

ПОПЕРЕЧНІ ПЕРЕРІЗИ ОСНОВНИХ ПРОЦЕСІВ, ЩО ФОРМУЮТЬ КОЕФІЦІЄНТ НЕПЕРЕРВНОГО ПОГЛИНАННЯ У ФОТОСФЕРАХ ЗІР ТИПУ СОНЦЯ

М. В. Ваврух, О. М. Стельмах

*Львівський національний університет імені Івана Франка, кафедра астрофізики,
вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна*

(Отримано 10 червня 2013 р.; в остаточному вигляді — 30 грудня 2013 р.)

На базі квантовомеханічних розрахунків поперечних перерізів основних низькоенергетичних процесів взаємодії фотонів із речовиною, які формують коефіцієнт неперервного поглинання у фотосферах зір G-класу, вперше пояснено спектральні особливості ефективного відносного поперечного перерізу фотойонізації негативного йона водню у фотосфері Сонця в околі максимуму ($\lambda \sim 8200 \text{ \AA}$). Розрахунок поперечного перерізу фотойонізації йонів H^- виконано в межах базисно-варіаційного підходу, який ми запропонували. Висунуто гіпотезу про особливості процесу фотойонізації нейтрального атома водню в середовищі частково йонізованої плазми, що приводить в околі порогових значень довжин хвиль до спектральної залежності поперечного перерізу, відмінної від загальноприйнятої.

Ключові слова: хвильова функція та енергія йона H^- , хвильова функція “вільного” електрона в полі нейтральних атомів водню, поперечні перерізи фотойонізації йонів H^- та збуджених атомів водню, сили осциляторів, електростатичні й обмінні кореляції.

PACS number(s): 95.30.-k, 95.30.Cq, 96.60.-j 97.10.Ex

I. ВСТУП

Однією з основних характеристик, якими описують перенесення випромінювання у фотосферах зір, є коефіцієнт поглинання. Розрізняють коефіцієнт поглинання у спектральних лініях та коефіцієнт неперервного поглинання (між лініями). Останній відіграє роль початку відліку для коефіцієнта поглинання в лініях і є повільно змінною функцією довжини хвилі.

Спектральну залежність коефіцієнта неперервного поглинання в загальних рисах установив Е. Мілн у 1922 році з аналізу спектра Сонця: в області довжин хвиль $\lambda > 4000 \text{ \AA}$ коефіцієнт неперервного поглинання зростає, має максимум в околі $\lambda \approx 8000 \text{ \AA}$, а зі збільшенням довжини хвилі він зменшується, досягаючи чітко вираженого мінімуму при $\lambda \approx 16.4 \cdot 10^3 \text{ \AA}$, а далі знову зростає (див. [1]). Така поведінка коефіцієнта неперервного поглинання характерна для зір з ефективними температурами ($4 \cdot 10^3 - 10^4$) K.

Пошук механізмів, що формують коефіцієнт неперервного поглинання у видимій та інфрачервоній ділянках спектра, був одним із головних завдань астрофізики минулого століття. Наприкінці 40-х років Р. Вільдт [2,3] обґрунтував гіпотезу про те, що основним механізмом неперервного поглинання в зоряних атмосферах є фотойонізація негативних йонів водню. Основні хімічні елементи атмосфер зір — водень і гелій. При ефективних температурах атмосфер, характерних для зір середніх спектральних класів, розрахунок йонізаційної рівноваги виконують, ураховуючи нейтральні атоми водню та гелію, протонів і йонів гелію, електронів та негативних йонів H^- . У прецизійних розрахунках беруть до уваги наявність багатоелектронних атомів лужних елементів, потенціал

йонізації яких нижчий, ніж у нейтрального водню, хоча концентрація атомів цих елементів дуже мала [4]. Потенціал йонізації негативного йона водню становить $0.0555 \dots \text{ Ry} \approx 0.75 \text{ eV}$, тому фотойонізація цих йонів може забезпечити неперервне поглинання в області довжин хвиль $\lambda \leq 16.4 \cdot 10^3 \text{ \AA}$. У далекій інфрачервоній області коефіцієнт неперервного поглинання формується іншими низькоенергетичними процесами, насамперед поглинанням фотонів “вільними” електронами.

Приймаючи гіпотезу Вільдта та виконавши прецизійні вимірювання коефіцієнта неперервного поглинання для Сонця в області довжин хвиль ($4 \cdot 10^3 - 13 \cdot 10^3$) \AA , автори праці [5] установили спектральну залежність відносного поперечного перерізу фотойонізації від’ємних йонів водню $\sigma(\lambda)[\sigma(\lambda_1)]^{-1}$ при $\lambda_1 = 5280 \text{ \AA}$. Використовуючи спостережуваний коефіцієнт поглинання, який формується не тільки фотойонізацією йонів H^- , але також іншими низькоенергетичними процесами, автори праці [5] насправді визначили спектральну залежність ефективного поперечного перерізу, що має тонку структуру, з невеликим мінімумом в околі 8200 \AA .

На рис. 1 наведено безрозмірні значення енергій фотонів та відповідні їм довжини хвиль, що визначають області, у яких певні процеси взаємодії фотонів із мікрочастинками фотосфери дають внески до коефіцієнта неперервного поглинання для зорі, подібної до Сонця. Тут уведено безрозмірну частоту

$$\omega_* = \hbar\omega \left(\frac{e^2}{2a_0} \right)^{-1},$$

де a_0 — радіус Бора. Довжина хвилі, що відповідає

заданому значенню енергії фотона $\hbar\omega$, дорівнює

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega} = \frac{\lambda_0}{\omega_*}, \quad \lambda_0 = 4\pi a_0 \frac{\hbar c}{e^2} \approx 911.27 \text{ \AA}.$$

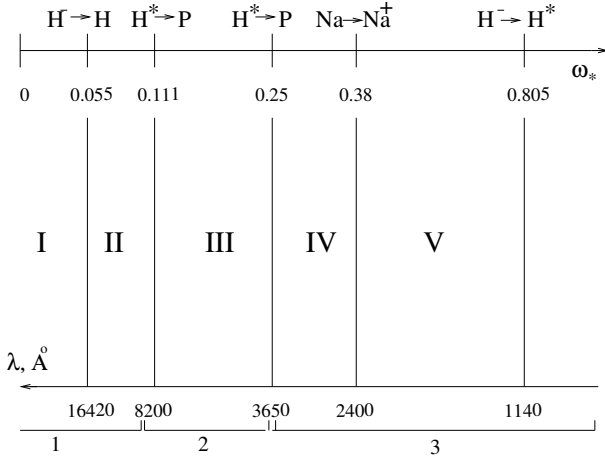


Рис. 1. Шкала енергій фотона та відповідних їм довжин хвиль, а також типових мікроскопічних процесів, що формують коефіцієнт неперервного поглинання в певних областях спектра.

В області I коефіцієнт поглинання формується низькоенергетичними процесами поглинання фотонів “вільними” електронами, фотойонізацією йонів Li^- , Na^- , K^- , а також фотойонізацією високозбуджених атомів водню (головне квантове число $n \geq 5$). Крім двох попередніх механізмів, в області II слід урахувати фотойонізацію йонів H^- як основний механізм, а також фотойонізацію збуджених атомів водню ($n \geq 4$). Значення енергії фотона $\omega_* = 0.1111$ визначає поріг фотойонізації збуджених атомів водню з рівня $n = 3$. В області III розташована видима ділянка спектра. Разом із перерахованими механізмами фотойонізація атомів водню, збуджених на рівень $n = 2$, дає внесок в області IV. Фотойонізація нейтральних атомів лужних елементів можлива в області V і т. д. З наведеної схеми видно, що коректний розрахунок коефіцієнта неперервного поглинання вимагає врахування багатьох каналів реакцій і є складною задачею. Як правило, при розрахунках внесків елементарних процесів взаємодії фотонів з атомними об’єктами не беруть до уваги середовище — частково йонізовану плазму, де відбуваються згадані процеси. Виконані досі розрахунки коефіцієнта неперервного поглинання ґрунтуються на використанні хвильових функцій ізольованих атомів та йонів, а екрануючий вплив середовища не взято до уваги.

Перші наближені розрахунки коефіцієнта неперервного поглинання при врахуванні фотойонізації йонів H^- з утворенням атомів водню в основному стані та поглинання фотонів “вільними” електронами були виконані в роботах [6, 7]. При деяких додаткових припущеннях вони дали змогу якісно пояснити відомі на ту пору спостережувані дані для Сонця. У пізніших працях було виконано точніші чисельні розрахунки поперечного перерізу реакції фотойонізації йона H^-

на основі багатопараметричних варіаційних функцій [8–10]. В основних рисах вони добре корелюють зі спостережуваними даними для Сонця.

Проблема дослідження коефіцієнта неперервного поглинання усе ще актуальна й тепер, про що свідчать праці останніх років (див. [11–13]). Розрахунки спектральної, температурної та концентраційної залежності коефіцієнта неперервного поглинання у фотосферах зір різних спектральних класів у межах мікроскопічної теорії є однією з актуальних задач астрофізики. Задача про розрахунок коефіцієнта неперервного поглинання має два аспекти — квантовомеханічний і статистичний. Квантовомеханічний зводиться до розрахунку поперечних перерізів процесів взаємодії фотонів з електронами, атомами, позитивними й негативними йонами, молекулами. Розрахунок концентрацій відповідних частинок та заселеностей енергетичних рівнів становить статистичний аспект задачі.

Інтерпретація спектральних особливостей ефективного відносного поперечного перерізу фотойонізації йона H^- , установлених у праці [5], протягом 50 років залишалася поза увагою дослідників. Як видно з рисунка 1, мінімум в околі $\lambda \approx 8200 \text{ \AA}$ можна пояснити фотойонізацією нейтральних атомів водню, збуджених на рівень із головним квантовим числом $n = 3$, для яких потенціал йонізації становить $0.111 \dots \text{ Ry}$. Цей процес дає внесок у неперервне поглинання в області $\lambda < 8200 \text{ \AA}$. Аналогічно фотойонізація атомів, збуджених на рівень $n = 4$, дає внесок у неперервне поглинання в області $\lambda \leq 16.4 \cdot 10^3 \text{ \AA}$ і т. д. Дослідження спектральної залежності відносного ефективного поперечного перерізу фотойонізації йона H^- на основі квантовомеханічних розрахунків парціальних поперечних перерізів трьох низькоенергетичних процесів (фотойонізація йонів H^- , фотойонізація збуджених атомів водню та поглинання фотонів “вільними” електронами) є метою цієї роботи.

Розрахунок парціального перерізу фотойонізації йона H^- виконано в межах запропонованого базисно-варіаційного підходу на основі двоелектронних хвильових функцій із невеликим числом параметрів, що має перевагу перед відомим досі варіаційним підходом із багатопараметричними функціями, бо дозволяє виконувати основні розрахунки в аналітичній формі. Ми встановили, що використання поперечних перерізів фотойонізації збуджених ізольованих атомів водню, розрахованих у праці [14], не дає змогу досягти доброї збіжності з даними роботи [5]. Ми запропонували наближені вирази для поперечних перерізів фотойонізації атомів водню в середовищі частково йонізованої плазми, де ймовірно є рекомбінація одного із “вільних” електронів із протоном, утвореним при взаємодії фотона зі збудженим атомом. Це забезпечило нульову асимптотику поперечних перерізів атомів водню в околі порогових (максимальних для цього квантового числа n) значень довжин хвиль і якісну збіжність із результатами праці [5]. Оскільки внески процесів фотойонізації атомів водню до загального значення ефективного поперечного перерізу

є малими, то розрахунки йонізаційної рівноваги виконувалися наближено — на основі роботи [15] у межах моделі фотосфери із “сонячним” умістом водню й гелію, але без урахування наявності інших елементів.

II. РОЗРАХУНОК ПОПЕРЕЧНОГО ПЕРЕРІЗУ ФОТОЙОНІЗАЦІЇ ЙОНА Н⁻

На відміну від традиційного варіаційного підходу, ми використовуємо базисний підхід, розраховуючи хвильові функції двоелектронної системи в полі протона. У теорії зіткнень електронів з атомами й у теорії атомних кореляцій доцільно використовувати змішаний базис [16]

$$\{\varphi_{\sigma}(\mathbf{r})\} = \{\Phi_j(\mathbf{r})\} \oplus \{\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}, \quad (1)$$

який є прямою сумою підпростору локалізованих функцій $\Phi_j(\mathbf{r})$ та підпростору функцій $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, асимптотика яких на великих відстанях від силових центрів збігається з плоскою хвилею. Якщо концентрація силових центрів $\frac{N}{V}$ є малою (а саме такі умови реалізуються у фотосферах зір), то в ролі $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ можна використати добре відомі в теорії металів так звані ортогоналізовані плоскі хвилі [17]

$$\begin{aligned} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \{1 - \hat{P}(\mathbf{r})\} \varphi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) \\ &= V^{-1/2} \left\{ \exp[i(\mathbf{k}, \mathbf{r})] - \sum_j \Phi_j^*(\mathbf{k}) \Phi_j(\mathbf{r}) \right\}, \end{aligned} \quad (2)$$

де $\varphi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r})$ — звичайна плоска хвиля, $\hat{P}(\mathbf{r}) = \sum_j |\Phi_j(\mathbf{k})\rangle \langle \Phi_j(\mathbf{r})|$ — оператор проектування на підпростір локалізованих функцій, $\Phi_j(\mathbf{k})$ — зображення Фур'є функції $\Phi_j(\mathbf{r})$. Функції $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ за побудовою строго ортогональні до всіх $\Phi_j(\mathbf{r})$, а величина їхньої взаємної неортогональності має порядок $\frac{N}{V} r_0^3$, де r_0 — характерний масштаб розмірів мікрооб'єктів атомно-го типу.

