$\varepsilon s$	2p	3p, 4p, 5p, $\varepsilon p$	$\varepsilon s$
2p	$\varepsilon s$	$\varepsilon p$	2p	3d, 4d, 5d, $\varepsilon d$	$\varepsilon s$
2p	$\varepsilon s$	$\varepsilon p$	2p	3s, 4s, 5s, $\varepsilon s$	$\varepsilon s$
2p	$\varepsilon s$	$\varepsilon s$	2s	3s, 4s, 5s, $\varepsilon s$	$\varepsilon s$
2p	$\varepsilon s$	$\varepsilon s$	2s	3p, 4p, 5p, $\varepsilon p$	$\varepsilon s$
2s	$\varepsilon p$	$\varepsilon p$	2p	3p, 4p, 5p, $\varepsilon p$	$\varepsilon p$
2s	$\varepsilon p$	$\varepsilon d$	2p	3d, 4d, 5d, $\varepsilon d$	$\varepsilon p$
2s	$\varepsilon p$	$\varepsilon d$	2p	3s, 4s, 5s, $\varepsilon s$	$\varepsilon p$
2s	$\varepsilon p$	$\varepsilon s$	2p	3d, 4d, 5d, $\varepsilon d$	$\varepsilon p$
2s	$\varepsilon p$	$\varepsilon s$	2p	3s, 4s, 5s, $\varepsilon s$	$\varepsilon p$
2s	$\varepsilon p$	$\varepsilon p$	2s	3s, 4s, 5s, $\varepsilon s$	$\varepsilon p$
2s	$\varepsilon p$	$\varepsilon d$	2s	3p, 4p, 5p, $\varepsilon p$	$\varepsilon p$
2s	$\varepsilon p$	$\varepsilon s$	2s	3p, 4p, 5p, $\varepsilon p$	$\varepsilon p$

Результаты расчетов задержек фотоионизации с учетом и без учета рассеяния приведены на рис. 2. Как видно из этого рисунка, рассеяние существенно увеличивает задержку в канале  $2p \rightarrow \varepsilon d$  по сравнению с величиной, полученной только с учетом взаимодействия между каналами. При тех же энергиях фотонов влияние рассеяния на задержки в каналах  $2p \rightarrow \varepsilon s$  и  $2s \rightarrow \varepsilon p$  существенно меньше. На рисунке 3 приведены сечения фотоионизации для трех отдельных переходов. Как видно из этого рисунка, сечение фотоионизации для перехода  $2p \rightarrow \varepsilon s$  существенно меньше сечения фотоионизации для перехода  $2p \rightarrow \varepsilon d$ , поэтому эксперименту соответствует теоретическая разность задержек между каналами  $2p \rightarrow \varepsilon d$  и  $2s \rightarrow \varepsilon p$ . Эти разности сравниваются с экспериментом и теоретическими данными других авторов в табл. 2. Как видно из этой таблицы, все

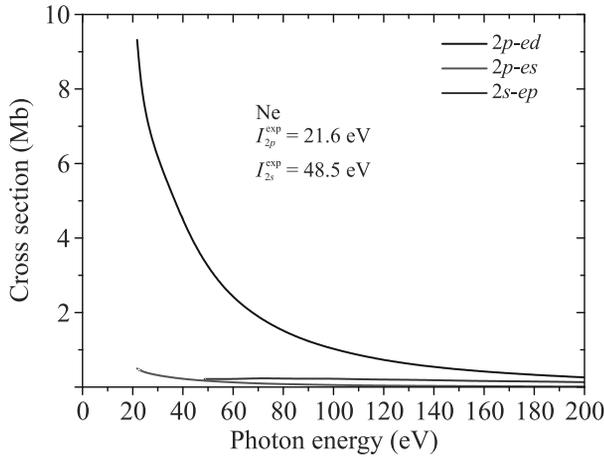


Рис. 3. (Цветной онлайн) Парциальные сечения фотоионизации Ne в ПСФО

теоретические данные, наши и других авторов, полученные при учете только взаимодействий между каналами в приближении ПСФО (или в эквивалентных приближениях), согласуются с экспериментальной величиной 11 ас [4]. Учет рассеяния увеличил указанную величину на 8 ас, и в результате наши результаты лучше согласуются с экспериментом [3]. Однако следует отметить, что с учетом приведенных ошибок экспериментов, наши результаты находятся в согласии с результатами обеих экспериментальных работ [3, 4].

