01

Двухфотонная ионизация K-оболочки тяжелого бериллиеподобного 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 10.10.2025 г.
В окончательной редакции 05.01.2026 г.
Принята к публикации 31.01.2026 г.

В рамках второго порядка нерелятивистской квантовой теории возмущений предсказаны аналитическая структура и абсолютные значения обобщенных сечений двухфотонной резонансной однократной ионизации K-оболочки тяжелых бериллиеподобных ионов атомов титана (Ti^{18+}), хрома (Cr^{20+}), железа (Fe^{22+}) и цинка (Zn^{26+}). Полные волновые функции основного состояния иона и состояний его ионизации получены в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока. Установлены эффекты (a) возникновения гигантских резонансов в допороговой области обобщенных сечений ионизации, (b) деструктивной квантовой интерференции амплитуд вероятности радиационных переходов в промежуточные состояния p-симметрии и (c) лидирующей роли d-симметрии конечного состояния ионизации в определении значений полного обобщенного сечения в области энергий поглощаемых фотонов жесткого рентгеновского диапазона. Для проверки полученных результатов предположена реализация эксперимента с линейно поляризованными рентгеновскими фотонами.

Ключевые слова: бериллиеподобный атомный ион, двухфотонная ионизация, амплитуда вероятности, обобщенное сечение.

DOI: 10.61011/OS.2026.02.62687.8640-25

Введение

Двухфотонная (нелинейная) ионизация глубоких оболочек атомов, атомных ионов, молекул и твердых тел — один из фундаментальных процессов микромира. С созданием рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL) [1] как источника жесткого многофотонного излучения открылась возможность высокоточных экспериментальных и теоретических исследований этого процесса [2,3]. Проведенные теоретические исследования этого процесса обнаружили, в частности, важную роль релятивистских эффектов, эффектов экранирования и недипольных (квадрупольных) эффектов в (a) определении нерезонансной структуры обобщенных сечений двухфотонной ионизации K-оболочки атома и атомного иона [4–7] и (b) угловом распределении фотоэлектронов, рожденных надпороговой двухфотонной ионизацией K-оболочки атома [8,9]. В упомянутых статьях отсутствуют исследования резонансной допороговой структуры обобщенного сечения двухфотонной ионизации. Такая структура в рамках второго порядка нерелятивистской квантовой теории возмущений впервые исследована в [10,11] на примере атома неона (Ne), бериллиеподобного (Ne^{6+}) и гелиеподобного (Ne^{8+}) атомных ионов. При этом были учтены основные (лидирующие в бесконечном полном наборе) части допороговой резонансной структуры сечения, эффекты радиальной релаксации состояний перехода в поле $1s$-вакансии и лишь проекция $M = 0$ полного углового момента $J = 2$ волновой функции конечного состояния ионизации d-симметрии. В [12,13] теория работ [10,11] модифицирована для учета (a) полноты набора промежуточных состояний $1s \to np$ фотовозбуждения, (b) деструктивной квантовой интерференции парциальных амплитуд вероятности радиационного перехода и (c) нетривиальной полной ($J = 2$; $M = 0, \pm 1, \pm 2$) угловой структуры амплитуды вероятности радиационного перехода в конечные состояния ионизации d-симметрии. При этом было дано обобщение результатов [10,11] на тяжелый неоноподобный ион атома железа (Fe^{16+}) [12] и ионы изоядерной последовательности тяжелого атома никеля ($^{29}Ni \to Ni^{18+} \to Ni^{24+} \to Ni^{26+}$) [13]. В настоящей статье теория [12,13] модифицируется (учитывается зависимость ширин радиационного распада $1s$-вакансии промежуточных $1snp$-состояний фотовозбуждения от главного квантового числа) и обобщается на изоэлектронную последовательность тяжелых бериллиеподобных атомных ионов. В качестве объектов исследования взяты бериллиеподобные ионы атомов титана (Ti^{18+}, заряд ядра иона $Z = 22$, конфигурация и терм основного состояния $[0] = 1s^2 2s^2 [^1S_0]$), хрома (Cr^{20+}, $Z = 24$), железа (Fe^{22+}, $Z = 26$) и цинка (Zn^{26+}, $Z = 30$). Выбор изоэлектронной последовательности обусловлен сферической симметрией основного состояния ионов, их доступностью в газовой фазе [14,15] при проведении эксперимента по поглощению двух XFEL-фотонов энергии $\hbar\omega$ ($\hbar$ — постоянная Планка, ω — круговая частота фотона) ионом, захваченным в „ловушке“ [16,17],

и востребованностью их спектральных характеристик, в частности, при рентгеновской диагностике горячей лабораторной [18,19] и астрофизической [20–22] плазмы, а также конструкционных материалов в установках управляемого термоядерного синтеза [23–25].

1. Теория

Рассмотрим следующий канал двухфотонной резонансной однократной ионизации K-оболочки бериллиеподобного атомного иона:

$$2\hbar\omega + [0] \to 1s(n,x)p + \hbar\omega \to 1s\varepsilon l. \qquad (1)$$

В (1) n — главное квантовое число возбужденных состояний дискретного спектра, $x(\varepsilon)$ — энергия электрона сплошного спектра, $l = s, d$ и заполненная $2s^2$-оболочка не указана. Структура канала (1) соответствует следующим приближениям.

Сильная пространственная и энергетическая отделённость $2s^2$-оболочки от $1s^2$-оболочки иона позволяет пренебречь рождением конечных $1s^2 2s\varepsilon(s,d)$-состояний двухфотонной ионизации. Например, для иона Ti^{18+} выполнены неравенства: $r_{1s} = 0.0367\,\text{Å} \ll r_{2s} = 0.1552\,\text{Å}$ (r_{ns} — средний радиус ns-оболочки иона), $I_{1s} = 6019.25\,\text{eV}$ (расчет данной работы) $\gg I_{2s} = 1346.89\,\text{eV}$ [26] (I_{ns} — энергия порога ионизации ns-оболочки иона).

