

Двухфотонная ионизация одиночных атомов, локализованных на оси бесселева пучка

М.Д. Киселев^{†*×1)}, Е.В. Грызлова[†], М.М. Попова[†], А.Н. Грум-Гржимайло^{†*}

[†]Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скobelцына,
МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

^{*}Физический факультет, Университет ИТМО, 197101 С.-Петербург, Россия

[×]Лаборатория моделирования квантовых процессов,
Тихоокеанский государственный университет, 680035 Хабаровск, Россия

Поступила в редакцию 2 октября 2024 г.

После переработки 29 октября 2024 г.

Принята к публикации 12 ноября 2024 г.

В статье исследуется влияние закрученности бесселева излучения на двухфотонную ионизацию одиночных атомов, расположенных на оси падающего пучка. Получено выражение для матричного элемента двухфотонной ионизации такого рода при произвольной поляризации и мультипольности падающего излучения. Анализируется дифференциальная и интегральная по углу фотоэмиссии вероятность ионизации атома. Иллюстрирующие расчеты выполнены для атомов гелия и неона в простейшем случае поля круговой поляризации в электрическом дипольном приближении в модели одного активного электрона.

DOI: 10.31857/S0370274X24120144, EDN: IOZHDK

1. Введение. Исследования фотоэлектронной эмиссии – мощный и глубоко развитый метод изучения природы и внутренней структуры материи – перешли на качественно новый уровень с развитием методов детектирования векторных корреляций, таких как угловые распределения продуктов реакции, спиновой поляризации электронов или различного рода дихроизмов [1]. Спектр возможных явлений становится еще шире, когда речь заходит о многофотонных процессах, так как поглощение первого фотона создает поляризованную мишень с определенным неоднородным распределением электронной плотности в пространстве, и последующие электроны работают как зонд для первичного поглощения [2–4]. До недавнего времени основным фактором, влияющим на кинематику многофотонных процессов, была поляризация излучения [5–10]. Однако с развитием методов генерации закрученного излучения открылись новые перспективы [11–15]. Закрученное излучение обладает уникальными характеристиками – неоднородный профиль интенсивности излучения, отличная от плоскости поверхность постоянной фазы, сложная структура потоков энергии внутри пучка – и можно ожидать, что эти характеристики будут проявляться особенным образом в угловых распределениях фотоэмиссии. К настоящему

моменту в литературе исследования двухфотонных процессов с участием закрученного излучения представлены ограниченным кругом работ и преимущественно относятся к комбинации закрученного света и плоской волны [16–18].

Для анализа выбрана фотоионизация бесселевым светом, распространяющимся вдоль оси z (ось квантования), когда атом локализован на этой же оси. Такая геометрия рассматривалась, например, в работах [19–22]. В этом случае бесселево состояние излучения характеризуется линейной проекцией импульса k_z и проекцией полного углового момента m_{tam} на ось z . Абсолютное значение поперечного импульса, $\kappa_{\perp} = |\mathbf{k}_{\perp}|$, фиксировано и вместе с k_z определяет энергию падающего излучения: $\omega = c\sqrt{\kappa_{\perp}^2 + k_z^2}$, где c – скорость света в вакууме. Как показано в работе [22], такое бесселево состояние описывается векторным потенциалом

$$\mathbf{A}_{\kappa_{\perp} m_{\text{tam}} \lambda}^{\text{tw}} = \int \mathbf{u}_{\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} a_{\kappa_{\perp} m_{\text{tam}}}(\mathbf{k}_{\perp}) \frac{d^2\mathbf{k}_{\perp}}{4\pi^2}, \quad (1)$$

где

$$a_{\kappa_{\perp} m_{\text{tam}}}(\mathbf{k}_{\perp}) = (-i)^{m_{\text{tam}}} e^{im_{\text{tam}}\phi_k} \sqrt{\frac{2\pi}{k_{\perp}}} \delta(k_{\perp} - \kappa_{\perp}), \quad (2)$$

а \mathbf{u}_{λ} – вектор поляризации со спиральностью $\lambda = \pm 1$.

Бесселеву волну, определяемую уравнениями (1)–(2), в импульсном пространстве можно представить

¹⁾e-mail: md.kiselev@physics.msu.ru

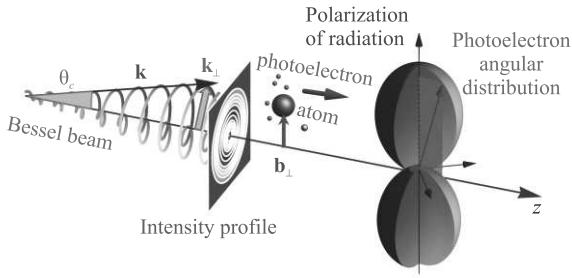


Рис. 1. (Цветной онлайн) Общая схема ионизации атома бесселевым излучением

как когерентную суперпозицию плоских волн, волновые векторы $\mathbf{k} = (k_{\perp}, k_z)$ которых лежат на поверхности некоторого конуса с углом раскрытия $\operatorname{tg} \theta_c = k_{\perp}/k_z$ (см. рис. 1). Положение облучаемой мишени в плоскости xy может быть задано вектором \mathbf{b}_{\perp} .