**Таблица 2.** Разность задержек фотоионизации  $2p$ - и  $2s$ -оболочек атома Ne  $\Delta\tau = \tau_{2p} - \tau_{2s}$  при энергии фотона 105 эВ в ас ( $1 \text{ ас} = 10^{-18} \text{ с}$ )

$\Delta\tau$ (ас)	Работа/метод
$21 \pm 5$	[3] эксперимент
11	[4] эксперимент
10.2	[15] R-матрица
12	[16] МЧТВ
10	[9] ПСФО
11.9	[17] ВК
10	[18] ЗВХФ
11.5	Настоящая работа: ПСФО (фотоионизация)
18.5	Настоящая работа: ПСФО (фотоионизация + рассеяние)

**Выводы.** Согласно теории Вигнера–Смита [7, 8] задержка определяется производной фазы рассеяния по энергии (формула (1)). При фотоионизации задержка определяется фазой волновой функции непрерывного спектра  $\delta_{lp}$ , амплитудой фотоионизации  $\langle i|D(\omega)|p\rangle$  с учетом взаимодействий между каналами в приближении ПСФО (формула (2)) и СЭЧ функции Грина фотоэлектрона ((8) и (11)).

В настоящей работе приведена формула, выражающая совместное влияние двух последних взаимодействий через величину  $\langle i|D^\Sigma(\omega)|p\rangle$  (формула (12)). Проведенные расчеты в базе волновых функций Хартри–Фока показали, что рассеяние фотоэлектрона на электронах ионизируемого атома увеличивает время задержки для перехода  $2p \rightarrow \epsilon d$  почти в два раза и практически не меняет времена задержки для остальных переходов. Разность времен задержки  $\Delta\tau = \tau_{2p} - \tau_{2s}$ , полученная в настоящей работе в приближении ПСФО, 11.5 ас близка результатам других теоретических работ и экспериментальной работы [4]. При учете рассеяния фотоэлектрона задержка достигает 18.5 ас и приближается к экспериментальной величине 21 ас [3]. Следует также отметить, с учетом ошибок экспериментов наши результаты не противоречат также и другим экспериментальным данным [4]. Таким образом, из полученных результатов следует, что при расчете задержек фотоэлектронов, кроме учета межоболочечных корреляций в приближении ПСФО и аналогичных приближениях, необходим учет рассеяния фотоэлектронов на электронах ионизируемого атома.

**Финансирование работы.** Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Института общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова Российской академии наук и Физико-технического института им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

**Конфликт интересов.** Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. A. S. Kheifets, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **56**, 022001 (2023).
2. H. Ahmadi, E. Plésiat, M. Moiola, F. Frassetto, L. Poletto, P. Declava, C. D. Schröter, T. Pfeifer, R. Moshhammer, A. Palacios, F. Martin, and G. Sansone, Nat. Commun. **13**, 1242 (2022).
3. M. Schultze, M. Fieß, N. Karpowicz et al. (Collaboration), Science **328**, 1658 (2010).
4. M. R. Isinger, J. Squibb, D. Busto, S. Zhong, A. Harth, D. Kroon, S. Nandi, C. L. Arnold, M. Miranda, J. M. Dahlström, E. Lindroth, R. Feifel, M. Gisselbrecht, and A. L’Huillier, Science **358**, 893 (2017).
5. K. Klunder, J. M. Dahlstrom, M. Gisselbrecht, T. Fordell, M. Swoboda, D. Guenot, P. Johnsson, J. Caillat, J. Mauritsson, A. Maquet, R. Taieb, and A. L’Huillier, Phys. Rev. Lett. **106**, 143002 (2011).
6. C. Alexandridi, D. Platzer, L. Barreau et al. (Collaboration), Phys. Rev. Research **3**, L012012 (2021).

