 © 2018

ФОТОИОНИЗАЦИЯ СВЯЗАННЫХ СИСТЕМ ПРИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЯХ

Е. Г. Друкарев[*], *А. И. Михайлов*

Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»
188300, Гатчина, Ленинградская обл., Россия

Поступила в редакцию 22 декабря 2017 г.

Рассмотрена фотоионизация систем, связанных центральным потенциалом $V(r)$. Показано, что нерелятивистскую высокоэнергетическую асимптотику сечения фотоионизации можно найти, не решая волнового уравнения. С помощью уравнения Липпмана – Швингера асимптотика выражается через фурье-представление потенциала. Для экранированного кулоновского поля получена асимптотика и ведущие поправки к ней, которые описываются универсальным фактором. Найдено, что энергетическая зависимость сечения при высоких энергиях определяется аналитическими свойствами потенциала $V(r)$. Показано, что энергетическая зависимость асимптотики фотоионизации фуллеренов в большой мере модельно-зависима. Продемонстрировано, что если аппроксимировать потенциал фуллерена функцией $V(r)$, имеющей особенности в комплексной плоскости, то степенная асимптотика достигается при энергиях фотоэлектрона настолько больших, что сечение становится исчезающе малым. Практическое значение в таких случаях имеет предасимптотическое поведение с более быстрым убыванием сечения.

DOI: 10.7868/S0044451018060032

1. ВВЕДЕНИЕ

В этой статье мы анализируем ионизацию связанных систем фотонами с энергией ω, значительно превосходящей энергию связи I_B. Мы вычислим нерелятивистскую высокоэнергетическую асимптотику сечений, т. е. найдем ведущие члены их разложений по степеням ω^{-1} при

$$I_B \ll \omega \ll m, \tag{1}$$

где m — масса покоя электрона (используем релятивистскую систему единиц, в которой $\hbar = 1$, $c = 1$, квадрат заряда электрона $e^2 = \alpha = 1/137$). Покажем, что асимптотику сечения $\sigma(\omega)$ можно найти, не решая волновое уравнение. Найдем также поведение сечений перед выходом на асимптотику.

Если система связана центральным потенциалом $V(r)$, то асимптотика отношения сечений фотоионизации любого s-состояния при двух больших значениях энергии ω_1 и ω_2 может быть выражена простой формулой

$$\frac{\sigma(\omega_1)}{\sigma(\omega_2)} = \left(\frac{\omega_2}{\omega_1}\right)^{3/2} \frac{|V(p_1)|^2}{|V(p_2)|^2}, \tag{2}$$

где $p_i = \sqrt{2m\omega_i}$ — импульсы фотоэлектронов. Отношение сечений, таким образом, выражается через фурье-образ

$$\tilde{V}(p) = \int d^3r V(r) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \tag{3}$$

потенциала $V(r)$. В дальнейшем мы опускаем знак «тильда» для фурье-образов.

Формула (2) основана на том, что при вычислении асимптотики ионизации s-состояний волновая функция фотоэлектрона описывается плоской волной, что допустимо, если используется оператор взаимодействия электрона с фотоном в калибровке скорости [1]. Поэтому сечение выражается через волновую функцию $\psi(p)$ связанного состояния в импульсном представлении:

$$\sigma(\omega) = \frac{4\alpha p}{3} n_e |\psi(p)|^2, \tag{4}$$

где p — импульс фотоэлектрона, n_e — количество электронов в ионизуемом s-состоянии. Отметим, что благодаря закону сохранения энергии

$$\omega = \frac{p^2}{2m} + I_B, \tag{5}$$

[*] E-mail: drukarev@thd.pnpi.spb.ru

и условию $\omega \gg I_B$ импульс фотоэлектрона значительно больше характерного импульса связи $\mu = \sqrt{2mI_B}$:

$$p \gg \mu. \tag{6}$$

Это позволяет выразить функцию $\psi(p)$ через потенциал $V(p)$ с помощью уравнения Липпмана–Швингера [2] как

$$\psi(p) = -\frac{1}{\omega}J(p), \tag{7}$$

где

$$J(p) = \int \frac{d^3f}{(2\pi)^3}V(\mathbf{p}-\mathbf{f})\psi(\mathbf{f}). \tag{8}$$

Если $pV(p) \to 0$ при $p \to \infty$, то интеграл насыщается малыми $f \sim \mu \ll p$, зависимость потенциала $V(p)$ определяет зависимость $\psi(p)$ при больших p. Для потенциалов $V(p)$, которые можно разложить по степеням $1/p$ при больших импульсах, найдем

$$J(p) = V(p)\psi(r=0). \tag{9}$$

В этих случаях получаем простую формулу для асимптотического сечения [3]:

$$\sigma(\omega) = n_e\frac{4\alpha}{3}\frac{p}{\omega^2}|V(p)|^2\psi^2(r=0), \quad p = \sqrt{2m\omega}. \tag{10}$$

Для широкого круга потенциалов можно получить соотношение

$$J(p) = V(p)\kappa, \tag{11}$$

где параметр κ не зависит от p и определяется только параметрами связанного состояния. В этих случаях можно найти не только отношения сечений, но и сами сечения:

$$\sigma(\omega) = \frac{4\alpha}{3}\frac{p}{\omega^2}|V(p)|^2 n_e\kappa^2. \tag{12}$$

Заметим, однако, что вычислить параметр κ удается не всегда. В ряде случаев можно дать лишь его оценку. Тогда формула (12) воспроизводит аналитическую зависимость сечения от энергии фотона, но дает лишь оценку его численной величины.

Асимптотическая зависимость сечений определяется, таким образом, формой зависимости $V(p)$, которая, в свою очередь, определяется аналитическими свойствами потенциала $V(r)$ [4]. Поэтому асимптотика $\sigma(\omega)$ зависит от аналитического вида потенциала $V(r)$.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 мы напомним, как осуществляется асимптотический анализ фотоионизации атомов. В разд. 3 мы получим уравнения (7) и (10), в разд. 4 — асимптотики и предасимптотическое поведение для случая экранированного кулоновского поля, в разд. 5 — связь асимптотического поведения сечения с аналитическими свойствами потенциала. В разд. 6 рассмотрена асимптотика фотоионизации фуллеренов, для описания которых часто используются модельные потенциалы [5–7]. Мы подведем итоги в разд. 7.

2. АСИМПТОТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ДЛЯ АТОМОВ

Начнем со случая кулоновского поля, для которого известна аналитическая формула для сечения [1, 7]. Для водородоподобного иона с зарядом ядра Z сечение фотоионизации $1s$-состояния может быть записано как

$$\sigma(\omega) = \frac{16\sqrt{2}\pi}{3Z^2}\alpha r_0^2\left(\frac{m\alpha^2 Z^2}{\omega}\right)^{7/2}\Phi(p), \tag{13}$$

$r_0 = 1/m\alpha$ — боровский радиус. Если для описания фотоэлектрона использовать плоскую волну, то $\Phi(p) = 1$, и формула (13) дает асимптотику процесса $\omega^{-7/2}$ [1].