2. Результаты. В настоящей работе получено общее выражение, позволяющее описывать угловое распределение фотоэлектронов, образуемых при двухфотонной ионизации бесселевыми волнами атома, при расположении последнего на оси падающего пучка (см. формулу (A.9) в Приложении). Под общим выражением имеется в виду, что рассмотрено электромагнитное взаимодействие произвольной мультипольности и поляризации. Здесь для иллюстрации мы рассмотрим ионизацию полем круговой поляризации в дипольном приближении и модели одного активного электрона (детали вывода, а также используемые обозначения, приведены в Приложении):

$$\begin{aligned} \widetilde{W}_{2\gamma, E1}^{(\text{tw, circ})}(\theta_p; \theta_c) = & 45 \times \sum_{\substack{l \gamma L' \gamma k \gamma r \\ l_{\xi} l'_{\xi} l' l}} (-1)^{L_f + l + l'} \frac{\hat{L}''}{L_f} \\ & (11, 1 - 1|L_{\gamma} 0)^2 (11, 1 - 1|L'_{\gamma} 0)^2 (L_{\gamma} 0, L'_{\gamma} 0|k_{\gamma} 0)^2 \\ & (22, 2 - 2|r 0)(l 0, l' 0|r 0) \left\{ \begin{array}{ccc} L_f & l & 2 \\ 1 & 1 & l_{\xi} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} L_f & l' & 2 \\ 1 & 1 & l'_{\xi} \end{array} \right\} \\ & \left\{ \begin{array}{ccc} l & l' & r \\ 2 & 2 & L_f \end{array} \right\} \times P_r(\cos \theta_p) P_{k_{\gamma}}(\cos \theta_c) \mathcal{R}_{l_0 l_{\xi} l} \mathcal{R}_{l_0 l'_{\xi} l'}^*, \end{aligned} \quad (3)$$

где $P_n(x)$ – полином Лежандра порядка n , $\mathcal{R}_{l_0 l_{\xi} l}$ – радиальный интеграл соответствующего матричного элемента.

Амплитуды двухфотонной ионизации были рассчитаны методом, предложенным в [23, 24]. Этот метод также подробно описан в [25], однако, стоит отметить, что суммирование в формуле (5) этой статьи необходимо начинать с $m = 0$. Волновые функции

были рассчитаны в программе RADIAL [26] с использованием потенциала $2p$ -электрона в конфигурациях $1s2p$ (для гелия) и $1s^22s^22p^53p$ (для неона), полученного с помощью программного пакета MCHF [27].

Ионизация 1s-оболочки атома гелия. В соответствии с формулой (3) угловое распределение фотоэлектронов при ионизации 1s-оболочки атома гелия двумя бесселевыми волнами будет иметь форму:

$$\widetilde{W}_{2\gamma, E1}^{(\text{tw})}(\theta_p; \theta_c) = \frac{9}{8} \cos^8 \frac{\theta_c}{2} \sin^4 \theta_p |\mathcal{R}_{spd}|^2, \quad (4)$$

где \mathcal{R}_{spd} соответствует $\mathcal{R}_{l_0 l_{\xi} l}$ при $l_0 = 0$; $l_{\xi} = 1$ и $l = 2$.

Сечение процесса при этом:

$$\sigma_{2\gamma, E1}^{(\text{tw})}(\theta_c) = \frac{3}{5} \cos^8 \frac{\theta_c}{2} |\mathcal{R}_{spd}|^2. \quad (5)$$

Отметим, что при двойной ионизации s -оболочки полем круговой поляризации единственный разрешенный канал – это εd -волн. Сечения и угловые распределения фотоэмиссии, соответствующие выражениям (4) и (5), представлены на рис. 2.

Ионизация 2p-оболочки атома неона. В соответствии с формулой (3) угловое распределение фотоэлектронов при ионизации 2p-оболочки атома неона ($l_0 = 1$) двумя бесселевыми волнами будет иметь форму:

$$\begin{aligned} \widetilde{W}_{2\gamma, E1}^{(\text{tw})}(\theta_p; \theta_c) = & \frac{1}{800} \cos^8 \frac{\theta_c}{2} \sin^2 \theta_p \left(400 |\mathcal{R}_{psp}|^2 + \right. \\ & + 4 |\mathcal{R}_{pdp}|^2 + 6 |\mathcal{R}_{pdf}|^2 (21 - 5 \cos 2\theta_p) + \sqrt{6} (3 + 5 \cos 2\theta_p) \\ & \times [\mathcal{R}_{pdp} \mathcal{R}_{pdf}^* + \mathcal{R}_{pdf}^* \mathcal{R}_{pdp} + 10 (\mathcal{R}_{psp} \mathcal{R}_{pdf}^* + \mathcal{R}_{pdf}^* \mathcal{R}_{psp})] + \\ & \left. + 40 (\mathcal{R}_{psp} \mathcal{R}_{pdp}^* + \mathcal{R}_{pdp}^* \mathcal{R}_{psp}) \right), \end{aligned} \quad (6)$$

где \mathcal{R}_{psp} соответствует $\mathcal{R}_{l_0 l_{\xi} l}$ при $l_{\xi} = 0$ и $l = 1$; \mathcal{R}_{pdp} – при $l_{\xi} = 2$ и $l = 1$; \mathcal{R}_{pdf} – при $l_{\xi} = 2$ и $l = 3$.

Сечение процесса при этом:

$$\begin{aligned} \sigma_{2\gamma, E1}^{(\text{tw})}(\theta_c) = & \frac{1}{300} \cos^8 \frac{\theta_c}{2} \left(100 |\mathcal{R}_{psp}|^2 + |\mathcal{R}_{pdp}|^2 + \right. \\ & \left. + 36 |\mathcal{R}_{pdf}|^2 + 10 (\mathcal{R}_{pdp} \mathcal{R}_{psp}^* + \mathcal{R}_{pdf}^* \mathcal{R}_{psp}) \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Сечения и угловые распределения, соответствующие выражениям (6) и (7), представлены на рис. 3.

