

О процессах фотоионизации закрученным светом

И. Волобуев

Семинар к 100-летию Юрия Михайловича Широкова

13 ноября 2025 г.

Цилиндрические волны и закрученные фотоны

Цилиндрические или бesselовы волны - это точные решения уравнения Даламбера в цилиндрических координатах:

$$\psi_{\kappa m k_z}(\vec{r}, t) = e^{-i\omega t} J_m(\kappa \rho) e^{i(m\phi + k_z z)} = \int a_{\kappa m}(\vec{k}_\perp) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \frac{d^2 k_\perp}{(2\pi)^2},$$

$$\vec{k} = (\vec{k}_\perp, k_z), \omega = c\sqrt{\kappa^2 + k_z^2}, a_{\kappa m}(\vec{k}_\perp) = i^{-m} e^{im\phi_k} \frac{2\pi}{k_\perp} \delta(k_\perp - \kappa).$$

Для электромагнитного поля

$$\frac{1}{c} \vec{A}_{\kappa m k_z \Lambda}(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} \int a_{\kappa m}(\vec{k}_\perp) \vec{e}_{\vec{k}\Lambda} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \frac{d^2 k_\perp}{(2\pi)^2},$$

где $\vec{e}_{\vec{k}\Lambda}, (\vec{k}, \vec{e}_{\vec{k}\Lambda}) = 0$, обозначает вектор поляризации фотона с импульсом $\vec{k}$, энергией $\omega = kc$ и спиральностью $\Lambda = \pm 1$.

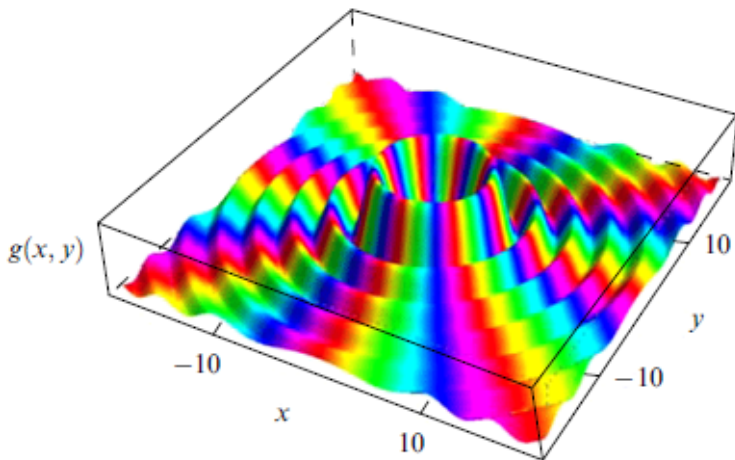


Рис. 1: Квадрат модуля y -компоненты векторного потенциала в плоскости (x, y) в единицах $1/\kappa$.

Рассеяние цилиндрических волн обсуждалось в работах:

- A. Picón, A. Benseny, J. Mompart, J.R. Vázquez de Aldana, L. Plaja, G.F. Calvo, and L. Roso, Transferring orbital and spin angular momenta of light to atoms, *New J. Phys.* **12**, 083053 (2010)
- I.P. Ivanov, Colliding particles carrying nonzero orbital angular momentum, *Phys.Rev.D* **83**, 093001 (2011)
- I.P. Ivanov and V.G. Serbo, Scattering of twisted particles: Extension to wave packets and orbital helicity, *Phys.Rev.A* **84**, 033804 (2011)
- Б.А. Князев, В.Г. Сербо, Пучки фотонов с ненулевой проекцией орбитального момента импульса: новые результаты, *УФН* **188**, 508–539 (2018)
- M.D. Kiselev, E.V. Gryzlova, A.N. Grum-Grzhimailo, Angular distribution of photoelectrons generated in atomic ionization by twisted radiation, *Phys.Rev.A* **108**, 023117 (2023)
- A.L. Harris, Projectile coherence effects in twisted electron ionization of helium, *Atoms* **11**, 79 (2023)

В большинстве работ при вычислении вероятностей процессов с закрученными фотонами пропадает зависимость от проекции момента импульса волны.