7. E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **98**, 145 (1955).
8. F. T. Smith, *Phys. Rev.* **118**, 349 (1960).
9. A. S. Kheifets, *Phys. Rev. A* **87**, 063404 (2013).
10. A. S. Kheifets, D. Toffoli, and P. Decleva, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53**, 115201 (2020).
11. М. Я. Амусья, Л. В. Чернышева, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 233 (2020) [*JETP Lett.* **112**, 219 (2020)].
12. М. Я. Амусья, Л. В. Чернышева, *Письма ЖЭТФ* **112**, 709 (2020) [*JETP Lett.* **112**(10), 673 (2020)].
13. D. A. Keating, S. T. Manson, V. K. Dolmatov, A. Mandal, P. C. Deshmukh, F. Naseem, and A. S. Kheifets, *Phys. Rev. A* **98**, 013420 (2018).
14. J. Vinbladh, J. M. Dahlstrom, and E. Lindroth, *Phys. Rev. A* **100**, 043424 (2019).
15. L. R. Moore, M. A. Lysaght, J. S. Parker, H. W. van der Hart, and K. T. Taylor, *Phys. Rev. A* **84**, 061404 (2011).
16. J. M. Dahlstrom, T. Carette, and E. Lindroth, *Phys. Rev. A* **86**, 061402(R) (2012).
17. J. Feist, O. Zatsarinny, S. Nagele, R. Pazourek, J. Burgdorfer, X. Guan, K. Bartschat, and B. I. Schneider, *Phys. Rev. A* **89**, 033417 (2014).
18. J. J. Omiste and L. B. Madsen, *Phys. Rev. A* **97**, 013422 (2018).
19. W. R. Johnson and C. D. Lin, *Phys. Rev. A* **20**, 964 (1979).
20. B. Grafstrom and A. S. Landsman, *Atoms* **11**, 84 (2023).
21. C. Cirelli, C. Marante, S. Heuser et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **9**, 955 (2018).
22. D. You, K. Ueda, O. Tugs et al. (Collaboration), *J. Phys.: Conf. Ser.* **1412**, 112006 (2020).
23. D. You, K. Ueda, E. V. Gryzlova et al. (Collaboration), *Phys. Rev. X* **10**, 031070 (2020).
24. P. K. Maroju, C. Grazioli, M. Di Fraia et al. (Collaboration), *Nature* **578**, 386 (2020).
25. A. S. Kheifets, *Atoms* **10**, 89 (2022).
26. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, G. F. Gribakin, and K. L. Tsemekhman, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23**, 393 (1990).
27. A. Kikas, S. J. Osborne, A. Ausmees, S. Svensson, O.-P. Sairanen, and S. Aksela, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **77**, 241 (1996).
28. G. Goldsztejn, T. Marchenko, R. Puttner, L. Journel, R. Guillemin, S. Carniato, P. Selles, O. Travnikova, D. Ceolin, A. F. Lago, R. Feifel, P. Lablanquie, M. N. Piancastelli, F. Penent, and M. Simon, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 133001 (2016).
29. V. G. Yarzhemsky and Yu. A. Teterin, *Atoms* **10**, 73 (2022).
30. V. G. Yarzhemsky, G. B. Armen, and F. P. Larkins, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26**, 2785 (1993).
31. M. Ya. Amusia and L. V. Chernysheva, *Computation of Atomic and Molecular Processes. Introducing the ATOM-M Software Suite*, Springer, Berlin Heidelberg (2021), 456 p.
32. М. Я. Амусья, С. К. Семенов, Л. В. Чернышева, *АТОМ-М алгоритмы и программы исследований атомных и молекулярных процессов*, Наука, СПб. (2016), 552 с.
33. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, and V. G. Yarzhemsky, *Handbook of Theoretical Atomic Physics, Data for Photon Absorption, Electron Scattering, and Vacancies Decay*, Springer, Berlin, Heidelberg (2012), 812 p.
34. I. Lindgren and J. Morrison, *Atomic many-body theory*, Springer, Berlin (1986), 466 p.
35. М. Я. Амусья, *Атомный фотоэффект*, Наука, М. (1987), 272 с.
36. В. Г. Яржемский, Ю. А. Тетерин, И. А. Пресняков, К. И. Маслаков, А. Ю. Тетерин, К. Е. Иванов, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 487 (2020) [*JETP Lett.* **111**, 422 (2020)].
37. В. Г. Яржемский, Ю. А. Тетерин, К. И. Маслаков, А. Ю. Тетерин, К. Е. Иванов, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 661 (2021) [*JETP Lett.* **114**, 609 (2021)].