

Двухфотонная ионизация K -оболочки атомного иона

© А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский[✉], Р.В. Конеев

Ростовский государственный университет путей сообщения,
Ростов-на-Дону, Россия

[✉] e-mail: amnrnd@mail.ru

Поступила в редакцию 03.04.2025 г.

В окончательной редакции 08.06.2025 г.

Принята к публикации 27.06.2025 г.

Теоретически предсказаны аналитическая структура и абсолютные значения обобщенного сечения двухфотонной однократной ионизации K -оболочки тяжелого неоноподобного иона атома железа (Fe^{16+}). Установлены ярко выраженная резонансная допороговая структура обобщенного сечения и эффект деструктивной квантовой интерференции амплитуд вероятности радиационных переходов в виртуальные возбужденные состояния p -симметрии. Наличие валентной $2p^6$ -оболочки в ионном остове обуславливает рождение дополнительного гигантского резонанса обобщенного сечения как эффект „обратной“ жесткой рентгеновской эмиссии K_α -типа $1s^2(2s^2)2p^5 + \hbar\omega \rightarrow 1s(2s^2)2p^6$. Представлена схема предполагаемого эксперимента с линейно поляризованными рентгеновскими фотонами для проверки полученных теоретических результатов.

Ключевые слова: двухфотонная резонансная однократная ионизация, неоноподобный атомный ион, амплитуда вероятности, обобщенное сечение.

DOI: 10.61011/OS.2025.07.61101.7780-25

1. Введение

Создание рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL) как источника жесткого рентгеновского излучения открыло возможность высокоточных экспериментальных и теоретических исследований одного из фундаментальных процессов микромира — двухфотонной (нелинейной) однократной ионизации глубоких оболочек атомов, атомных ионов, молекул и твердых тел [1,2]. Проведенные исследования этого процесса обнаружили, в частности, важную роль (а) релятивистских эффектов и эффектов экранирования в нерезонансном обобщенном сечении двухфотонной ионизации K -оболочки атома [3] и (б) недипольных (квадрупольных) эффектов в угловом распределении фотоэлектронов, рожденных надпороговой двухфотонной ионизацией K -оболочки атома [4]. В упомянутых работах, насколько нам известно, отсутствуют исследования резонансной допороговой структуры обобщенного сечения двухфотонной ионизации. В работах авторов [5–7] во втором порядке нерелятивистской квантовой теории возмущений проведены первые теоретические исследования обобщенного сечения двухфотонной резонансной однократной ионизации $1s^2$ -оболочки атомов (Ne, Ar), бериллиевого (Ne^{6+}) и гелиевого (Ne^{8+}) атомных ионов с учетом лишь основной (лидирующей в бесконечном полном наборе) части допороговой резонансной структуры сечения и эффектов радиальной релаксации состояний перехода в поле $1s$ -вакансии. В данной статье теория работ [5–7] обобщается на тяжелые неоноподобные атомные ионы и модифицируется для учета (а) полноты набора виртуальных (промежуточных) состояний фотовозбуждения, (б) нетривиальной

угловой структуры амплитуд вероятности перехода в конечные состояния d -симметрии и (в) деструктивной квантовой интерференции парциальных амплитуд вероятностей переходов. В качестве объекта исследования взят неоноподобный ион атома железа (Fe^{16+} , заряд ядра иона $Z = 26$, конфигурация и терм основного состояния $[0] = 1s^2 2s^2 2p^6 [^1S_0]$). Выбор обусловлен сферической симметрией основного состояния иона Fe^{16+} , его доступностью в газовой фазе [8] при проведении экспериментов по поглощению двух линейно поляризованных XFEL-фотонов энергии $\hbar\omega$ ($\hbar$ — постоянная Планка, ω — круговая частота фотона) ионом, захваченным в „ловушке“ [9] и востребованностью его спектральных характеристик в астрофизике [10].

2. Теория

Амплитуды вероятности и обобщенное сечение двухфотонной ионизации получены в лидирующем втором (по числу вершин взаимодействия) порядке нерелятивистской квантовой теории возмущений. В структуре оператора радиационного перехода,

$$\hat{R} = -\frac{1}{c} \sum_{n=1}^{\infty} (\hat{p}_n \hat{A}_n), \quad (1)$$

для оператора электромагнитного поля (в представлении вторичного квантования) принято дипольное приближение:

$$\hat{A}_n \rightarrow \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\rho=1,2} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho} (\hat{a}_{\mathbf{k}\rho}^+ + \hat{a}_{\mathbf{k}\rho}^-), \quad (2)$$

$$(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n) \ll 1 \Rightarrow \exp\{\pm i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n)\} \cong 1. \quad (3)$$

