

01

## Двухфотонная ионизация $K$ -оболочки тяжелого бериллиепоподобного 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 бериллиепоподобных ионов атомов титана ( $\text{Ti}^{18+}$ ), хрома ( $\text{Cr}^{20+}$ ), железа ( $\text{Fe}^{22+}$ ) и цинка ( $\text{Zn}^{26+}$ ). Полные волновые функции основного состояния иона и состояний его ионизации получены в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока. Установлены эффекты (а) возникновения гигантских резонансов в допороговой области обобщенных сечений ионизации, (б) деструктивной квантовой интерференции амплитуд вероятности радиационных переходов в промежуточные состояния  $p$ -симметрии и (с) 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:** бериллиепоподобный 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 (а) определении нерезонансной структуры обобщенных сечений двухфотонной ионизации  $K$ -оболочки атома и атомного иона [4–7] и (б) 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), бериллиепоподобного ( $\text{Ne}^{6+}$ ) и гелиепоподобного ( $\text{Ne}^{8+}$ ) 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 (а) полноты набора промежуточных состояний  $1s \rightarrow np$  фотовозбуждения, (б) деструктивной квантовой интерференции парциальных амплитуд вероятности радиационного перехода и (с) 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 неопоподобный ион атома железа ( $\text{Fe}^{16+}$ ) [12] и ионы изоэлектронной последовательности тяжелого атома никеля ( $^{29}\text{Ni} \rightarrow \text{Ni}^{18+} \rightarrow \text{Ni}^{24+} \rightarrow \text{Ni}^{26+}$ ) [13]. В настоящей статье теория [12,13] модифицируется (учитывается зависимость ширины радиационного распада  $1s$ -вакансии промежуточных  $1snp$ -состояний фотовозбуждения от главного квантового числа) и обобщается на изоэлектронную последовательность тяжелых бериллиепоподобных атомных ионов. В качестве объектов исследования взяты бериллиепоподобные ионы атомов титана ( $\text{Ti}^{18+}$ , заряд ядра иона  $Z = 22$ , конфигурация и терм основного состояния  $[0] = 1s^2 2s^2 [1S_0]$ ), хрома ( $\text{Cr}^{20+}$ ,  $Z = 24$ ), железа ( $\text{Fe}^{22+}$ ,  $Z = 26$ ) и цинка ( $\text{Zn}^{26+}$ ,  $Z = 30$ ). 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,  $\omega$  — 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 бериллиевого атомного иона:

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

В (1)  $n$  — главное квантовое число возбужденных состояний дискретного спектра,  $x(\epsilon)$  — 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  $1s^2 2s\epsilon(s, d)$ -состояний двухфотонной ионизации. Например, для иона  $\text{Ti}^{18+}$  выполнены неравенства:  $r_{1s} = 0.0367 \text{ \AA} \ll r_{2s} = 0.1552 \text{ \AA}$  ( $r_{ns}$  — 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  $2\hbar\omega + [0] \rightarrow 1s\epsilon l$  определяется оператором контактного взаимодействия

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

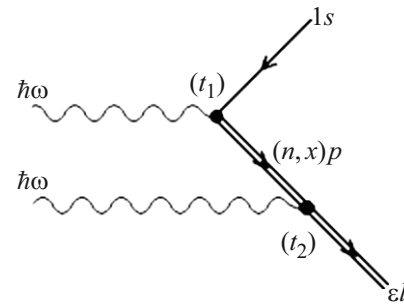
( $N$  — число электронов в ионе) и пропорциональна матричному элементу  $\langle 1s | j_l | \epsilon l \rangle$  [27]. Здесь  $j_l$  — сферическая функция Бесселя, возникающая при разложении в двойной функциональный ряд результирующей экспоненты в операторе  $\hat{C}$ . Для оператора электромагнитного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