Явный вид функции

$$\Phi(p) = D(\pi\xi)e^{4\xi\,\mathrm{arctg}\,\xi}, \quad D(\pi\xi) = \frac{2\pi\xi e^{-2\pi\xi}}{1-e^{-2\pi\xi}},$$

где $\xi = m\alpha Z/p$ — параметр кулоновского взаимодействия фотоэлектрона с ядром [1], позволяет вычислить ведущую поправку к асимптотике. Поскольку функция $\Phi(p)$ по-отдельности зависит от параметров $\pi\xi$ и ξ^2, т. е. $\Phi(p) = \Phi(\pi\xi, \xi^2)$, можно пренебречь поправками порядка ξ^2 и учитывать лишь первый член разложения по $\pi\xi$. Тогда получим

$$\Phi(\pi\xi, \xi^2 = 0) = 1 - \pi\xi, \tag{14}$$

где второе слагаемое в правой части дает ведущую поправку к асимптотике. Для $Z = 1$ она составляет 10 % при энергии $\omega > 14$ кэВ. Для $Z = 2$ эта поправка уменьшает сечение на 10 % уже при $\omega > 56$ кэВ. Однако $\omega/m > 0.1$ при таких энергиях фотона, и необходимо учитывать релятивистские поправки. Таким образом, для $Z > 2$ нет области энергий, где проявлялась бы нерелятивистская высокоэнергетическая асимптотика.

Отклонение сечений от асимптотического поведения удается описать множителем $S(\omega) = \Phi(\pi\xi, \xi^2 = 0)$, называемым фактором Штоббе [8]. Зависимость сечения от параметра $\pi\xi$ выражается фактором

$$S(\omega) = \frac{\pi\xi}{\mathrm{sh}(\pi\xi)}e^{-\pi\xi} \approx e^{-\pi\xi}, \quad \xi = \frac{m\alpha Z}{\sqrt{2m\omega}}, \tag{15}$$

в формуле (13).

Отношение сечений фотоионизации любого s-состояния при больших энергиях ω_1 и ω_2 описывается соотношением

$$\frac{\sigma(\omega_1)}{\sigma(\omega_2)} = \left(\frac{\omega_2}{\omega_1}\right)^{7/2} \frac{S(\omega_1)}{S(\omega_2)}. \tag{16}$$

Экспериментальные данные по фотоионизации многоэлектронных атомов (исключая случаи, когда необходимо учитывать корреляции внутри оболочек [7]), как и результаты вычислений в приближении Хартри–Фока хорошо описываются формулой (16) [8]. Это не удивительно, так как фактор Штоббе формируется на малых расстояниях $1/p$ от ядра и межэлекторонные взаимодействия не оказывают на него заметного влияния.

3. СЕЧЕНИЕ ФОТОИОНИЗАЦИИ ПРИ БОЛЬШИХ ЭНЕРГИЯХ

Далее $\mathbf{p}$ и Ω обозначают импульс фотоэлектрона и телесный угол, в который он вылетает, $p = |\mathbf{p}|$. Сечение фотоионизации связанной системы может быть записано как

$$d\sigma = n_e \frac{mp}{(2\pi)^2} |F|^2 d\Omega. \tag{17}$$

Здесь F — амплитуда процесса; подразумевается, что проведено усреднение по поляризациям фотона. Теперь мы должны вычислить амплитуду F.

Фотоионизация невозможна на свободном электроне, и источник поля должен получить большой импульс $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{p}$, где $\mathbf{k}$ — импульс фотона. Заметим, что $|\mathbf{k}| = \omega$. Из закона сохранения энергии (5) следует, что $p \gg k$, и $|\mathbf{q}| \approx p$. Импульс отдачи $\mathbf{p}$ может быть передан как связанным электроном, так и фотоэлектроном. В первом случае фотоэлектрон описывается плоской волной. Соответствующий вклад в амплитуду принимает вид [7]

$$F_a = N(\omega) \frac{\mathbf{e}\cdot\mathbf{p}}{m} \psi(p), \quad N(\omega) = \sqrt{\frac{4\pi\alpha}{2\omega}}, \tag{18}$$

где $\mathbf{e}$ — вектор поляризации фотона.

Учтем теперь вклад в случае, когда импульс отдачи передается фотоэлектроном. Этот механизм часто называют взаимодействием в конечном состоянии (в.к.с). Покажем, что в.к.с. дает поправки порядка $1/p$ к амплитуде F_a. В первом порядке теории возмущений для вклада в.к.с. в амплитуду имеем

$$F_b = N(\omega) \int \frac{d^3 f}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{p}|VG(\omega+\varepsilon_B)|\mathbf{f}\rangle \frac{\mathbf{e}\cdot\mathbf{f}}{m} \langle \mathbf{f}|\psi\rangle,$$

где G — электронный пропагатор свободного движения с матричными элементами

$$\langle \mathbf{f}_1|G(\varepsilon)|\mathbf{f}_2\rangle = g(\varepsilon, f_1)\delta(\mathbf{f}_1-\mathbf{f}_2), \quad g(\varepsilon, f_1) = \frac{1}{\varepsilon - f_1^2/2m},$$

$\varepsilon_B = -I_B < 0$ — энергия электрона в связанном состоянии. Можно переписать

$$F_b = N(\omega) \int \frac{d^3 f}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{p}|V|\mathbf{f}\rangle g(\omega+\varepsilon_B, f) \times \\ \times \frac{\mathbf{e}\cdot\mathbf{f}}{m} \langle \mathbf{f}|\psi\rangle. \tag{19}$$

С другой стороны, амплитуда F_a может быть записана как

$$F_a = N(\omega) \frac{\mathbf{e}\cdot\mathbf{p}}{m} g(\varepsilon_B, p) \int \frac{d^3 f}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{p}|V|\mathbf{f}\rangle \langle \mathbf{f}|\psi\rangle.$$

Для потенциалов с $\lim_{p\to\infty} pV(p) = 0$ интеграл в правой части определяется малыми величинами $f \sim \sim \mu$. Поэтому $F_b \sim (\mu/p)F_a \ll F_a$. Высшие члены по V, как легко видеть, подавлены дополнительными степенями $1/p$. Асимптотика амплитуды $F = F_a + F_b$ определяется слагаемым F_a, и мы можем положить $F = F_a$. Выполняя угловое интегрирование в (17), получим формулу (4).

Отметим, что малость вклада в.к.с. F_b в асимптотику амплитуды F получена нами при использовании калибровки скорости для оператора взаимодействия электрона с фотоном. При использовании калибровки длины оператор взаимодействия $\mathbf{e}\cdot\mathbf{p}/m$ в выражениях для амплитуды F_a заменяется на $-\omega\mathbf{e}\cdot\nabla_{\mathbf{p}}$, а оператор взаимодействия $\mathbf{e}\cdot\mathbf{f}/m$ в амплитуде F_b — на $-\omega\mathbf{e}\cdot\nabla_{\mathbf{f}}$. В калибровке длины уже нет аргумента, позволяющего пренебречь вкладом F_b^r (верхний индекс «r» обозначает, что используется калибровка длины), и соотношение между F_a^r и F_b^r требует дополнительного анализа. В частности, для атомов имеем $V(p) = -4\pi\alpha Z/p^2$ при больших p, и непосредственное вычисление дает $F_a^r = 2F_a$, $F_b^r = = -F_a$. Таким образом, амплитуды F_a^r и F_b^r сравнимы по величине. Вклады более высокого порядка по в.к.с. подавлены дополнительными степенями $1/p$. Асимптотика амплитуды в калибровке длины имеет вид $F^r = F_a^r + F_b^r$, т. е. включает первую поправку по в.к.с. (см. разд. 7.2.3 в книге [7]). При этом, как и ожидалось, $F^r = F$.