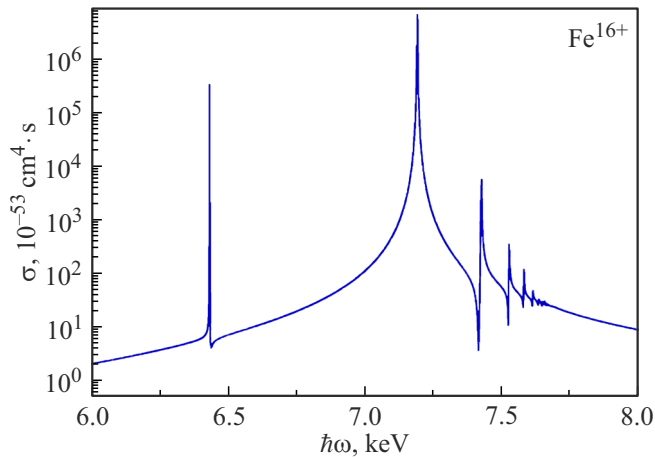


Рис. 1. Полное обобщенное сечение двухфотонной резонансной однократной ионизации К-оболочки иона Fe^{16+} , $\hbar\omega$ — энергия поглощаемого фотона.

Таблица 1. Спектральные характеристики лидирующих резонансов $1s \rightarrow np$ обобщенного сечения двухфотонной однократной ионизации К-оболочки иона Fe^{16+} в области энергий поглощаемого фотона $\hbar\omega \in (7.00; 7.70)$ keV, введено обозначение $[n] \equiv 10^n$

np	I_{1snp} , keV	σ_g , $10^{-53} \text{ cm}^4 \cdot \text{s}$
$3p$	7.194	$6.55 \cdot [6]$
$4p$	7.427	$5.52 \cdot [3]$
$5p$	7.529	$3.48 \cdot [2]$
$6p$	7.583	$1.19 \cdot [2]$

Таблица 2. Относительный вклад s- и d-симметрий конечного состояния ионизации $\Lambda = \sigma_g^{(d)}/\sigma_g^{(s)}$ (см. (28)) для слагаемых $l = d$ и $l = s$ в полное обобщенное сечение двухфотонной резонансной однократной ионизации К-оболочки иона Fe^{16+}

$\hbar\omega$, keV	6.0	7.0	8.0
Λ	2.504	2.573	2.660

Для критерия применимости дипольного приближения в форме $\theta_{nl} = \lambda_\omega/r_{nl} \gg 1$ (λ_ω — длина волны поглощаемого фотона, r_{nl} — средний радиус nl -оболочки иона) в случае иона Fe^{16+} при энергиях поглощаемого фотона $\hbar\omega = 8$ (6.4) keV имеем $\theta_{1s}(\theta_{2p}) \cong 50$ (16). Здесь использованы значения $r_{1s}(r_{2p}) = 0.031$ (0.123) Å (расчёт данной работы). В соотношениях (1)–(3) $e(m_e)$ — заряд (масса) электрона, c — скорость света в вакууме, N — число электронов в ионе, $\hat{p}_n(\mathbf{r}_n)$ — оператор импульса (радиус-вектор) n -электрона иона, $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho}(\mathbf{k})$ — вектор поляризации (волновой вектор) фотона и $\hat{a}_{\mathbf{k}\rho}^+(\hat{a}_{\mathbf{k}\rho}^-)$ — оператор рождения (уничтожения) фотона.

Рассмотрим следующие каналы двухфотонной однократной ионизации К-оболочки неоподобного атомного иона:

$$2\omega + [0] \rightarrow 2p^5xl + \omega \rightarrow 1s\epsilon l, \quad (4)$$

$$2\omega + [0] \rightarrow 1s(n, x)p + \omega \rightarrow 1s\epsilon l. \quad (5)$$

В (1), (4), (5) и далее принята атомная система единиц ($e = \hbar = m_e = 1$), $x(\epsilon)$ — энергия электрона сплошного спектра, n — главное квантовое число возбужденного состояния дискретного спектра, $l = s, d$ и заполненные оболочки конфигураций иона не указаны. В результатах расчета (рис. 1, табл. 1, 2) через постоянную Планка восстановлены обычные единицы. Не учитываемые в (4) промежуточные $2p^5nl$ -состояния дискретного спектра при $\omega \gg I_{2pnl}$ (I_{2pnl} — энергия фотовозбуждения $2p \rightarrow nl$) подавляются энергетическим знаменателем $(\omega - I_{2pnl} + i\gamma_{2p})^{-1}$ (здесь $\gamma_{2p} = \Gamma_{2p}/2$, Γ_{2p} — ширина распада $2p$ -вакансии) и малостью интеграла перекрытия $\langle nl|\epsilon l\rangle \ll 1$ в амплитуде вероятности двухфотонной ионизации. Сильная пространственная и энергетическая отделенность субвалентной ($2s^2$) и валентной ($2p^6$) оболочек от глубокой $1s^2$ -оболочки иона Fe^{16+} позволяет пренебречь рождением конечных $2s\epsilon(s, d)$ - и $2p^5\epsilon(p, f)$ -состояний двухфотонной ионизации. В самом деле, для иона Fe^{16+} выполнены неравенства: $r_{1s} = 0.031 \text{ Å} \ll r_{2s}(r_{2p}) = 0.140$ (0.123) Å, $I_{1s} = 7699.23 \text{ eV}$ (релятивистский расчет данной работы) $\gg I_{2s}(I_{2p}) = 1397.77$ (1270.60) eV [11], I_{nl} — энергия порога ионизации nl -оболочки иона. Наконец, амплитуда вероятности двухфотонной ионизации по каналу $2\omega + [0] \rightarrow 1s\epsilon l$ определяется оператором контактного взаимодействия $\hat{C} = (1/2c^2) \sum_{n=1}^N (\hat{A}_n \cdot \hat{A}_n)$ и пропорциональна матричному элементу $\langle 1s|j_i|\epsilon\rangle$, где j_i — сферическая функция Бесселя. В дипольном приближении для $\hat{A}_n$ -оператора $j_0 \rightarrow 1$, $j_2 \rightarrow 0$ и $\langle 1s|j_i|\epsilon l\rangle \rightarrow 0$.