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

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

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

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  $\lambda_\omega$  — длина волны поглощаемого фотона. Например, для иона  $\text{Ti}^{18+}$  имеем:  $r_{1s} = 0.0367 \text{ \AA}$ ,  $\lambda_\omega = 2.0330 \text{ \AA}$  ( $\hbar\omega = 6.10 \text{ keV}$ ) и  $r_{1s}/\lambda_\omega = 0.018 \ll 1$ . Тогда  $j_0 \rightarrow 1$ ,  $j_2 \rightarrow 0$  и  $\langle 1s | j_l | \epsilon l \rangle \rightarrow 0$ . Отметим здесь, что в [28] понятие „критерия применимости дипольного приближения“



**Рис. 1.** Амплитуда вероятности двухфотонной резонансной однократной ионизации  $K$ -оболочки бериллиевого 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.

модифицировано. Как результат показано, что коротковолновая область применимости дипольного приближения по энергии поглощаемого фотона намного шире области, определяемой неравенством (4).

### 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 (а.е.;  $e = \hbar = m_e = 1$ ). 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:

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

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

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

$$|0\rangle = [0] \otimes (a_0^+)^2 |0_{ph}\rangle, \quad (8)$$

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

$$|\Psi_{\epsilon l}\rangle = |1s\epsilon l(^1L_{J=l}), M\rangle \otimes |0_{ph}\rangle, \quad (10)$$

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

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  $1s \rightarrow np$ ,  $\gamma_{1s,n} = \Gamma_{1s,n}/2$  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):

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

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:

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

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

$$\mu = i2\sqrt{2\bar{\varepsilon}} \langle 1s_0|\hat{r}|\bar{\varepsilon} p_+\rangle, \quad (15)$$

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

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

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

$$\langle 1s_0|\hat{r}|\bar{\varepsilon} np_+\rangle = \langle 1s_0|1s_+\rangle \langle 2s_0|2s_+\rangle^2 \langle 1s_0|\hat{r}|\bar{\varepsilon} np_+\rangle, \quad (18)$$

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

Индексы  $\langle 0 \rangle$  и  $\langle + \rangle$  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],

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

учитывая „золотое правило“ Ферми [36],

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

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

$$\sigma_g(\text{cm}^4 \cdot \text{s}) = (\eta/\omega)^2 \sum_{l=s,d} \sum_{i=1,2} a_i L_{il}^2, \quad (22)$$

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

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

$$D = 2\sqrt{2\bar{\varepsilon}} \langle 1s_0|\hat{r}|\bar{\varepsilon} np_+\rangle, \quad (25)$$

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

Здесь учтено, что для  $xp$ -состояний сплошного спектра энергетический знаменатель амплитуды вероятности фотоионизации  $1s \rightarrow xp$  в точке полюса  $\bar{\varepsilon} = 2\omega - I_{1s}$  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  $\eta(\text{cm}^4 \cdot \text{s}) = 0.278 \cdot 10^{-52}$ ,  $a_s = 1$ ,

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

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

$$a_d = 6 \sum_{M=-2}^2 |Q_M|^2 \quad (27)$$

с учетом аналитического результата работы [37] для сумм 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	$\Gamma_A$ , eV	$\alpha$ , eV	$\beta$	$\gamma$	$I_{1s}$ , keV
Ti <sup>18+</sup>	0.085	2.568	3.282	1.831	6.019
Cr <sup>20+</sup>	0.087	3.474	3.279	1.679	7.230
Fe <sup>22+</sup>	0.091	5.062	3.271	1.686	8.553
Zn <sup>26+</sup>	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),

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

Отметим, что  $(a_d^{(0)}/a_d)100(\%) \cong 72(\%)$ . Таким образом, дополнительный учет проекций  $M = \pm 1, \pm 2$  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:

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

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

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

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

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

При больших значениях  $n$  из (30) имеем:

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

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 фотовозбуждения.