Для вычисления функции $\psi(p)$ при $p \gg \mu$ воспользуемся уравнением Липпмана–Швингера

$$\psi = \psi_0 + G(\varepsilon_B)V\psi \tag{20}$$

в импульсном представлении. Здесь ψ_0 — волновая функция при $V = 0$. Для связанных состояний $\psi_0 = 0$, и мы получаем

$$\psi(p) = \langle \mathbf{p}|GV|\psi\rangle = g(\varepsilon_B, p)J(p),$$

где $J(p)$ определяется формулой (8). При больших p можно положить $g(\varepsilon_B, p) = -2m/p^2$, что приводит к формуле (7).

В интеграле $J(p)$ можно выделить три области изменения импульса f. Если $f \sim \mu \ll p$, то, положив $V(\mathbf{p}-\mathbf{f}) = V(\mathbf{p})$, получим вклад в $\psi(p)$ порядка $V(p)/p^2$. Вклад области импульсов $f \sim p$, для которых $|\mathbf{p}-\mathbf{f}| \ll p$, в правую часть уравнения (7) порядка $\psi(p)/p^2$, т. е. за пределами асимптотики. Что касается области больших импульсов $f \sim p$; $|\mathbf{p}-\mathbf{f}| \sim p$, то их вклад в правую часть формулы (7) порядка $pV(p)\psi(p)$.

Итак, для потенциалов $V(p)$, убывающих при больших p быстрее, чем $1/p$, интеграл $J(p)$ определяется областью малых импульсов $f \sim \mu \ll p$. Для потенциалов, убывающих на асимптотике как $1/p$, основной вклад в $J(p)$ дает область больших импульсов $f \sim p$, если $V(p)$ не содержит осциллирующих множителей.

Напомним, что потенциалы $V(p)$, убывающие медленнее, чем $1/p$, соответствующие росту $V(r)$ при $r \to 0$ более быстрому, нежели $1/r^2$, приводят к «падению на центр» [9].

Таким образом, при $\lim_{p\to\infty} pV(p) = 0$ интеграл $J(p)$ определяется малыми импульсами $f \ll p$. Если к тому же потенциал $V(p)$ можно разложить по степеням $1/p$ при больших p, то, положив в формуле (8) $\mathbf{p}-\mathbf{f} = \mathbf{p}$, получаем формулу (9).

В разд. 5 и 6 мы увидим, что величину $J(p)$ удается получить и в ряде представляющих практический интерес случаев, когда упомянутые условия, налагаемые на $V(p)$, не выполняются. Здесь заметим только, что удобной для анализа оказывается и запись интеграла $J(p)$ в координатном представлении:

$$J(p) = \int d^3r\, V(r)\psi(r)e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} = \frac{4\pi}{p}\int\limits_0^\infty dr\, V(r)\chi(r)\sin(pr), \quad (21)$$

где $\chi(r) = r\psi(r)$.

4. ЭКРАНИРОВАННЫЕ КУЛОНОВСКИЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

Отметим прежде всего, что формула (10) описывает асимптотику сечения фотоионизации (формула (13) с $\Phi(p) = 1$) $1s$-электрона в кулоновском поле. Мы получили ее, не решая волнового уравнения. Понадобилось лишь известное значение $\psi^2(r=0) = (m\alpha Z)^3/\pi$.

Один из способов описать электрон в многоэлектронном атоме — это ввести экранированный потенциал, который ведет себя как $1/r$ при $r \to 0$. Для того чтобы найти асимптотику фотоионизации в таких полях, рассмотрим поведение экранированных потенциалов при больших p. Начнем с потенциала Юкавы

$$V(r) = -\frac{ge^{-\lambda r}}{r}, \quad g > 0, \quad (22)$$

для которого фурье-преобразование имеет вид

$$V(p) = -\frac{4\pi g}{p^2+\lambda^2}, \quad (23)$$

а для больших $p \gg \lambda$

$$V(p) \approx -\frac{4\pi g}{p^2}\left(1 - \frac{\lambda^2}{p^2}\right). \quad (24)$$

Асимптотика сечения такая же, как и в случае кулоновского поля с $\alpha Z = g$. Этот результат понятен, так как асимптотика определяется малыми расстояниями $r \sim 1/p \ll 1/\lambda$, и в формуле (22) можно положить $e^{-\lambda r} = 1$. Второй член в правой части выражения (24) сохранен, чтобы показать, что ведущие поправки от экранирования убывают как $1/\omega$.

Поле, созданное тяжелым атомом, может быть аппроксимировано потенциалом Томаса – Ферми. В параметризации Титца [10] он имеет вид

$$V(r) = -\frac{\alpha Z}{r}\frac{1}{(1+ar/r_0)^2}, \quad a = c_T Z^{1/3}, \quad (25)$$

где $c_T \approx 0.6$. Фурье-преобразование потенциала дает

$$V(p) = -4\pi\alpha Z I(p), \quad I(p) = \frac{1}{p}\int\limits_0^\infty dr\frac{\sin(pr)}{(1+ar/r_0)^2} = b^2\int\limits_0^\infty dr\frac{\cos(pr)}{r+b} \quad (26)$$

с $b = r_0/a$. Величину I можно получить в виде разложения по параметру bp. Учитывая два низших члена разложения, имеем

$$I(p) = \frac{1}{p^2}\left(1 - \frac{6a^2}{p^2b^2}\right). \quad (27)$$

Таким образом, асимптотика потенциала $V(p)$ такая же, как и для кулоновского поля с зарядом Z. Ведущие поправки порядка $1/p^2$.

Полученные результаты применимы ко всем потенциалам с кулоновской асимптотикой на малых расстояниях. Чтобы показать это, заметим, что поскольку поведение $V(p)$ при больших p определяется малыми r, мы можем потенциал представить в виде

$$V(r) = -\frac{\alpha Z}{r}(1 + c_1 r + c_2 r^2). \tag{28}$$

Запишем теперь

$$V(p) = -\alpha Z[V_0(p) + c_1 V_1(p) + c_2 V_2(p)]$$

с тремя слагаемыми в правой части равенства, соответствующими трем вкладам в правую часть формулы (28). При этом

$$\begin{aligned} V_0(p) &= \lim_{\lambda\to 0}\int d^3r \frac{e^{-\lambda r}}{r} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} = \left.\frac{4\pi}{p^2+\lambda^2}\right|_{\lambda=0}, \\ V_k(p) &= \lim_{\lambda\to 0}\int d^3r\, r^k \frac{e^{-\lambda r}}{r} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} = \\ &= \left(-\frac{\partial}{\partial\lambda}\right)^k \left.\frac{4\pi}{p^2+\lambda^2}\right|_{\lambda=0}. \end{aligned} \tag{29}$$

Мы получим

$$V_0 = \frac{4\pi}{p^2}, \quad V_1 = 0, \quad V_2 = -\frac{8\pi}{p^4},$$

т. е. кулоновскую асимптотику и поправки порядка $1/p^2$.