Амплитуды вероятности двухфотонной ионизации по каналам (4) и (5) физически интерпретированы на рис. 2 в формализме (нерелятивистских) диаграмм Фейнмана. Установим их аналитическую структуру.

2.1. Амплитуда по каналу (4)

Согласно рис. 2, а, для искомым амплитуд имеем следующие выражения:

$$A_l = \sum_{M'} \int_0^\infty dx \frac{\langle 0|\hat{R}|\Phi_{xl}\rangle \langle \Phi_{xl}|\hat{R}|\Psi_{\epsilon l}\rangle}{\omega - I_{2p} - x + i\gamma_{2p}}, \quad (6)$$

$$|0\rangle = [0] \otimes (\hat{a}_\omega^+)^2 |0_{ph}\rangle, \quad (7)$$

$$|\Phi_{xl}\rangle = |2p^5xl(^1P_1), M'\rangle \otimes \hat{a}_\omega^+ |0_{ph}\rangle, \quad (8)$$

$$|\Psi_{\epsilon l}\rangle = |1s\epsilon l(^1I_{J=l}), M\rangle \otimes |0_{ph}\rangle. \quad (9)$$

В (6)–(9) определены: полные волновые функции начального ($|0\rangle$), промежуточного ($|\Phi\rangle$) и конечного ($|\Psi\rangle$) состояний двухфотонной ионизации, проекции полных моментов системы „ионный остаток $\otimes$

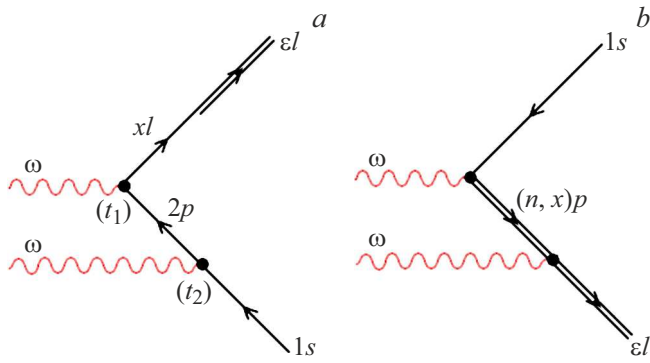


Рис. 2. Амплитуды вероятности двухфотонной резонансной однократной ионизации К-оболочки неоподобного атомного иона в представлении диаграмм Фейнмана: (а) по каналу (4), (b) по каналу (5). Направление времени — слева направо ($t_1 < t_2$). Стрелка вправо — электрон, стрелка влево — вакансия. Двойная линия — состояние получено в хартри-фоковском поле 1s-вакансии. Соединению однократной и двойной линий соответствует интеграл перекрытия $\langle xl|\epsilon l\rangle$, $l = s, d$. Черный кружок соответствует вершине радиационного перехода, ω — поглощаемый фотон.

электрон., $M' = 0, \pm 1$, $M = 0$ для $l = s$, $M = 0, \pm 1, \pm 2$ для $l = d$ и $|0_{ph}\rangle$ — волновая функция фотонного вакуума квантовой электродинамики. Структура $^1I_{J=1}$ -термов конечных состояний двухфотонной ионизации ($J = 0 \Rightarrow ^1S_0$; $J = 2 \Rightarrow ^1D_2$) воспроизводит теорему Ландау-Янга [12,13] для полного момента системы двух поглощаемых фотонов $J_\omega = 0, 2$. Используя методы алгебры операторов рождения (уничтожения) фотонов, теории неприводимых тензорных операторов, теории неортогональных орбиталей [14] и приближение (состояния получены в разных самосогласованных полях, рис. 2,а) для интеграла перекрытия волновых функций сплошного спектра $\langle xl|\epsilon l\rangle \cong \delta(x - \epsilon)$ (здесь δ — дельта-функция Дирака), для (6) получаем:

$$A_s = \xi \langle 2p_0 | \hat{r} | \bar{\epsilon} s_+ \rangle, \quad (10)$$

$$A_d = \sqrt{6} \xi \langle 2p_0 | \hat{r} | \bar{\epsilon} d_+ \rangle Q_M, \quad (11)$$

$$\xi = \frac{4\pi}{3V\omega} \frac{\omega_{sp}(2\omega - \omega_{sp})}{(\omega - \omega_{sp} - i\gamma_{2p})} \langle 1s_0 | \hat{r} | 2p_+ \rangle, \quad (12)$$

$$Q_M = -\frac{4\pi}{3} \sum_{M'} \sum_p (-1)^{M'} Y_{1,M'}(\mathbf{e}_\omega) Y_{1,p}^*(\mathbf{e}_\omega) \times \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ -M' & p & M \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Здесь $\bar{\epsilon} = 2\omega - I_{1s}$, $\omega_{sp} = I_{1s} - I_{2p}$, $V(\text{см}^3) = c$ — объем квантования электромагнитного поля (численно равный скорости света в вакууме) [15], $Y_{\alpha,\beta}(\mathbf{e}_\omega)$ — сферическая функция, $p = 0 \pm 1$, „*“ — символ комплексного сопряжения и определен 3j-символ Вигнера. В равенствах (10)–(12) индексы „0“ и „+“ соответствуют радиальным частям волновых функций электронов, полученных решением одноконфигурационных уравнений

самосогласованного поля Хартри-Фока для $[0]$ - и $1s + \epsilon l$ -конфигураций иона. Появление множителя Q_M в (11) отражает факт нетривиальной угловой структуры амплитуды вероятности перехода в конечные состояния d -симметрии (в верхней строке 3j-символа Вигнера $J = 2$).

2.2. Амплитуда по каналу (5)

Согласно рис. 2, b, для искомых амплитуд имеем квантовую интерференцию парциальных амплитуд:

$$B_l = B_l^{(1)} + B_l^{(2)}, \quad (14)$$

$$B_l^{(1)} = \sum_{M'} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{\langle 0 | \hat{R} | K_n \rangle \langle K_n | \hat{R} | \Psi_{\epsilon l} \rangle}{\omega - I_{1snp} + i\gamma_{1s}}, \quad (15)$$

$$B_l^{(2)} = \sum_{M'} \int_0^{\infty} dx \frac{\langle 0 | \hat{R} | K_x \rangle \langle K_x | \hat{R} | \Psi_{\epsilon l} \rangle}{\omega - I_{1s} - x + i\gamma_{1s}}, \quad (16)$$

$$|K_{n,x}\rangle = |1s(n, x)p(^1P_1), M'\rangle \otimes \hat{a}_\omega^+ |0_{ph}\rangle, \quad (17)$$

где I_{1snp} — энергия фотовозбуждения $1s \rightarrow np$, $\gamma_{1s} = \Gamma_{1s}/2$ и Γ_{1s} — ширина распада 1s-вакансии. Для знаменателя амплитуды вероятности (15) принято приближение независимости параметра Γ_{1s} от главного квантового числа состояния фотовозбуждения $1s \rightarrow np$. Следуя методам построения A_l -амплитуд предыдущего разд. 2.1 и принимая приближение плоских волн, $|\chi(r)\rangle \sim \sin(r\sqrt{2x})$, для одноэлектронной амплитуды вероятности радиационного перехода между состояниями сплошного спектра в (16),

$$(x - \epsilon) \langle xp_+ | \hat{r} | \epsilon l_+ \rangle \cong i\sqrt{2x} \delta(x - \epsilon), \quad (18)$$

для (14) получаем:

$$B_s = \eta \left(\mu + \sum_{n=3}^{\infty} \beta_n \langle np_+ | \hat{r} | \bar{\epsilon} s_+ \rangle \right), \quad (19)$$

$$B_d = \sqrt{6} \cdot \eta \left(\mu + \sum_{n=3}^{\infty} \beta_n \langle np_+ | \hat{r} | \bar{\epsilon} d_+ \rangle \right) Q_M, \quad (20)$$

$$\mu = i2\sqrt{2\bar{\epsilon}} \langle 1s_0 | \hat{r} | \bar{\epsilon} p_+ \rangle, \quad (21)$$

$$\beta_n = \frac{I_{1snp}(2\omega - I_{1snp})}{(\omega - I_{1snp} + i\gamma_{1s})} \langle 1s_0 | \hat{r} | np_+ \rangle, \quad (22)$$

где $\eta = \frac{4\pi}{3} \frac{1}{V\omega}$ и определена одноэлектронная амплитуда вероятности фотовозбуждения $1s \rightarrow np$ (учет радиальной релаксации остоновых и возбужденных состояний в хартри-фоковском поле 1s-вакансии методами теории неортогональных орбиталей):

$$\langle 1s_0 | \hat{r} | np_+ \rangle = N_{1s} (\langle 1s_0 | \hat{r} | np_+ \rangle - F_n), \quad (23)$$

$$N_{1s} = \langle 1s_0 | 1s_+ \rangle \langle 2s_0 | 2s_+ \rangle^2 \langle 2p_0 | 2p_+ \rangle^6 \quad (24)$$

$$F_n = \frac{\langle 1s_0 | \hat{r} | 2p_+ \rangle \langle 2p_0 | np_+ \rangle}{\langle 2p_0 | 2p_+ \rangle}. \quad (25)$$