Формально математически бесконечные ряды в (23), (24) соответствуют учету полноты набора промежуточных состояний фотовозбуждения  $1s \rightarrow np$ . 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  $1s \rightarrow np$  получены аппроксимацией вида:

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

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

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

где параметры  $c$ ,  $d$  и  $f$  определены значениями  $J_m$  для  $m = 8, 9, 10$ . Для интеграла  $\langle np_+|\hat{r}|\bar{\epsilon}l_+ \rangle$  в (26) реализована формула (35) с учетом того, что параметры  $c$ ,  $d$  и  $f$  становятся функциями от энергии поглощаемого фотона ( $\bar{\epsilon} = 2\omega - I_{1s}$ ). 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  $|\bar{\epsilon}s_+ \rangle$  сплошного спектра той же симметрии:

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

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

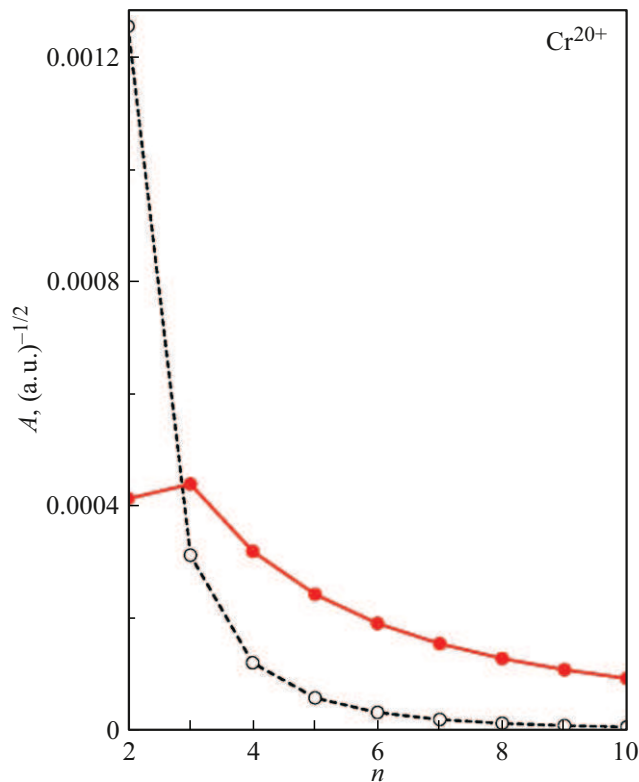
$$|\bar{\epsilon}s_+ \rangle \rightarrow |\tilde{\epsilon}s_+ \rangle = |\bar{\epsilon}s_+ \rangle - \alpha|1s_+ \rangle - \beta|2s_+ \rangle, \quad (37)$$

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

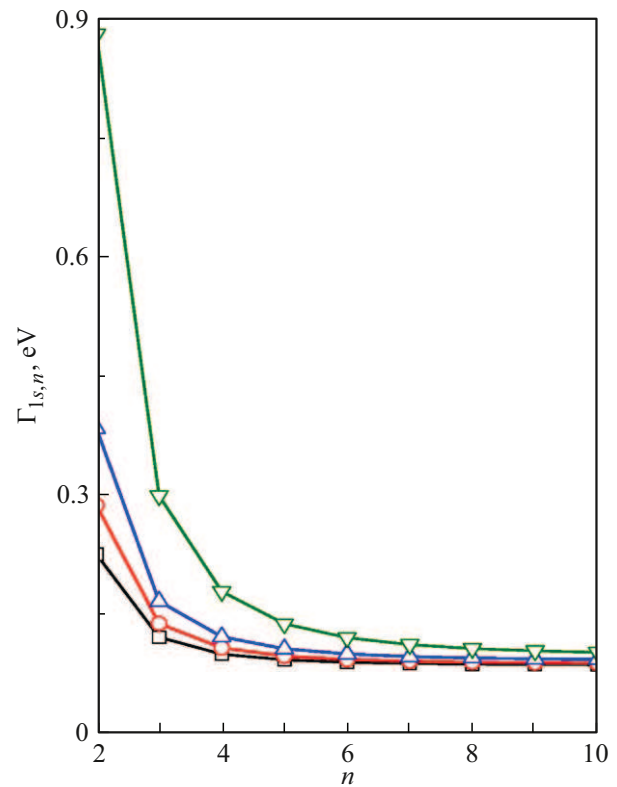
Как результат, искомый интеграл в (26) принимает вид:

$$\langle np_+|\hat{r}|\tilde{\epsilon}s_+ \rangle = \langle np_+|\hat{r}|\bar{\epsilon}s_+ \rangle - \alpha \langle np_+|\hat{r}|1s_+ \rangle - \beta \langle np_+|\hat{r}|2s_+ \rangle. \quad (39)$$