Выясним теперь роль взаимодействия фотоэлектрона с силовым центром. В первом порядке теории возмущений амплитуда в.к.с. выражается формулой (19), где взаимодействие V дается формулами (22) и (25). Интеграл в правой части (19) определяется областью малых $f \sim \mu \ll p$. Поэтому $|\mathbf{p} - \mathbf{f}| \gg \mu$, и с точностью до членов $1/p^2$ мы можем воспользоваться формулами (24) и (27) с учетом лишь первых членов в их правых частях. Таким образом, дальнейший анализ происходит так же, как и в случае кулоновского поля. Как ясно из материала, изложенного в предыдущем абзаце, этот вывод справедлив для любого поля с кулоновской асимптотикой.

Окончательно для фотоионизации ns-состояния в поле с кулоновской асимптотикой на малых расстояниях получим [7]

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{16\sqrt{2}\pi^2\alpha(\alpha Z)^2}{3m^{3/2}\omega^{7/2}} n_e e^{-\pi\xi}\psi_{ns}^2(r=0), \\ \xi &= \frac{m\alpha Z}{\sqrt{2m\omega}}. \end{aligned} \tag{30}$$

Вся зависимость от экранирования содержится в множителе $\psi_{ns}^2(r=0)$.

5. АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СЕЧЕНИЙ И АНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОТЕНЦИАЛА

В предыдущем разделе мы рассмотрели кулоновский и экранированный кулоновский потенциалы, имеющие сингулярность при $r = 0$. Теперь мы рассмотрим прямоугольную яму — потенциал, имеющий на вещественной оси точку разрыва при конечном $r = R$. Он задается формулой

$$V(r) = -V_0\theta(r)\theta(R - r), \quad V_0 > 0, \tag{31}$$

где, как обычно, $\theta(x) = 1$ при $x > 0$ и $\theta(x) = 0$ при $x < 0$. Непосредственное вычисление дает

$$V(p) = \frac{4\pi V_0}{p^3}[pR\cos(pR) - \sin(pR)].$$

На асимптотике имеем $pR \gg 1$, и вторым слагаемым в скобках нужно пренебречь. Получаем

$$V(p) = \frac{4\pi V_0 R}{p^2}\cos(pR). \tag{32}$$

Потенциал убывает как $1/p^2$ при больших p, и в интеграле (8) для $J(p)$ доминируют малые $f \sim \mu$. Для того чтобы воспользоваться формулой (8), нам понадобится потенциал $V(\mathbf{v})$ с

$$\mathbf{v} = \mathbf{p} - \mathbf{f}.$$

Заметим, что в яме $\mu \sim 1/R$, поэтому $\cos(vR)$ в выражении

$$V(\mathbf{v}) = 4\pi V_0 R\cos(vR)/v^2 = 4\pi V_0 R\cos(vR)/p^2$$

не может быть разложен по степеням $\mathbf{f}$. Заметим также, что для вычисления асимптотики достаточно положить

$$v = p - ft, \quad t = \mathbf{p}\cdot\mathbf{f}/pf.$$

Таким образом,

$$J(p) = \frac{4\pi V_0 R}{p^2} X(p, R),$$

$$\begin{aligned} X(p,R) = \int \frac{d^3f}{(2\pi)^3} \times \\ \times [\cos(pR)\cos(ftR) + \sin(pR)\sin(ftR)]\,\psi(f). \end{aligned}$$

Второе слагаемое в скобках не дает вклада, так как $\psi(f)$ не зависит от направления импульса $\mathbf{f}$ для s-состояний. Интегрирование по t дает

$$X(p, R) = \cos(pR)\psi(R).$$

Поэтому получаем

$$J(p) = \frac{4\pi V_0}{p^2}\cos(pR)\chi(R),$$
$$\psi(p) = -\frac{4\pi V_0}{\omega p^2}\cos(pR)\chi(R). \tag{33}$$

Сечение фотоионизации

$$\sigma = \frac{2^6\pi^2\alpha}{3}\frac{V_0^2R^2}{\omega^2p^3}\cos^2(pR)n_e\psi^2(R), \qquad p^2 = 2m\omega \tag{34}$$

убывает как $\omega^{-7/2}$.

Теперь рассмотрим простой потенциал, имеющий сингулярности в комплексной плоскости:

$$V(r) = -\frac{U_0}{\pi}\frac{a}{r^2+a^2}, \quad a > 0, \tag{35}$$

где $U_0 > 0$ — безразмерная константа. При $a \to 0$ получим

$$V(r) \to -U_0\delta(r),$$

т. е. формула (35) дает одну из возможностей введения потенциала нулевого радиуса [11].

В импульсном представлении этот потенциал легко вычисляется:

$$V(p) = -\frac{4U_0a}{p}\int\limits_0^\infty dr\frac{r\sin(pr)}{r^2+a^2} = -\frac{2\pi U_0 a}{p}e^{-pa}. \tag{36}$$

Эту формулу можно получить интегрированием в комплексной плоскости. При этом потенциал $V(p)$ определяется полюсами подынтегральной функции при $r = \pm ia$.

Напомним, что нам нужно вычислить функцию $\psi(p) = -J(p)/\omega$, см. выражение (7). Интеграл

$$J(p) = -2\pi U_0 a\int\frac{d^3f}{(2\pi)^3}\frac{e^{-v(\mathbf{f})a}}{v(\mathbf{f})}\psi(f),$$
$$v(\mathbf{f}) = |\mathbf{p}-\mathbf{f}| = \sqrt{p^2 - 2\mathbf{p}\cdot\mathbf{f} + f^2} \tag{37}$$

(см. формулу (8)) определяется малыми $f \ll p$. В знаменателе подынтегрального выражения можно положить $v = p$ с точностью до членов $1/p^2$, однако этого нельзя сделать в показателе экспоненты. Формулу (37) перепишем как

$$J(p) = -2\pi\frac{U_0a}{p}I(p), \quad I(p) = \int\frac{d^3f}{(2\pi)^3}e^{-v(\mathbf{f})a}\psi(f).$$

В производной величины I по p,

$$I'(p) = -a\int\frac{d^3f}{(2\pi)^3}e^{-v(\mathbf{f})a}v'_p(\mathbf{f})\psi(f),$$

можно с точностью $1/p^2$ положить $v'_p = 1$. В результате для $I(p)$ получается простое дифференциальное уравнение

$$I'(p) = -aI(p). \tag{38}$$

Используя его решение $I(p) = \kappa e^{-pa}$, получим

$$J(p) = -2\pi U_0 a\kappa\frac{e^{-pa}}{p}. \tag{39}$$

Здесь κ — неопределенная константа. Ее смысл становится понятным, если обратиться к выражению (21). Наш результат соответствует тому, что фурье-преобразованию подвергается только потенциал $V(r)$, при этом существенны $r \sim a$. Волновая функция берется в некоторой точке, соответствующей характерным расстояниям. Поэтому можно положить $\kappa = \psi(r \approx a)$.