→ Следствие использования при расчетах формализма S -матрицы.

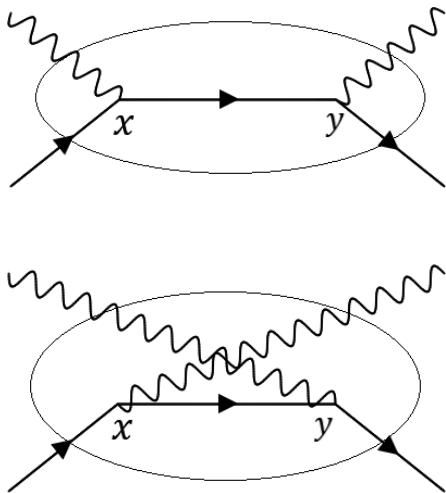


Рис. 2: Стандартный процесс рассеяния.

Зависимость от проекции момента импульса волны была получена в работе Князева и Сербо для процесса ионизации водорода закрученными фотонами в приближении бесконечно тяжелого ядра, локализованного в конечной области пространства.

Здесь мы рассмотрим более сложный процесс комптоновской ионизации атома водорода закрученными фотонами в нерелятивистском приближении с учетом конечной массы ядра.

V. Egorov and I. Volobuev, "On Compton ionization of a hydrogen atom by twisted photons," Eur. Phys. J. Plus **140** (2025) no.9, 905 [arXiv:2412.14127 [physics.atom-ph]].

Комптоновская ионизация атома водорода

Гамильтониан атома водорода в электромагнитном поле в атомной системе единиц имеет вид:

$$H = \frac{1}{2} \left(-i\vec{\nabla}_{r_1} - \frac{1}{c}\vec{A}(\vec{r}_1, t) \right)^2 + \frac{1}{2M} \left(-i\vec{\nabla}_{r_2} + \frac{1}{c}\vec{A}(\vec{r}_2, t) \right)^2 - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}.$$

Выразим координаты $\vec{r}_1$ и $\vec{r}_2$ через относительную координату $\vec{\rho} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ и координату центра масс атома $\vec{R} = (\vec{r}_1 + M\vec{r}_2)/(M+1)$ ($M = 1836$ а.е.). Тогда для сопряженных импульсов имеем

$$\vec{p}_e = \frac{1}{M+1}\vec{P}_R + \vec{p}_\rho, \quad \vec{P} = \frac{M}{M+1}\vec{P}_R - \vec{p}_\rho,$$

где $\vec{p}_e$ – импульс электрона, $\vec{P}$ – импульс протона (ядра), $\vec{P}_R$ – полный импульс, $\vec{p}_\rho$ – относительный импульс фрагментов.

Матричный элемент процесса вычисляем в приближении A^2

$$\mathcal{M}^{tw} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \Psi^-(\vec{p}_e, \vec{P}, t) | \tilde{V}_{int}(t) | \Phi_0(t) \rangle,$$

где потенциал взаимодействия записывается как

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{int}(\vec{R}, \vec{\rho}; t) &= \langle \vec{k}_1, \Lambda_1 | \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} \vec{A}(\vec{r}_1, t) \right)^2 + \frac{1}{2M} \left(\frac{1}{c} \vec{A}(\vec{r}_2, t) \right)^2 | \kappa, m, k_z, \Lambda \rangle \\ &= \frac{\pi}{\sqrt{\omega\omega_1}} \int \frac{d\phi_k}{2\pi} i^{-m} e^{im\phi_k} (\vec{e}_{\vec{k}(\phi_k)\Lambda}, \vec{e}_{\vec{k}_1\Lambda_1}^*) e^{i(\vec{Q}\vec{R} - (\omega - \omega_1)t)} \\ &\quad \times \left(e^{i\vec{Q}\vec{\rho}} + \frac{1}{M} e^{-i(1/M)\vec{Q}\vec{\rho}} \right). \end{aligned}$$

Здесь $\vec{k}(\phi_k) = (\kappa \cos \phi_k, \kappa \sin \phi_k, k_z)$ и $\vec{Q} = \vec{k}(\phi_k) - \vec{k}_1$.