2.3. Обобщенное сечение ионизации

Следуя определению понятия обобщенного сечения двухфотонной однократной ионизации атома (атомного иона) [16],

$$d\sigma_g^{(l)} = (V/2c)d\sigma_l, \quad (26)$$

учитывая квантовую интерференцию A_l - и B_l -амплитуд в „золотом правиле“ Ферми [17],

$$d\sigma_l = (\pi V/c)|A_l + B_l|^2 \delta(\varepsilon - \bar{\varepsilon}) d\varepsilon, \quad (27)$$

и интегрируя в (27) по энергии фотоэлектрона, для искомого полного обобщенного сечения получаем (вероятность исчезновения фотонов без регистрации фотоэлектрона):

$$\sigma_g = \chi \frac{1}{\omega^2} \sum_{l=s,d} \sum_{i=1,2} a_i L_{il}^2, \quad (28)$$

$$L_{1l} = (\omega - \omega_{sp})L_l + \sum_{n=3}^{\infty} (\omega - I_{1snp})C_{ln}, \quad (29)$$

$$L_{2l} = \gamma_{2p}L_l - \gamma_{1s} \sum_{n=3}^{\infty} C_{ln} + D, \quad (30)$$

$$L_l = \frac{\omega_{sp}(2\omega - \omega_{sp})}{(\omega - \omega_{sp})^2 + \gamma_{2p}^2} \langle 1s_0 | \hat{r} | 2p_+ \rangle \langle 2p_0 | \hat{r} | \bar{\varepsilon} l_+ \rangle, \quad (31)$$

$$C_{ln} = \frac{I_{1snp}(2\omega - I_{1snp})}{(\omega - I_{1snp})^2 + \gamma_{1s}^2} \langle 1s_0 \| \hat{r} \| np_+ \rangle \langle np_+ | \hat{r} | \bar{\varepsilon} l_+ \rangle, \quad (32)$$

$$D = 2\sqrt{2\bar{\varepsilon}} \langle 1s_0 \| \hat{r} \| \bar{\varepsilon} p_+ \rangle, \quad (33)$$

где $\chi = 0.278 \cdot 10^{-52} \text{ cm}^4 \cdot \text{s}$, $a_s = 1$, $a_d = \frac{3}{2} a_d^{(0)} \left(1 - \frac{1}{4\pi}\right)$ и $a_d^{(0)} = 4/5$ [5–7] (учтена лишь проекция $M = 0$ полного момента $J = 2$). При расчете коэффициента

$$a_d = 6 \sum_{M=-2}^2 |Q_M|^2 \quad (34)$$

в сумме квадратов амплитуд вероятностей переходов по M -проекциям конечных состояний d -симметрии учтён аналитический результат работы [18] для суммы произведений $3j$ -символов Вигнера (Приложение) и реализована схема предполагаемого XFEL-эксперимента для линейно поляризованных поглощаемых фотонов: $\mathbf{k} \in OZ$, $\mathbf{e}_\omega \in OX$ (OX , OZ — оси прямоугольной системы координат) $\Rightarrow$

$$Y_{1,0}(\mathbf{e}_\omega) = 0, \quad Y_{1,\pm 1}(\mathbf{e}_\omega) = \mp 3/(4\pi\sqrt{2}). \quad (35)$$

Согласно (34), дополнительный учет ($a_d^{(0)} \rightarrow a_d$) проекций $M = \pm 1, \pm 2$ полного момента $J = 2$ заметно (на $\sim 30\%$) увеличивает вклад компоненты обобщенного сечения (28) для $l = d$.

3. Результаты и обсуждение

Результаты расчета приведены на рис. 1 и в табл. 1, 2. Для параметров обобщенного сечения (28) приняты значения: $\Gamma_{1s} = 1.046 \text{ eV}$ [19], $\Gamma_{2p} = 0.023 \text{ eV}$ (экстраполяция данных работ [20,21] для ширин радиационных распадов $2p^5 n(s, d) \rightarrow 2p^6$, $n \in [3; \infty)$), $I_{1s} = 7699.23 \text{ eV}$, $I_{2p} = 1270.60 \text{ eV}$ [11] и $\omega \in (6; 8) \text{ keV}$ ([22] LCLS XFEL, USA; [23] PAL-XFEL, Republic of Korea; [24] European XFEL, Germany).