Обсуждение. Угловые распределения, представленные на рис. 2б и 3б, выглядят подобно. Для одноканального случая ионизации гелия угловое распределение аналитически пропорционально $\sin^4 \theta_p$, однако, в неоне появляется дополнительная зависимость от энергии излучения (см. выражение (6)), а, значит, и от соотношения сечений каналов psp ,

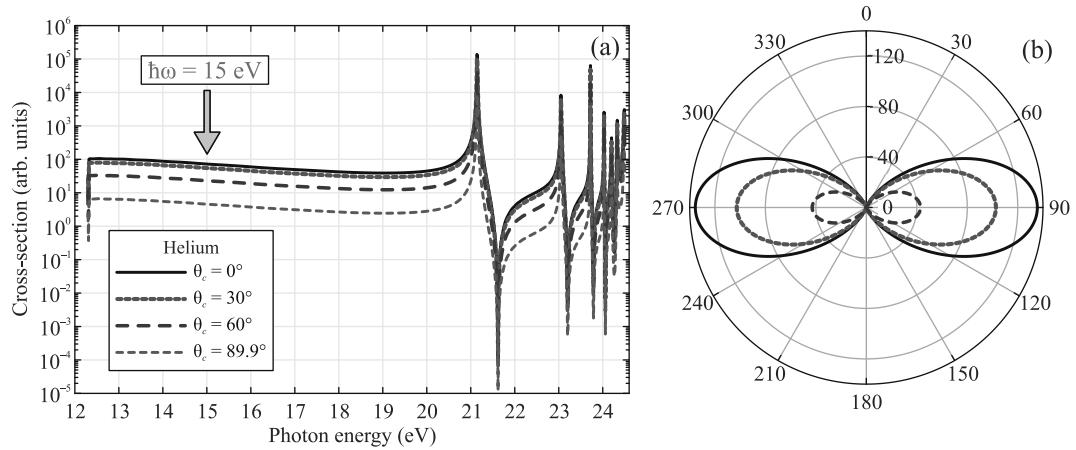


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Сечение двухфотонной ионизации гелия для различных углов раскрытия конуса бесселева пучка θ_c . (б) – Угловое распределение фотоэлектронов, соответствующее энергии падающего пучка $\hbar\omega = 15$ эВ, для различных углов раскрытия конуса бесселева пучка θ_c

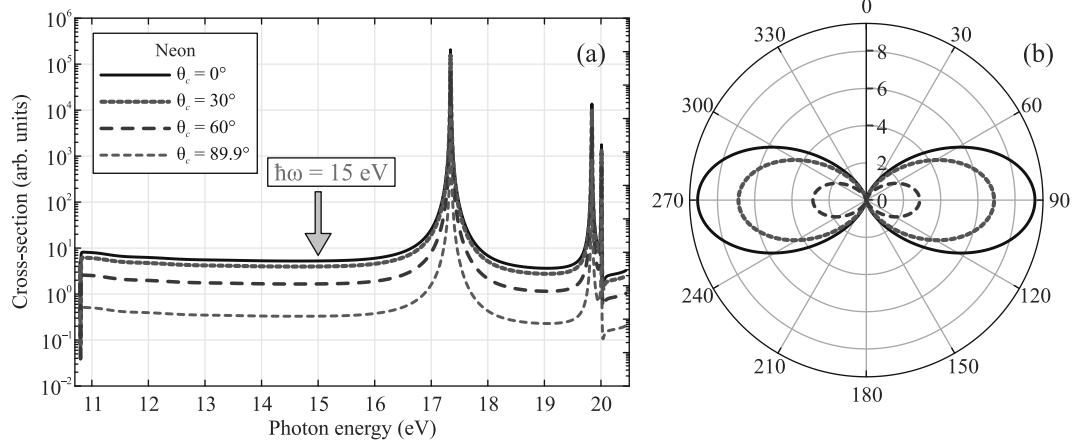


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Сечение двухфотонной ионизации неона для различных углов раскрытия конуса бесселева пучка θ_c . (б) – Угловое распределение фотоэлектронов, соответствующее энергии падающего пучка $\hbar\omega = 15$ эВ, для различных углов раскрытия конуса бесселева пучка θ_c

pdp и *pdf*. Но даже для многоэлектронной мишени, какой является неон, волновая функция электрона, испущенного при двухфотонной ионизации по лем круговой поляризации, содержит по меньшей мере $\sin^2 \theta_p$, поэтому угловые распределения имеют схожую форму.

Обнаруженной особенностью двухфотонной ионизации бесселевыми волнами атомов, расположенных на оси падающего пучка, является выделяемая независимо от типа облучаемого атома (или иона) одинаковая зависимость как угловых распределений фотоэлектронов, так и сечений ионизации от угла раскрытия конуса бесселева пучка $\sim \cos^8(\theta_c/2)$ – часть выражения (3), про-суммированная аналитически по L_γ , L'_γ и k_γ . Примечательно, что при этом не возникает никаких дополнительных зависимостей, в результате которых

могли бы стать “разрешенными” переходы, которые “запрещены” в плосковолновом случае (например, переход $1s \rightarrow np \rightarrow \epsilon s$ в гелии). Хотя подобных эффектов можно было ожидать – так, например, в работе [28] было показано, что закрученность падающего излучения приводит к появлению компоненты спиновой поляризации фотоэлектрона, запрещенной в процессе плосковолновой ионизации. Таким образом, закрученность падающего излучения в случае двухфотонной ионизации приводит лишь к уменьшению сечения процесса, но не к усилению или появлению новых качественных особенностей. Нетрудно понять, что при увеличении числа N поглощенных атомом-мишенью бесселевых волн в дипольном приближении зависимость дифференциальных и интегральных по углу фотоэмиссии вероятностей ионизации от параметра θ_c будет

даваться выражением $\sim \cos^{4N}(\theta_c/2)$. Отметим, что хотя иллюстрирующие расчеты выполнены в рамках модели одного активного электрона и для импульса бесконечной длительности, представленные выше выводы носят общий характер. Таким образом, в силу того, что геометрическая часть, связанная с параметром бесселева поля θ_c , аналитически отделяется от энергетической части, можно выполнять расчеты в произвольной модели (это относится к структуре пучка как по длительности, так и по амплитуде, а также к используемой модели атома) и при этом все сделанные выводы останутся в силе.