Волновую функцию конечного состояния выбираем в виде

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \Psi^-(\vec{p}_e, \vec{P}, t) \rangle = e^{i\vec{P}_R \vec{R} - i(E_1 + E_2)t} \phi^-(\vec{p}_\rho, \vec{\rho}),$$

где функция $\phi^-(\vec{p}_\rho, \vec{\rho})$ удовлетворяет уравнению Шредингера для атома водорода в относительных координатах и описывает состояние непрерывного спектра

$$\left[\frac{1}{2\mu} p_\rho^2 + \frac{1}{2\mu} \Delta_\rho + \frac{1}{\rho} \right] \phi^-(\vec{p}_\rho, \vec{\rho}) = 0, \quad \mu = \frac{M}{M+1} \approx 1.$$

Волновую функцию начального состояния атома водорода возьмем в виде произведения волновой функции основного состояния атома водорода $\phi_0(\rho)$ и волновой функции движения центра масс, зависящей от $\vec{R}$ и описываемой гауссовым волновым пакетом с центром в точке $\vec{b}$. Если это состояние имеет макроскопический размер, например, если $d \sim 0.1$ см, то такое состояние позволяет феноменологически учесть размер и расположение макроскопического детектора.

Средняя энергия состояния, описываемого таким волновым пакетом, $\langle \frac{\vec{p}_R^2}{2M} \rangle \sim 10^{-17}$ эВ, а время жизни этого состояния $\tau = \frac{Md^2}{\hbar} \sim 1$ сек, т.е. макроскопическое. Для упрощения вычислений мы просто пренебрежем зависимостью этого состояния от времени, т.е. возьмем волновую функцию начального состояния в виде

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \Phi_0(t) \rangle = \frac{1}{(\sqrt{\pi}d)^{3/2}} e^{-i\varepsilon_0 t} \phi_0(\rho) e^{-\frac{(\vec{R}-\vec{b})^2}{2d^2}},$$

где ε_0 обозначает энергию основного состояния атома водорода, и при вычислении матричного элемента будем интегрировать по времени в бесконечных пределах.

Подставляя волновые функции в формулу для матричного элемента и выполняя интегрирование по времени, получим:

$$\mathcal{M}^{tw}(\vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P})_{\Lambda\Lambda_1} = i^{-m} \frac{2\pi^2}{\sqrt{\omega\omega_1}} \delta(\omega - |\varepsilon_0| - \omega_1 - E_1 - E_2) \times$$

$$\int \frac{d\phi_k}{2\pi} e^{im\phi_k} (\vec{e}_{\vec{k}(\phi_k)\Lambda}, \vec{e}_{\vec{k}_1\Lambda_1}^*) M^{Pl}(\vec{k}(\phi_k), \vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P}) \times$$

$$\int d^3R e^{i\vec{R}(\vec{k}(\phi_k) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P})} \frac{1}{(\sqrt{\pi}d)^{3/2}} e^{-\frac{(\vec{R}-\vec{b})^2}{2d^2}},$$

где

$$M^{Pl}(\vec{k}(\phi_k), \vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P}) = \langle \phi^-(\vec{p}_\rho) | \left[e^{i\vec{Q}\vec{\rho}} + \frac{1}{M} e^{-i(1/M)\vec{Q}\vec{\rho}} \right] | \phi_0 \rangle .$$

Выполняя интегрирование по $\vec{R}$ и опуская дельта-функцию сохранения энергии, умноженную на 2π , перепишем матричный элемент в виде

$$\mathcal{M}^{tw}(\vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P})_{\Lambda_1} = i^{-m} \frac{\pi(2\sqrt{\pi}d)^{3/2}}{\sqrt{\omega\omega_1}} \int \frac{d\phi_k}{2\pi} e^{im\phi_k} e^{i\vec{b}(\vec{k}(\phi_k) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P})} \times$$

$$e^{-\frac{d^2}{2}(\vec{k}(\phi_k) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P})^2} (\vec{e}_{\vec{k}(\phi_k)\Lambda}, \vec{e}_{\vec{k}_1\Lambda_1}^*) M^{Pl}(\vec{k}(\phi_k), \vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P}).$$