A. Базисний опис від'ємного йона водню

Координатну частину хвильової функції йона Н⁻ зобразимо у вигляді білінійного розкладу за базисом $\{\varphi_{\sigma}(\mathbf{r})\}$, а саме

$$\psi_{-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} a_{\sigma_1, \sigma_2} \varphi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2), \quad (3)$$

де a_{σ_1, σ_2} — невідомі коефіцієнти, причому $a_{\sigma_1, \sigma_2} = a_{\sigma_2, \sigma_1}$, що випливає із симетрії двоелектронної хвильової функції в синглетному стані.

Підставляючи розклад (3) в рівняння Шредингера

$$\begin{aligned} \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= E_{-} \psi_{-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \\ \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \hat{h}(\mathbf{r}_1) + \hat{h}(\mathbf{r}_2) + e^2 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1}, \\ \hat{h}(\mathbf{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 - \frac{e^2}{r}, \end{aligned} \quad (4)$$

одержуємо систему однорідних лінійних рівнянь для коефіцієнтів a_{σ_1, σ_2} :

$$\sum_{\sigma'_1, \sigma'_2} a_{\sigma'_1, \sigma'_2} \{H_{\sigma_2, \sigma_1 | \sigma'_1, \sigma'_2} - E_{-} \delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \delta_{\sigma_2, \sigma'_2}\} = 0, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} H_{\sigma_2, \sigma_1 | \sigma'_1, \sigma'_2} &= \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_{\sigma_2}^*(\mathbf{r}_2) \varphi_{\sigma_1}^*(\mathbf{r}_1) \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &\quad \times \varphi_{\sigma'_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\sigma'_2}(\mathbf{r}_2). \end{aligned}$$

Маючи на меті використати теорію збурень для знаходження розв'язку цієї системи, виберемо деяку допоміжну функцію $\psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, близьку до розв'язку рівняння (4), і також розкладемо її за базисними функціями,

$$\psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} S_{\sigma_1, \sigma_2} \varphi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2). \quad (6)$$

Згідно з умовою близькості функцій $\psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ і $\psi_{-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$,

$$S_{\sigma_1, \sigma_2} = \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_{\sigma_1}^*(\mathbf{r}_1) \varphi_{\sigma_2}^*(\mathbf{r}_2) \psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (7)$$

можна використати в ролі нульового наближення для невідомих a_{σ_1, σ_2} . Підстановкою $a_{\sigma_1, \sigma_2} = S_{\sigma_1, \sigma_2} + \alpha_{\sigma_1, \sigma_2}$ зведемо систему рівнянь (5) до системи неоднорідних рівнянь

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma'_1, \sigma'_2} \alpha_{\sigma'_1, \sigma'_2} H_{\sigma_2, \sigma_1 | \sigma'_1, \sigma'_2} - E_{-} \alpha_{\sigma_1, \sigma_2} \\ = E_{-} S_{\sigma_1, \sigma_2} - H_{\sigma_1, \sigma_2}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$H_{\sigma_1, \sigma_2} = \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_{\sigma_2}^*(\mathbf{r}_2) \varphi_{\sigma_1}^*(\mathbf{r}_1) \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).$$

Домножуючи кожне з рівнянь (8) на S_{σ_1, σ_2}^* і підсумовуючи за σ_1 і σ_2 , одержуємо рівняння для енергії йона:

$$\begin{aligned} E_{-} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} |S_{\sigma_1, \sigma_2}|^2 \\ = E_0 + \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \alpha_{\sigma_1, \sigma_2} (H_{\sigma_1, \sigma_2}^* - E_{-} S_{\sigma_1, \sigma_2}^*), \end{aligned} \quad (9)$$

$$E_0 = \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \left(\psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right)^* \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

причому $\sum_{\sigma_1, \sigma_2} |S_{\sigma_1, \sigma_2}|^2 = 1$ у випадку нормованої $\psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Вважаючи $\alpha_{\sigma_1, \sigma_2}$ малими величинами, розв'язуватимемо систему рівнянь (8) наближено. У першому порядку теорії збурень

$$\alpha_{\sigma_1, \sigma_2}^{(1)} = - (H_{\sigma_1, \sigma_2} - E_0 S_{\sigma_1, \sigma_2}) \left\{ \tilde{H}_{\sigma_1, \sigma_2} - E_0 \right\}^{-1} \quad (10)$$

$$\tilde{H}_{\sigma_1, \sigma_2} = H_{\sigma_2, \sigma_1 | \sigma_1, \sigma_2} + (1 - \delta_{\sigma_1, \sigma_2}) H_{\sigma_2, \sigma_1 | \sigma_2, \sigma_1},$$

унаслідок чого енергія і хвильова функція набувають такого вигляду:

$$E_-^{(1)} = E_0 + \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \Delta E_{\sigma_1, \sigma_2},$$

$$\Delta E_{\sigma_1, \sigma_2} = \alpha_{\sigma_1, \sigma_2}^{(1)} (H_{\sigma_1, \sigma_2}^* - E_0 S_{\sigma_1, \sigma_2}^*), \quad (11)$$

$$\psi_-^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \alpha_{\sigma_1, \sigma_2}^{(1)} \varphi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2).$$

У ролі $\psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ можна було б використати варіаційні функції типу функцій Гарта–Герцберга [18] чи Шварца [19]. Але ці функції багатопараметричні й незручні для аналітичних розрахунків. Ми сконструювали $\psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ у вигляді розкладу за ортонормованими функціями двоелектронного базису,

$$\psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{s=0}^{s_0} \Gamma_s \psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (12)$$

причому $\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ вибирали у вигляді функції Шулля–Льовдіна [20]

$$\psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C_0 \{e^{-\alpha\rho_1} e^{-\beta\rho_2} + e^{-\alpha\rho_2} e^{-\beta\rho_1}\}, \quad (13)$$

$$C_0 = \pi^{-1} 2^{-1/2} \{(\alpha\beta)^{3/2} (\alpha + \beta)^3 [(\alpha + \beta)^6 + (4\alpha\beta)^3]\}^{-1/2}$$

з невідомими параметрами α, β . Кутові кореляції електронів ураховують функції

$$\psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{(2s+1)^{1/2}}{4\pi} a_0^{-3} R_s(\rho_1) R_s(\rho_2) P_s(\cos\theta), \quad (14)$$

при $s \geq 1$, де $P_s(x)$ — поліном Лежандра s -го порядку [21], θ — кут між векторами \mathbf{r}_1 і \mathbf{r}_2 ,

$$R_s(\rho) = (2\gamma_s)^{s+3/2} [(2s+2)!]^{-1/2} \rho^s e^{-\gamma_s \rho}. \quad (15)$$

Параметри Γ_s були визначені із секулярної задачі

$$\sum_{s=0}^{s_0} \Gamma_s \{H_{ks} - E_0 \delta_{k,s}\} = 0, \quad 0 \leq k \leq s_0, \quad (16)$$

а параметри $\alpha, \beta, \gamma_1, \dots, \gamma_{s_0}$ — варіаційні, їх знаходили з умови мінімального значення найменшого кореня рівняння

$$\|H_{ks} - E_0 \delta_{k,s}\| = 0. \quad (17)$$

У формулах (16), (17) H_{ks} є матричними елементами гамільтоніана, розрахованими на функціях $\psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$,

$$H_{ks} = \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_k^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (18)$$

Усі вони обчислюються в аналітичному вигляді. При $s_0 = 3$ одержано такі значення параметрів:

$$\alpha = 1.0384, \quad \beta = 0.3298,$$

$$\gamma_1 = 1.1380, \quad \gamma_2 = 1.5810, \quad \gamma_3 = 2.1050; \quad (19)$$

$$\Gamma_0 = 0.99447, \quad \Gamma_1 = -0.102258,$$

$$\Gamma_2 = -0.023426, \quad \Gamma_3 = -0.008372.$$

У цьому варіанті розрахунку енергія йона H^- у нульовому наближенні $E_0 = -1.05239 \dots \text{Ry}$.

Для врахування внесків теорії збурень до енергії та хвильової функції ми обмежилися підпростором локалізованих функцій, що включає 6 хвильових функцій атома водню

$$\{\Phi_j(\mathbf{r})\} \equiv (\varphi_{1s}, \varphi_{2s}, \varphi_{2p,0}, \varphi_{2p,1}, \varphi_{2p,-1}, \varphi_{3s}). \quad (20)$$

У таблиці 1 наведено коефіцієнти розкладу S_{ij} , матричні елементи H_{ij} (див. (18)), \tilde{H}_{ij} , коефіцієнти α_{ij} , а також внески до енергії нульового наближення ΔE_{ij} згідно з формулами (11). Найсуттєвішими є внески станів $2p$, а їхній сумарний внесок до енергії близький до -0.003 Ry . Внески інших станів мають порядок 10^{-5} Ry . У результаті підсумовування внесків першого порядку теорії збурень одержуємо $E_-^{(1)} \cong -1.055472 \dots \text{Ry}$, у зв'язку з чим відносна похибка розрахунку енергії йона становить приблизно 0.003%.

$\sigma_1; \sigma_2$	1s; 1s	1s; 2s	1s; 3s	2s; 2s	2s; 3s	2p, 0; 2p, 0	2p, 1; 2p, -1
S_{σ_1, σ_2}	0.767688	-0.443227	0.006696	-0.018522	-0.000975	-0.025934	-0.025934
$v_{ij}^{(0)}$	0.765441	-0.085418	0.002767	0.007423	0.005172	0.049534	0.049534
H_{ij}	-0.805371	0.468364	-0.004467	0.013966	0.004265	0.045726	0.045726
\tilde{H}_{ij}	-0.7500	-0.7863	-0.9006	-0.1992	-0.1779	-0.1086	-0.0875
$-\alpha_{ij}^{(1)}$	0.008386	0.0063365	0.001706	-0.006477	0.003704	0.031228	0.031228
$-\Delta E_{ij}$	0.0000213	0.0000137	0.000044	0.0000358	0.00001191	0.000921	0.000921

Таблиця 1. Коефіцієнти розкладу хвильових функцій, внески до енергії та матричні елементи.

Знайдена хвильова функція має 5 варіаційних параметрів і дає значення енергії йона H^- краще, ніж 20-параметрична хвильова функція Гарта–Герцберга [18]. Одержане значення енергії $E_-^{(1)}$ відрізняється від

знайденого за допомогою 70-параметричної функції Шварца [19] на величину $-1.3 \cdot 10^{-5} \text{ Ry}$ і на $2.7 \cdot 10^{-5} \text{ Ry}$ від результату Пекеріса, розрахованого з використанням 444-параметричної функції [22].

В. Хвильові функції кінцевих станів процесу фотойонізації

Унаслідок одноелектронної фотойонізації йона H^- утворюється нейтральний атом водню в основному чи збудженому стані та електрон, що перебуває в його полі та має енергію $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m_0$. Хвильову функцію цієї двоелектронної системи також можна розвинути білінійним розкладом за функціями базису $\{\varphi_\sigma(\mathbf{r})\}$ або ж еквівалентним йому розкладом

$$\Psi_{\sigma,k}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma_1} \left\{ \varphi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) F_{\sigma_1}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_2 | \sigma) + \varphi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_2) F_{\sigma_1}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_1 | \sigma) \right\}, \quad (21)$$

де $F_{\sigma_1}(\mathbf{k}; \mathbf{r} | \sigma)$ — невідомі ортонормовані функції, які на великих відстанях від протона мають таку асимптотику:

$$F_{\sigma_1}(\mathbf{k}; \mathbf{r} | \sigma) \approx \varphi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) \delta_{\sigma, \sigma_1}, \quad \varphi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) = V^{-1/2} \exp[i(\mathbf{k}, \mathbf{r})], \quad (22)$$

якщо атомний електрон перебуває у стані $\varphi_\sigma(\mathbf{r})$. Ми вибрали синглетний стан електронів, оскільки для триплетного стану матричний елемент оператора $(\hat{\mathbf{P}}_1 + \hat{\mathbf{P}}_2)$ на функціях $\Psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, $\Psi_{\sigma,k}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ дорівнював би нулеві.