Амплитуда вероятности двухфотонной ионизации по каналу $2\hbar\omega + [0] \to 1s\varepsilon l$ определяется оператором контактного взаимодействия

$$\hat{C} \sim \sum_{n=1}^{N} (\hat{A}_n \cdot \hat{A}_n)$$

(N — число электронов в ионе) и пропорциональна матричному элементу $\langle 1s|j_l|\varepsilon l\rangle$ [27]. Здесь j_l — сферическая функция Бесселя, возникающая при разложении в двойной функциональный ряд результирующей экспоненты в операторе $\hat{C}$. Для оператора электромагнитного поля $\hat{A}_n$ (в представлении вторичного квантования) принято дипольное приближение:

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

$$(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n) \ll 1 \Rightarrow \exp[\pm i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n)] \cong 1, \qquad (3)$$

$$r_{1s}/\lambda_\omega \ll 1. \qquad (4)$$

В (2)–(4) $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho}(\mathbf{k})$ — вектор поляризации (волновой вектор) фотона, $\hat{a}^{+}_{\mathbf{k}\rho}(\hat{a}^{-}_{\mathbf{k}\rho})$ — оператор рождения (уничтожения) фотона, $\mathbf{r}_n$ — радиус-вектор n-электрона и λ_ω — длина волны поглощаемого фотона. Например, для иона Ti^{18+} имеем: $r_{1s} = 0.0367\,\text{Å}$, $\lambda_\omega = 2.0330\,\text{Å}$ ($\hbar\omega = 6.10\,\text{keV}$) и $r_{1s}/\lambda_\omega = 0.018 \ll 1$. Тогда $j_0 \to 1$, $j_2 \to 0$ и $\langle 1s|j_1|\varepsilon l\rangle \to 0$. Отметим здесь, что в [28] понятие „критерия применимости дипольного приближения“ модифицировано. Как результат показано, что коротковолновая область применимости дипольного приближения по энергии поглощаемого фотона намного шире области, определяемой неравенством (4).

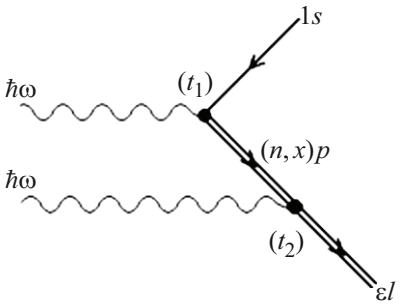

Рис. 1. Амплитуда вероятности двухфотонной резонансной однократной ионизации K-оболочки бериллиеподобного атомного иона в представлении диаграмм Фейнмана ($l = s, d$). Направление времени — слева направо ($t_1 < t_2$). Стрелка вправо — электрон, стрелка влево — вакансия. Двойная линия — состояние получено в хартри-фоковском поле $1s$-вакансии. Черный кружок соответствует вершине радиационного перехода, $\hbar\omega$ — поглощаемый фотон.

1.1. Амплитуда вероятности ионизации

Амплитуда вероятности двухфотонной ионизации по каналу (1) физически интерпретирована на рис. 1 в формализме диаграмм Фейнмана в рамках второго (по числу вершин взаимодействия) порядка нерелятивистской квантовой теории возмущений. Установим её аналитическую структуру. При этом нижеследующие формулы этого раздела статьи даны в атомных единицах (a.u.; $e = \hbar = m_e = 1$). В последующих разделах статьи восстановлены обычные единицы. Согласно рис. 1, для искомой амплитуды имеем квантовую интерференцию парциальных амплитуд вероятности фотопоглощения по промежуточным состояниям дискретного и сплошного спектров p-симметрии:

$$A_l = A_l^{(1)} + A_l^{(2)}, \qquad (5)$$

$$A_l^{(1)} = \sum_{M'} \sum_{N=2}^{\infty} \frac{\langle 0|\hat{R}|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|\hat{R}|\Psi_{\varepsilon l}\rangle}{\omega - I_{1snp} + i\gamma_{1s,n}}, \qquad (6)$$

$$A_l^{(2)} = \sum_{M'} \int_0^{\infty} dx\, \frac{\langle 0|\hat{R}|\Phi_x\rangle\langle\Phi_x|\hat{R}|\Psi_{\varepsilon l}\rangle}{\omega - I_{1s} - x + i\gamma_{1s}}, \qquad (7)$$

$$|0\rangle = [0] \otimes (a^{+}_{\omega})^2|0_{ph}\rangle, \qquad (8)$$

$$|\Phi_{n,s}\rangle = |1s(n,x)p(^1P_1), M'\rangle \otimes \hat{a}^{+}_{\omega}|0_{ph}\rangle, \qquad (9)$$

$$|\Psi_{\varepsilon l}\rangle = |1s\varepsilon l(^1l_{J=l}), M\rangle \otimes |0_{ph}\rangle, \qquad (10)$$

$$\hat{R} = -\frac{1}{c}\sum_{n=1}^{N}(\hat{p}_n \cdot \hat{A}_n). \qquad (11)$$

В (6)–(11) определены: полные волновые функции начального ($|0\rangle$), промежуточного ($|\Phi\rangle$) и конечного ($|\Psi\rangle$) состояний двухфотонной ионизации, $\hat{R}$ — оператор радиационного перехода, c — скорость света в вакууме, $\hat{P}_n$ — оператор импульса n-электрона, проекции полных угловых моментов системы „ионный остаток $\otimes$ электрон“ $M' = 0, \pm 1$, $M = 0$ для $l = s$, $M = 0, \pm 1, \pm 2$ для $l = d$, $|0_{ph}\rangle$ — волновая функция фотонного вакуума квантовой электродинамики, I_{1snp} — энергия фотовозбуждения $1s \to np$, $\gamma_{1s,n} = \Gamma_{1s,n}/2$ и $\gamma_{1s} = \Gamma_{1s}/2$, где $\Gamma_{1s,n}(\Gamma_{1s})$ — ширина распада $1s$-вакансии $1snp$ $(1sxp)$-состояния. Заметим, что структура ${}^1l_{J=l}$-термов конечных состояний двухфотонной ионизации ($J = 0 \Rightarrow {}^1S_0$; $J = 2 \Rightarrow {}^1D_2$) в (10) воспроизводит теорему Ландау–Янга [29,30] для полного углового момента системы двух поглощаемых фотонов $J_\omega = 0, 2$.