Тогда квадрированный матричный элемент, в котором выполнено суммирование по поляризациям конечного фотона, запишется так:

$$\begin{aligned} \sum_{\Lambda_1} |\mathcal{M}^{tw}(\vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P})_{\Lambda\Lambda_1}|^2 &= \frac{\pi^2 (2\sqrt{\pi}d)^3}{\omega\omega_1} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_k}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi'_k}{2\pi} \times \\ &e^{i(\vec{k}(\phi_k)_\perp - \vec{k}(\phi'_k)_\perp) \cdot \vec{b}} e^{-\frac{d^2}{2}(\vec{k}(\phi_k) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P})^2} e^{-\frac{d^2}{2}(\vec{k}(\phi'_k) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P})^2} \times \\ &e^{im(\phi_k - \phi'_k)} \left((\vec{e}_{\vec{k}(\phi_k)\Lambda} \cdot \vec{e}_{\vec{k}(\phi'_k)\Lambda}^*) - \frac{(\vec{e}_{\vec{k}(\phi_k)\Lambda} \cdot \vec{k}_1)(\vec{e}_{\vec{k}(\phi'_k)\Lambda}^* \cdot \vec{k}_1)}{\vec{k}_1^2} \right) \times \\ &M^{Pl}(\vec{k}(\phi_k), \vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P}) M^{Pl*}(\vec{k}(\phi'_k), \vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P}). \end{aligned}$$

Если размер детектора d макроскопический, например, порядка 0.1 см, то содержащие d^2 экспоненты практически равны нулю при сумме импульсов в показателе экспоненты, отличающейся от нуля больше чем на 10^{-3} эВ, т. е.

фактически ведут себя как дельта-функции.

Перейдем в двойном интеграле к новым переменным

$$\phi_{\pm} = (\phi_k \pm \phi'_k)/2:$$

$$\begin{aligned} \sum_{\Lambda_1} |\mathcal{M}^{tw}(\vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P})_{\Lambda\Lambda_1}|^2 &= \frac{2\pi^2(2\sqrt{\pi}d)^3}{\omega\omega_1} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_+}{2\pi} \int_{-\pi+|\phi_+-\pi|}^{\pi-|\phi_+-\pi|} \frac{d\phi_-}{2\pi} \times \\ &e^{i(\vec{k}(\phi_k)_{\perp} - \vec{k}(\phi'_k)_{\perp})\vec{b}} e^{-\frac{d^2}{2}[(\vec{k}(\phi_++\phi_-) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P})^2 + (\vec{k}(\phi_+-\phi_-) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P})^2]} \times \\ &e^{2im\phi_-} \left((\vec{e}_{\vec{k}(\phi_k)\Lambda}, \vec{e}_{\vec{k}(\phi'_k)\Lambda}^*) - \frac{(\vec{e}_{\vec{k}(\phi_k)\Lambda}, \vec{k}_1)(\vec{e}_{\vec{k}(\phi'_k)\Lambda}^*, \vec{k}_1)}{\vec{k}_1^2} \right) \times \\ &M^{Pl}(\vec{k}(\phi_k), \vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P}) M^{Pl*}(\vec{k}(\phi'_k), \vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P}). \end{aligned}$$

Тождественно преобразуем слагаемые в квадратных скобках в показателе экспоненты, содержащей d^2 , следующим образом:

$$\frac{d^2}{2} [(\vec{k}(\phi_+ + \phi_-) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P})^2 + (\vec{k}(\phi_+ - \phi_-) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P})^2] \equiv$$

$$\frac{d^2}{4} (\vec{k}(\phi_+ + \phi_-) - \vec{k}(\phi_+ - \phi_-))^2 +$$

$$d^2 \left(\frac{1}{2} (\vec{k}(\phi_+ + \phi_-) + \vec{k}(\phi_+ - \phi_-)) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P} \right)^2.$$

Выражение во второй строке этой формулы запишем через углы и подставим теперь эти выражения в формулу для квадрированного матричного элемента.