Хвильові функції $\Psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ і $\Psi_{\sigma,k}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ є власними функціями того самого гамільтоніана, що відповідають різним власним значенням, тому вони є ортогональними між собою. Звідси випливає вимога ортогональності невідомих $F_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ до базисних функцій локалізованих станів

$$\int F_{\sigma_1}(\mathbf{k}, \mathbf{r} | \sigma) \varphi_{\sigma_2}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0. \quad (23)$$

Якби розрахунок функцій $\Psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, $\Psi_{\sigma,k}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ виконувався точно, з використанням повних і ортогональних систем $\{\varphi_\sigma(\mathbf{r})\}$, то ортогональність цих функцій і умова (23) виконувались би автоматично. При наближеному розрахунку умову (23) можна використати для оптимізації процедури знаходження коректних наближень для функцій $F_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{r} | \sigma)$.

Можливі процеси каскадної фотойонізації йонів H^- , коли утворені на першій стадії збуджені нейтральні атоми водню фотойонізуються, даючи внески в коефіцієнт неперервного поглинання. Ураховуючи, що концентрація йонів H^- є малою порівняно з концентрацією нейтральних атомів в основному стані, доходимо висновку, що високоенергетичні канали фотойонізації H^- можуть давати нехтовно малий парціальний внесок до загальної концентрації збуджених атомів водню. У зв'язку з цим обмежимося розглядом випадку, коли під час фотойонізації йонів H^- утворюються атоми в основному стані ($\sigma = 1s$), покладаючи $F_{\sigma_1}(\mathbf{k}; \mathbf{r} | 1s) \equiv F_{\sigma_1}(\mathbf{r})$. Підставляючи розклад (21) у рівняння Шредингера та враховуючи умову (23), одержуємо таку систему зв'язаних інтегродиференціальних рівнянь для функцій $F_\sigma(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} & \left\{ \hat{T} - \varepsilon_k + E_\sigma - E_1 + \nu_\sigma(\mathbf{r}) \right\} F_\sigma(\mathbf{r}) \\ & + \varphi_\sigma(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}_2 \varphi_\sigma^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} F_\sigma(\mathbf{r}_2) \\ & = - \sum_{\sigma' (\neq \sigma)} \hat{M}_{\sigma'}(\mathbf{r}) F_{\sigma'}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (24)$$

де

$$\begin{aligned} \hat{M}_{\sigma'}(\mathbf{r}) F_{\sigma'}(\mathbf{r}) & \equiv \omega_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r}) F_{\sigma'}(\mathbf{r}) \\ & + \varphi_{\sigma'}(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}_2 \varphi_\sigma^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} F_{\sigma'}(\mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (25)$$

Тут E_1 — енергія електрона в основному стані атома, E_σ — енергія електрона у стані, що описується хвильовою функцією $\varphi_\sigma(\mathbf{r})$, \hat{T} — оператор кінетичної енергії електрона. При записі рівнянь (24) використано такі позначення:

$$\begin{aligned} \omega_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r}) & = \int d\mathbf{r}_2 \varphi_\sigma^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} \varphi_{\sigma'}(\mathbf{r}_2); \\ \nu_\sigma(\mathbf{r}) & = -\frac{e^2}{r} + \omega_{\sigma, \sigma}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (26)$$

Уведемо систему функцій Гріна, що задовольняють рівняння

$$\left\{ \hat{T} - \varepsilon_k + E_\sigma - E_1 \right\} G_\sigma^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (27)$$

Використовуючи розв'язки цих рівнянь

$$G_\sigma^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\exp(i(\mathbf{q}, \mathbf{r} - \mathbf{r}'))}{\varepsilon_q - \varepsilon_k + E_\sigma - E_1}, \quad (28)$$

зведемо систему рівнянь (24) до інтегральної форми:

$$\begin{aligned} F_\sigma(\mathbf{r}) & = F_\sigma^{(0)}(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}' G_\sigma^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left\{ \nu_\sigma(\mathbf{r}') F_\sigma(\mathbf{r}') \right. \\ & + \varphi_\sigma(\mathbf{r}') \int d\mathbf{r}_2 \varphi_\sigma^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2|} F_\sigma(\mathbf{r}_2) \\ & \left. + \sum_{\sigma' (\neq \sigma)} \hat{M}_{\sigma'}(\mathbf{r}') F_{\sigma'}(\mathbf{r}') \right\}. \end{aligned} \quad (29)$$

Згідно з граничними умовами задачі,

$$F_{1s}^{(0)}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}); \quad F_\sigma^{(0)}(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{при } \sigma \neq 1s. \quad (30)$$

Відповідно до умови (23)

$$(1 - \hat{P}(\mathbf{r})) F_\sigma(\mathbf{r}) = F_\sigma(\mathbf{r}). \quad (31)$$

Використаємо цю рівність, щоб перетворити рівняння (29), а саме, подіємо оператором $1 - \hat{P}(\mathbf{r})$ на ліві і праві частини цих рівнянь. У результаті одержуємо еквівалентну систему рівнянь: при $\sigma = 1s$

$$F_{1s}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}' G_{1s}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left\{ \nu_{1s}(\mathbf{r}') F_{1s}(\mathbf{r}') + \varphi_{1s}(\mathbf{r}') \int d\mathbf{r}_2 \varphi_{1s}^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2|} F_{1s}(\mathbf{r}_2) + \sum_{\sigma' (\neq 1s)} \hat{M}_{\sigma'}(\mathbf{r}') F_{\sigma'}(\mathbf{r}') \right\}, \quad (32)$$

при $\sigma \neq 1s$

$$F_{\sigma}(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' G_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left\{ \nu_{\sigma}(\mathbf{r}') F_{\sigma}(\mathbf{r}') + \varphi_{\sigma}(\mathbf{r}') \int d\mathbf{r}_2 \varphi_{\sigma}^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2|} F_{\sigma}(\mathbf{r}_2) + \sum_{\sigma' (\neq \sigma)} \hat{M}_{\sigma'}(\mathbf{r}') F_{\sigma'}(\mathbf{r}') \right\}. \quad (33)$$

У цих рівняннях

$$G_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = (1 - \hat{P}(\mathbf{r})) G_{\sigma}^{(o)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\exp(-i(\mathbf{q}, \mathbf{r}')) \varphi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})}{\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + E_{\sigma} - E_1}. \quad (34)$$

Застосуємо до розв'язування рівнянь (32), (33) метод ітерацій. У першому борнівському наближенні одержуємо

$$F_{1s}^{(1)}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}' G_{1s}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left\{ \nu_{1s}(\mathbf{r}') \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') + \varphi_{1s}(\mathbf{r}') \int d\mathbf{r}_2 \varphi_{1s}^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2|} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_2) \right\} = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \chi_{1s}(\mathbf{k}|\mathbf{r}), \quad (35)$$

а при $\sigma \neq 1s$

$$F_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' G_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left\{ \omega_{\sigma, 1s}(\mathbf{r}') \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') + \varphi_{1s}(\mathbf{r}') \int d\mathbf{r}_2 \varphi_{\sigma}^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2|} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_2) \right\} = \chi_{\sigma}(\mathbf{k}|\mathbf{r}), \quad (36)$$

де $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ — ортогоналізована плоска хвиля.

Застосовність борнівського наближення зумовлена тим, що функції $\chi_{1s}(\mathbf{k}|\mathbf{r})$, $\chi_{\sigma}(\mathbf{k}|\mathbf{r})$ побудовані на ортогоналізованих плоских хвилях. Використовуючи розклад двоелектронного потенціалу та плоских хвиль за сферичними функціями, борнівські поправки $\chi_{\sigma}(\mathbf{k}|\mathbf{r})$ для довільних σ можна зобразити у вигляді

$$\chi_{\sigma}(\mathbf{k}|\mathbf{r}) = -V^{-1} \sum_{\mathbf{q}} \varphi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \{ \varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + E_{\sigma} - E_1 \}^{-1} V_{\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}), \quad (37)$$

де

$$V_{1s}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \nu_{1s}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \sum_{\sigma} \varphi_{\sigma}^*(\mathbf{k}) \{ \nu_{1s}^{\sigma}(-\mathbf{q}) + \omega_{1s, \sigma}^{1s}(-\mathbf{q}) \} + 16\pi e^2 a_o^2 \sum_{l \geq 0} P_l(t) a_l^{1s}(k_*, q_*); \quad (38)$$

для інших s -станів (при $\sigma \neq 1s$)

$$V_{\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \omega_{\sigma, 1s}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \sum_{\sigma_1} \varphi_{\sigma_1}^*(\mathbf{k}) \{ \omega_{\sigma, 1s}^{\sigma_1}(-\mathbf{q}) + \omega_{\sigma, \sigma_1}^{1s}(-\mathbf{q}) \} + 16\pi e^2 a_o^2 \sum_{l \geq 0} P_l(t) a_l^{\sigma}(k_*, q_*); \quad (39)$$

У формулах (38), (39) $P_l(t)$ — поліном Лежандра; t — косинус кута між векторами \mathbf{k} і \mathbf{q} ; $k_* \equiv ka_0$, $q_* \equiv qa_0$,

$$a_l^{\sigma}(k_*, q_*) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} d\rho_1 d\rho_2 \rho_1^2 \rho_2^2 e^{-\rho_1} \tilde{\varphi}_{\sigma}(\rho_2) a_l(\rho_1, \rho_2) j_l(k\rho_1) j_l(q\rho_2), \quad (40)$$

де $j_l(x)$ — сферична функція Бесселя першого роду l -го порядку, $a_l(\rho_1, \rho_2) = \rho_1^l \rho_2^{-l-1}$; $\tilde{\varphi}_{\sigma}(\rho) \equiv \pi^{1/2} a_0^{3/2} \varphi_{\sigma}(\rho)$. Коефіцієнти $a_l^{\sigma}(k_*, q_*)$ виражаються в елементарних функціях. Крім того,

$$\nu_{1s}^{\sigma}(-\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{q}, \mathbf{r})} \nu_{1s}(\mathbf{r}) \varphi_{\sigma}(\mathbf{r}); \quad \omega_{1s, \sigma}^{1s}(-\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{q}, \mathbf{r})} \omega_{1s, \sigma}(\mathbf{r}) \varphi_{1s}(\mathbf{r}); \quad (41)$$

$$\omega_{\sigma, 1s}^{\sigma_1}(-\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{q}, \mathbf{r})} \omega_{\sigma, 1s}(\mathbf{r}) \varphi_{\sigma_1}(\mathbf{r}).$$

С. Матричний елемент оператора імпульсу

У процесі фотойонізації йона H^- може брати участь будь-який із двох електронів, тому сила осцилятора для каналу, який ми розглядаємо, дорівнює

$$f(\mathbf{k}) = 8\{3m\hbar\omega_{1s,k}\}^{-1}|\mathbf{P}(\mathbf{k})|^2, \quad (42)$$

де $\mathbf{P}(\mathbf{k})$ — матричний елемент оператора імпульсу одного з електронів.

$$\mathbf{P}(\mathbf{k}) = \langle \psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | (-i\hbar\nabla_1) | \psi_{1s,k}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle, \quad (43)$$

а $\hbar\omega_{1s,k} = \varepsilon_k - \frac{\epsilon^2}{2a_0} - E_-^{(1)} = \frac{\epsilon^2}{2a_0}\{k_*^2 + \Delta\epsilon\}$, де $\Delta\epsilon \simeq 0.0555\dots$ — енергія йонізації в рідбергах.