Примем приближение плоских волн,

$$|x(r)\rangle \sim \sin(r\sqrt{2x}),$$

для одноэлектронной амплитуды вероятности радиационного перехода между состояниями сплошного спектра в (7):

$$(x - \varepsilon)\langle x p_+|\hat{r}|\varepsilon l_+\rangle \cong i\sqrt{2x}\delta(x - \varepsilon). \tag{12}$$

Появление мнимой единицы в (12) обусловлено реализацией формулы Сохоцкого–Племели для знаменателя $(x-\varepsilon-i0)^{-1}$ в приближении отбрасывания главного значения (интеграла) по Коши. Тогда, используя методы алгебры операторов рождения (уничтожения) фотонов [31], теории неприводимых тензорных операторов [32] и теории неортогональных орбиталей [33], для амплитуды (5) получаем:

$$A_s = \xi\left(\mu + \sum_{n=2}^{\infty} \beta_n\langle np_+|\hat{r}|\overline{\varepsilon}s_+\rangle\right), \tag{13}$$

$$A_d = \sqrt{6}\,\xi\left(\mu + \sum_{n=2}^{\infty} \beta_n\langle np_+|\hat{r}|\overline{\varepsilon}d_+\rangle\right)\cdot Q_M, \tag{14}$$

$$\mu = i2\sqrt{2\overline{\varepsilon}}\,\langle 1s_0\|\hat{r}\|\overline{\varepsilon}p_+\rangle, \tag{15}$$

$$\beta_n = \frac{I_{1snp}(2\omega - I_{1snp})}{\omega - I_{1snp} + i\gamma_{1s,n}}\,\langle 1s_0\|\hat{r}\|np_+\rangle, \tag{16}$$

$$Q_M = -\frac{4\pi}{3}\sum_{M'}\sum_{p}(-1)^{M'}Y_{1,M'}(\mathbf{e}_\omega)Y^*_{1,p}(\mathbf{e}_\omega)\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ -M' & p & M\end{pmatrix}. \tag{17}$$

Здесь $\xi = 4\pi/(3V\omega)$, $V(\mathrm{cm}^3) = c$ — объем квантования электромагнитного поля (численно равный скорости света в вакууме) [34], $\overline{\varepsilon} = 2\omega - I_{1s}$, $Y_{\alpha,\beta}(\mathbf{e}_\omega)$ — сферическая функция, индекс суммирования в (17) $p = 0, \pm 1$, $\ll^*\gg$ — символ комплексного сопряжения, определен $3j$-символ Вигнера и одноэлектронная амплитуда вероятности фотовозбуждения $1s \to np$ имеет вид

$$\langle 1s_0\|\hat{r}\|np_+\rangle = \langle 1s_0|1s_+\rangle\langle 2s_0|2s_+\rangle^2\langle 1s_0|\hat{r}|np_+\rangle, \tag{18}$$

$$\langle 1s_0|\hat{r}|np_+\rangle = \int_0^\infty P_{1s_0}(r)r\,P_{np_+}(r)dr. \tag{19}$$

Индексы $\ll 0\gg$ и $\ll +\gg$ соответствуют $P(r)$-радиальным частям волновых функций электронов, полученных решением одноконфигурационных уравнений Хартри–Фока для конфигураций иона [0], $1s_+(n, x)p_+$ и $1s_+\varepsilon l_+$.

1.2. Обобщенное сечение ионизации

Установим аналитическую структуру обобщенного сечения двухфотонной однократной ионизации атомного иона. Следуя определению понятия такого сечения [35],

$$d\sigma_g^{(l)} = (V/2c)d\sigma_l, \tag{20}$$

учитывая „золотое правило“ Ферми [36],

$$d\sigma_l = (\pi V/c)|A_l|^2\cdot\delta(\varepsilon - \overline{\varepsilon})d\varepsilon, \tag{21}$$

интегрируя в (21) по энергии фотоэлектрона и суммируя по $l = s, d$, для полного обобщенного сечения получаем:

$$\sigma_g(\mathrm{cm}^4\cdot\mathrm{s}) = (\eta/\omega)^2\sum_{l=s,d}\sum_{i=1.2}a_l L_{il}^2, \tag{22}$$

$$L_{1l} = \sum_{n=2}^{\infty}(\omega - I_{1snp})B_{ln}. \tag{23}$$

$$L_{2l} = D - \sum_{n=2}^{\infty}\gamma_{1s,np}B_{ln}, \tag{24}$$

$$D = 2\sqrt{2\overline{\varepsilon}}\langle 1s_0\|\hat{r}\|np_+\rangle, \tag{25}$$

$$B_{ln} = \frac{\beta_n}{\omega - I_{1snp} - i\gamma_{1s,n}}\,\langle np_+|\hat{r}|\overline{\varepsilon}l_+\rangle. \tag{26}$$

Здесь учтено, что для xp-состояний сплошного спектра энергетический знаменатель амплитуды вероятности фотоионизации $1s \to xp$ в точке полюса $\overline{\varepsilon} = 2\omega - I_{1s}$ принимает вид

$$\omega - i\gamma_{1s} = \omega(1 - i\gamma_{1s}/\omega) \cong \omega$$

при $\omega \sim I_{1s} \gg \gamma_{1s}$. Здесь также определены величины $\eta(\mathrm{cm}^4\cdot\mathrm{s}) = 0.278\cdot 10^{-52}$, $a_s = 1$,

$$a_d = \frac{3}{2}a_d^{(0)}\left(1 - \frac{1}{4\pi}\right)$$

и $a_d^{(0)} = 4/5$ [10,11] (учтена лишь проекция $M = 0$ полного углового момента $J = 2$). Значение коэффициента a_d получено по формуле

$$a_d = 6\sum_{M=-2}^{2}|Q_M|^2 \tag{27}$$

с учетом аналитического результата работы [37] для суммы произведений двух $3j$-символов Вигнера. При этом