В результате получим

$$\begin{aligned}
\sum_{\Lambda_1} |\mathcal{M}^{tw}(\vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P})_{\Lambda\Lambda_1}|^2 &= \frac{2\pi^2(2\sqrt{\pi}d)^3}{\omega\omega_1} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_+}{2\pi} \int_{-\pi+|\phi_+-\pi|}^{\pi-|\phi_+-\pi|} \frac{d\phi_-}{2\pi} \times \\
&e^{2im\phi_-} e^{-\kappa^2 d^2 \sin^2(\phi_-)} e^{i(\vec{k}(\phi_++\phi_-)_\perp - \vec{k}(\phi_+-\phi_-)_\perp) \vec{b}} \times \\
&e^{-d^2(\frac{1}{2}(\vec{k}(\phi_++\phi_-) + \vec{k}(\phi_+-\phi_-)) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P})^2} \times \\
&\left((\vec{e}_{\vec{k}(\phi_k)\Lambda}, \vec{e}_{\vec{k}(\phi'_k)\Lambda}^*) - \frac{(\vec{e}_{\vec{k}(\phi_k)\Lambda}, \vec{k}_1)(\vec{e}_{\vec{k}(\phi'_k)\Lambda}^*, \vec{k}_1)}{\vec{k}_1^2} \right) \times \\
&M^{Pl}(\vec{k}(\phi_k), \vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P}) M^{Pl*}(\vec{k}(\phi'_k), \vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P}).
\end{aligned}$$

При $\kappa d \gg 1$ присутствие под знаком интеграла множителя $e^{-\kappa^2 d^2 \sin^2(\phi_-)}$ приводит к тому, что основной вклад в интеграл по ϕ_- дает очень узкая область вблизи $\phi_- = 0$. Проводя в этой формуле приближенное интегрирование по ϕ_- , окончательно найдем

$$\sum_{\Lambda_1} |\mathcal{M}^{tw}(\vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P})_{\Lambda\Lambda_1}|^2 \simeq \frac{4\pi^3 d^2}{\kappa \omega \omega_1} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_k}{2\pi} e^{-\frac{(m - \kappa b \sin \phi_k)^2}{\kappa^2 d^2}} \times$$

$$\left(1 + \frac{(\vec{k}(\phi_k) \vec{k}_1)^2}{\vec{k}(\phi_k)^2 \vec{k}_1^2} \right) |M^{Pl}(\vec{k}(\phi_k), \vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P})|^2 e^{-d^2(\vec{k}(\phi_k) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P})^2}.$$

В этой формуле экспонента $e^{-d^2(\vec{k}(\phi_k) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P})^2}$ ведет себя фактически как дельта-функция от суммы импульсов в ее показателе. Поэтому, чтобы найти вероятность процесса комптоновской ионизации атома водорода, нужно проинтегрировать эту экспоненту по одному из импульсов и выразить в оставшемся выражении этот импульс через остальные три импульса в соответствии с законом сохранения. Мы проинтегрируем эту экспоненту по импульсу ядра $\vec{P}$

$$\int e^{-d^2(\vec{k}(\phi_k) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e - \vec{P})^2} \frac{d\vec{P}}{(2\pi)^3} = \frac{\sqrt{\pi}}{8\pi^2 d^3}$$

и положим в матричном элементе $\vec{P} = \vec{P}(\phi_k) = \vec{k}(\phi_k) - \vec{k}_1 - \vec{p}_e$.