Таким образом, мы нашли

$$\psi(p) = 2\pi U_0 a\kappa\frac{e^{-pa}}{\omega p}$$

и сечение

$$\sigma = \frac{16\pi^2\alpha}{3}U_0^2a^2\frac{e^{-2pa}}{\omega^2p}n_e\kappa^2, \tag{40}$$

где для оценки можно положить $\kappa^2 = \psi^2(r=0)$.

Можно сделать и более общее утверждение. Сечение фотоионизации системы, связанной полем с полюсами в комплексной плоскости, экспоненциально убывает с ростом импульса. Показатель экспоненты есть умноженное на $2p$ значение мнимой части полюса, наиболее близкого к вещественной оси.

В качестве иллюстрации рассмотрим модифицированный потенциал Пешля – Теллера (он подробно исследуется в книге [12])

$$V(r) = -\frac{V_0}{\operatorname{ch}^2(ar)}, \quad V_0 > 0, \quad a > 0. \tag{41}$$

Функция $V(r)$ имеет полюсы в точках $r = \pm i\pi(2n+1)/2a$, где n — натуральное число. Фурье-образ потенциала при $pa \gg 1$,

$$V(p) = -\frac{\pi^3V_0}{a^3}e^{-\pi p/2a}, \tag{42}$$

определяется полюсом $r = i\pi/2a$. Используя формулы (7), (8) и (12), найдем формулу для сечения фотоионизации:

$$\sigma = \frac{4\pi^6\alpha}{3}\frac{V_0^2}{a^6}\frac{pe^{-2pa}}{\omega^2}n_e\kappa^2, \tag{43}$$

где для оценки можно положить $\kappa^2 = \psi^2(r=0)$.

Аналогичным образом рассмотрим фотоионизацию в поле, описываемым гауссианой

$$V(r) = -V_0 e^{-r^2/a^2}, \quad V_0 > 0, \quad a > 0 \qquad (44)$$

с существенной особенностью в комплексной плоскости. В импульсном представлении

$$V(p) = -\pi^{3/2} V_0 a^3 \exp(-p^2 a^2/4). \qquad (45)$$

Действуя так же, как в предыдущем случае, мы получим

$$\psi(p) = \pi^{3/2} V_0 a^3 \kappa \frac{\exp(-p^2 a^2/4)}{\omega}$$

и

$$\sigma = \frac{4\pi^3 \alpha}{3} V_0^2 a^6 \frac{\exp(-p^2 a^2/2) p}{\omega^2} n_e \kappa^2, \qquad (46)$$

где для оценки также можно положить $\kappa^2 = \psi^2(r = 0)$. Таким образом, сечение убывает даже быстрее гауссианы.

6. ФОТОИОНИЗАЦИЯ ФУЛЛЕРЕНОВ

Напомним, что фуллерен состоит из нескольких десятков атомов углерода, в которых $1s$-электроны связаны со своими ядрами, а остальные электроны обобществлены.

Рассмотрим ионизацию сферических фуллеренов, в которых ядра и электроны расположены между сферами радиусами $R-\Delta/2$ и $R+\Delta/2$. Характерная толщина слоя Δ составляет 1 ат. ед., в то время как радиус R порядка 6 ат. ед. Будем рассматривать их отношение как малый параметр, т. е. приводим формулы в первом порядке по $\Delta/R \ll 1$. Для описания поля фуллерена $V(r)$, сосредоточенного в основном внутри тонкого слоя $R - \Delta/2 \le r \le R + \Delta/2$ часто используются модельные потенциалы [5, 6].

6.1. Прямоугольная яма и дираковский пузырь

Прототипом является, очевидно, прямоугольная яма с границами в точках $R_{2,1} = R \pm \Delta/2$. При $r < R_1$ и $r > R_2$ поле вообще исчезает. Потенциал $V(r)$ в этой модели задается формулой

$$V(r) = -V_0 \theta(r - R_1) \left[1 - \theta(r - R_2)\right], \quad V_0 > 0. \qquad (47)$$

Как мы видели, для прямоугольной ямы удобно использовать формулу (21). Аналогично формуле (33) получим

$$\psi(p) = -\frac{4\pi V_0 R}{\omega p^2} \Lambda, \quad \Lambda = \cos(pR_2)\psi(R_2) - \cos(pR_1)\psi(R_1). \qquad (48)$$

Можно выразить Λ через R и Δ:

$$\Lambda = -\sin(pR) \sin\left(p\frac{\Delta}{2}\right) \times \left[\psi\left(R + \frac{\Delta}{2}\right) + \psi\left(R - \frac{\Delta}{2}\right)\right] + \cos(pR)\cos\left(p\frac{\Delta}{2}\right)\left[\psi\left(R + \frac{\Delta}{2}\right) - \psi\left(R - \frac{\Delta}{2}\right)\right].$$

Заметим, что функция $\psi(r)$ существенно меняется на интервале Δ, а разность $\psi(R_2) - \psi(R_1)$ не мала.

Таким образом, сечение фотоионизации

$$\sigma = \frac{2^6 \pi^2 \alpha}{3} \frac{V_0^2 R^2}{\omega^2 p^3} n_e \Lambda^2 \qquad (49)$$

убывает как $\omega^{-7/2}$.

В модели дираковского пузыря

$$V(r) = -U_0 \delta(R - r), \quad U_0 > 0, \qquad (50)$$

где U_0 — безразмерная константа, толщина слоя $\Delta \to 0$. Используя формулы (21) и (7), моментально получаем

$$\psi(p) = \frac{4\pi U_0 R}{\omega p} \sin(pR) \psi(R) \qquad (51)$$

и сечение

$$\sigma = \frac{2^6}{3} \frac{\pi^2 \alpha U_0^2 R^2}{\omega^2 p} \sin^2(pR) n_e \psi^2(R), \quad p^2 = 2m\omega, \qquad (52)$$

которое убывает как $\omega^{-5/2}$. Формула для сечения была получена ранее [13] путем решения волнового уравнения.

Сечение фотоионизации для дираковского пузыря убывает медленнее, чем сечение в поле прямоугольной ямы. Различие объясняется тем, что в точках разрыва в первом случае потенциал бесконечен, а во втором случае претерпевает конечные скачки. Это приводит к разному характеру поведения волновых функций в точках разрыва. Для дираковского потенциала производная $\psi'(r)$ имеет скачок в точке $r = R$ [11], будучи непрерывной функцией для прямоугольной ямы в точках $r = R_{1,2}$ [9]. Убедиться в том, что производная волновой функции дираковского пузыря теряет непрерывность в точке $r = R$ можно, проинтегрировав волновое уравнение

$$-\frac{\chi''(r)}{2m} + V(r)\chi(r) = \varepsilon_B \chi(r) \qquad (53)$$

с $V(r) = -U_0\delta(r - R)$ по малому интервалу $R - \delta \le r \le R + \delta$. Результат

$$\chi'(R + \delta) - \chi'(R - \delta) + 2mU_0\chi(R) = 0$$

наглядно показывает наличие скачка.