Результаты рис. 2 демонстрируют значительную роль „эффекта“ ортогонализации при построении амплитуд вероятности радиационного перехода  $np_+ \rightarrow \tilde{\epsilon}s_+$ . 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  $\text{Cr}^{20+}$  для энергии электрона сплошного спектра  $\tilde{\epsilon} = 2I_{1snp} - I_{1s}$ . Штриховая кривая — до процедуры ортогонализации, сплошная кривая — после ортогонализации.



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

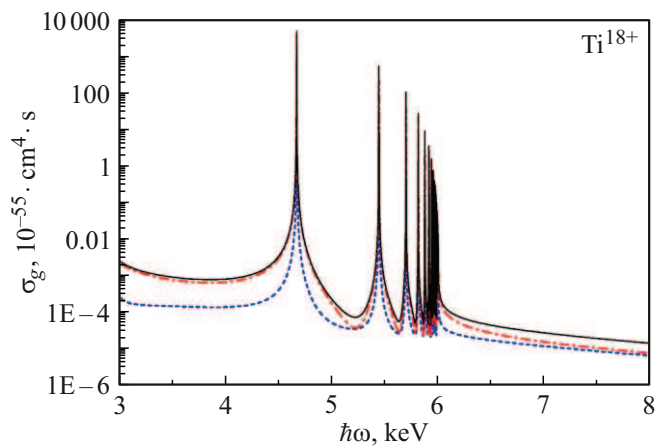
## 2. Результаты и обсуждение

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  $\langle 1s_0 | \hat{r} | np_+ \rangle$ ,  $\langle np_+ | \hat{r} | \tilde{\epsilon}(s, d)_+ \rangle$  в (26) и увеличением полных  $\Gamma_{1s,n}$ -ширин распада  $1s$ -вакансии  $1snp$ -состояний (рис. 3). Например, для лидирующего резонанса фотовозбуждения  $1s \rightarrow 2p$  имеем:  $\langle 1s_0 | \hat{r} | 2np_+ \rangle \cdot 10^2 = 5.8$  ( $\text{Ti}^{18+}$ ),  $4.3$  ( $\text{Zn}^{26+}$ );

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

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



**Рис. 4.** Обобщенное сечение двухфотонной резонансной однократной ионизации  $K$ -оболочки иона  $\text{Ti}^{18+}$ .  $\hbar\omega$  — 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-

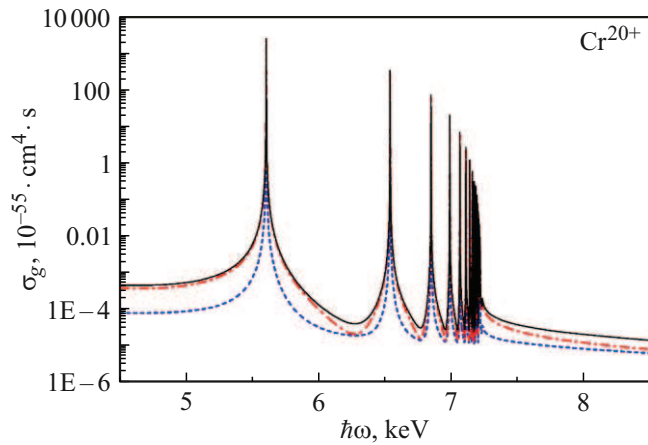


Рис. 5. То же, что на рис. 4, но для иона  $\text{Cr}^{20+}$ .