Результаты на рис. 1 и в табл. 1 демонстрируют ярко выраженную допороговую резонансную структуру обобщенного сечения двухфотонной ионизации иона Fe^{16+} при $\omega \in (6.25; 7.70) \text{ keV}$. Структура сечения при $\omega \in (7.00; 7.70) \text{ keV}$ обусловлена виртуальными состояниями фотовозбуждения $1s \rightarrow np$ (рис. 2, *b*; учтены значения главного квантового числа $n \in [3; 150]$). Гигантский резонанс обобщенного сечения при $\omega = 6.4329 \text{ keV}$ обусловлен радиационным поглощением $1s^2 2p^5 + \omega \rightarrow 1s 2p^6$ второго падающего на ион фотона (рис. 2, *a*). Его значение $\sigma_g \cong 2 \cdot 10^{-48} \text{ cm}^4 \cdot \text{s}$ практически на порядок меньше значения лидирующего резонанса фотовозбуждения $1s \rightarrow 3p$, но значительно превосходит значения резонансов фотовозбуждения $1s \rightarrow np$ для $n \geq 4$ (табл. 1).

Результаты на рис. 1 также демонстрируют эффект деструктивной (гасящей) квантовой интерференции амплитуд вероятности состояний резонансных переходов $1s^2 2p^5 \rightarrow 1s 2p^6$ и $1s \rightarrow np$. Этот эффект обусловлен знакопеременностью множителей $(\omega - \omega_{sp})$ и $\omega - I_{1snp}$ в (29) и „погруженностью“ этих состояний в континуум (D в (30)). При этом между максимумами резонансов обобщенного сечения возникают „окна прозрачности“ в виде резкого падения вероятности двухфотонной ионизации иона Fe^{16+} .

Формально математически бесконечные суммы в (29), (30) соответствуют учету полноты набора виртуальных состояний фотовозбуждения $1s \rightarrow np$. Для водородоподобных ионов метод аналитического суммирования подобных рядов предложен в работе [25]. Другой эффективный подход к проблеме учета полноты набора — замена суммирования рядов поиском минимума функционала матричных элементов переходов (метод стабильной вариации) — реализован в работах [26–28]. Однако, насколько нам известно, проблема аналитического учета полноты набора для многоэлектронных систем остается открытой. В данной работе реализован численный метод суммирования авторов [29]. Значения I_{1snp} и $J_n = \langle 1s_0 \| \hat{r} \| np_+ \rangle$ для $n \in [3; 10]$ получены в одноконfigurационном приближении Хартри-Фока. Для $n \in [11; \infty)$ энергии фотовозбуждения $1s \rightarrow np$ получены аппроксимацией вида

$$I_{1snp} = I_{1s} - \frac{1}{n^2} \left(a - \frac{b}{n} \right), \quad \lim_{n \rightarrow \infty} I_{1snp} = I_{1s}, \quad (36)$$

где величины a и b определены значениями I_{1smp} для $m = 9, 10$. Для $n \in [11; \infty)$ амплитуды вероятности фо-

товозбуждения $1s \rightarrow np$ получены аппроксимацией вида

$$J_n = \frac{1}{n^2} \left(c + \frac{d}{n} + \frac{f}{n^2} \right), \quad \lim_{n \rightarrow \infty} J_n = 0, \quad (37)$$

где величины c , d и f определены значениями J_m для $m = 8, 9, 10$. Для интеграла в (32) реализована формула (37) с учетом того факта, что величины c , d и f становятся функциями от энергии поглощаемого фотона ($\bar{E} = 2\omega - I_s$).

Как и следовало ожидать, в силу неравенств для одноэлектронных амплитуд вероятности перехода в (31) и (32),

$$|\langle 2p_0(np_+) | \hat{r} | \bar{e}d_+ \rangle| > |\langle 2p_0(np_+) | \hat{r} | \bar{e}s_+ \rangle|, \quad (38)$$

результаты в табл. 2 показывают лидирующую роль d -симметрии конечного состояния ионизации в определении значения полного обобщенного сечения при $\omega \in (6; 8)$ keV. Аналогичное утверждение (на примере ионизации К-оболочки нейтральных атомов Ne и Ge) о лидирующей роли канала $s \rightarrow p \rightarrow d$ двухфотонной ионизации над каналом $s \rightarrow p \rightarrow s$ дано в работе [3]. Таким образом, при однократной ионизации К-оболочки неоподобного атомного иона двумя фотонами с наибольшей вероятностью реализуется полный момент системы фотонов $J_\omega = 2$. Этот результат аналогичен таковому для однофотонной ($J_\omega = 1$) однократной ионизации nl -оболочки атома (атомного иона), где переход $l \rightarrow l + 1$ называют „главным“ [30].

