

01

## Двухфотонная ионизация *K*-оболочки атомного иона

© А.Н. Хоперский, А.М. Надолинский<sup>✉</sup>, Р.В. Конеев

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

<sup>✉</sup> 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 ( $\text{Fe}^{16+}$ ). 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  $K_\alpha$ -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 ( $\text{Ne}^{6+}$ ) и гелиевого ( $\text{Ne}^{8+}$ ) 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 ( $\text{Fe}^{16+}$ , 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  $\text{Fe}^{16+}$ , его доступностью в газовой фазе [8] при проведении экспериментов по поглощению двух линейно поляризованных XFEL-фотонов энергии  $\hbar\omega$  ( $\hbar$  — постоянная Планка,  $\omega$  — круговая частота фотона) ионом, захваченным в „ловушке“ [9] и востребованностью его спектральных характеристик в астрофизике [10].

### 2. Теория

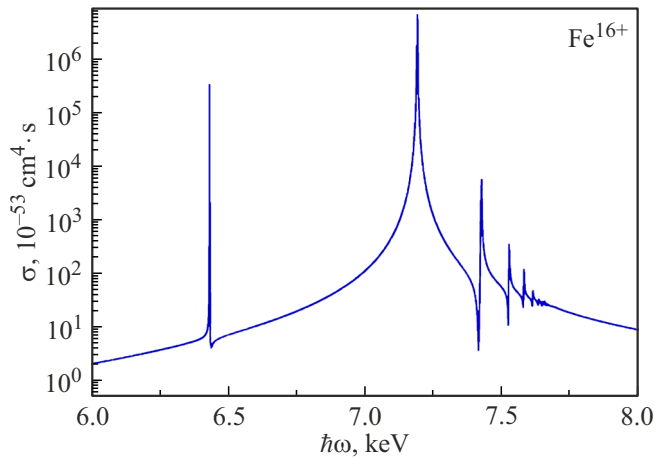
Амплитуды вероятности и обобщенное сечение двухфотонной ионизации получены в лидирующем втором (по числу вершин взаимодействия) порядке нерелятивистской квантовой теории возмущений. В структуре оператора радиационного перехода,

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

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  $K$ -оболочки иона  $\text{Fe}^{16+}$ ,  $\hbar\omega$  — энергия поглощаемого фотона.

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

$np$	$I_{1snp}$ , keV	$\sigma_g$ , $10^{-53}$ cm $^4$ .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  $K$ -оболочки иона  $\text{Fe}^{16+}$

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

Для критерия применимости дипольного приближения в форме  $\theta_{nl} = \lambda_\omega/r_{nl} \gg 1$  ( $\lambda_\omega$  — длина волны поглощаемого фотона,  $r_{nl}$  — средний радиус  $nl$ -оболочки иона) в случае иона  $\text{Fe}^{16+}$  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  $K$ -оболочки неоподобного атомно-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  $\gamma_{2p} = \Gamma_{2p}/2$ ,  $\Gamma_{2p}$  — 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  $\text{Fe}^{16+}$  позволяет пренебречь рождением конечных  $2s\epsilon(s, d)$ - и  $2p^5\epsilon(p, f)$ -состояний двухфотонной ионизации. В самом деле, для иона  $\text{Fe}^{16+}$  выполнены неравенства:  $r_{1s} = 0.031$  Å  $\ll$   $r_{2s}(r_{2p}) = 0.140$  (0.123) Å,  $I_{1s} = 7699.23$  eV (релятивистский расчёт 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,  $a$ , для искомых амплитуд имеем следующие выражения:

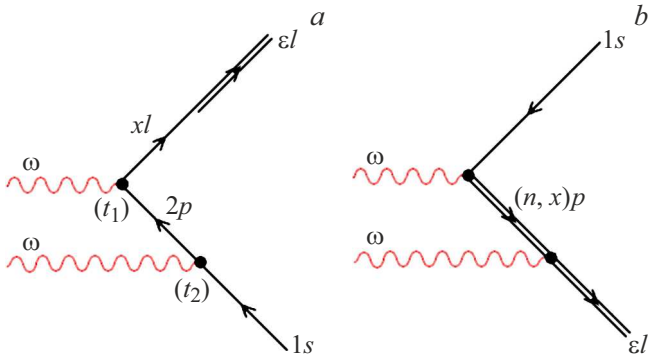
$$A_l = \sum_{M'} \int_0^\infty dx \frac{\langle 0|\hat{R}|\Phi_{xl}\rangle \langle \Phi_{xl}|\hat{R}|\Psi_{\epsilon l}\rangle}{\omega - I_{2p} - x + i\gamma_{2p}}, \quad (6)$$

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

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

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

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-фокковском поле  $1s$ -вакансии. Соединению однократной и двойной линий соответствует интеграл перекрывания  $\langle xl|\epsilon l\rangle$ ,  $l = s, d$ . Черный кружок соответствует вершине радиационного перехода,  $\omega$  — 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  $^1l_{J=1}$ -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 перекрывания волновых функций сплошного спектра  $\langle xl|\epsilon l\rangle \cong \delta(x - \epsilon)$  (здесь  $\delta$  — 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  $\Gamma_{1s}$  — ширина распада  $1s$ -вакансии. Для знаменателя амплитуды вероятности (15) принято приближение независимости параметра  $\Gamma_{1s}$  от главного квантового числа состояния фотовозбуждения  $1s \rightarrow np$ . Следуя методам построения  $A_l$ -амплитуд предыдущего разд. 2.1 и принимая приближение плоских волн,  $|x(r)\rangle \sim \sin(r\sqrt{2x})$ , 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:

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

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

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

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

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

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

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

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

### 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):

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

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

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

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

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

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

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  $\text{Fe}^{16+}$  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  $\text{Fe}^{16+}$ .

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 одноконфигурационном 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 ( $\bar{\epsilon} = 2\omega - I_s$ ).

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

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

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 *K*-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 *K*-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 *K*-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  $\hat{R}$ -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  $\gamma$ -квантами:  $\gamma\gamma \rightarrow e^+e^-$ ) [31] — до сих пор экспериментально однозначно не идентифицирован [32]. Однако этот эффект регистрируется экспериментально через рождение двух виртуальных  $\gamma$ -квантов при периферийном столкновении тяжелых ионов золота (Au;  $Z = 79$ ) [33] и свинца (Pb;  $Z = 82$ ) [34].

#### Приложение

Выражение (34) содержит сумму произведений  $3j$ -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)].