Таблица 1. Параметры полных ширин распада $1s$-вакансии промежуточных $1snp$-состояний фотовозбуждения (получены по теоретическим данным работы [38]) из формулы (29) и энергии порогов ионизации (расчет данной работы) $1s^2$-оболочек (I_{1s}) исследуемых ионов

Ион	Γ_A, eV	α, eV	β	γ	I_{1s}, keV
Ti^{18+}	0.085	2.568	3.282	1.831	6.019
Cr^{20+}	0.087	3.474	3.279	1.679	7.230
Fe^{22+}	0.091	5.062	3.271	1.686	8.553
Zn^{26+}	0.097	13.051	3.264	1.589	11.544

предположена реализация схемы XFEL-эксперимента для линейно поляризованных поглощаемых фотонов: $\mathbf{k} \in OZ$, $\mathbf{e}_\omega \in OX$ (OX, OZ — оси прямоугольной системы координат),

$$Y_{1,0}(\mathbf{e}_\omega) = 0, \quad Y_{1,\pm1}(\mathbf{e}_\omega) = \mp 3/(4\pi\sqrt{2}). \qquad (28)$$

Отметим, что $(a_d^{(0)}/a_d)100\,(\%) \cong 72\,(\%)$. Таким образом, дополнительный учет проекций $M = \pm1, \pm2$ полного углового момента $J = 2$ значительно (на $\sim 30\,\%$) увеличивает вклад компоненты обобщенного сечения (22) для $l = d$.

В (6) принята следующая аппроксимация полных ширин распада $1s$-вакансий:

$$\Gamma_{1s,n} = \Gamma_A + \Gamma_{R,n}, \qquad (29)$$

$$\Gamma_{R,n} = \alpha n^{-(\beta+\gamma/n)}. \qquad (30)$$

$$\lim_{n\to\infty} \Gamma_{1s,n} = \Gamma_A. \qquad (31)$$

В (29) Γ_A — ширина оже–распада по каналу $1s2s^2 \to 1s^2\varepsilon s$ в приближении независимости Γ_A от главного квантового числа (np-электрон играет роль „наблюдателя“) и $\Gamma_{R,n}$ — ширина радиационного распада по каналу $1snp \to 1s^2$. Параметры Γ_A, α, β, γ определены интерполяцией (для Ti^{18+} и Cr^{20+}) и экстраполяцией (для Zn^{26+}) теоретических данных работы [38] для $n = 2$ в ионах Mg^{8+}, Ar^{14+} и Fe^{22+} с учетом рекуррентной формулы [39]:

$$\frac{\Gamma_{R,n}}{\Gamma_{R,n+1}} = \left(\frac{I_{1snp}}{I_{1s(n+1)p}}\right)^3 \left(\frac{\langle 1s|\hat{r}|np\rangle}{\langle 1s|\hat{r}|(n+1)p\rangle}\right)^2, \; n \geq 2. \qquad (32)$$

При больших значениях n из (30) имеем:

$$\Gamma_{R,n} \sim n^{-\beta}. \qquad (33)$$

Формула (33) качественно воспроизводит (см. $\beta \cong 3$ в табл. 1 статьи) результат теории квантового дефекта $\Gamma \sim n^{-3}$ [40] с тем отличием, что в [40] исследованы ширины автоионизационных резонансов сечений фотопоглощения.

Формально математически бесконечные ряды в (23), (24) соответствуют учету полноты набора промежуточных состояний фотовозбуждения $1s \to np$. Насколько нам известно, проблема аналитического учета полноты набора для атома (атомного иона) с ненулевыми ширинами распада, прежде всего, внутренних вакансий остается открытой. В данной статье реализован численный метод суммирования работы [41]. Значения I_{1snp} и $J_n = \langle 1s_0\|r\|np_+\rangle$ для $n \in [2;10]$ получены в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока. Для $n \in [11;\infty)$ энергии фотовозбуждения $1s \to np$ получены аппроксимацией вида:

$$I_{1snp} = I_{1s} - \frac{1}{n^2}\left(a - \frac{b}{n}\right), \quad \lim_{n\to\infty} I_{1snp} = I_{1s}, \qquad (34)$$

где параметры a и b определены значениями I_{1smp} для $m = 9, 10$. Для $n \in [11;\infty)$ амплитуды вероятности $1s \to np$-фотовозбуждения получены аппроксимацией вида:

$$J_n = \frac{1}{n^2}\left(c + \frac{d}{n} + \frac{f}{n^2}\right), \quad \lim_{n\to\infty} J_n = 0, \qquad (35)$$

где параметры c, d и f определены значениями J_m для $m = 8, 9, 10$. Для интеграла $\langle np_+|\hat{r}|\overline{\varepsilon}l_+\rangle$ в (26) реализована формула (35) с учетом того, что параметры c, d и f становятся функциями от энергии поглощаемого фотона ($\overline{\varepsilon} = 2\omega - I_{1s}$). При этом необходимо учесть, что, как правило, численные решения уравнений Хартри–Фока не удовлетворяют физическому требованию ортогональности волновых функций состояний остова $|1s_+\rangle$ и $|2s_+\rangle$ к возбужденному состоянию $|\overline{\varepsilon}s_+\rangle$ сплошного спектра той же симметрии:

$$\alpha = \langle 1s_+|\overline{\varepsilon}s_+\rangle \neq 0, \quad \beta = \langle 2s_+|\overline{\varepsilon}s_+\rangle \neq 0. \qquad (36)$$

Для восстановления ортогональности использована процедура ортогонализации Грама–Шмидта [42]:

$$|\overline{\varepsilon}s_+\rangle \to |\tilde{\varepsilon}s_+\rangle = |\overline{\varepsilon}s_+\rangle - \alpha|1s_+\rangle - \beta|2s_+\rangle, \qquad (37)$$

$$\langle 1s_+|\tilde{\varepsilon}s_+\rangle = \langle 2s_+|\tilde{\varepsilon}s_+\rangle = 0. \qquad (38)$$

Как результат, искомый интеграл в (26) принимает вид:

$$\langle np_+|\hat{r}|\tilde{\varepsilon}s_+\rangle = \langle np_+|\hat{r}|\overline{\varepsilon}s_+\rangle - \alpha\langle np_+|\hat{r}|1s_+\rangle - \beta\langle np_+|\hat{r}|2s_+\rangle. \qquad (39)$$

Результаты рис. 2 демонстрируют значительную роль „эффекта“ ортогонализации при построении амплитуд вероятности радиационного перехода $np_+ \to \tilde{\varepsilon}s_+$. Математически более строгий подход (концепция расширенного пространства Гильберта) к построению амплитуд вероятности радиационных переходов с реализацией процедуры ортогонализации Грама–Шмидта представлен в работе [43].