Разный характер поведения волновых функций в точках разрыва приводит к разным p-зависимостям волновой функции

$$\psi(p) = \int d^3r\, \psi(r) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} = \frac{4\pi}{p} \int\limits_0^\infty dr \sin(pr)\chi(r).$$

Для дираковского пузыря имеем

$$\psi(p) = \frac{4\pi}{p}\left[\int\limits_0^{R_-} dr \sin(pr)\chi(r) + \int\limits_{R_+}^\infty dr \sin(pr)\chi(r)\right],$$

$$R_\pm = R \pm \delta, \quad \delta \to 0.$$

После двух интегрирований по частям получим

$$\psi(p) = \frac{4\pi}{p^3} R \sin(pR)[\psi'(R_-) - \psi'(R_+)] - \\ - \frac{4\pi}{p^3}\left[\int\limits_0^{R_-} dr \sin(pr)\chi^{(2)}(r) + \right. \\ \left. + \int\limits_{R_+}^\infty dr \sin(pr)\chi^{(2)}(r)\right], \quad (54)$$

и асимптотика $p \to \infty$ определяется первым членом в правой части. В случае прямоугольной ямы производные $\psi'(r)$ в точках $R_{1,2}$ непрерывны и для определения асимптотики следует проинтегрировать по частям второе слагаемое (с $R_\pm = R_1 \pm \delta$ и $R_\pm = R_2 \pm \delta$). Таким образом, волновая функция $\psi(p)$ для прямоугольной ямы приобретает дополнительный множитель $1/p$ по сравнению со случаем дираковского пузыря. Это приводит к дополнительному множителю $1/\omega$ в сечении. Заметим, что, хотя правая часть формулы (54) не содержит явной зависимости от U_0, скачок $\psi'(R_-) - \psi'(R_+)$ пропорционален U_0.

6.2. Модель желе

В настоящее время часто используется модель желе (см., например, работы [14, 15]). В этой модели предполагается, что положительный электрический заряд сердцевины фуллерена, состоящей из атомов углерода и внутренних электронов, распределен равномерно в слое толщиной Δ. При $r < R_1$ поле постоянно, а при $r > R_2$ убывает как кулоновское. Если обозначить поле сердцевины как $V(r) = V_1(r)$ при $0 \le r < R_1$, $V(r) = V_2(r)$ при $R_1 \le r \le R_2$ и $V(r) = V_3(r)$ при $r > R_2$, то

$$V_1(r) = -U_0 \frac{3}{2}\frac{R_2^2 - R_1^2}{R_2^3 - R_1^3},$$
$$V_2(r) = -\frac{U_0}{2(R_2^3 - R_1^3)}\left[3R_2^2 - r^2\left(1 + \frac{2R_1^3}{r^3}\right)\right], \quad (55)$$
$$V_3(r) = -\frac{U_0}{r}, \quad U_0 > 0.$$

Здесь U_0 — безразмерная константа. Потенциал $V(r)$, определенный формулами (55), и его производная $V'(r)$ непрерывны на вещественной оси:

$$V_1(R_1) = V_2(R_1), \quad V_2(R_2) = V_3(R_2),$$
$$V_1'(R_1) = V_2'(R_1), \quad V_2'(R_2) = V_3'(R_2).$$

Вторая производная $V^{(2)}(r)$ претерпевает скачки в точках $r = R_{1,2}$. Этим определяется зависимость асимптотического сечения от энергии.

Для исследования этой зависимости удобно воспользоваться комбинацией формул (7) и (21):

$$\psi(p) = -\frac{1}{\omega}\int d^3r e^{-i\mathbf{f}\cdot\mathbf{r}} V(r)\psi(r). \quad (56)$$

Элементарное интегрирование по углам дает

$$\psi(p) = -\frac{4\pi}{\omega p}\int\limits_0^\infty dr \sin(pr)\varphi(r),$$
$$\varphi(r) = rV(r)\psi(r) = V(r)\chi(r). \quad (57)$$

Здесь

$$\int\limits_0^\infty dr = \int\limits_0^{R_1-\delta} dr + \int\limits_{R_1+\delta}^{R_2-\delta} dr + \int\limits_{R_2+\delta}^\infty dr, \quad \delta \to 0.$$

Разрывы высших производных подынтегральной функции не сказываются на результате первых двух интегрирований по частям:

$$\psi(p) = \frac{4\pi}{\omega p^3}\int\limits_0^\infty dr \sin(pr)\varphi^{(2)}(r). \quad (58)$$

Следующее интегрирование по частям приводит к выражению

$$\psi(p) = -\frac{4\pi}{\omega p^4}\sum_{i=1,2}\lambda_i + \frac{4\pi}{\omega p^4}\int\limits_0^\infty dr \cos(pr)\varphi^{(3)}(r), \quad (59)$$

где

$$\lambda_i = \chi(R_i)\cos(pR_i)[V^{(2)}(R_i - \delta) - V^{(2)}(R_i + \delta)]$$

— скачки подынтегральной функции в точках $R_{1,2}$ (производные $\psi^{(2)}$ не имеют скачков в точках $R_{1,2}$, как видно из волнового уравнения (53)). Асимптотика волновой функции определяется первым членом в правой части формулы (59). Второй член в дальнейших интегрированиях по частям дает вклады, подавленные степенями $1/p$.

Асимптотика сечения фотоионизации имеет вид

$$\sigma = \frac{64\pi^2\alpha}{3\omega^2 p^7} n_e \Lambda^2, \quad \Lambda = \lambda_1 + \lambda_2, \tag{60}$$

т. е. сечение убывает как $\omega^{-11/2}$.

6.3. Лоренцевский пузырь

Так называют потенциал, определенный формулой

$$V(r) = -\frac{U_0}{\pi} \frac{a}{(r-R)^2 + a^2}. \tag{61}$$

При $R = 0$ он превращается в потенциал, описываемый формулой (35). Дираковский пузырь может рассматриваться как предельный случай лоренцевского пузыря при $a \to 0$. В применении к фуллеренам нужно считать, что $a \sim \Delta \ll R$.

Фурье-преобразование потенциала можно записать как

$$V(p) = V_A + V_B, \quad V_{A,B} = -4\frac{a}{p} X_{A,B}. \tag{62}$$

Здесь введены обозначения

$$X_A(p) = U_0 \left(-\frac{\partial}{\partial p}\right) \cos(pR) \int_{-\infty}^{\infty} dx \cos(px) u(x),$$

$$X_B(p) = U_0 \frac{\partial}{\partial p} \int_R^{\infty} dx \cos[p(x-R)] u(x), \tag{63}$$

$$u(x) = \frac{1}{x^2 + a^2}.$$

Мы заменили переменную интегрирования, введя $x = r - R$.