Анализируя результаты, представленные на рис. 2 и 3, становится ясно, что при фиксированной энергии падающего пучка (для определенности в расчетах эта энергия принята равной 15 эВ для гелия и для неона) сечение процесса может уменьшиться до 16 раз при предельном увеличении параметра θ_c . Вероятность фотоэмиссии под определенным углом также падает с ростом θ_c , но при этом форма угловых распределений полностью сохраняется.

3. Заключение. В результате анализа аналитической формы выражения для углового распределения вероятности фотоэлектронной эмиссии из атомов, расположенных на оси пучка, под действием бесселева излучения было показано, что угловые распределения двухфотонной ионизации сохраняют свою форму при любых параметрах закрученного излучения. Это утверждение, доказанное в текущей статье, и справедливое для любой мультипольности и поляризации рассматриваемого излучения, было проиллюстрировано расчетами для поля круговой поляризации в дипольном приближении. Более того, утверждение легко обобщается на трех- и многофотонные переходы, так как и интегральная вероятность процесса, и угловая зависимость модифицируются бесселевым излучением, как $\cos^{4N}(\theta_c/2)$. Доказанное утверждение демонстрирует важность использования структурированных, т.е. с определенным распределением атомов, мишней для наблюдения эффектов закрученности излучения в векторных характеристиках многофотонных процессов, таких как угловые распределения.

Приложение. Вывод рабочих формул

В приводимых ниже формулах $\mathcal{J}_n(x)$ – функция Бесселя первого рода порядка n ; $D_{lm}^k(\hat{\Omega})$ – D-функция Вигнера поворота $\hat{\Omega}$ на тройку углов Эйлера; $d_{lm}^k(\theta)$ – малая D-функция Вигнера; $\hat{a} = \sqrt{2a+1}$, а также используются стандартные обозначения для коэффициентов Клебша–Гордана и $6j$ -символов Вигнера.

Матричный элемент однофотонной ионизации атома бесселевым излучением, идущей по схеме

$$\hbar\omega + A(\alpha_i J_i M_i) \rightarrow A^+(\alpha_f J_f M_f) + e^-(\mathbf{p} m_s), \quad (\text{A.1})$$

дается выражением, [29]:

$$\begin{aligned} M_{\text{cont}}^{(\text{tw})} = & \sqrt{\kappa_\perp} \sum_{LMp} i^{L+M-2m_{\text{tam}}} \hat{L}(i\lambda)^p e^{i(m_{\text{tam}}-M)\phi_b} \\ & \times \mathcal{J}_{m_{\text{tam}}-M}(\kappa_\perp b_\perp) d_{M\lambda}^L(\theta_c) \sum_{\kappa\mu J_t M_t} \frac{\hat{l}}{\hat{J}_t}(l0, \frac{1}{2}m_s | jm_s) \\ & \times (J_f M_f, j\mu | J_t M_t) (J_t M_t, LM | J_t M_t) D_{\mu m_s}^{j*}(\hat{\mathbf{p}}) \\ & \times \langle (\alpha_f J_f, \epsilon\kappa) J_t | H_\gamma(pL) | \alpha_i J_i \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

где $A(A^+)$ означает состояние до (после) ионизации; $\hbar\omega$ – энергия падающего фотона; $J_{i,f}$ и $M_{i,f}$ – полный момент и его проекция для начального (i) и конечного (f) состояний; $\alpha_{i,f}$ – набор квантовых чисел, необходимых для полного описания состояния; m_{tam} – проекция полного углового момента бесселева пучка; $\hat{\mathbf{p}} = (\phi_p, \theta_p, 0)$ – направление вылета фотоэлектрона с орбитальным моментом l и полным моментом j ; $H_\gamma(pL)$ – оператор взаимодействия атомного электрона с магнитным ($p = 0$) или электрическим ($p = 1$) фотоном мультипольности L . Отметим, что приведенный матричный элемент $\langle (\alpha_f J_f, \epsilon\kappa) J_t | H_\gamma(pL) | \alpha_i J_i \rangle$ включает в себя зависимость от фазы рассеяния (детали также можно найти в [29]).

Матричный элемент однофотонного возбуждения атома бесселевым излучением, идущим по схеме

$$\hbar\omega + A(\alpha_i J_i M_i) \rightarrow A^*(\alpha_f J_f M_f), \quad (\text{A.3})$$

дается выражением, [30]:

$$\begin{aligned} M_{\text{discrete}}^{(\text{tw})} = & \sqrt{\kappa_\perp} \sum_{LMp} i^{L+M-2m_{\text{tam}}} \hat{L}(i\lambda)^p e^{i(m_{\text{tam}}-M)\phi_b} \\ & \times \mathcal{J}_{m_{\text{tam}}-M}(\kappa_\perp b_\perp) d_{M\lambda}^L(\theta_c) \frac{1}{\hat{J}_f}(J_t M_t, LM | J_f M_f) \\ & \times \langle (\alpha_f J_f | H_\gamma(pL) | \alpha_i J_i \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Далее для краткости записи будем использовать $m_{\text{tam}} \equiv m$. В случае одиночного атома, расположенного на оси бесселева пучка ($b_\perp = 0$), и после интегрирования по азимутальному углу ϕ_b ($\int e^{i(m-M)\phi} \frac{d\phi}{2\pi} = \delta_{mM}$), последовательным перемножением матричных элементов (A.2) и (A.4) можно