У зв'язку з доброю збіжністю розкладу (12) досить обмежитися складовими $\psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ з невеликими значеннями s . Головні внески породжуються функціями $\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ та $\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, інші дорівнюють нулеві через те, що інтеграли за кутовими змінними від $P_s(\cos\gamma)$ або ж від $\cos\theta_1 P_s(\cos\gamma)$ зануляються. Ураховуючи, що борнівські поправки $\chi_\sigma(\mathbf{k}|\mathbf{r})$ є малими величинами та виділяючи головні доданки, запишімо $\mathbf{P}(\mathbf{k})$ у вигляді:

$$\mathbf{P}(\mathbf{k}) = \mathbf{P}_{0,1}(\mathbf{k}) + \mathbf{P}_{1,1}(\mathbf{k}) + \sum_{\sigma} \{\mathbf{P}_{0,2}^{\sigma}(\mathbf{k}) + \mathbf{P}_{1,2}^{\sigma}(\mathbf{k})\} + \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \alpha_{\sigma_1, \sigma_2}^{(1)} \Delta \mathbf{P}_{\sigma_1, \sigma_2}(\mathbf{k}) + \dots, \quad (44)$$

де

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{0,1}(\mathbf{k}) &= -\frac{i\hbar\Gamma_0}{\sqrt{2}} \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \varphi_{1s}(\mathbf{r}_2) \nabla_1 \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1); \\ \mathbf{P}_{1,1}(\mathbf{k}) &= -\frac{i\hbar\Gamma_1}{\sqrt{2}} \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \{\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_2) \nabla_1 \varphi_{1s}(\mathbf{r}_1) + \varphi_{1s}(\mathbf{r}_2) \nabla_1 \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1)\}; \\ \mathbf{P}_{0,2}^{\sigma}(\mathbf{k}) &= -\frac{i\hbar\Gamma_0}{\sqrt{2}} \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \{\varphi_{\sigma}(\mathbf{r}_2) \nabla_1 \chi_{\sigma}(\mathbf{k}|\mathbf{r}_1) + \chi_{\sigma}(\mathbf{k}|\mathbf{r}_2) \nabla_1 \varphi_{\sigma}(\mathbf{r}_1)\}; \\ \mathbf{P}_{1,2}^{\sigma}(\mathbf{k}) &= -\frac{i\hbar\Gamma_1}{\sqrt{2}} \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \{\varphi_{\sigma}(\mathbf{r}_2) \nabla_1 \chi_{\sigma}(\mathbf{k}|\mathbf{r}_1) + \chi_{\sigma}(\mathbf{k}|\mathbf{r}_2) \nabla_1 \varphi_{\sigma}(\mathbf{r}_1)\}, \end{aligned} \quad (45)$$

а доданки $\Delta \mathbf{P}_{\sigma_1, \sigma_2}(\mathbf{k})$ породжені поправкою до функції $\psi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ і пропорційні $\alpha_{\sigma_1, \sigma_2}^{(1)}$. Як видно з формул (45), детальний розрахунок матричного елемента є досить громіздким. У роботі [23] ми розраховували його в наближенні базису, що включає $1s$ - та $2s$ -функції атома водню. У цьому варіанті

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{0,1}(\mathbf{k}) &= 32\sqrt{2}\pi^{3/2} \left(\frac{a_0^3}{V}\right)^{1/2} \Gamma_0 C_0 \hbar \mathbf{k} \{\alpha(1+\beta)^{-3}[\alpha^2 + (ka_0)^2]^{-2} + \beta(1+\alpha)^{-3}[\beta^2 + (ka_0)^2]^{-2}\}; \\ \mathbf{P}_{1,1}(\mathbf{k}) &= -128\frac{(2\pi)^{1/2}}{\sqrt{3}} \left(\frac{a_0^3}{V}\right)^{1/2} \Gamma_1 \hbar \mathbf{k} \gamma_1^6 (1+\gamma_1)^{-4} [\gamma_1^2 + (ka_0)^2]^{-3}. \end{aligned} \quad (46)$$

Доданки $\mathbf{P}_{0,2}(\mathbf{k})$ є однотипними. Використовуючи формули (38), (39), інтегруючи за векторами \mathbf{r}_1 та \mathbf{r}_2 і переходячи від суми за вектором \mathbf{q} до інтеграла, а також вводячи безрозмірні змінні k_* , q_* , одержуємо такий вираз:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{0,2}^{\sigma}(\mathbf{k}) &= -\frac{\hbar}{a_0} \Gamma_0 C_0 \left(\frac{a_0^3}{V}\right)^{1/2} \frac{\mathbf{k}}{k} 8\sqrt{2}\pi \int_0^{\infty} dq_* \frac{q_*^3}{q_*^2 - k_*^2 + 1 - n_{\sigma}^{-2}} \\ &\times \left(J_{\sigma}(\beta) \frac{\alpha}{(q_*^2 + \alpha^2)^2} + J_{\sigma}(\alpha) \frac{\beta}{(q_*^2 + \beta^2)^2} \right) \int_{-1}^1 dt t \tilde{V}_{\sigma}(\mathbf{k}_*, \mathbf{q}_*). \end{aligned} \quad (47)$$

Тут використано позначення

$$\tilde{V}_{\sigma}(\mathbf{k}_*, \mathbf{q}_*|t) \equiv V_{\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \{4\pi e^2 a_0^2\}^{-1};$$

$$J_{1s}(\alpha) = 8(1+\alpha)^{-3}; \quad J_{2s}(\alpha) = 2\sqrt{2}(\alpha-1) \left(\frac{1}{2} + \alpha\right)^{-4}; \quad \dots,$$

n_{σ} — головне квантове число стану σ ($\sigma = (n_{\sigma}, 0, 0)$), а t — косинус кута між векторами \mathbf{k} і \mathbf{q} .

Матричний елемент $\mathbf{P}_{1,2}^\sigma(\mathbf{k})$ подібний до $\mathbf{P}_{0,2}^\sigma(\mathbf{k})$:

$$\mathbf{P}_{1,2}^\sigma(\mathbf{k}) = -\frac{\mathbf{k}}{k} \frac{\hbar \Gamma_1}{a_0} \left(\frac{a_0^3}{V}\right)^{1/2} \gamma_1^6 S_\sigma(\gamma_1) \frac{512}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{dq_* q_*^3}{q_*^2 - k_*^2 + 1 - n_\sigma^{-2}} (\gamma_1^2 + q_*^2)^{-3} \int_{-1}^1 dt t \hat{V}_\sigma(\mathbf{k}_*, \mathbf{q}_* | t), \quad (48)$$

$$S_{1s}(\gamma_1) = -\left(\frac{3}{2}\right)^{1/2} (1 + \gamma_1)^{-4}; \quad S_{2s}(\gamma_1) = \frac{\sqrt{3}}{4} \left(\frac{1}{2} - \gamma_1\right) (1 + \gamma_1)^{-5}.$$

Виконуючи інтегрування за змінною t у формулах (47), (48), зводимо вирази $\mathbf{P}_{0,2}^\sigma(\mathbf{k})$, $\mathbf{P}_{1,2}^\sigma(\mathbf{k})$ до одновимірних безрозмірних інтегралів, у яких підінтегральна функція має полюс у точці $q_o(k) = (k^2 - 1 + n_\sigma^{-2})^{1/2}$ за умови, що $k \geq (1 - n_\sigma^{-2})^{1/2}$. Для наступного розрахунку скористаємося добре відомим співвідношенням

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(q - q^o(k) - i\varepsilon)} = \frac{\mathcal{P}}{q - q^o(k)} + i\pi\delta(q - q^o(k)) \quad (49)$$

та виділимо дійсну й уявну частини в матричних елементах:

$$\mathbf{P}_{0,2}^\sigma(\mathbf{k}) = A_{0,2}^\sigma \frac{\mathbf{k}}{k} \left(\frac{a_0^3}{V}\right)^{1/2} \frac{\hbar}{a_0} \{I_{0,2}^\sigma(k) + iJ_{0,2}^\sigma(k)\}, \quad (50)$$

$$\mathbf{P}_{1,2}^\sigma(\mathbf{k}) = A_{1,2}^\sigma \frac{\mathbf{k}}{k} \left(\frac{a_0^3}{V}\right)^{1/2} \frac{\hbar}{a_0} \{I_{1,2}^\sigma(k) + iJ_{1,2}^\sigma(k)\}.$$

$$A_{0,2}^{1s} = 64 \Gamma_o a_0 (2\pi)^{1/2}; \quad A_{0,2}^{2s} = 32 \Gamma_o a_0 \sqrt{\pi};$$

$$A_{1,2}^{1s} = \frac{512}{\sqrt{6\pi}} \Gamma_1 \gamma_1^6 \frac{1}{(1 + \gamma_1)^4};$$

$$A_{1,2}^{2s} = \frac{128}{3\sqrt{\pi}} \Gamma_1 \gamma_1^6 \frac{\gamma_1 - \frac{1}{2}}{(1 + \gamma_1)^5}.$$

Функції $J_{0,2}^\sigma(k)$, $J_{1,2}^\sigma(k)$ мають аналітичне зображення, а $I_{0,2}^\sigma(k)$ та $I_{1,2}^\sigma(k)$ розраховані чисельно і представлені апроксимантами Паде (див. Додаток 1).

Для зручності наступних розрахунків виділимо в матричному елементі $\mathbf{P}(\mathbf{k})$ розмірний множник,

$$\mathbf{P}(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}}{k} \frac{\hbar}{a_0} \left(\frac{a_0^3}{V}\right)^{1/2} p(k), \quad (51)$$

де $p(k)$ — безрозмірна комплексна скалярна функція безрозмірного хвильового числа $k = |\mathbf{k}|a_o$. Згідно з формулою (42),

$$f(\mathbf{k}) = \frac{16}{3} [k^2 + \Delta\varepsilon]^{-1} \frac{a_0^3}{V} |p(k)|^2, \quad (52)$$

де $\Delta\varepsilon$ — потенціал йонізації йона H^- у рідберґах. Точність розрахунку сил осцилятора визначається вибором хвильових функцій початкового й кінцевого станів. Через це доцільно виконати тестування розрахунку $p(k)$ за правилом сум (теоремою Томаса-Райхе-Куна) (див.[21]). У нашому випадку сума сил осцилятора процесу фотойонізації зводиться до виразу

$$F = \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{8}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{dk \cdot k^2}{k^2 + \Delta\varepsilon} |p(k)|^2. \quad (53)$$

У таблиці 2 наведено зміну значень F за послідовного врахування доданків $\mathbf{P}_{0,1}$, $\mathbf{P}_{1,1}$, $\mathbf{P}_{0,2}$, $\mathbf{P}_{1,2}$. Відзначимо, що в роботі [8], де використано дуже складні хвильові функції, що вимагало громіздких числових розрахунків, одержано значення $F = 1.72 \dots$ Згідно з правилом сум для двоелектронної системи, яку ми розглядаємо, при врахуванні інших каналів процесу фотойонізації (за яких атом водню переходить у збуджений стан) повинна виконуватися рівність $F = 2$. Одержаний результат для суми сил осциляторів, як і результат роботи [8], задовольняє умову $F < 2$, але важко визначити, який із цих результатів кращий, бо для цього треба було б враховувати всі інші канали фотойонізації.

n	1	2	3	4	5	6	7
F	1.3443	1.5888	1.5209	1.5169	1.6362	1.6423	1.6830

Таблиця 2. Залежність суми сил осциляторів від кількості доданків у формулі (44).

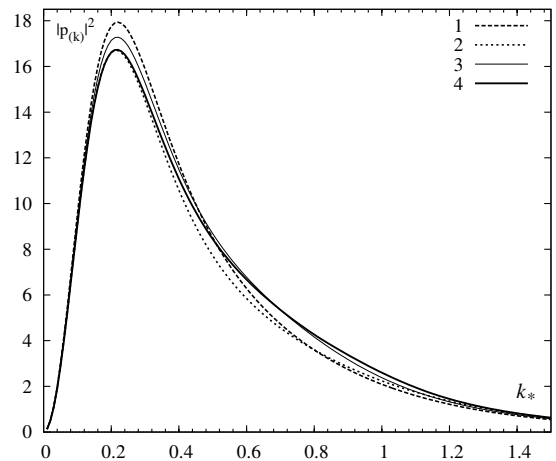


Рис. 2. Залежність $|p(k)|^2$ від безрозмірного хвильового числа $k = |\mathbf{k}|a_o$.

Як видно з рис. 2, на якому наведено залежність $|p(k)|^2$ від безрозмірного хвильового числа $k = |\mathbf{k}|a_o$, є добра збіжність відносно числа врахованих у матричному елементі доданків. При цьому крива 1 відповідає врахуванню доданків $\mathbf{P}_{0,1}$, $\mathbf{P}_{1,1}$ у формулі (44), крива

2 враховує додатково матричний елемент $\mathbf{P}_{0,2}^{1s}$, крива 3 — ще й матричний елемент $\mathbf{P}_{1,2}^{1s}$. Крива 4 відповідає врахуванню всіх доданків у формулі (44). Максимум кривої $|p(k)|^2$ дещо зменшується зі збільшенням кількості доданків. Положення максимуму при цьому змінюється мало й перебуває в околі точки $k \approx 0.2$. Як

видно з рисунка, врахування в базисі локалізованих функцій хвильової функції $2s$ -стану відчутно змінює поведінку кривої в області великих хвильових векторів.

Поперечний переріз фотойонізації йона H^- дорівнює

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{H}^-}(\omega) &= \frac{2\pi^2 e^2}{m c} \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \delta(\omega_{1s,\mathbf{k}} - \omega) = \frac{16}{3} \frac{e^2}{m c} \int_0^\infty \frac{dk \cdot k^2}{k^2 + \Delta\varepsilon} |p(k)|^2 \delta\left(\frac{e^2}{2a_0\hbar}[k^2 + \Delta\varepsilon] - \omega\right) \\ &= \frac{16}{3} \alpha_0 a_0^2 \frac{(\omega_* - \Delta\varepsilon)^{1/2}}{\omega_*} \left| p([\omega_* - \Delta\varepsilon]^{1/2}) \right|^2, \end{aligned} \quad (54)$$

де α_0 — стала тонкої структури. У шкалі довжин хвиль

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{H}^-}(\lambda) &= \frac{16}{3} \alpha_0 a_0^2 \lambda_* \left(\frac{\lambda_*^{\max} - \lambda_*}{\lambda_*^{\max} \lambda_*} \right)^{1/2} \\ &\times \left| p\left(\left[\frac{\lambda_*^{\max} - \lambda_*}{\lambda_*^{\max} \lambda_*} \right]^{1/2} \right) \right|^2, \end{aligned} \quad (55)$$

де $\lambda_* = \frac{\lambda}{\lambda_0}$, $\lambda_*^{\max} = (\Delta\varepsilon)^{-1} \approx 18.1818\dots$ Таким чином, фотойонізація йонів H^- дає внесок у коефіцієнт неперервного поглинання в області $\omega_* > \Delta\varepsilon$ або $\lambda < \lambda_*^{\max}$. Залежність поперечного перерізу цього процесу від довжини хвилі показано на рис. 3. Жирна крива побудована з урахуванням усіх доданків формули (57), пунктирна відповідає результатам найкращого варіанта розрахунку роботи [8], суцільна тонка лінія відповідає апроксимаційній формулі Джона [9], побудованій за результатами числових розрахунків інших авторів.