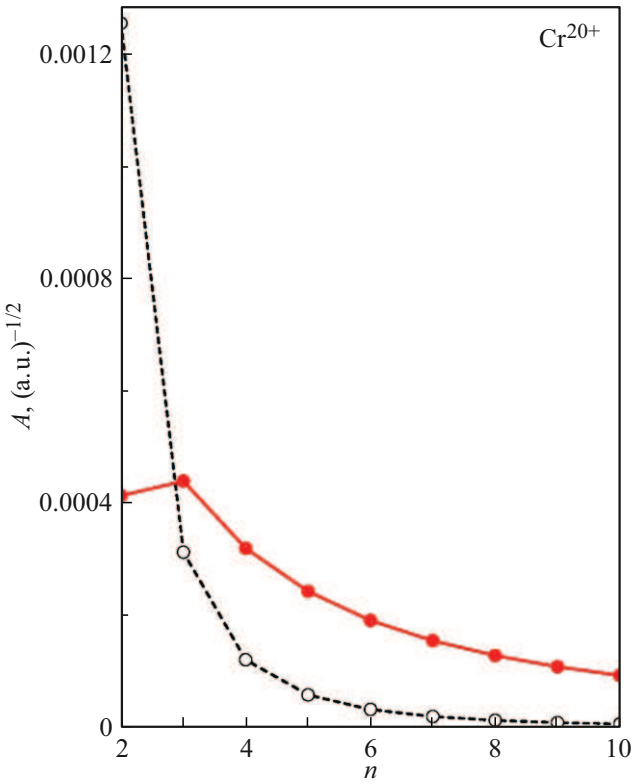

Рис. 2. „Эффект“ ортогонализации при построении амплитуды вероятности A радиационного перехода из (39) на примере иона Cr^{20+} для энергии электрона сплошного спектра $\tilde{\varepsilon} = 2I_{1snp} - I_{1s}$. Штриховая кривая — до процедуры ортогонализации, сплошная кривая — после ортогонализации.

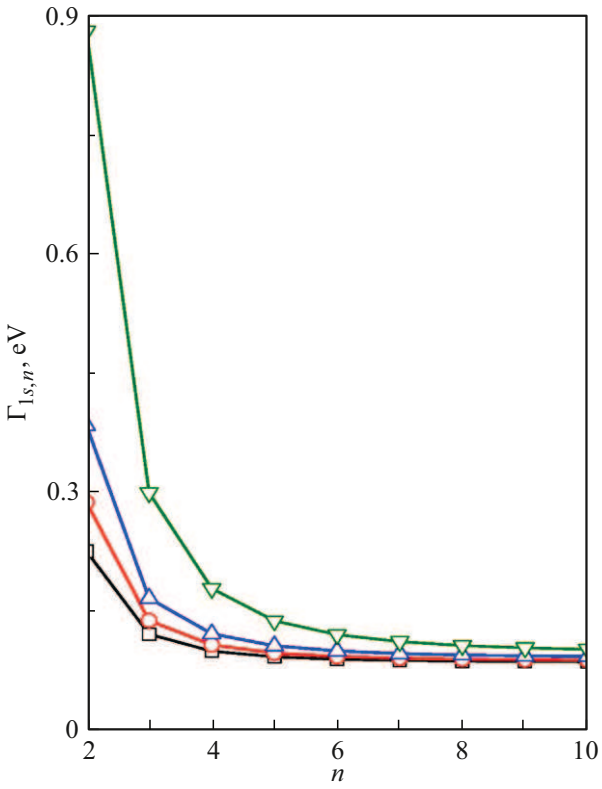

Рис. 3. Полные ширины ($\Gamma_{1s,n}$) распада $1s$-вакансии промежуточных состояний фотовозбуждения $1s \to np$ ионов Zn^{26+} — открытые треугольники „вниз“, Fe^{22+} — открытые треугольники „вверх“, Cr^{20+} — открытые кружки и Ti^{18+} — открытые квадраты, рассчитанные по формуле (29).

2. Результаты и обсуждение

Результаты расчета приведены на рис. 3–7 и в табл. 1–3. Значения параметров обобщенного сечения (22), принятые при расчетах, даны в табл. 1 и на рис. 3. Для энергий XFEL-фотонов принят диапазон $\hbar\omega \in (3; 13)$ keV ([44] XFELO, USA; [45,46] European XFEL, Germany; [47] PAL–XFEL, Republic of Korea).

Результаты на рис. 4–7 и в табл. 2 демонстрируют ярко выраженную допороговую резонансную структуру обобщенных сечений двухфотонной ионизации исследуемых ионов, обусловленную возникновением промежуточных состояний перехода (учтены значения главного квантового числа $n \in [2; 500]$). Уменьшение абсолютных значений резонансов обобщенного сечения по ряду исследуемых ионов обусловлено уменьшением амплитуд вероятности переходов $\langle 1s_0|\hat{r}|np_+\rangle$, $\langle np_+|\hat{r}|\tilde{\varepsilon}(s,d)_+\rangle$ в (26) и увеличением полных $\Gamma_{1s,n}$-ширин распада $1s$-вакансии $1snp$-состояний (рис. 3). Например, для лидирующего резонанса фотовозбуждения $1s \to 2p$ имеем: $\langle 1s_0|\hat{r}|2np_+\rangle \cdot 10^2 = 5.8$ (Ti^{18+}), 4.3 (Zn^{26+});

$$\langle 2p_+|\hat{r}|\varepsilon d_+\rangle \cdot 10^3 \left(\frac{1}{\sqrt{\text{a.u.}}}\right) = 1.5\ (Ti^{18+}),$$

0.8 (Zn^{26+}); $\Gamma_{1s,2}$ (eV) $= 0.225$ (Ti^{18+}), 0.879 (Zn^{26+}).