получить матричный элемент двухфотонной ионизации атома бесселевым излучением, идущей по схеме, изображенной на рис. 1А, в следующей форме:

$$\begin{aligned}
 M_{2\gamma}^{(\text{tw})} = & \kappa_{\perp} \sum_{\substack{L_1 L_2 \bar{L}_{\gamma} \\ J_{\xi} \mu \bar{M}_{\gamma}}} i^{L_1 + L_2 + 2m} (i\lambda)^{p_1 + p_2} \frac{\hat{L}_1 \hat{L}_2 \hat{l} \hat{L}_{\gamma}}{\hat{J}_t} \\
 & \times (-1)^{-J_0 + L_1 + L_2 - J_t} (l0, \frac{1}{2} m_s | jm_j) D_{\mu m_j}^{j*} (\hat{\mathbf{p}}) \\
 & \times (J_0 M_0, \bar{L}_{\gamma} \bar{M}_{\gamma} | J_t M_t) (J_f M_f, j\mu | J_t M_t) \\
 & \times (L_1 m, L_2 m | \bar{L}_{\gamma} \bar{M}_{\gamma}) d_{m\lambda}^{L_1} (\theta_c) d_{m\lambda}^{L_2} (\theta_c) \left\{ \begin{array}{ccc} L_1 & L_2 & \bar{L}_{\gamma} \\ J_t & J_0 & J_{\xi} \end{array} \right\} \\
 & \times \langle (\alpha_t J_t || H_{\gamma}(p_2 L_2) || \alpha_{\xi} J_{\xi}) \langle (\alpha_{\xi} J_{\xi} || H_{\gamma}(p_1 L_1) || \alpha_0 J_0) \rangle \rangle. \quad (\text{A.5})
 \end{aligned}$$

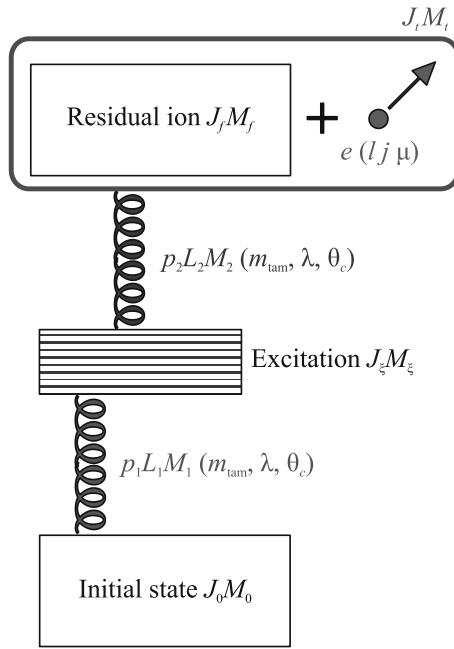


Рис. 1А. (Цветной онлайн) Схема двухфотонной ионизации. $J_0 M_0$, $J_{\xi} M_{\xi}$ и $J_f M_f$ – полный момент и его проекция для начального состояния, промежуточных связанных состояний (возбуждений) и остаточного иона, соответственно. $J_t M_t$ – полный момент и его проекция для системы “остаточный ион + фотоэлектрон”

Для удобства записи дальнейших выражений введем обозначение:

$$\begin{aligned}
 \langle J_t || L_1 + L_2 || J_0 \rangle_{2\gamma} \equiv & \\
 \equiv & \sum_{J_{\xi}} i^{L_1 + L_2} (i\lambda)^{p_1 + p_2} \left\{ \begin{array}{ccc} L_1 & L_2 & \bar{L}_{\gamma} \\ J_t & J_0 & J_{\xi} \end{array} \right\} \\
 & \times \langle (\alpha_t J_t || H_{\gamma}(p_2 L_2) || \alpha_{\xi} J_{\xi}) \langle (\alpha_{\xi} J_{\xi} || H_{\gamma}(p_1 L_1) || \alpha_0 J_0) \rangle \rangle. \quad (\text{A.6})
 \end{aligned}$$

Заметим, что малые d -функции Вигнера в выражении (A.5) могут быть просуммированы таким образом, что итоговое выражение будет содержать только d -функции с нулевыми проекциями:

$$\begin{aligned}
 d_{m\lambda}^{L_1} (\theta_c) d_{m\lambda}^{L_2} (\theta_c) &= (-1)^{\lambda - m} d_{m\lambda}^{L_1} (\theta_c) d_{-m-\lambda}^{L_2} (\theta_c) = \\
 &= (-1)^{\lambda - m} \sum_{L_{\gamma} M_{\gamma} \Lambda_{\gamma}} d_{M_{\gamma} \Lambda_{\gamma}}^{L_{\gamma}} (\theta_c) \\
 &\times (L_1 m, L_2 - m | L_{\gamma} M_{\gamma}) (L_1 \lambda, L_2 - \lambda | L_{\gamma} \Lambda_{\gamma}) = \\
 &= (-1)^{\lambda - m} \sum_{L_{\gamma}} d_{00}^{L_{\gamma}} (\theta_c) \\
 &\times (L_1 m, L_2 - m | L_{\gamma} 0) (L_1 \lambda, L_2 - \lambda | L_{\gamma} 0). \quad (\text{A.7})
 \end{aligned}$$

Вышеизложенное позволяет переписать выражение (A.5) в форме:

$$\begin{aligned}
 M_{2\gamma}^{(\text{tw})} = & \kappa_{\perp} \sum_{\substack{L_1 L_2 \bar{L}_{\gamma} \bar{L}_{\gamma} \\ M_{\gamma} \mu}} i^{2m} \frac{\hat{L}_1 \hat{L}_2 \hat{l} \hat{L}_{\gamma}}{\hat{J}_t} D_{\mu m_j}^{j*} (\hat{\mathbf{p}}) d_{00}^{L_{\gamma}} (\theta_c) \\
 & \times (-1)^{-J_0 + L_1 + L_2 - J_t + \lambda - m} (l0, \frac{1}{2} m_s | jm_j) \\
 & \times (J_0 M_0, \bar{L}_{\gamma} \bar{M}_{\gamma} | J_t M_t) (J_f M_f, j\mu | J_t M_t) \\
 & \times (L_1 m, L_2 - m | L_{\gamma} 0) (L_1 \lambda, L_2 - \lambda | L_{\gamma} 0) \\
 & \times (L_1 m, L_2 m | \bar{L}_{\gamma} \bar{M}_{\gamma}) \langle J_t || L_1 + L_2 || J_0 \rangle_{2\gamma}. \quad (\text{A.8})
 \end{aligned}$$