4. Заключение

Построен нерелятивистский вариант квантовой теории процесса двухфотонной резонансной однократной ионизации К-оболочки тяжелого неоподобного атомного иона. Установлены эффекты (а) возникновения гигантских резонансов в допороговой области обобщенного сечения ионизации, (б) деструктивной квантовой интерференции парциальных амплитуд вероятности переходов и (в) лидирующей роли d -симметрии конечного состояния ионизации в определении полного обобщенного сечения в области энергий фотонов жесткого рентгеновского диапазона $\omega \in (6; 8)$ keV. Выход за рамки дипольного приближения для R -оператора радиационного перехода и учет корреляционных и релятивистских эффектов является предметом будущего развития теории. Обобщение представленной теории на атомы и атомные ионы другого типа и установление роли заряда их ядра является предметом будущих исследований. Наконец, результаты успешных экспериментов по наблюдению двухфотонной ионизации атомов, молекул и твердых тел [1,2] позволяют полагать, что абсолютные значения обобщенного сечения на рис. 1 вполне доступны измерению в современном XFEL-эксперименте. Интересно заметить, что „аналог“ двухфотонной однократной ионизации атома (атомного иона) в квантовой электродинамике — линейный эффект

Брейта-Уиллера (рождение электрон-позитронной пары двумя реальными γ -квантами: $\gamma\gamma \rightarrow e^+e^-$) [31] — до сих пор экспериментально однозначно не идентифицирован [32]. Однако этот эффект регистрируется экспериментально через рождение двух виртуальных γ -квантов при периферийном столкновении тяжелых ионов золота (Au; $Z = 79$) [33] и свинца (Pb; $Z = 82$) [34].

Приложение

Выражение (34) содержит сумму произведений - символов Вигнера вида

$$W_{cd}^{ab} = \sum_{m=-2}^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ a & b & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ c & d & m \end{pmatrix}. \quad (A1)$$

Результат аналитического суммирования в (A1) установлен в работе [18]. Здесь кратко его воспроизведем.

Рассмотрим условие ортогональности $3j$ -символов Вигнера [35]:

$$\sum_j \sum_m (2j+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ a & b & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ c & d & m \end{pmatrix} = \delta_{a,c} \delta_{b,d}, \quad (A2)$$

где $\delta_{\alpha,\beta}$ — символ Кронекера-Вейерштрасса и выполняются равенства $a + b + m = 0$, $c + d + m = 0$. Учтем частные значения $3j$ -символов Вигнера [36]:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ a & b & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}} (-1)^{1+b} \delta_{a,-b}, \quad (A3)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ a & b & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}} (-1)^b a \delta_{a,-b}, \quad (A4)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ a & b & \pm 1 \end{pmatrix} = \pm \frac{1}{2\sqrt{3}} (-1)^b \sqrt{(1 \mp b)(2 \pm b)} \delta_{a, \mp 1-b}. \quad (A5)$$

Тогда при $j_1 = j_2 = 1$ и $j = 0, 1, 2$ из (A2) получаем

$$W_{cd}^{ab} = \frac{1}{5} \delta_{a,c} \delta_{b,d} - \frac{1}{20} (-1)^{b+d} (E + W), \quad (A6)$$

$$E = \left(2bd + \frac{4}{3} \right) \delta_{a,-b} \delta_{c,-d}, \quad (A7)$$

$$W = W_+ + W_-, \quad (A8)$$

$$W_{\pm} = \sqrt{(1 \pm b)(2 \mp b)(1 \pm d)(2 \mp d)} \delta_{a, \pm 1-b} \delta_{c, \pm 1-d}. \quad (A9)$$