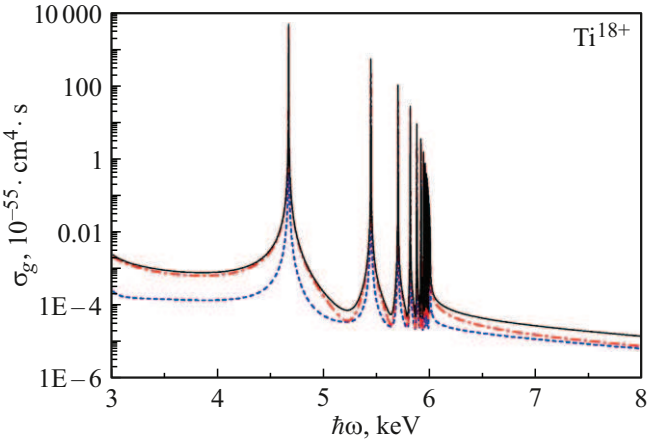

Рис. 4. Обобщенное сечение двухфотонной резонансной однократной ионизации K-оболочки иона Ti^{18+}. $\hbar\omega$ — энергия поглощаемого фотона. Штрихпунктирная кривая — $\sigma_g^{(d)}$ (парциальное сечение d-симметрии конечного состояния ионизации), штриховая кривая — $\sigma_g^{(s)}$ (парциальное сечение s-симметрии конечного состояния ионизации), сплошная кривая — $\sigma_g = \sigma_g^{(d)} + \sigma_g^{(s)}$ (полное обобщенное сечение).

Результаты на рис. 4–7 также демонстрируют эффект деструктивной (гасящей) квантовой интерференции ам-

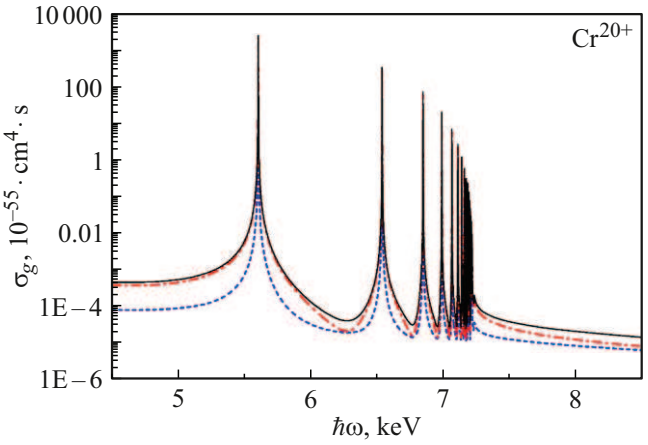

Рис. 5. То же, что на рис. 4, но для иона Cr^{20+}.

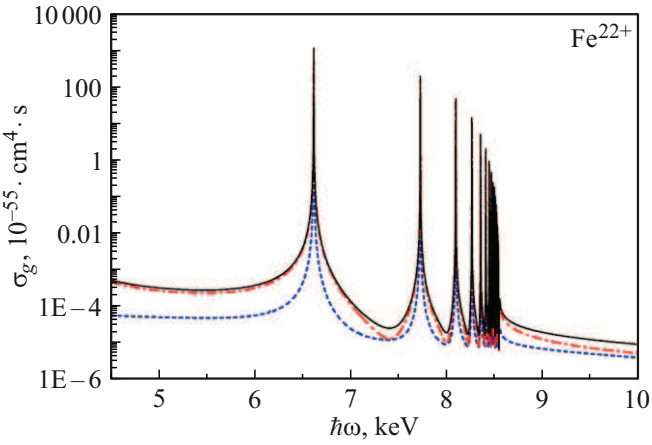

Рис. 6. То же, что на рис. 4, но для иона Fe^{22+}.

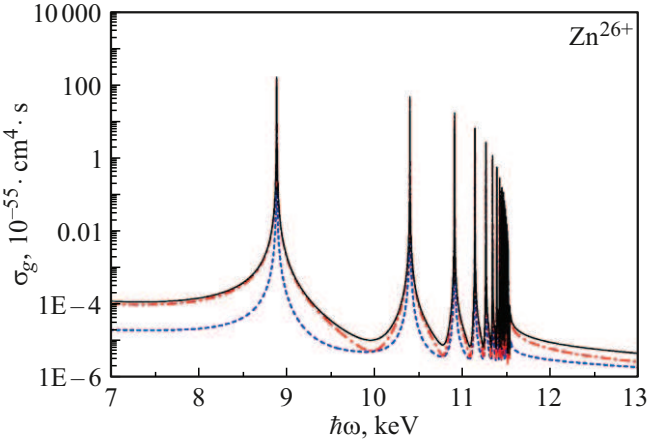

Рис. 7. То же, что на рис. 4, но для иона Zn^{26+}.

плитуд вероятности переходов $1s \to np$. Этот эффект обусловлен знакопеременностью множителя $\hbar\omega - I_{1snp}$ в (23) и „погруженностью“ этих состояний в континуум (см. D в (24)). При этом по ряду исследуемых ионов между максимумами резонансов обобщенного сечения

Таблица 2. Спектральные характеристики лидирующих резонансов фотовозбуждения $1s \to np$-обобщенных сечений двухфотонной однократной ионизации K-оболочки исследуемых ионов в области энергий поглощаемого фотона $\hbar\omega \in (3; 13)$ keV

Ион	np	I_{1snp}, keV	σ_g, 10^{-52} cm^4 · s
Ti^{18+}	$2p$	4.6752	4.5445
	$3p$	5.4481	0.5120
	$4p$	5.7020	0.0979
Cr^{20+}	$2p$	5.5998 5.6160[a]	2.3279
	$3p$	6.5341	0.3405
	$4p$	6.8430	0.0723
Fe^{22+}	$2p$	6.6099 6.6287[b]	1.1402
	$3p$	7.7212	0.1967
	$4p$	8.0904	0.0479
Zn^{26+}	$2p$	8.8897	0.2868
	$3p$	10.4015	0.0798
	$4p$	10.9078	0.0294

Примечание. [a] Эксперимент [48]. [b] Релятивистский расчет [49].