Угловое распределение фотоэлектронов, образованных в процессе двухфотонной ионизации бесселевым излучением одиночного атома, расположенного на оси падающего пучка, может быть найдено по базовым квантовомеханическим принципам: $W_{2\gamma}^{(\text{tw})} (\theta_p; \theta_c) = M_{2\gamma}^{(\text{tw})} M_{2\gamma}^{(\text{tw})*}$. Используя матричный элемент в форме (A.8) и технику суммирования по проекциям, аналогичную используемой в [29], получаем общее выражение для углового распределения:

$$\begin{aligned}
 W_{2\gamma}^{(\text{tw})} (\theta_p; \theta_c) = & \sum_{\substack{J_f L_1 L_1' L_2 L_2' L_{\gamma} L_{\gamma}' \\ \bar{L}_{\gamma} \bar{L}_{\gamma}' J_t J_t' l l' j j' k_{\gamma} r}} (-1)^{-J_0 - J_f - J_t - J_t' + L_1 + L_1' + \\ & + L_2 + L_2' + 2j - 2m - 1/2} \\
 & \hat{L}_1 \hat{L}_1' \hat{L}_2 \hat{L}_2' \hat{\bar{L}}_{\gamma} \hat{\bar{L}}_{\gamma}' \hat{J}_t \hat{J}_t' \hat{l} \hat{l}' \hat{j} \hat{j}' (L_{\gamma} 0, L_{\gamma}' 0 | k_{\gamma} 0)^2 \\
 & (L_1 m, L_2 m | \bar{L}_{\gamma} 2m) (L_1' m, L_2' m | \bar{L}_{\gamma}' 2m) \\
 & (L_1 m, L_2 - m | L_{\gamma} 0) (L_1' m, L_2' - m | L_{\gamma}' 0) \\
 & (L_1 \lambda, L_2 - \lambda | L_{\gamma} 0) (L_1' \lambda, L_2' - \lambda | L_{\gamma}' 0) \\
 & (\bar{L}_{\gamma} 2m, \bar{L}_{\gamma}' - 2m | r 0) (l 0, l' 0 | r 0) \\
 & \left\{ \begin{array}{ccc} l & l' & r \\ j' & j & \frac{1}{2} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} j & j' & r \\ J_t' & J_t & J_f \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} \bar{L}_{\gamma} & \bar{L}_{\gamma}' & r \\ J_t' & J_t & J_0 \end{array} \right\} \\
 & P_r (\cos \theta_p) P_{k_{\gamma}} (\cos \theta_c) \\
 & \langle J_t || L_1 + L_2 || J_0 \rangle_{2\gamma} \langle J_t' || L_1' + L_2' || J_0 \rangle_{2\gamma}^{*}. \quad (\text{A.9})
 \end{aligned}$$

В качестве иллюстрации в настоящей работе рассматривается ионизация $1s$ -оболочки атома гелия и $2p$ -оболочки атома неона в нейтральных состояниях ($J_0 = 0$) в электрическом дипольном приближении ($L_{1,2} = L'_{1,2} = 1$; $p_{1,2} = 1$). В этом случае ($j \pm 1/2$) и J_ξ – целые числа, поэтому выражение (A.9) упрощается и принимает вид:

$$W_{2\gamma, E1}^{(\text{tw})}(\theta_p; \theta_c) = 9 \times \sum_{\substack{J_f J_t J'_t L_\gamma L'_\gamma \\ L_\gamma L'_\gamma l' j j' k_\gamma r}} (-1)^{-J_f - J_t - J'_t + 1/2} \hat{L}_\gamma \hat{L}'_\gamma \hat{J}_t \hat{J}'_t \hat{l}' \hat{j}' (L_\gamma 0, L'_\gamma 0 | k_\gamma 0)^2 (11, 1-1 | L_\gamma 0)^2 (11, 1-1 | L'_\gamma 0)^2 (11, 11 | \bar{L}_\gamma 2) (11, 11 | \bar{L}'_\gamma 2) (11, 1-1 | \bar{L}_\gamma 2, \bar{L}'_\gamma -2 | r 0) (l 0, l' 0 | r 0) \begin{Bmatrix} l & l' & r \\ j' & j & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j & j' & r \\ J'_t & J_t & J_f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{L}_\gamma & \bar{L}'_\gamma & r \\ J'_t & J_t & 0 \end{Bmatrix} P_r(\cos \theta_p) P_{k_\gamma}(\cos \theta_c) \mathcal{A}_{2\gamma}^{E1} \mathcal{A}_{2\gamma}^{E1*}, \quad (\text{A.10})$$

где

$$\mathcal{A}_{2\gamma}^{E1} = \sum_{J_\xi} (-1)^{J_\xi} \begin{Bmatrix} J_1 & 1 & \bar{L}_\gamma \\ J_t & 0 & J_\xi \end{Bmatrix} \times \langle (\alpha_t J_t) | H_\gamma(E1) | \alpha_\xi J_\xi \rangle \langle (\alpha_\xi J_\xi) | H_\gamma(E1) | \alpha_0 J_0 \rangle. \quad (\text{A.11})$$

Далее воспользуемся моделью одного активного электрона, представив исходную систему как совокупность ионного остова и ионизируемого (активного) электрона. Для этого в (A.11) разделим моменты по схеме:

$$\begin{aligned} J_0 &= L_0(L_f l_0) + S_0 \\ J_\xi &= L_\xi(L_f l_\xi) + S_\xi \\ J_t &= L_t(L_f l) + S_t, \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

где L_f – орбитальный момент ионного остова (остаточного иона); l_0 , l_ξ и l – орбитальный момент ионизируемого электрона в начальном состоянии атома, в возбужденном состоянии и в непрерывном спектре, соответственно.