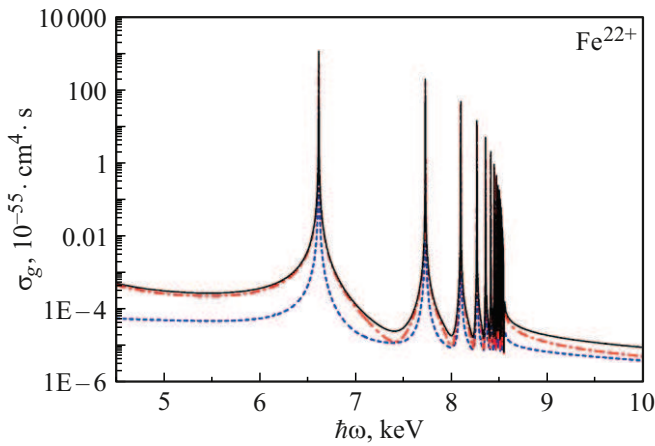


Рис. 6. То же, что на рис. 4, но для иона  $\text{Fe}^{22+}$ .

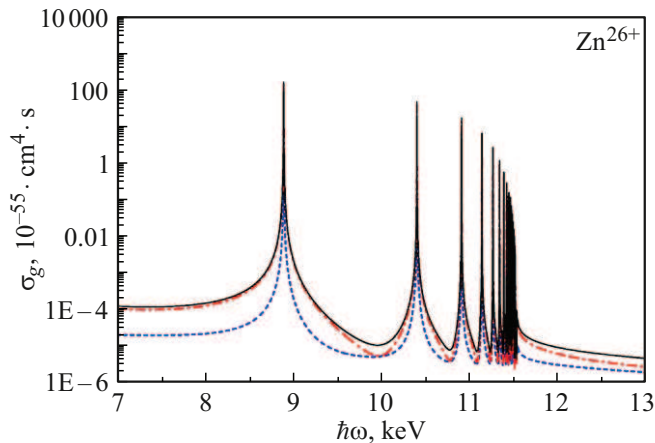


Рис. 7. То же, что на рис. 4, но для иона  $\text{Zn}^{26+}$ .

плитуд вероятности переходов  $1s \rightarrow np$ . 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  $1s \rightarrow np$ -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	$\sigma_g$ , $10^{-52}$ $\text{cm}^4 \cdot \text{s}$
$\text{Ti}^{18+}$	$2p$	4.6752	4.5445
	$3p$	5.4481	0.5120
	$4p$	5.7020	0.0979
$\text{Cr}^{20+}$	$2p$	5.5998 5.6160 <sup>a</sup>	2.3279
	$3p$	6.5341	0.3405
	$4p$	6.8430	0.0723
$\text{Fe}^{22+}$	$2p$	6.6099 6.6287 <sup>b</sup>	1.1402
	$3p$	7.7212	0.1967
	$4p$	8.0904	0.0479
$\text{Zn}^{26+}$	$2p$	8.8897	0.2868
	$3p$	10.4015	0.0798
	$4p$	10.9078	0.0294

Примечание. <sup>a</sup> Эксперимент [48]. <sup>b</sup> 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	$\Lambda$
$\text{Ti}^{18+}$	4.6752	8.4972
	7.0200	1.3041
$\text{Cr}^{20+}$	5.5998	10.3713
	8.2300	1.3753
$\text{Fe}^{22+}$	6.6099	8.5061
	9.5530	1.4242
$\text{Zn}^{26+}$	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:

$$\langle np_+ | \hat{r} | \bar{\epsilon} d_+ \rangle > \langle np_+ | \hat{r} | \bar{\epsilon} s_+ \rangle. \quad (40)$$

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

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

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 бериллиепоподобного атомного иона. Исследована изоэлектронная последовательность ионов  $Ti^{18+} \rightarrow Cr^{20+} \rightarrow Fe^{22+} \rightarrow Zn^{26+}$ . Установлены ярко выраженные резонансные пороговые 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. Mascioveccio. *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 López-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. Mücke, 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. Савукина. *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