Таблица 3. Относительный вклад s- и d-симметрий конечного состояния ионизации $\Lambda = \sigma_g^{(d)}/\sigma_g^{(s)}$ (см (22) для слагаемых $l = d$, $l = s$) в полное обобщенное сечение двухфотонной резонансной однократной ионизации K-оболочки исследуемых ионов. Взяты энергии поглощаемых фотонов $\hbar\omega = I_{1s2p}$ (верхняя строка), $I_{1s} + 1$ (keV) (нижняя строка)

Ион	$\hbar\omega$, keV	Λ
Ti^{18+}	4.6752	8.4972
	7.0200	1.3041
Cr^{20+}	5.5998	10.3713
	8.2300	1.3753
Fe^{22+}	6.6099	8.5061
	9.5530	1.4242
Zn^{26+}	8.8897	9.9992
	12.5440	1.5705

увеличиваются энергетические расстояния и возникают „окна прозрачности“ в виде резкого падения вероятности двухфотонной ионизации.

Для одноэлектронных амплитуд вероятности перехода в (26) выполнено неравенство:

$$\langle np_+|\hat{r}|\overline{\varepsilon}d_+\rangle > \langle np_+|\hat{r}|\overline{\varepsilon}s_+\rangle. \qquad (40)$$

Например, для лидирующего резонанса фотовозбуждения $1s \to 2p$ в ионе Ti^{18+} имеем

$$\langle 2p_+|\hat{r}|\overline{\varepsilon}d_+\rangle \cdot 10^3 \left(\frac{1}{\sqrt{\text{a.u.}}}\right) = 1.5 > \langle 2p_+|\hat{r}|\overline{\varepsilon}s_+\rangle \cdot 10^3 \left(\frac{1}{\sqrt{\text{a.u.}}}\right) = 0.5.$$

Как результат, данные табл. 3 (см. также рис. 4–7 для парциальных и полных обобщенных сечений) показывают лидирующую роль d-симметрии конечного состояния ионизации в определении абсолютных значений, прежде всего, резонансов полного обобщенного сечения при $\hbar\omega \in (3; 13)$ keV.

3. Заключение

Построен нерелятивистский вариант квантовой теории процесса двухфотонной резонансной однократной ионизации K-оболочки тяжелого бериллиеподобного атомного иона. Исследована изоэлектронная последовательность ионов $Ti^{18+} \to Cr^{20+} \to Fe^{22+} \to Zn^{26+}$. Установлены ярко выраженные резонансные допороговые структуры обобщенных сечений и эффект деструктивной квантовой интерференции амплитуд вероятности радиационных переходов в промежуточные состояния p-симметрии. Установлена также лидирующая роль d-симметрии конечного состояния ионизации в определении абсолютных значений полного обобщенного сечения в области энергий XFEL-фотонов $\hbar\omega \in (3; 13)$ keV. Учет корреляционных и релятивистских эффектов и выход за рамки дипольного приближения для $\hat{R}(\hat{C})$-оператора радиационного (контактного) перехода является предметом будущего развития теории. Результаты успешных экспериментов по наблюдению двухфотонной ионизации атомов, молекул и твердых тел [50] позволяют полагать, что абсолютные значения обобщенных сечений на рис. 4–7 вполне доступны измерению в современном XFEL-эксперименте.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] C. Pellegrini, A. Marinelli, S. Reiche. Rev. Mod. Phys., **88**, 015006 (2016). DOI: 10.1103/RevModPhys.88.015006

[2] M. Chergui, M. Beye, S. Mukamel, Cr. Svetina, C. Masciovecchio. Nature Rev. Phys., **5**, 578 (2023). DOI: 10.1038/s42254-023-00643-7

[3] Y. Kubota, K. Tamasaku. *Nonlinear X-Ray Spectroscopy for Materials Science* (Springer Series in Optical Science, 2023), **246**, Ch. 5, P. 119–145. DOI: 10.1007/978-981-99-6714-8_5

[4] A. Surzhykov, P. Indelicato, S.P. Santos, P. Amaro, S. Fritzsche. Phys. Rev. A, **84**, 022511 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevA.84.022511

[5] J. Hofbrucker, A.V. Volotka, S. Fritzsche. Phys. Rev. A, **94**, 063412 (2016). DOI: 10.1103/PhysRevA.94.063412

[6] J. Hofbrucker, A.V. Volotka, S. Fritzsche. Scientific Reports, **10**, 3617 (2020). DOI: 10.1038/s41598-020-60206-z

[7] J. Fan, J. Hofbrucker, A.V. Volotka, S. Fritzsche. Eur. Phys. J. D, **76**, 18 (2022). DOI: 10.1140/epjd/s10053-021-00334-x

[8] A.N. Grum-Grzhimailo, E.V. Gryzlova. Phys. Rev. A, **89**, 043424 (2014). DOI: 10.1103/PhysRevA.89.043424

[9] J. Hofbrucker, A.V. Volotka, S. Fritzsche. Phys. Rev. A, **96**, 013409 (2017). DOI: 10.1103/PhysRevA.96.013409

[10] S.A. Novikov, A.N. Hopersky. J. Phys. B, **33**, 2287 (2000). DOI: 10.1088/0953-4075/33/12/310

[11] S.A. Novikov, A.N. Hopersky. J. Phys. B, **34**, 4857 (2001). DOI: 10.1088/0953-4075/34/23/327

[12] A.N. Hopersky, A.M. Nadolinsky, S.A. Novikov, R.V. Koneev. arXiv: 2504.05290v1 [physics.optics] (2025). DOI: 10.48550/arXiv.2504.05290

[13] A.N. Hopersky, A.M. Nadolinsky, S.A. Novikov, R.V. Koneev. arXiv: 2506.18117v1 [physics.atom-ph] (2025). DOI: 10.48550/arXiv.2506.18117