Учитывая, что $J_f = L_f + S_f$, $S_0 = S_\xi = S_t = 0$, $S_f = 1/2$, $J_\xi = L_\xi = 1$ и, как следствие, $\bar{L}_\gamma = J_t = L_t$, а также используя формулы (A.72) и (A.73) из [31], легко показать, что амплитуда (A.11) сводится к форме:

$$\widetilde{\mathcal{A}}_{2\gamma}^{E1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{l_\xi} (-1)^{j+l_0+\bar{L}_\gamma-1/2} \frac{\hat{J}_f \hat{j}}{\hat{L}_f} \begin{Bmatrix} J_f & L_f & \frac{1}{2} \\ l & j & \bar{L}_\gamma \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_f & l & \bar{L}_\gamma \\ 1 & 1 & l_\xi \end{Bmatrix} \langle l | H_\gamma(E1) | l_\xi \rangle \langle l_\xi | H_\gamma(E1) | l_0 \rangle. \quad (\text{A.13})$$

Тогда в одноэлектронной модели выражение для углового распределения (A.10) принимает вид:

$$\begin{aligned} \widetilde{W}_{2\gamma, E1}^{(\text{tw})}(\theta_p; \theta_c) &= \frac{9}{2} \times \sum_{\substack{L_\gamma L'_\gamma L_\gamma L'_\gamma \\ J_f l'_\xi l' j j' k_\gamma r}} (-1)^{j+j'-J_f-1/2} \frac{\hat{L}_\gamma^2 \hat{L}'_\gamma^2 \hat{j}_f^2 \hat{j}'^2 \hat{l}'^2}{\hat{L}_f^2} (L_\gamma 0, L'_\gamma 0 | k_\gamma 0)^2 (11, 1-1 | L_\gamma 0)^2 \\ &\quad (11, 1-1 | L'_\gamma 0)^2 (11, 11 | \bar{L}_\gamma 2) (11, 11 | \bar{L}'_\gamma 2) \\ &\quad \times (\bar{L}_\gamma 2, \bar{L}'_\gamma -2 | r 0) (l 0, l' 0 | r 0) \times \begin{Bmatrix} l & l' & r \\ j' & j & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_f & L_f & \frac{1}{2} \\ l & j & \bar{L}_\gamma \end{Bmatrix} \\ &\quad \times \begin{Bmatrix} J_f & L_f & \frac{1}{2} \\ l' & j' & \bar{L}'_\gamma \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_f & l & \bar{L}_\gamma \\ 1 & 1 & l_\xi \end{Bmatrix} \\ &\quad \times \begin{Bmatrix} L_f & l & \bar{L}_\gamma \\ 1 & 1 & l_\xi \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_f & l' & \bar{L}'_\gamma \\ 1 & 1 & l'_\xi \end{Bmatrix} \\ &\quad \times \begin{Bmatrix} j & j' & r \\ \bar{L}'_\gamma & \bar{L}_\gamma & J_f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{L}_\gamma & \bar{L}'_\gamma & r \\ \bar{L}'_\gamma & \bar{L}_\gamma & 0 \end{Bmatrix} \\ &\quad \times P_r(\cos \theta_p) P_{k_\gamma}(\cos \theta_c) \mathcal{R}_{l_0 l_\xi l} \mathcal{R}_{l_0 l'_\xi l'}, \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

где $\mathcal{R}_{l_0 l_\xi l} \equiv \langle l | H_\gamma(E1) | l_\xi \rangle \langle l_\xi | H_\gamma(E1) | l_0 \rangle$.

После снятия суммы по j , j' и J_f получаем окончательно:

$$\begin{aligned} \widetilde{W}_{2\gamma, E1}^{(\text{tw})}(\theta_p; \theta_c) &= 9 \times \sum_{\substack{L_\gamma L'_\gamma L_\gamma L'_\gamma \\ l'_\xi l' l' j j' k_\gamma r}} (-1)^{L_f + l + l'} \frac{\hat{L}_\gamma \hat{L}'_\gamma \hat{l} \hat{l}'}{\hat{L}_f^2} (11, 1-1 | L_\gamma 0)^2 (11, 1-1 | L'_\gamma 0)^2 (L_\gamma 0, L'_\gamma 0 | k_\gamma 0)^2 \\ &\quad (11, 11 | \bar{L}_\gamma 2) (11, 11 | \bar{L}'_\gamma 2) (\bar{L}_\gamma 2, \bar{L}'_\gamma -2 | r 0) (l 0, l' 0 | r 0) \\ &\quad \begin{Bmatrix} L_f & l & \bar{L}_\gamma \\ 1 & 1 & l_\xi \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_f & l' & \bar{L}'_\gamma \\ 1 & 1 & l'_\xi \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l & l' & r \\ \bar{L}'_\gamma & \bar{L}_\gamma & L_f \end{Bmatrix} \\ &\quad P_r(\cos \theta_p) P_{k_\gamma}(\cos \theta_c) \mathcal{R}_{l_0 l_\xi l} \mathcal{R}_{l_0 l'_\xi l'}. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Если рассматривать падающее поле круговой поляризации, то с учетом дипольного приближения в (A.15) остаются только $\bar{L}_\gamma = \bar{L}'_\gamma = 2$, т.е.:

$$\begin{aligned} \widetilde{W}_{2\gamma, E1}^{(\text{tw, circ})(\theta_p; \theta_c)} &= 45 \times \sum_{\substack{L_\gamma L'_\gamma L_\gamma L'_\gamma \\ l'_\xi l' l' j j' k_\gamma r}} (-1)^{L_f + l + l'} \frac{\hat{l} \hat{l}'}{\hat{L}_f^2} (11, 1-1 | L_\gamma 0)^2 (11, 1-1 | L'_\gamma 0)^2 (L_\gamma 0, L'_\gamma 0 | k_\gamma 0)^2 \\ &\quad (22, 2-2 | r 0) (l 0, l' 0 | r 0) \begin{Bmatrix} L_f & l & 2 \\ 1 & 1 & l_\xi \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_f & l' & 2 \\ 1 & 1 & l'_\xi \end{Bmatrix} \\ &\quad \times \begin{Bmatrix} l & l' & r \\ 2 & 2 & L_f \end{Bmatrix} \times P_r(\cos \theta_p) P_{k_\gamma}(\cos \theta_c) \mathcal{R}_{l_0 l_\xi l} \mathcal{R}_{l_0 l'_\xi l'}. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Финансирование работы. Разработка формализма для описания двухфотонной ионизации одиночного атома бесселевыми волнами поддержана Российским научным фондом, проект 23-62-10026 (<https://rscf.ru/project/23-62-10026/>). Анализ сечений и угловых распределений выполнен при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, грант 075-15-2021-1353. Вычислительная часть работы поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта FEME-2024-0005.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. U. Becker and D. A. Shirley, *VUV and Soft X-Ray Photoionization*, Plenum Press, N.Y., London (1996).
2. F. J. Wuilleumier and M. Meyer, *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **39**, R425 (2006).
3. Н. Б. Делоне, М. В. Федоров, УФН **158**, 215 (1989).
4. H. Kleinpoppen, B. Lohmann, and A. N. Grum-Grzhimailo, *Perfect/Complete Scattering Experiments*, Springer Berlin, Heidelberg (2013).
5. P. Lambropoulos, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 585 (1972).
6. V. L. Jacobs, *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **6**, 1461 (1973).
7. H. R. Reiss, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 1129 (1972).
8. Н. Л. Манаков, А. В. Меремьянин, *ЖЭТФ* **111**, 1984 (1997).
9. T. S. Sarantseva, A. A. Romanov, A. A. Silaev, N. V. Vvedenskii, and M. V. Frolov, *Phys. Rev. A* **107**, 023113 (2023).
10. A. S. Maxwell, S. V. Popruzhenko, and C. Figueira de Morisson Faria, *Phys. Rev. A* **98**, 063423 (2018).
11. B. A. Knyazev and V. G. Serbo, *Phys.-Uspekhi* **61**, 449 (2018).
12. M. Babiker, D. L. Andrews, and V. E. Lembessis, *J. Opt.* **21**, 013001 (2018).
13. S. N. Khonina, N. L. Kazanskiy, S. V. Karpeev, and M. A. Butt, *Micromachines* **11**, 997 (2020).
14. W. Fuscaldo, P. Burghignoli, and A. Galli, *Optik* **240**, 166834 (2021).
15. A. Schimmoller, S. Walker, and A. S. Landsman, *Photonics* **11**, 871 (2024).
16. D. Seipt, R. A. Müller, A. Surzhykov, and S. Fritzsche, *Phys. Rev. A* **94**, 053420 (2016).
17. V. P. Kosheleva, V. A. Zaytsev, R. A. Müller, A. Surzhykov, and S. Fritzsche, *Phys. Rev. A* **102**, 063115 (2020).
18. I. P. Ivanov, *Ann. Phys.* **534**, 2100128 (2022).
19. A. Picón, J. Mompart, J. R. Vázquez de Aldana, L. Plaja, G. F. Calvo, and L. Roso, *Opt. Express* **18**, 3660 (2010).
20. A. Picón, A. Benseñy, J. Mompart, J. R. Vázquez de Aldana, L. Plaja, G. F. Calvo, and L. Roso, *New J. Phys.* **12**, 083053 (2010).
21. A. Afanasev, C. E. Carlson, and A. Mukherjee, *J. Opt.* **18**, 074013 (2016).
22. O. Matula, A. G. Hayrapetyan, V. G. Serbo, A. Surzhykov, and S. Fritzsche, *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **46**, 205002 (2013).
23. B. Gao and A. F. Starace, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 404 (1988).
24. A. E. Orel and T. N. Rescigno, *Chem. Phys. Lett.* **146**, 434 (1988).
25. Е. И. Старосельская, А. Н. Грум-Гржимайло, *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон.* **5**, 45 (2015).
26. F. Salvat and J. M. Fernández-Varea, *Comput. Phys. Commun.* **240**, 165 (2019).
27. C. Froese Fischer, T. Brage, and P. Jönsson, *Computational Atomic Structure. An MCHF Approach*, Institute of Physics Publishing, Bristol (1997).
28. M. D. Kiselev, E. V. Gryzlova, and A. N. Grum-Grzhimailo, *Phys. Rev. A* **109**, 023108 (2024).
29. M. D. Kiselev, E. V. Gryzlova, and A. N. Grum-Grzhimailo, *Phys. Rev. A* **108**, 023117 (2023).
30. A. Surzhykov, D. Seipt, V. G. Serbo, and S. Fritzsche, *Phys. Rev. A* **91**, 013403 (2015).
31. V. V. Balashov, A. N. Grum-Grzhimailo, and N. M. Kabachnik, *Polarization and Correlation Phenomena in Atomic Collisions: A Practical Theory Course*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, N.Y. (2000).