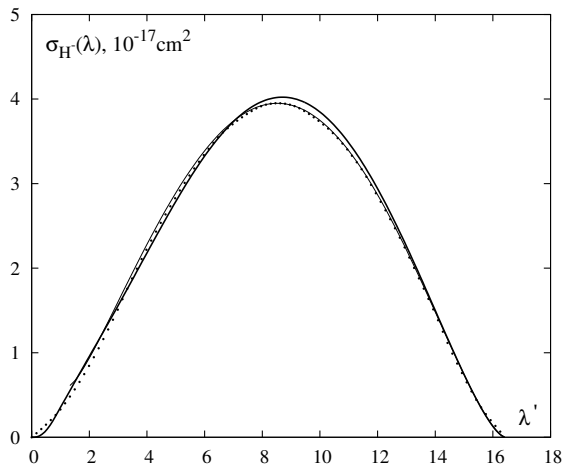


Рис. 3. Залежність поперечного перерізу фотойонізації йона H^- від довжини хвилі $\lambda' = \lambda \cdot 10^{-3}$, де λ вимірюється в ангстремах.

На рис. 4 зображено відносний поперечний переріз $\sigma_{\text{H}^-}(\lambda)/\sigma_{\text{H}^-}(\lambda_1)$ при $\lambda_1 = 5280 \text{ \AA}$ процесу фотойонізації йонів H^- . Мітки відповідають спостережуваним даним для Сонця з праці [5]. Пунктирна крива побудована за результатами роботи [8], а суцільна — за нашими розрахунками. Як бачимо, наші результати, як і результати праці [8], однаковою мірою добре описують спостережувані дані в області від 4000 \AA до 13000 \AA , крім невеликої ділянки в околі максимуму $((8-9) \cdot 10^3 \text{ \AA})$.

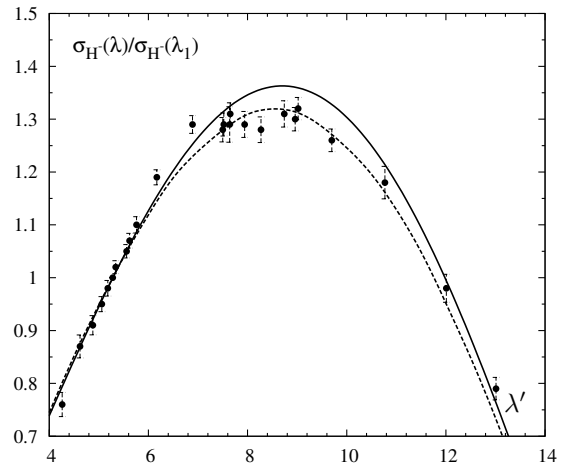


Рис. 4. Залежність відносного поперечного перерізу $\sigma_{\text{H}^-}(\lambda)/\sigma_{\text{H}^-}(\lambda_1)$ при $\lambda_1 = 5280 \text{ \AA}$ від довжини хвилі.

III. ПОПЕРЕЧНІ ПЕРЕРІЗИ ФОТОЙОНІЗАЦІЇ ЗБУДЖЕНИХ АТОМІВ ВОДНЮ

Розрахунок поперечних перерізів фотойонізації збуджених атомів водню чи воднеподібних атомів також є складною задачею, яка вимагає врахування багатьох факторів і допускає розв'язки лише в межах певних моделей. Добре відомі результати квазікласичного наближення для таких перерізів із праці [25],

а також із прці [14], присвяченої обчисленню так званих факторів Гаунта, які використовують для корекції формули Крамерса. У роботі [14] для розрахунку матричного елемента координати використано кулонівські хвильові функції неперервного спектра електрона в полі ядра. Це наближення відповідає фотойонізації ізолюваного атома. У фотосфері ж йонізований електрон перебуває в полі інших мікрочастинок, у тому числі заряджених, які створюють ефект екранування взаємодій. Ще важливіше, що в цій моделі нехтується процесами рекомбінації, тобто можливістю захоплення протоном одного з "вільних" електронів й утворення нейтрального атома, у полі якого перебуває фотоелектрон, особливо в тому випадку, якщо енергія його мала і тривалість його перебування поблизу протона перевищує характерний час рекомбінації в частково йонізованій плазмі фотосфери. З цього погляду, використання кулонівських функцій обґрунтоване у випадку великих енергій фотоелектрона (високоенергетичних фотонів), тобто для довжин хвиль, набагато менших від червоної границі фотоелектру для цього процесу. У випадку ж, коли енергія фотона близька до енергії йонізації, фотоелектрон більшу частину часу проводить не в полі протона, а в полі утвореного нейтрального атома, через що його стан описується хвильовою функцією, близькою до плоскої хвилі. Згідно з цими міркуваннями розрахунок поперечних перерізів на кулонівських функціях неперервного спектра слід розглядати як одне з наближень. Поперечні перерізи атомів, розраховані в цьому наближенні, в околі червоної границі мають стрибкоподібну залежність від довжини хвилі ($\sigma_{n,l}(\lambda) \sim \lambda^3$ при $0 \leq \lambda \leq \lambda^{\max}$, $\sigma_{n,l}(\lambda) = 0$ при $\lambda \geq \lambda^{\max} = n^2 \cdot \lambda_0$, де n — головне квантове число стану, з якого відбувається фотойонізація).

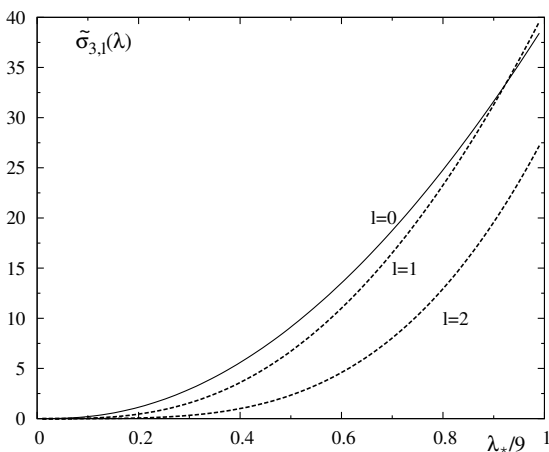


Рис. 5. Залежність поперечних перерізів фотойонізації атомів водню для станів з головним квантовим числом $n = 3$ від довжини хвилі ($l = 0, 1, 2$).

Використовуючи загальні вирази для поперечних перерізів фотойонізації атома водню як функції енергії фотоелектрона, знайдені в праці [14], ми одержали аналітичні вирази для цих перерізів у шкалі довжин

хвиль. Нехай $\sigma_{n,l,m}(\lambda)$ — поперечний переріз фотойонізації атома водню, який перебуває у стані з квантовими числами n, l, m . Тоді в дипольному наближенні

$$\sigma_{n,l}(\lambda) \equiv \sum_{m=-l}^l \sigma_{n,l,m}(\lambda) = \pi \alpha_0 a_0^2 \tilde{\sigma}_{n,l}(\lambda); \quad (56)$$

$$\tilde{\sigma}_{n,l}(\lambda) = \tilde{\sigma}_{n,l}^+(\lambda) + \tilde{\sigma}_{n,l}^-(\lambda).$$

Для розрахунку коефіцієнта неперервного поглинання у видимій і ближній інфрачервоній областях спектра необхідні поперечні перерізи як мінімум для станів зі значенням головного квантового числа $n = 3$ і 4 при всіх можливих значеннях орбітального числа l (див. Додаток 2). Спектральну залежність цих перерізів ілюструють рисунки 5 і 6.

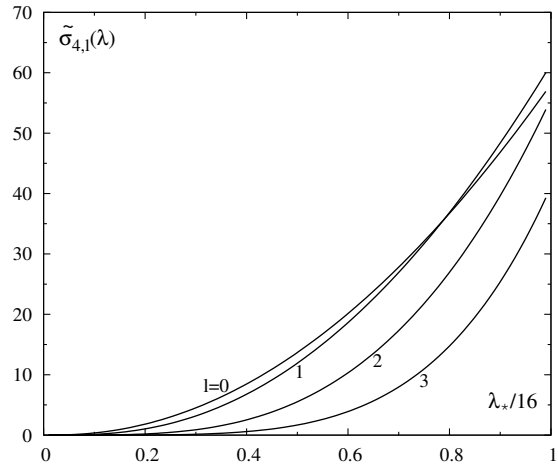


Рис. 6. Залежність поперечних перерізів фотойонізації атомів водню для станів із головним квантовим числом $n = 4$ від довжини хвилі ($l = 0, 1, 2, 3$).

Таким чином, розрахунок поперечного перерізу на кулонівських функціях слід розглядати як одне з наближень, придатне для великих енергій фотоелектрона (малих довжин хвиль). Водночас поперечний переріз фотойонізації йона H^- , як видно з рисунка 3, в області великих довжин хвиль є монотонно спадною функцією, яка дорівнює нулеві в червоній границі ($\approx 16.4 \cdot 10^3 \text{ \AA}$) саме завдяки тому, що у формулі (21) функція $F_{\sigma_1}(\mathbf{k}; \mathbf{r}|\sigma)$ близька до плоскої хвилі.

У зв'язку з викладеними вище міркуваннями для оцінки внесків фотойонізації збуджених атомів водню до загального коефіцієнта неперервного поглинання фотосфери доцільно розраховувати відповідні поперечні перерізи також у межах наближення, що враховує процеси рекомбінації, використовуючи плоскі хвилі або ортогоналізовані плоскі хвилі, або плоскі хвилі з борнівськими поправками замість кулонівських функцій. У цій праці ми розраховували поперечні перерізи, описуючи стан фотоелектрона плоскою хвилею.

Розгляньмо фотойонізацію, що відбувається при взаємодії фотона з енергією $\hbar\omega$ з атомом водню, електрон якого перебуває у стані з хвильовою функцією $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$. У цьому наближенні розрахунок сил осциляторів зв'язано-вільних переходів

$$f_{\mathbf{k}|nlm} = 2 \{3m_0 \hbar \omega_{\mathbf{k}|n}\}^{-1} |\mathbf{P}_{\mathbf{k}|nlm}|^2, \quad (57)$$

$$\mathbf{P}_{\mathbf{k}|nlm} = \int d\mathbf{r} \psi_{nlm}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

$$\hbar \omega_{\mathbf{k}|n} = \frac{e^2}{2a_0} [n^{-2} + (ka_0)^2]$$

зводиться до розрахунку Фур'є-зображення функції $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$, адже

$$\mathbf{P}_{\mathbf{k}|nlm} = V^{-1/2} \hbar \mathbf{k} \psi_{nlm}(\mathbf{k}). \quad (58)$$

Поперечний переріз фотойонізації збудженого атома, що перебуває у стані з квантовими числами n, l , дорівнює

$$\sigma_n(\omega) = \sum_{0 \leq l \leq n-1} \sigma_{n,l}(\omega), \quad (59)$$

$$\sigma_{n,l}(\omega) = 2\pi^2 e^2 (m_0 c)^{-1} \sum_m \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}|nlm} \delta(\omega_{\mathbf{k}|n} - \omega).$$

Усі парціальні поперечні перерізи при $l \geq 0$ у шкалі частот чи довжин хвиль зображаються простими аналітичними формулами. Зокрема для s -станів ($n \geq 1$)

$$\tilde{\sigma}_{n,0}(\lambda) = \frac{2^8}{3} n^4 (x_n)^{7/2} (1-x_n)^{3/2} M_{n,0}(x_n); \quad (60)$$

$$M_{n,0}(x_n) = \left\{ \sum_{s=0}^{n-1} (-1)^s \frac{(2n-1)!}{(2s+1)!(2n-2s-1)!} \times x_n^{n-s-1} (1-x_n)^s \right\}^2; \quad x_n = \lambda_*/n^2;$$

для p -станів ($n \geq 2$)

$$\sigma_{n,1}^{\text{PW}}(\lambda) = \alpha_0 \pi a_0^2 \frac{2^{10}}{3^2} n^4 (n^2-1) \left(\frac{\lambda_*}{n^2}\right)^{9/2} \times \left(1 - \frac{\lambda_*}{n^2}\right)^{5/2} M_{n,1}\left(\frac{\lambda_*}{n^2}\right); \quad (61)$$

$$M_{2,1}(x) = 1; \quad M_{3,1}(x) = [1-2x]^2;$$

$$M_{4,1}(x) = \left\{1 - \frac{24}{5}x + \frac{24}{5}x^2\right\}^2; \dots;$$

для d -станів ($n \geq 3$)

$$\sigma_{n,2}^{\text{PW}}(\lambda) = \alpha_0 \pi a_0^2 \frac{2^{12}}{3 \cdot 5} n^2 (n^2-1)(n^2-4) \left(\frac{\lambda_*}{n^2}\right)^{11/2} \times \left(1 - \frac{\lambda_*}{n^2}\right)^{7/2} M_{n,2}\left(\frac{\lambda_*}{n^2}\right); \quad (62)$$

$$M_{3,2}(x) = 1; \quad M_{4,2}(x) = [1-2x]^2; \dots;$$

для f -станів ($n \geq 4$)

$$\sigma_{n,3}^{\text{PW}}(\lambda) = \alpha_0 \pi a_0^2 \frac{2^{14}}{3 \cdot 7 \cdot (3 \cdot 5)^2} \times n^2 (n^2-1)(n^2-4)(n^2-9) \times \left(\frac{\lambda_*}{n^2}\right)^{13/2} \left(1 - \frac{\lambda_*}{n^2}\right)^{9/2} M_{n,3}\left(\frac{\lambda_*}{n^2}\right); \quad (63)$$

$$M_{4,3}(x) = 1; \quad M_{5,3}(x) = [1-2x]^2; \dots \text{ і т. д.}$$

При цьому виконуються рівності $M_{n,l}(0) = M_{n,l}(1) = 1$.