[14] J.K. Rudolph, S. Bernitt, S.W. Epp et al. Phys. Rev. Lett., **111**, 103002 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.103002

[15] S.W. Epp, J.R. Crespo Lŏpez-Urrutia, G. Brenner et al. Phys. Rev. Lett., **98**, 183001 (2007). DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.183001

[16] M.O. Herdrich, D. Hengstler, S. Allgeier et al. J. Phys. B, **57**, 085001 (2024). DOI: 10.1088/1361-6455/ad34a2

[17] P. Micke, S. Kühn, L. Buchauer et al. Rev. Sci. Instrum., **89**, 063109 (2018). DOI: 10.1063/1.5026961

[18] P. Beiersdorfer, T. Phillips, V.L. Jacobs et al. Astrophys. J., **409**, 846 (1993). DOI: 10.1086/172715

[19] K. Wang, X.L. Guo, H.T. Liu et al. Astrophys. J. Supp. Ser., **218**, 16 (2015). DOI: 10.1088/0067-0049/218/2/16

[20] The Hitomi Collaboration. Publ. Astron. Soc. Japan., **70**, 12 (P. 1–48) (2018). DOI: 10.1093/pasj/psx127

[21] A.M. Pollock, M.F. Corcoran, I.R. Stevens et al. Astrophys. J., **923**, 191 (2021). DOI: 10.3847/1538-4357/ac2430

[22] N.S. Schulz, D.P. Huenemoerder, D.A. Principe et al. arXiv: 2404.19676v1 [astro-ph. SR] (2024). DOI: 10.48550/arXiv.2404.19676

[23] S.P. Regan, B. Yaakobi, T.R. Boehly et al. High Energy Density Physics, **5**, 234 (2009). DOI: 10.1016/j.hedp.2009.05.004

[24] R.K. Kirkwood, J.D. Moody, J. Kline et al. Plasma Phys. Control. Fusion, **55**, 103001 (2013). DOI: 10.1088/0741-3335/55/10/103001

[25] R. Betti, O.A. Hurricane. Nature Phys., **12**, 435 (2016). DOI: 10.1038/nphys3736

[26] A.V. Malyshev, A.V. Volotka, D.A. Glazov et al. Phys. Rev. A, **92**, 012514 (2015). DOI: 10.1103/ PhysRevA.92.012514

[27] A.N. Hopersky, A.M. Nadolinsky, S.A. Novikov. Phys. Rev. A, **92**, 052709 (2015).

[28] А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский, Р.В. Конеев, Ю.Н. Толкунова. Изв. вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки, **2**, 23 (2025); arXiv: 2504.08656v1 [physics. atom-ph] (2025). DOI: 10.18522/1026-2237-2025-2-23-28

[29] L.D. Landau. Dokl. Akad. Nauk SSSR, **60**, 207 (1948).

[30] C.N. Yang. Phys. Rev., **77**, 242 (1950). DOI: 10.1103/PhysRev.77.242

[31] В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. *Квантовая электродинамика* (Наука, М., 1980).

[32] А.П. Юцис, А.Ю. Савукинас. *Математические основы теории атома* (Минтис, Вильнюс, 1973).
[33] A.P. Jucys, E.P. Našlėnas, P.S. Žvirblis. Int. J. Quant. Chem., **6**, 465 (1972). DOI: 10.1002/qua.560060308
[34] N. Bloembergen. *Nonlinear Optics* (World Scientific, Singapore, 1996).
[35] P. Lambropoulos, X. Tang. J. Opt. Soc. Am. B, **4**, 821 (1987). DOI: 10.1364/JOSAB.4.000821
[36] Р.М. Лоудон. *Квантовая теория света* (Мир, М., 1976).
[37] А.Н. Хоперский, Р.В. Конеев. Изв. вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки, **1**, 24 (2023); arXiv: 2504.11567v1 [physics. atom-ph] (2023). DOI: 10.18522/1026-2237-2023-1-24-28
[38] M.H. Chen. Phys. Rev. A, **31**, 1449 (1985). DOI: 10.1103/PhysRevA.31.1449
[39] Р. Каразия. *Суммы атомных величин и средние характеристики спектров* (Мокслас, Вильнюс, 1991).
[40] M.J. Seaton. Rep. Prog. Phys., **46**, 167 (1983). DOI: 10.1088/0034-4885/46/2/002
[41] A.N. Hopersky, A.M. Nadolinsky, S.A. Novikov. J. Phys. B, **57**, 215601 (2024). DOI: 10.1088/1361-6455/ad7cab
[42] М. Рид, Б. Саймон. *Методы современной математической физики. Т. 1. Функциональный анализ* (Мир, М.,1977).
[43] А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский, Р.В. Конеев. Изв. вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки, **1**, 38 (2024); arXiv: 2504.13329v1 [physics. atom-ph] (2024). DOI: 10.18522/1026-2237-2024-1-38-42
[44] B. Adams, G. Aeppli, Th. Allison et al. arXiv: 1903.09317v2 [physics. ins-det] (2019). DOI: 10.48550/ arXiv.1903.09317
[45] N. Kujala, W. Freund, J. Liu et al. Rev. Sci. Instrum., **91**, 103101 (2020). DOI: 10.1063/5.0019935
[46] Ch. Grech, M.W. Guetg, G.A. Geloni et al. Phys. Rev. Accel. Beam, **27**, 050701 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.27.050701
[47] I. Nam, Ch-K. Min, B. Oh et al. Nat. Photonics, **15**, 435 (2021). DOI: 10.1038/s41566-021-00777-z
[48] TEP Group, J. Dubau, M. Loulergue. J. Phys. B, **15**, 1007 (1982). DOI: 10.1088/0022-3700/15/7/010
[49] V.A. Yerokhin, A. Surzhykov, S. Fritzsche. Phys. Rev. A, **90**, 022509 (2014). DOI: 10.1103/ PhysRevA.90.022509
[50] T. Osaka, I. Inoue, J. Yamada et al. Phys. Rev. Res., **4**, L012035 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.4.L012035