**Развитие методов расчета параметров спектров**

**углового распределения фотоэлектронов**

***Козулин К.В., Петряйкин Ф.А.***

*Студент, 5 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: konstantin.kozulin@chemistry.msu.ru*

Теоретическое и экспериментальное изучение электронной структуры молекулярных и ионных систем является источником фундаментальных знаний о них. Одним из важнейших способов исследования электронной структуры является фотоэлектронная спектроскопия. В 1987 был впервые зарегистрирован спектр углового распределения фотоэлектронов в ходе исследования фотоионизации электронейтральной молекулы иодоформа [1]. В настоящее время данный метод был распространен и на газофазные ионы.

Несмотря на высокий уровень проводимых экспериментальных исследований, теоретическое описание получаемых спектров до сих пор остается неудовлетворительным. Важнейшей наблюдаемой в фотоэлектронной спектроскопии является параметр анизотропии углового распределения испущенных фотоэлектронов (β). Его значение можно определить, рассчитав дифференциальные сечения при углах вылета электрона θ = 0 (σ∥) и θ = π/2 (σ⊥) [2]. Таким образом, достаточно получить выражения для дипольных матричных элементов электронного переходы M∥ и M⊥:

$$β=\frac{2(\overline{|M\_{∥}|^{2}}-\overline{|M\_{⊥}|^{2}})}{\overline{|M\_{∥}|^{2}}+2\overline{|M\_{⊥}|^{2}}} .$$

Квадраты матричных элементов необходимо усреднить, исходя из предположения о случайной ориентации исходной молекулярной системы. Это можно сделать двумя способами: в лабораторной (ЛСК) или молекулярной (МСК) системах координат. В литературе описан только один из данных подходов, а именно – усреднение по всем поляризациям света [3]. Существующие программы являются ресурсоемкими в плане вычисления, поскольку вычисление матричных элементов производится на сетке в трехмерном пространстве, а получаемые результаты показывают хорошее согласие с экспериментом только для узкого диапазона исследуемых систем.

В рамках данной работы представлен альтернативный метод вывода параметров спектра PAD, основанный на мультипольном разложении, проведено сравнение с существующими подходами и получены выражения для расчета параметров спектра в случае плоской, кулоновской и дипольной волн. Предложенный подход позволяет избавиться от процедуры вычисления интегралов в трехмерном пространстве, переходя к вычислению фазовых сдвигов вычислением одномерных интегралов по радиальным переменным.

Верификация полученных результатов была проведена сравнением различных реализаций предложенного подхода на простых модельных системах.

Литература:

[1] Chandler D.W., Houston P.L. J. Chem. Phys. 1987 Vol. 87(2). P. 1445-1447.

[2] Oana C.M., Krylov A.I. J. Chem. Phys. 2009 V. 131 (12) P. 124114.

[3] Gozem S., Krylov A.I. EzDyson User’s Manual. University of Southern California, 2018.