В соответствии с представлением (62) волновая функция может быть записана как

$$\psi(p) = \psi_A(p) + \psi_B(p). \tag{64}$$

В низшем порядке разложения по степеням $a/R \ll 1$ получим потенциал

$$V_A(p) = -4\pi \frac{U_0 R}{p} e^{-pa} \sin(pR). \tag{65}$$

Основной вклад в $V_A(p)$ дают $x \sim a$, т. е. область, где $|r - R| \sim a$ и плотность электронов максимальна.

Потенциал $V_B(p)$ можно переписать, введя переменную $r' = x - R$:

$$V_B(p) = \frac{4U_0 a}{p} \int_0^{\infty} dr' \frac{r' \sin(pr')}{(R + r')^2 + a^2}.$$

Интеграл в правой части определяется малыми $r' \sim 1/p$. Асимптотическое разложение интеграла в правой части по степеням $(pR)^{-1}$ дает

$$V_B(p) = \frac{16 U_0 a R}{p^3 (R^2 + a^2)^2}.$$

В низшем порядке разложения по степеням a^2/R^2 имеем

$$V_B(p) = \frac{16 U_0 a}{(pR)^3}. \tag{66}$$

Вычислим теперь волновые функции $\psi_A(p)$ и $\psi_B(p)$, введенные формулой (64). Комбинируя формулы (7), (8) и (63), получим

$$\psi_A(p) = 4\frac{\pi U_0 R}{\omega} \int \frac{d^3 f}{(2\pi)^3} \frac{e^{-va}}{v} \sin(vR) \psi(f), \quad v = |\mathbf{p} - \mathbf{f}|. \tag{67}$$

Заметим, что для вычисления асимптотики, как и в случае прямоугольной ямы, рассмотренном в разд. 5, достаточно учесть члены, линейные по f, положив

$$v = p - ft, \quad t = \mathbf{p} \cdot \mathbf{f}/pf.$$

Тогда

$$\psi_A(p) = 4\frac{\pi U_0 R}{\omega} \int \frac{d^3 f}{(2\pi)^3} \frac{e^{-va}}{v} \times \\ \times [\sin(pR) \cos(ftR) - \cos(pR) \sin(ftR)] \psi(f). \tag{68}$$

Благодаря множителю в квадратных скобках интеграл определяется областью $|ft| \sim 1/R$. Это позволяет положить $v = p$ и $e^{-va} = e^{-pa}$ в первом множителе подынтегральной функции. Так как волновая функция не зависит от углов, угловое интегрирование осуществляется легко и дает

$$\psi_A(p) = 4\frac{\pi U_0 R}{\omega p} e^{-pa} \sin(pR) X(p),$$

$$X(p) = \frac{4\pi}{R} \int_0^{\infty} \frac{df f}{(2\pi)^3} \sin(fR) \psi(f). \tag{69}$$

Введя вектор $\mathbf{R}$ с $|\mathbf{R}| = R$ и произвольным направлением, заметим, что последний интеграл есть не что иное, как

$$X(p) = \int \frac{d^3 f}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{f}\cdot\mathbf{R}} \psi(f) = \psi(R).$$

Таким образом,

$$\psi_A(p) = 4\frac{\pi U_0 R}{\omega p} e^{-pa} \sin(pR)\psi(R). \qquad (70)$$

С помощью формулы (9) найдем

$$\psi_B(p) = -\frac{16 U_0 a}{\omega p (pR)^3}\psi(r=0). \qquad (71)$$

С формальной точки зрения, асимптотика волновой функции определяется вкладом $\psi_B(p)$, и асимптотическое сечение

$$\sigma_B = \frac{2^{10}\alpha}{3}\,\frac{U_0^2 a^2}{R^6}\,\frac{\psi^2(r=0)}{\omega^2 p^7}, \qquad (72)$$

убывает как $\omega^{-11/2}$.

Заметим, что сечение $\sigma_B(p)$ пропорционально величине $\psi^2(r=0)$, в то время как потенциал $V_B(p)$, как мы видели, определяется областью малых $r' \sim 1/p$, соответствующих расстояниям от центра фуллерена r, близким к $2R$. Эти два утверждения не противоречат друг другу. Потенциал, определенный формулой (61), инвариантен относительно преобразования $r' = 2R - r$. Поэтому из волнового уравнения (53) следует, что $\chi(r) = \chi(2R-r) = C\chi(r)$, где C — численный коэффициент. В частности, при $r \ll R$ можно положить $\chi(2R) = C\chi(r)$. При любом x и $\delta \ll x$ величина $n_x = \int_x^{x+\delta} dy\,\chi^2(y)$ определяет долю электронов, находящихся вблизи поверхности радиуса x. Поэтому из справедливого при $r \ll R$ соотношения $\chi^2(2R) = C^2\chi^2(r)$ получим, что доля электронов вблизи поверхности радиуса $2R$ определяется плотностью вблизи поверхности малого радиуса r.

Как мы покажем ниже, степенное убывание сечения достигается при таких энергиях фотоэлектронов, когда сечение становится настолько малым, что недоступно наблюдению. Практический интерес представляет область, где волновая функция $\psi(p)$ определяется вкладом $\psi_A(p)$ и наблюдаемое сечение

$$\sigma = \frac{64}{3}\,\frac{\alpha\pi^2 U_0^2 R^2}{\omega^2 p} e^{-2pa}\sin^2(pR) n_e \psi^2(R) \qquad (73)$$

отличается от случая дираковского пузыря (52) множителем e^{-2pa}. Это связано с тем, что $|\psi_B(p)| > |\psi_A(p)|$ только при

$$\frac{e^{pa}}{(pa)^3} > \frac{3}{4}\frac{R^4}{a^4}\tau, \quad \tau = \frac{|\psi(R)|}{|\psi(0)|}. \qquad (74)$$

Отношение $\tau \gg 1$ (напомним, что в фуллерене электронная плотность концентрируется в области $|r-R| \ll R$) вычисляется для простейших моделей. Воспользуемся результатом для дираковского пузыря, где $\tau = e^{\mu R}/2\mu R$ [7, 13]. При характерных значениях $R = 6$ ат. ед. и $I_B = 1\,\mathrm{Ry}$ найдем $\tau \approx 34$. При $a = 1$ ат. ед. неравенство (74) становится справедливым при $pa > 19$, что соответствует энергиям фотоэлектрона $\varepsilon > 5$ кэВ. Сечение, определенное формулой (73), при $pa = 19$ оказывается подавленным более чем в 10^8 раз по сравнению с сечением при $pa = 3$ ($\varepsilon \approx 100$ эВ) и не имеет шансов быть замеченным.