Ми зіставили розраховані за формулами (59)–(63) парціальні поперечні перерізи фотойонізації атома водню для станів n, l , де n змінюється від 1 до 5 (при всіх допустимих значеннях l), з відповідними перерізами, розрахованими за формулами праці [23]. У границі малих довжин хвиль ($\lambda_* \ll n^2$) результати обох наближень збігаються. Розраховані за формулами (59)–(63), поперечні перерізи є неперервними функціями довжини хвилі, які занулюються в околах відповідних червоних границь ($\lambda_* \rightarrow n^2$).

Відзначимо, що функції $\tilde{\sigma}_{n,l}^{\text{PW}}(\lambda)$ при $0 \leq l \leq n-2$ є осцилюючими функціями довжини хвилі, але $\sum_{l=0}^{n-1} \tilde{\sigma}_{n,l}^{\text{PW}}(\lambda)$ осциляцій не має. Це добре видно з рисунка 7, на якому наведено функції $\tilde{\sigma}_{3,l}^{\text{PW}}(\lambda)$ (пунктирні криві) та їхню суму (суцільна крива з одним максимумом, розташованим поблизу $\lambda = 6000 \text{ \AA}$). Таку ж властивість мають функції $\sigma_{n,l}^{\text{PW}}(\lambda)$ при довільних значеннях n .

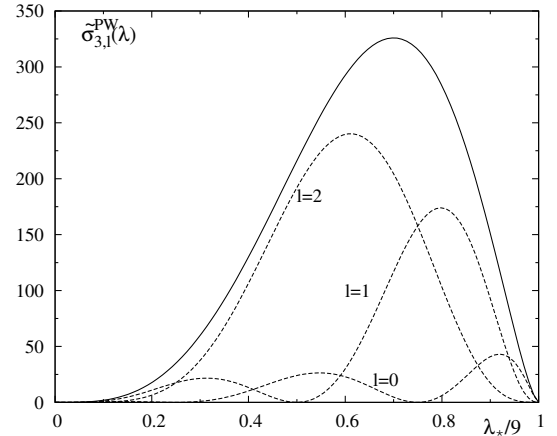


Рис. 7. Спектральна залежність поперечних перерізів фотойонізації атомів водню, розрахованих у плоскохвильовому наближенні, для стану з головним квантовим числом $n = 3$. Суцільна крива зображає суму $\sum_{l=0}^2 \sigma_{n,l}^{\text{PW}}(\lambda)$.

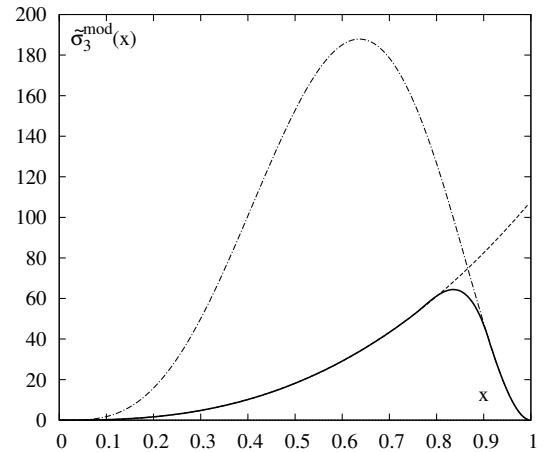


Рис. 8. Зшивання кулонівського і плоскохвильового поперечних перерізів фотойонізації атомів водню у випадку $n = 3$. Суцільна крива — $\tilde{\sigma}_3^{\text{mod}}(x)$.

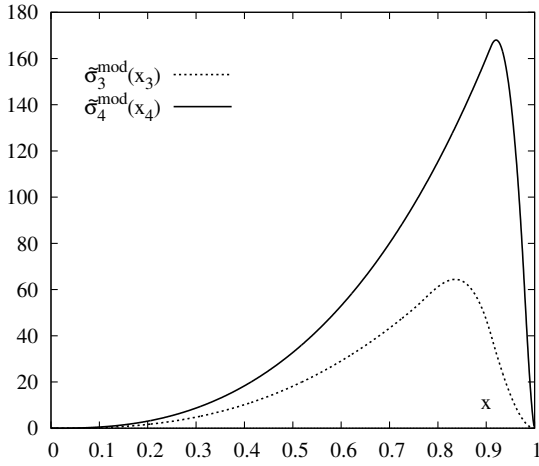


Рис. 9. Спектральна залежність модельних поперечних перерізів $\tilde{\sigma}_3^{\text{mod}}(x_3)$ і $\tilde{\sigma}_4^{\text{mod}}(x_4)$.

Поперечні перерізи, розраховані на кулонівських функціях неперервного спектра, коректні в області довжин хвиль, далеких від порогових значень, а $\sigma_{n,l}^{\text{PW}}(\lambda)$ — в областях поблизу порогів. Щоб отримати наближені вирази, придатні для всіх допустимих довжин хвиль, ми скористалися методом зшивання, що ілюструє рис. 8. Тут пунктирними кривими зображено функції $\sum_{l=0}^2 \tilde{\sigma}_{3,l}(\lambda)$ та $\sum_{l=0}^2 \tilde{\sigma}_{3,l}^{\text{PW}}(\lambda)$, а суцільною кривою — функцію $\tilde{\sigma}_3^{\text{mod}}(\lambda)$

$$\tilde{\sigma}_3^{\text{mod}}(\lambda) = \begin{cases} \sum_{l=0}^2 \sigma_{3,l}(x) & \text{при } 0 \leq x \leq x_1; \\ y_3(x) & \text{при } x_1 < x \leq x_2; \\ \sum_{l=0}^2 \sigma_{3,l}^{\text{PW}}(x) & \text{при } x_2 < x \leq 1. \end{cases} \quad (64)$$

При цьому $x = \lambda_*/9$, а зшивання проводимо в точках $x_1 = 0.75$, $x_2 = 0.91$;

$$y_3(x) = b_0 + b_1x + b_2x^2 + b_3x^3, \quad (65)$$

де $b_0 = 7428.7$, $b_1 = -29061.4$, $b_2 = 37917.9$, $b_3 = -16378.4$.

Аналогічно сконструйовано модельний поперечний переріз фотойонізації атомів водню, збуджених на рівень $n = 4$. На рис. 9 наведено $\tilde{\sigma}_3^{\text{mod}}(x_3)$ та $\tilde{\sigma}_4^{\text{mod}}(x_4)$ як функції змінних $x_3 = \lambda_*/9$, $x_4 = \lambda_*/16$.

Оскільки заселеність рівнів зменшується зі збільшенням головного квантового числа, а ефекти екранування приводять до того, що стани з великими значеннями n не можуть реалізуватися, то при наближеному розрахунку ми враховували лише квантові стани атомів водню з $n = 3$ і 4 . Сконструйовані модельні поперечні перерізи з нульовою пороговою асимптотикою дають змогу якісно описати немонотонну поведінку коефіцієнта неперервного поглинання в околі його максимуму, відому зі спостережуваних даних [4].

IV. ПОПЕРЕЧНИЙ ПЕРЕРІЗ ПОГЛИНАННЯ ФОТОНІВ “ВІЛЬНИМИ” ЕЛЕКТРОНАМИ

Хвильова функція незв'язаного електрона у стані із заданими значеннями хвильового вектора \mathbf{k} й енергії $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m_0$ визначається його взаємодією з нейтральними атомами, протонами, додатними й від'ємними йонами і т. д. Врахуємо, що у фотосферах зір із невисокими ефективними температурами концентрація нейтральних незбуджених атомів водню на декілька порядків перевищує концентрацію всіх інших частинок. У зв'язку з цим обмежимося взаємодією електрона з атомами водню, що перебувають у $1s$ -стані,

$$V_e(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{N_H} v_{1s}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|), \quad (66)$$

$$v_{1s}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{r} \left(1 + \frac{r}{a_0}\right) \exp(-2r/a_0),$$

де \mathbf{R}_j — радіус-вектор протона j -го атома. Враховуючи, що хартвіцький потенціал атома є слабким, обмежимося борнівським наближенням, записуючи хвильову функцію електрона у вигляді

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}^{(0)} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} (\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})^{-1} \varphi_{\mathbf{q}}^{(0)}(\mathbf{r}) \nu_{1s}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) S_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}, \quad (67)$$

де $\nu_{1s}(\mathbf{k})$ — зображення Фур'є функції $v_{1s}(\mathbf{r})$, а

$$S_{\mathbf{q}} \equiv \sum_{j=1}^{N_H} \exp[i(\mathbf{q}, \mathbf{R}_j)] - \quad (68)$$

структурний фактор атомної підсистеми.

Поперечний переріз процесу поглинання фотона з енергією $\hbar\omega$, що супроводжується переходом електрона між станами неперервного спектра, визначається виразом [24]

$$\sigma_{\text{ff}}(\omega) = \frac{2\pi^2 e^2 \hbar}{mc} \frac{V}{N_e} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_1} f_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \delta(\hbar\omega_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} - \hbar\omega), \quad (69)$$

де

$$\rho_{\mathbf{k}} = V^{-1} (2\pi\hbar^2 / m_0 k_B T)^{3/2} \exp[-\varepsilon_k / k_B T] - \quad (70)$$

імовірність початкового стану електрона, $f_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$ — сила осцилятора для цього переходу,

$$f_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} = \frac{2}{3} [m\hbar\omega_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}]^{-1} |\mathbf{P}_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}|^2, \quad \hbar\omega_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} = \varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1},$$

$$\mathbf{P}_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} = \int \psi_{\mathbf{k}_2}^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{P}} \psi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (71)$$

У наближенні хаотичного просторового розподілу атомів, коли $S_{\mathbf{q}} S_{-\mathbf{q}} \simeq N_H$,

$$\sigma_{\text{ff}}(\lambda, T) = \frac{N_H}{V} a_0^3 \sigma_e(\lambda, T), \quad (72)$$

де $\sigma_e(\lambda, T)$ — поперечний переріз у розрахунку на один атом водню,

$$\sigma_e(\lambda, T) = \alpha_0 \pi a_0^2 \frac{256}{3} I_e(\lambda_*, T_*), \quad (73)$$

$$I_e(\lambda_*, T_*) = \pi^{1/2} T_*^{-3/2} \lambda_*^3 \int_0^\infty dx x^2 x_0 \times \exp(-x^2/T_*) N(x, x_0),$$

$$N(x, x_0) = \frac{1}{2xx_0} \left\{ \ln \frac{4+z_+}{4+z_-} - \frac{4}{(4+z_+)^3} \left(\frac{8}{3} + 6z_+ + z_+^2 \right) + \frac{4}{(4+z_-)^3} \left(\frac{8}{3} + 6z_- + z_-^2 \right) \right\},$$

де $z_+ = (x + x_0)^2$, $z_- = (x - x_0)^2$, $z(t) \equiv x^2 + x_0^2 - 2xx_0t$; $x_0 \equiv (x^2 + \omega_*)^{1/2}$, $T_* \equiv k_B T \left(\frac{e^2}{2a_0} \right)^{-1}$.

Поперечний переріз $\sigma_{\text{ff}}(\lambda, T)$ є плавною монотонно зростаючою функцією довжини хвилі ($\sigma_{\text{ff}}(\lambda, T) \simeq \lambda_*^3$), він приймає малі значення у видимій та ближній інфрачервоній областях спектра, а тому його вплив на поведінку $\sigma_{\text{eff}}(\lambda)$ є слабким.