Тогда вероятность в единицу времени процесса комптоновской ионизации атома водорода цилиндрической электромагнитной волной, просуммированная по поляризациям конечного фотона, запишется так:

$$dW = \frac{\sqrt{\pi}}{4\kappa d} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_k}{2\pi} e^{-\frac{(m - \kappa b \sin \phi_k)^2}{\kappa^2 d^2}} \times$$

$$\frac{(2\pi)^2}{\omega \omega_1} \left(1 + \frac{(\vec{k}(\phi_k) \vec{k}_1)^2}{\vec{k}(\phi_k)^2 \vec{k}_1^2} \right) |M^{Pl}(\vec{k}(\phi_k), \vec{k}_1, \vec{p}_e, \vec{P}(\phi_k))|^2 \times$$

$$\delta(\omega - |\varepsilon_0| - \omega_1 - \vec{p}_e^2/2 - (\vec{P}(\phi_k))^2/(2M)) \frac{d\vec{p}_e}{(2\pi)^3} \frac{d\vec{k}_1}{(2\pi)^3}.$$

С помощью дельта-функции здесь можно проинтегрировать по энергии фотона ω_1 и получить дифференциальную вероятность в виде

$$\frac{d^5 W}{dE_e d\Omega_e d\Omega_1}.$$

Дифференциальное сечение комптоновской ионизации атома водорода плосковолновым фотоном с импульсом $\vec{k}(\phi_k)$ записывается в виде

$$\frac{d^5\sigma(\phi_k)}{dE_e d\Omega_e d\Omega_1} = \frac{\alpha^4}{(2\pi)^3} p_e \left(1 - \frac{|\epsilon_0| + \vec{p}_e^2/2 + \vec{P}^2(\phi_k)/2M}{\omega} \right) \times \left(1 + \frac{(\vec{k}(\phi_k), \vec{k}_1(\phi_k))^2}{\vec{k}^2(\phi_k) \vec{k}_1^2(\phi_k)} \right) |\mathcal{M}^{\text{Pl}}(\vec{k}(\phi_k), \vec{k}_1(\phi_k), \vec{p}_e, \vec{P}(\phi_k))|^2.$$

Поэтому формулу для дифференциальной вероятности процесса можно переписать следующим образом

$$\frac{d^5W}{dE_e d\Omega_e d\Omega_1} = \frac{c}{8\sqrt{\pi}\kappa d} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_k}{2\pi} e^{-\frac{(m-\kappa b \sin \phi_k)^2}{\kappa^2 d^2}} \frac{d^5\sigma(\phi_k)}{dE_e d\Omega_e d\Omega_1},$$

где учтено, что в атомной системе единиц $\alpha = 1/c$.

В предыдущей формуле фактор

$$\frac{c}{16\pi\sqrt{\pi}\kappa d} e^{-\frac{(m-\kappa b \sin \phi_k)^2}{\kappa^2 d^2}}$$

дает поток фотонов с импульсом $\vec{k}(\phi_k)$ через мишень, а интеграл

$$\frac{c}{16\pi\sqrt{\pi}\kappa d} \int_0^{2\pi} d\phi_k e^{-\frac{(m-\kappa b \sin \phi_k)^2}{\kappa^2 d^2}} = \frac{c}{16\pi\sqrt{\pi}\kappa d} I$$

дает полный поток фотонов цилиндрической волны через мишень. Тогда по теореме о среднем

$$\frac{d^5\bar{\sigma}}{dE_e d\Omega_e d\Omega_1} = \frac{1}{I} \int_0^{2\pi} d\phi_k e^{-\frac{(m-\kappa b \sin \phi_k)^2}{\kappa^2 d^2}} \frac{d^5\sigma(\phi_k)}{dE_e d\Omega_e d\Omega_1} = \frac{d^5\sigma(\phi_k^*)}{dE_e d\Omega_e d\Omega_1},$$

где $\phi_k^* \in [0, 2\pi)$.

Заключение

- Предложен способ вычисления вероятности процесса комптоновской ионизации атома водорода и обобщенного дифференциального сечения этого процесса, позволяющий учесть зависимость этих величин от углового момента цилиндрической волны.
- Обобщенное дифференциальное сечение получается в результате усреднения обычного дифференциального сечения для плосковолновых фотонов по поперечным импульсам цилиндрической волны и совпадает с обычным сечением для некоторого поперечного импульса, который зависит как от характеристик этой волны, так и от характеристик мишени. Таким образом, использование в процессах фотоионизации цилиндрических волн не дает новых угловых распределений по сравнению со случаем плоских волн.

Спасибо за внимание!