6.4. Гауссовский потенциал

В работе [16] был предложен потенциал с более резко выраженным максимумом при $r = R$,

$$V(r) = -\frac{V_0}{\pi}\exp\left(-\frac{(r-R)^2}{a^2}\right), \quad V_0 > 0, \qquad (75)$$

при $a \sim \Delta \ll R$. Анализ этого случая проводится так же, как и в случае лоренцевского пузыря. Потенциал, подобно формуле (62), представляем в виде

$$V(p) = V_A(p) + V_B(p),$$
$$V_{A,B}(p) = -4V_0 X_{A,B}(p)/p.$$

При этом величины $X_{A,B}$ выражаются формулами (63) с $u(x) = \exp(-x^2/a^2)$ и $U_0 = 1$. Действуя так же, как в разд. 6.3, получим вклад, определяемый расстояниями $|r-R| \sim a$:

$$V_A(p) = \sqrt{\pi} V_0 R a \frac{\exp(-p^2a^2/4)}{p} \times \left[\sin(pR) + \frac{a}{2R} pa\cos(pR)\right]. \qquad (76)$$

Пока $pa \ll 2R/a$ (т. е. $\varepsilon \ll 2$ кэВ при выбранных в разд. 6.3 характерных параметрах) в правой части формулы (76) доминирует первое слагаемое. Для сечения получим

$$\sigma = \frac{64\alpha\pi}{3}\,\frac{V_0^2 R^2 a^2}{\omega^2 p}\exp\left(-\frac{p^2a^2}{2}\right) \times \sin^2(pR) n_e \psi^2(R). \qquad (77)$$

Интервалом $1 \ll pa \ll 2R/a$ исчерпывается область, где сечение представляет практический интерес. Из формулы (77) мы видим, что при изменении энергии фотоэлектрона от 100 до 300 эВ сечение убывает в $4 \cdot 10^4$ раз. При $pa \approx 2R/a$ оно уменьшается на много порядков.

Ведущий член асимптотического разложения потенциала

$$V_B(p) = \frac{16 V_0 R}{p^3 a^2}\exp\left(-\frac{R^2}{a^2}\right) \qquad (78)$$

определяет сечение

$$\sigma_B = \frac{16}{3}\,\frac{\alpha V_0^2 R^2}{a^4\omega^8 p^5}\exp\left(-\frac{2R^2}{a^2}\right) n_e\psi^2(r=0). \qquad (79)$$

Формально именно это выражение следует считать асимптотикой сечения. Однако оно описывает полное сечение лишь при

$$\frac{e^y}{y^2} > 2\sqrt{\pi}\frac{|\psi(R)|}{|\psi(0)|}\,\frac{a}{R}\exp\left(\frac{R^2}{a^2}\right), \quad y = \frac{p^2a^2}{4},$$

т. е. при $y > 46$, $\varepsilon > 2.5$ кэВ. В этой области энергий сечение слишком мало, чтобы быть наблюдаемым. Формула (79) может представлять интерес для систем с меньшим значением отношения R/a, нежели известные на сегодня фуллерены.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрены системы, связанные центральным потенциалом $V(r)$. Показано, что энергетическое поведение сечений фотоионизации при больших, но нерелятивистских энергиях фотоэлектронов можно определить, не решая волнового уравнения. Асимптотика сечения выражается через фурье-представление потенциала $V(p)$ как

$$\sigma(\omega) = 4\alpha p|V(p)|^2\kappa^2/3\omega^2$$

(см. формулу (12)), где не зависящий от энергии параметр κ определяется свойствами связанного состояния. В простейшем случае $\kappa^2 = |\psi(r=0)|^2$.

Мы продемонстрировали, что наши формулы справедливы для известного случая кулоновского поля. Мы нашли асимптотики сечений для экранированного кулоновского поля и показали, что ведущие поправки к асимптотике описываются универсальным фактором Штоббе, как и в случае кулоновского поля.

Показано, что энергетическое поведение сечения определяется аналитическими свойствами потенциала. Потенциалы, имеющие особенности на вещественной оси, приводят к степенному убыванию сечения, в то время как потенциалы с полюсами в комплексной плоскости соответствуют его экспоненциальному убыванию. Потенциал с существенной особенностью в комплексной плоскости соответствует еще более быстрому убыванию сечения.

Модельные потенциалы широко применяются при изучении физики фуллеренов. Полученные в работе результаты применены к фотоионизации фуллеренов. Мы сравнили энергетическое поведение сечений в трех моделях с особенностями на вещественной оси. Наиболее медленное убывание сечения как $\omega^{-5/2}$ достигается в случае дираковского пузыря с бесконечным скачком потенциала. В модели прямоугольной ямы с конечными скачками $V(r)$ сечение ведет себя как $\omega^{-7/2}$. Наконец, в модели желе сечение убывает как $\omega^{-11/2}$. Более быстрое убывание в этом случае объясняется большей гладкостью потенциала. Разрывы претерпевают лишь его вторые производные.

При описании фуллеренов потенциалами с особенностями в комплексной плоскости (в качестве примеров рассмотрены лоренцевский пузырь и гауссиана) асимптотика формально определяется областью малых $r \sim 1/p$, и сечения убывают как $\omega^{-11/2}$. Однако такое поведение достигается при энергиях фотоэлектронов настолько больших, что сечения становятся исчезающе малыми и недоступными для наблюдения. Интерес представляет предасимптотическое поведение, определяемое областью максимальной плотности связанных электронов. Зависимость сечения от импульса фотоэлектрона определяется убывающей экспонентой в случае лоренцевского пузыря и гауссианой в случае гауссовского поведения потенциала.

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматлит, Москва (1960).

2. Р. Ньютон, *Теория рассеяния волн и частиц*, Мир, Москва (1969).

3. E. G. Drukarev and A. I. Mikhailov, Eur. Phys. J. D **71**, 207 (2017).

4. А. Б. Мигдал, *Качественные методы в квантовой теории*, Наука, Москва (1975).

5. V. K. Ivanov, G. Yu. Kashenock, P. G. Polozkov, and A. V. Solov'ev, J. Phys. B **34**, L669 (2001).

6. A. S. Baltenkov, S. T. Manson, and A. Z. Msezane J. Phys. B **48**, 185103 (2015).

7. E. G. Drukarev and A. I. Mikhailov, *High-Energy Atomic Physics*, Springer, Switzerland (2016).

8. N. B. Avdonina, E. G. Drukarev, and R. H. Pratt, Phys. Rev. A **65**, 052705 (2002).

9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Нерелятивистская квантовая механика*, Наука, Москва (1974).

10. T. Tietz, Z. Naturforsch. A **23**, 191 (1968).

11. Ю. Н. Демков, В. Н. Островский, *Метод потенциала нулевого радиуса в атомной физике*, Изд-во ЛГУ, Ленинград (1975).

12. З. Флюгге, *Задачник по квантовай механике*, т. 1, Мир, Москва (1974).

13. M. Ya. Amusia, A. S. Baltenkov, and B. G. Krakov, Phys. Lett. A **243**, 99 (1998).

14. M. E. Madjet, H. S. Chakraborty, J. M. Rost, and S. T. Manson, J. Phys. B **41**, 105101 (2008).

15. A. V. Verkhoversev, R. G. Polozkov, V. K. Ivanov, A. V. Korol, and A. V. Solov'yov, J. Phys. B **45**, 215101 (2012).

16. E. M. Nascimento, F. V. Prudente, M. N. Guimaraes, and A. M. Maniero, J. Phys. B **44**, 5003 (2011).