V. КОЕФІЦІЄНТ ПОГЛИНАННЯ І ЕФЕКТИВНИЙ ПОПЕРЕЧНИЙ ПЕРЕРІЗ

Загальний коефіцієнт поглинання в моделі водневої фотосфери визначається сумою парціальних внесків різних процесів

$$\begin{aligned} \varkappa(\lambda) = & (1 - \exp[-(\lambda_* T_*)^{-1}]) \left\{ \frac{N_{\text{H}^-}}{V} \sigma_{\text{H}^-}(\lambda) + \sum_{n \geq 1} \frac{N_{\text{H}}^{(n)}}{V} \sigma_n(\lambda) + \frac{N_e}{V} \sigma_{\text{ff}}(\lambda, T) + \dots \right\}, \quad (74) \end{aligned}$$

де $\frac{N_{\text{H}^-}}{V}$ — концентрація від'ємних йонів водню, $\frac{N_{\text{H}}^{(n)}}{V}$ — концентрація атомів, збуджених на рівень n , $\frac{N_e}{V}$ — концентрація “вільних” електронів і т. д. У наближенні локальної термодинамічної рівноваги

$$\frac{N_{\text{H}}^{(n)}}{V} \simeq \frac{N_{\text{H}}}{V} \exp\{-(1 - n^{-2})T_*^{-1}\}, \quad (75)$$

де $\frac{N_{\text{H}}}{V}$ — загальна концентрація нейтральних атомів водню.

Зважаючи на те, що основним механізмом формування неперервного поглинання у видимій та ближній інфрачервоній ділянках спектра є фотойонізація від'ємних йонів водню, можна ввести ефективний поперечний переріз співвідношенням

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{eff}}(\lambda) = & \sigma_{\text{H}^-}(\lambda) + \left\{ \frac{N_{\text{H}^-}}{V} \right\}^{-1} \times \left\{ \sum_{n \geq 1} \frac{N_{\text{H}}^{(n)}}{V} \sigma_n(\lambda) + \frac{N_e}{V} \sigma_{\text{ff}}(\lambda, T) + \dots \right\}. \quad (76) \end{aligned}$$

Оскільки фотойонізація збуджених атомів, поглинання фотонів “вільними” електронами та інші низькоенергетичні процеси дають невеликі внески до $\sigma_{\text{eff}}(\lambda)$,

то $\sigma_{\text{eff}}(\lambda)$ можна вважати ефективним поперечним перерізом процесу фотойонізації негативного йона водню, так що

$$\varkappa(\lambda) = \left\{ 1 - \exp[-(\lambda_* T_*)^{-1}] \right\} \frac{N_{\text{H}^-}}{V} \sigma_{\text{eff}}(\lambda), \quad (77)$$

а спектральну залежність відносного ефективного поперечного перерізу $\sigma_{\text{eff}}(\lambda) \{ \sigma_{\text{eff}}(\lambda_1) \}^{-1}$ можна порівнювати зі спостережуваними даними.

Ураховуючи, що в наближенні термодинамічної рівноваги безрозмірні концентрації нейтральних атомів, “вільних” електронів та негативних йонів водню пов'язані співвідношенням [15]

$$\frac{n_{\text{H}^-}^*}{n_{\text{H}^-}^*} = \frac{4}{n_e^*} \left(\frac{T_*}{4\pi} \right)^{3/2} U(\xi, T_*) \exp[-T_*^{-1} I(\xi)], \quad (78)$$

яке узагальнює відоме співвідношення Саха, де $n_{\text{H}^-}^* = \frac{N_{\text{H}^-}}{V} a_0^3$, $n_e^* = \frac{N_e}{V} a_0^3$, $n_{\text{H}^-}^* = \frac{N_{\text{H}^-}}{V} a_0^3$, $I_1(\xi)$ — потенціал йонізації йона H^- у рідбергах при заданому значенні безрозмірного параметра екранування ξ , а також приймаючи до уваги формулу (72), виразу (71) можна надати такого вигляду:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{eff}}(\lambda) = & \sigma_{\text{H}^-}(\lambda) + \frac{1}{2} \left(\frac{T_*}{\pi} \right)^{3/2} \times U(\xi, T_*) \exp(-T_*^{-1} I(\xi)) \times \left\{ \sigma_e(\lambda) + (n_e^*)^{-1} \sum_{n \geq 2} \sigma_{\text{H}}^{(n)}(\lambda) \exp[-T_*^{-1}(1 - n^{-2})] \right\}, \quad (79) \end{aligned}$$

де $I(\xi) \cong 0.0555$, n_e^* — безрозмірна концентрація електронів,

$$U(\xi, T_*) = Z_{\text{H}}(\xi, T_*) \exp[-T_*^{-1}], \quad (80)$$

а $Z_{\text{H}}(\xi, T_*)$ — статистична сума атома водню при врахуванні ефекту екранування взаємодій. За невисоких ефективних температур фотосфер $U(\xi, T_*)$ близька до одиниці.

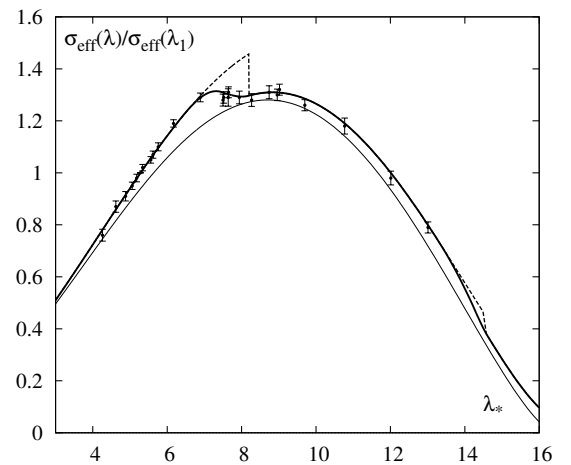


Рис. 10. Спектральна залежність відносного ефективного поперечного перерізу для температури $T = 6000$ К при $n_* = \frac{\rho}{m_{\text{H}}} a_0^3 = 10^{-10}$ у різних наближеннях. Мітки — спостережувані дані для Сонця з роботи [5].

На рис. 10 наведено спектральну залежність відносного ефективного поперечного перерізу для моделі фотосфери при “сонячних” значеннях температури й концентрації баріонів ($T = 6000$ K, $n_* = \frac{\rho}{m_H} a_0^3 = 10^{-10}$) для видимої та ближньої інфрачервоної області. Тонка крива відповідає парціальному внеску фотойонізації йонів H^- , а пунктирна крива — формулі (79) при використанні кулонівських поперечних перерізів $\sigma_{3,i}(\lambda)$, $\sigma_{4,i}(\lambda)$ (Додаток 2). Мітками позначено спостережувані дані [5]. Як видно з рисунка, пунктирна крива добре описує спостережувані дані в області (4000 – 14000) Å, крім інтервалу (7000 – 8200) Å. Відхилення пунктирної кривої від спостережуваних даних пояснюється незадовільною пороговою поведінкою перерізів фотойонізації $\sigma_{n,i}(\lambda)$.

Спектральна залежність нормованого ефективного поперечного перерізу, розрахованого за формулою (79) з використанням модельних поперечних перерізів $\tilde{\sigma}_3^{\text{mod}}(x_3)$ і $\tilde{\sigma}_4^{\text{mod}}(x_4)$, зображена жирною кривою рисунка 10. Відзначимо, що всі криві рисунка 10 нормовані одним і тим же значенням $\sigma_{\text{eff}}(\lambda_1)$ при $\lambda_1 = 5280$ Å, розрахованим за формулою (79). Як бачимо, відповідності між розрахованими і спостережуваними даними можна досягти тільки, використовуючи поперечні перерізи фотойонізації збуджених атомів із нульовою пороговою поведінкою.

ВИСНОВКИ

Розрахована в цій праці в базисно-варіаційному підході хвильова функція йона H^- , що має 5 варіаційних параметрів, приводить до значення енергії, яке відповідає результатам використання багатопараметричних функцій у прямому варіаційному методі. Базисний підхід, у межах якого розрахована двоелектронна хвильова функція кінцевого стану фотойонізації йона H^- , допускає використання борнівського наближення і при врахуванні обмінних кореляцій, на відміну від методу парціальних хвиль, який використовували в попередніх працях (див. [6–7]). Обчислену на цій основі спектральну залежність перерізу фотойонізації від’ємного йона водню, ми представили в аналітичному вигляді. Вона відповідає найкращому варіанту праці [8], а також апроксимаційній формулі роботи [9].

З метою зіставлення результатів теоретичних розрахунків зі спостережуваними даними у видимій та інфрачервоній областях спектра ми запропонували ввести ефективний переріз фотойонізації фотосфери, який враховує не тільки фотойонізацію йонів H^- , а також інші низькоенергетичні процеси. Спектральна залежність відносного (нормованого) ефективного перерізу фотойонізації розрахована з урахуванням перерізів йонізації атомів водню, збуджених на рівні з головним квантовим числом $n = 3$ та 4, а також перерізу поглинання фотонів “вільними” електронами.

Перерізи фотойонізації атомів водню, розраховані в кулонівському наближенні відповідно до роботи [14], в силу нефізичної порогової поведінки в околі довжин хвиль $\lambda_3 = 8200$ Å та $\lambda_4 = 14580$ Å не дають задовільного опису спостережуваних даних для Сонця з роботи [5]. Відхилення можна пояснити нехтуванням процесами рекомбінації у випадку утворення низькоенергетичних фотоелектронів, коли одноелектронний опис незастосовний. Зшиванням виразів для перерізів фотойонізації атомів водню в кулонівському (далеко від порога) і борнівському (близько до порога) наближеннях одержано апроксимаційні формули, які застосовні в усій допустимій області довжин хвиль. Це наближення можна назвати борн-кулонівським. Відзначимо, що спектральна залежність одержаних у цьому наближенні перерізів фотойонізації від енергії фотоелектрона в загальних рисах близька до вимірної в експериментах із зіткнення електронів з атомами водню [27, 28]. Використання одержаних таким способом перерізів приводить до спектральної залежності нормованого ефективного перерізу фотойонізації, близької до спостережуваних даних для Сонця.

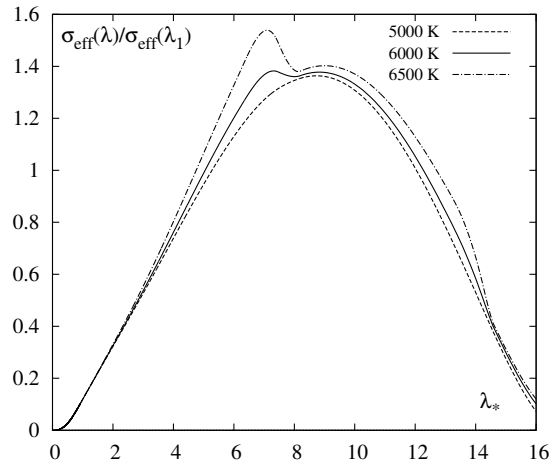


Рис. 11. Спектральна залежність відносного ефективного поперечного перерізу при різних температурах фотосфери ($n_* = 10^{-10}$).

Рис. 11 зображає зміну спектральної залежності нормованого ефективного поперечного перерізу зі зміною температури фотосфери. Представлені криві відповідають фіксованій концентрації баріонів ($n_* = 10^{-10}$) і температурам 5000 K, 6000 K, 6500 K. Як видно з рисунка, вплив процесів фотойонізації збуджених атомів збільшується зі зростанням температури, що пояснюється збільшенням концентрації цих атомів.

Відповідність між розрахованим нормованим ефективним перерізом і спостережуваними даними для Сонця можна розглядати як астрофізичне підтвердження запропонованої моделі фотойонізації атомів водню в частково йонізованій плазмі.