В нашем случае (см. (13) для Q_m) $a = -M'$, $b = p$, $c = -M''$, $d = p' = 0, \pm 1$ и $m = M$.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Y. Kubota, K. Tamasaku. *Nonlinear X-Ray Spectroscopy for Materials Science Springer Series in Optical Science* (Springer, Singapore, 2023) vol. 246, pp. 119–145.
- [2] M. Chergui, M. Beye, S. Mukamel, Cr. Svetina, C. Mascioveccio. *Nature Rev. Phys.*, **5**, 578 (2023). DOI: 10.1038/s42254-023-00643-7
- [3] J. Fan, J. Hofbrucker, A.V. Volotka, S. Fritzsche. *Eur. Phys. J. D*, **76**, 18 (2022). DOI: 10.1140/epjd/s10053-021-00334-x
- [4] A.N. Grum-Grzhimailo, E.V. Gryzlova. *Phys. Rev. A*, **89**, 043424 (2014). DOI: 10.1103/PhysRevA.89.043424
- [5] S.A. Novikov, A.N. Hopersky. *J. Phys. B*, **33**, 2287 (2000). DOI: 10.1088/0953-4075/33/12/310
- [6] S.A. Novikov, A.N. Hopersky. *J. Phys. B*, **34**, 4857 (2001). DOI: 10.1088/0953-4075/34/23/327
- [7] S.A. Novikov, A.N. Hopersky. *Radiat. Phys. Chem.*, **63**, 115 (2002). DOI: 10.1016/S0969-806X(01)00225-0
- [8] S. Kühn, Ch. Cheung, N.S. Oreshkina et al. *Phys. Rev. Lett.*, **129**, 245001 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevLett.129.245001
- [9] Ch. Shah, M. Togawa, M. Botz et al. *Astrophys. J.*, **969**, 52 (2024). DOI: 10.3847/1538-4357/ad454b
- [10] S.J. Gunderson, K.G. Gayley, D.P. Huenemoerder, P. Pradhan, N.A. Miller. *MNRAS*, **529**, 3154 (2024). DOI: 10.48550/arXiv.2206.05219
- [11] M. Nrisimhamurty, G. Aravind, P.C. Deshmukh, S.T. Manson. *Phys. Rev. A*, **91**, 013404 (2015). DOI: 10.1103/PhysRevA.91.013404
- [12] Л.Д. Ландау. *ДАН СССР*, **60**, 207 (1948). [L.D. Landau. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, **60**, 207 (1948)].
- [13] C.N. Yang. *Phys. Rev.*, **77**, 242 (1950). DOI: 10.1103/PhysRev.77.242
- [14] A.N. Hopersky, A.M. Nadolinsky, S.A. Novikov. *Phys. Rev. A*, **98**, 063424 (2018). DOI: 10.1103/PhysRevA.98.063424
- [15] N. Bloembergen. *Nonlinear Optics* (World Scientific, Singapore, 1996).
- [16] P. Lambropoulos, X. Tang. *J. Opt. Soc. Am. B*, **4**, 821 (1987). DOI: 10.1364/JOSAB.4.000821
- [17] R. Loudon. *The Quantum Theory of Light* (Oxford Science Publications, 2001).
- [18] A.N. Hopersky, R.V. Koneev. *Bulletin of Higher Educational Institutions. North Caucasus Region. Natural Science*, **1**, 24 (2023). DOI: 10.18522/1026-2237-2023-1-24-28
- [19] M.H. Chen, B. Crasemann, Kh.R. Karim, H. Mark. *Phys. Rev. A*, **24**, 1845 (1981). DOI: 10.1103/PhysRevA.24.1845
- [20] A. Hibbert, M. Le Dourneuf, M. Mohan. *At. Data Nucl. Data Tables*, **53**, 23 (1993).
- [21] T. Shirai, J. Sugar, A. Musgrove, W.L. Wiese. *J. Phys. Chem. Ref. Data Monograph.*, **8**, 1–632 (2000). DOI: 10.1063/1.555907
- [22] C. Bostedt, J.D. Bozek, P.H. Bucksbaum et al. *J. Phys. B*, **46**, 164003 (2013). DOI: 10.1088/0953-4075/46/16/164003
- [23] I. Nam, Ch-K. Min, B. Oh et al. *Nat. Photonics*, **15**, 435 (2021). DOI: 10.1038/s41566-021-00777-z
- [24] Ch. Grech, M.W. Guetg, G.A. Geloni et al. *Phys. Rev. Accel. Beams*, **27**, 050701 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.27.050701
- [25] А.А. Крыловецкий, Н.Л. Манаков, С.И. Мармо. *ЖЭТФ*, **119**, 45 (2001).
- [26] B. Gao, A.F. Starace. *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 404 (1988). DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.404
- [27] A.E. Orel, T.N. Rescigno. *Chem. Phys. Lett.*, **146**, 434 (1988). DOI: 10.1016/0009-2614(88)87473-6
- [28] Е.И. Старосельская, А.Н. Грум-Гржимайло. *Вестник МГУ*, **5**, 45 (2015). [E.I. Staroselskaya, A.N. Grum-Grzhimailo. *Moscow Univ. Phys.*, **70**, 374 (2015). DOI: 10.3103/S0027134915050148].
- [29] A.N. Hopersky, A.M. Nadolinsky, S.A. Novikov. *J. Phys. B*, **57**, 215601 (2024). DOI: 10.1088/1361-6455/ad7cab
- [30] М.Я. Амусья. *Атомный фотоэффект* (Наука, М., 1987). [M.Ya. Amusia. *Atomic Photoeffect* (Springer, US, 2013)].
- [31] G. Breit, J.A. Wheeler. *Phys. Rev.*, **46**, 1087 (1934). DOI: 10.1103/PhysRev.46.1087
- [32] J.D. Brandenburg, J. Seger, Z. Xu, W. Zha. *Rep. Prog. Phys.*, **86**, 083901 (2023). arXiv:2208.14943 [hep-ph]
- [33] The STAR Collaboration. *Phys. Rev. Lett.*, **127**, 052302 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevLett.127.052302
- [34] The CMS Collaboration. arXiv:2412.15413v1 [nucl-ex] (2024). DOI: 10.48550/arXiv.2412.15413
- [35] Д.А. Варшалович, А.Н. Москалев, В.К. Херсонский. *Квантовая теория углового момента* (Наука, Л., 1975). [D.A. Varshalovich, A.N. Moskalev, V.K. Khersonsky. *Quantum Theory of Angular Momentum* (World Scientific, Singapore, 1988)].
- [36] И.И. Собельман. *Введение в теорию атомных спектров* (Наука, М., 1977). [I.I. Sobelman. *Theory of Atomic Spectra* (Alpha Science International Ltd, Oxford, 2006)].