ДОДАТОК 1

Функції $J_{0,2}^{1s}(k)$ та $J_{1,2}^{\sigma}(k)$ зображаються такими співвідношеннями:

$$\begin{aligned} J_{0,2}^{1s}(k) &= -\frac{\pi}{2} k^2 f_{1s}(k, k) \left\{ \frac{\alpha}{(1+\beta)^3} (\alpha^2 + k^2)^{-2} + \frac{\beta}{(1+\alpha)^3} (\beta^2 + k^2)^{-2} \right\}; \\ J_{0,2}^{2s}(k) &= 0 \quad \text{при} \quad k \leq \frac{\sqrt{3}}{2}; \\ J_{0,2}^{2s}(k) &= \frac{\pi}{2} q_0^2(k) \left\{ \frac{\alpha(\beta-1)}{(\frac{1}{2}+\beta)^4 (\alpha^2 + q_0^2(k))^2} + \frac{\beta(\alpha-1)}{(\frac{1}{2}+\alpha)^4 (\beta^2 + q_0^2(k))^2} \right\} f_{2s}(k, q_0(k)); \\ k > \frac{\sqrt{3}}{2}, q_0(k) &= (k^2 - 3/4)^{1/2}. \end{aligned} \tag{81}$$

$$\begin{aligned} J_{1,2}^{1s}(k) &= \frac{\pi k^2}{2} \frac{1}{(\gamma_1^2 + k^2)^3} f_{1s}(k, k); \\ J_{1,2}^{2s}(k) &= 0 \quad \text{при} \quad k \leq \frac{\sqrt{3}}{2}; \\ J_{1,2}^{2s}(k) &= \frac{\pi}{2} q_o^2(k) \frac{1}{(\gamma_1^2 + q^2)^3} f_{2s}(k, q_o(k)); k > \frac{\sqrt{3}}{2}, q_o(k) = (k^2 - 3/4)^{1/2}. \end{aligned} \tag{82}$$

Тут використано такі позначення:

$$\begin{aligned} f_{1s}(k_*, q_*) &\equiv \int_{-1}^1 dt t \tilde{V}_{1s}(\mathbf{k}_*, \mathbf{q}_* | t) = (k_* q_*)^{-1} \left\{ 1 - \frac{k_*^2 + q_*^2}{4k_* q_*} \ln \frac{1 + \frac{1}{4}(k_* + q_*)^2}{1 + \frac{1}{4}(k_* - q_*)^2} \right. \\ &\quad \left. - \left[1 + \frac{1}{4}(k_*^2 + q_*^2) \right] \left[1 + \frac{1}{4}(k_* + q_*)^2 \right]^{-1} \left[1 + \frac{1}{4}(k_* - q_*)^2 \right]^{-1} \right\} + \frac{8}{3} a_1^{1s}(k_*, q_*); \\ f_{2s}(k_*, q_*) &\equiv \int_{-1}^1 dt t \tilde{V}_{2s}(\mathbf{k}_*, \mathbf{q}_* | t) = 16\sqrt{2} k_* q_* \left\{ \frac{9}{4} + (k_* + q_*)^2 \right\}^{-2} \left\{ \frac{9}{4} + (k_* - q_*)^2 \right\}^{-2} + \frac{8}{3} a_1^{2s}(k_*, q_*). \end{aligned}$$

Функції $I_{0,2}^{\sigma}(k)$, $I_{1,2}^{\sigma}(k)$ розраховані чисельно й апроксимовані такими виразами:

$$I_{0,2}^{1s}(k) \cong \left\{ \sum_{i=0}^7 d_i^{1s} k^i \right\}^{-1} \sum_{i=1}^4 c_i^{1s} k^i;$$

$$c_1 = -0.27961, \quad c_2 = -0.174374, \quad c_3 = 0.896962, \quad c_4 = -0.334049,$$

$$d_0 = 3.18625, \quad d_1 = -7.65579, \quad d_2 = 23.5982, \quad d_3 = -10.1513,$$

$$d_4 = -12.8213, \quad d_5 = 28.3342, \quad d_6 = -13.0526, \quad d_7 = 3.41433.$$

$$I_{0,2}^{2s}(k) \cong \left\{ \sum_{i=0}^8 d_i^{2s} k^i \right\}^{-1} \sum_{i=1}^5 c_i^{2s} k^i;$$

$$c_1 = 0.772822, \quad c_2 = -2.69749, \quad c_3 = 3.54126, \quad c_4 = -2.15752,$$

$$c_5 = 0.504674, \quad d_0 = 3.11471, \quad d_1 = -11.2358, \quad d_2 = 27.0674, \quad d_3 = -21.9333,$$

$$d_4 = -12.8262, \quad d_5 = 16.1737, \quad d_6 = 12.9162, \quad d_7 = -17.8086, \quad d_8 = 5.18957.$$

$$I_{1,2}^{1s}(k) \cong \left\{ \sum_{i=1}^6 s_i^{1s} k^i \right\}^{-1} \sum_{i=1}^7 m_i^{1s} k^i;$$

$$s_1 = 0.000427837, \quad s_2 = 0.113085, \quad s_3 = -0.21373, \quad s_4 = 0.106589, \quad s_5 = -0.0153609,$$

$$s_6 = 0.000770492, \quad m_1 = 2.85504, \quad m_2 = -10.3512, \quad m_3 = 21.099,$$

$$m_4 = -22.7228, \quad m_5 = 15.1263, \quad m_6 = -5.26053, \quad m_7 = 1.06851.$$

$$I_{1,2}^{2s}(k) \cong \left\{ \sum_{i=0}^4 s_i^{1s} k^i \right\}^{-1} \sum_{i=0}^7 m_i^{1s} k^i;$$

$$s_1 = -0.0333145, \quad s_2 = 0.0732624, \quad s_3 = -0.0394092, \quad s_4 = 0.00264078,$$

$$m_o = 0.558783, \quad m_1 = -2.18069, \quad m_2 = 7.62269, \quad m_3 = -7.13102,$$

$$m_4 = -7.12865, \quad m_5 = 15.6626, \quad m_6 = -9.01559, \quad m_7 = 1.84959.$$

ДОДАТОК 2

Поперечні перерізи фотойонізації збуджених станів атома водню, розраховані відповідно до роботи [14]:

$$\tilde{\sigma}_{3,0}^+(\lambda) = 3f_3(\lambda_*) \left(\frac{\lambda_*}{9}\right)^4 \frac{2^8 3^4}{3} \frac{1}{1+8\frac{\lambda_*}{9}} \left\{ 1 + \frac{28}{3} \frac{\lambda_*}{9} + \frac{32}{3} \left(\frac{\lambda_*}{9}\right)^2 \right\}^2;$$

$$\tilde{\sigma}_{3,1}^+(\lambda) = 3f_3(\lambda_*) \left(\frac{\lambda_*}{9}\right)^4 2^{14} \left\{ 1 + 8\frac{\lambda_*}{9} \right\} \left(\frac{\lambda_*}{9}\right)^5 \left\{ 1 + \frac{5}{4} \frac{\lambda_*}{9} \right\}; \quad (83)$$

$$\tilde{\sigma}_{3,1}^-(\lambda) = 3f_3(\lambda_*) (x_n)^5 2^{11} \{1 + 2x_n\}^2;$$

$$\tilde{\sigma}_{3,2}^+(\lambda) = 3f_3 \left(\frac{\lambda_*}{9}\right)^6 \frac{2^{15} 3^2}{25} \left\{ 1 + 8\frac{\lambda_*}{9} \right\} \left(1 + \frac{5}{4} \frac{\lambda_*}{9} \right);$$

$$\tilde{\sigma}_{3,2}^-(\lambda) = 3f_3(\lambda_*) \left(\frac{\lambda_*}{9}\right)^6 \frac{2^{12} 3}{25} \left(1 + 8\frac{\lambda_*}{9} \right);$$

$$\tilde{\sigma}_{4,0}^+(\lambda) = 4f_4(\lambda_*) \left(\frac{\lambda_*}{16}\right)^4 \frac{2^8 4^4}{3} \frac{1}{1+15\frac{\lambda_*}{16}} \left\{ 1 + \frac{114}{6} \frac{\lambda_*}{16} + \frac{376}{6} \left(\frac{\lambda_*}{16}\right)^2 + 40 \left(\frac{\lambda_*}{16}\right)^3 \right\}^2;$$

$$\tilde{\sigma}_{4,1}^+(\lambda) = 4f_4(\lambda_*) \left(\frac{\lambda_*}{16}\right)^5 \frac{2^{19}}{3^3} 5 \frac{1+15\frac{\lambda_*}{16}}{1+3\frac{\lambda_*}{16}} \left\{ 1 + \frac{19}{5} \frac{\lambda_*}{16} + \frac{12}{5} \left(\frac{\lambda_*}{16}\right)^2 \right\}^2;$$

$$\begin{aligned}\tilde{\sigma}_{4,1}^{-}(\lambda) &= 4f_4\lambda_* \left(\frac{\lambda_*}{9}\right)^5 \frac{2^{16}5}{3^3} \left(1 + \frac{28\lambda_*}{5\cdot 16} + \frac{24}{5} \left(\frac{\lambda_*}{16}\right)^2\right)^2; \\ \tilde{\sigma}_{4,2}^{+}(\lambda) &= 4f_4\lambda_* \left(\frac{\lambda_*}{16}\right)^6 \frac{2^{18}3^2}{25} \left\{1 + 3\frac{\lambda_*}{16}\right\} \left(1 + 15\frac{\lambda_*}{16}\right) \left(1 + \frac{7\lambda_*}{9\cdot 16}\right)^2; \\ \tilde{\sigma}_{4,2}^{-}(\lambda) &= 4f_4\lambda_* \left(\frac{\lambda_*}{16}\right)^6 \frac{2^{19}}{3\cdot 25} \left(1 + 15\frac{\lambda_*}{16}\right) \left(1 + \frac{4\lambda_*}{3\cdot 16}\right)^2; \\ \tilde{\sigma}_{4,3}^{+}(\lambda) &= 4f_4\lambda_* \left(\frac{\lambda_*}{16}\right)^7 \frac{2^{25}}{3\cdot 5\cdot 49} \left\{1 + 3\frac{\lambda_*}{16}\right\} \left(1 + 15\frac{\lambda_*}{16}\right) \left(1 + \frac{7\lambda_*}{9\cdot 16}\right) \left(1 + \frac{2\lambda_*}{3\cdot 16}\right)^2; \\ \tilde{\sigma}_{4,3}^{-}(\lambda) &= 4f_4\lambda_* \left(\frac{\lambda_*}{16}\right)^7 \frac{2^{22}}{3^2\cdot 5\cdot 49} \left(1 + 3\frac{\lambda_*}{16}\right) \left(1 + 15\frac{\lambda_*}{16}\right).\end{aligned}$$

Функції $f_n(\lambda_*)$ визначені такими співвідношеннями:

$$\begin{aligned}f_n(\lambda_*) &= \frac{2\pi}{1 - e^{-r_n(\lambda_*)}} \exp[-s_n(\lambda_*)], \\ s_n(\lambda_*) &= \frac{2}{\pi} r_n(\lambda_*) \arctan\left(\frac{2\pi n}{r_n(\lambda_*)}\right), \\ r_n(\lambda_*) &= \frac{2\pi n(\lambda_*/n^2)^{1/2}}{(1 - \lambda_*/n^2)^{1/2}}.\end{aligned}\tag{84}$$

При цьому для заданого квантового числа n область зміни довжин хвиль визначається рівністю $0 \leq \lambda_* \leq n^2$ ($0 \leq x_n \leq 1$).

-
- [1] С. Чандрасекхар, *Перенос лучистой энергии* (Иностранная литература, Москва, 1953).
 [2] R. Wildt, *Astrophys. J.* **89**, 295 (1939); **90**, 611 (1939).
 [3] R. Wildt, *Astrophys. J.* **93**, 47 (1941).
 [4] Г. С. Бисноватый-Коган, *Физические вопросы теории звездной эволюции* (Наука, Москва, 1989).
 [5] S. J. Smith, D. S. Burch, *Phys. Rev.* **116**, 5 (1959).
 [6] S. Chandrasekhar, *Astrophys. J.* **100**, 176 (1944).
 [7] S. Chandrasekhar, F. H. Breen, *Astrophys. J.* **104**, 430 (1946).
 [8] S. Geltman, *Phys. Rev.* **136**, 935 (1962).
 [9] T. L. John, *Astron. Astrophys.* **193**, 189 (1988).
 [10] A. R. P. Rau, *J. Astrophys. Astr.* **17**, 113 (1996).
 [11] S. Cohen, H. C. Bryant *Rev. Mex. Astron. Astrophys.* (Ser. Conf.) **9**, 148 (2000).
 [12] L. Chuzhoy, M. Kuhlen, P. R. Shapiro, *Astrophys. J.* **665**, L85 (2007).
 [13] H. Sadeghpour, P.C. Stancil, B.M. McLaughlin, A. Dalgarno, R. C. Forrey, *Astrophys. J.* **43** (2011).
 [14] W. J. Karzas, R. Latter, *Astrophys. J. Suppl.* **6**, 167 (1961).
 [15] М. В. Ваврух, О. М. Стельмах, С. В. Смеречинський, *Журн. фіз. досл.* **13**, 3902 (2009).
 [16] М. В. Ваврух, В. Б. Солов'ян, *Укр. фіз. журн.* **36**, 630 (1991).
 [17] У. Харрисон, *Теория твердого тела* (Мир, Москва, 1972).
 [18] J. F. Hart, G. Herzberg, *Phys. Rev.* **106**, 79 (1957).
 [19] C. Schwartz, *Phys. Rev.* **123**, 1700 (1961).
 [20] H. Schull, P.-O. Löwdin, *J. Chem. Phys.* **25**, 1035 (1956).
 [21] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (Наука, Москва, 1971).
 [22] C. L. Pekeris, *Phys. Rev.* **126**, 1470 (1962).
 [23] М. В. Ваврух, О. М. Стельмах, *Вісн. Львів. ун-ту. Сер. фіз.* **47**, 3 (2012).
 [24] І. О. Вакарчук, *Теорія зоряних спектрів*, (ЛНУ імені Івана Франка, Львів, 2002).
 [25] H. A. Kramers, *Phil. Mag.* **46**, 836 (1923).
 [26] J. A. Gaunt, *Phil. Trans. R. Soc. London* **229**, 163 (1930).
 [27] В. Файт, в *Атомные и молекулярные процессы*, под ред. Д. Р. Бейтса (Мир, Москва, 1964), с. 367.
 [28] Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков, *Возбуждение атомов и уширение спектральных линий* (Наука, Москва, 1979).

**THE CROSS-SECTIONS OF THE MAIN PROCESSES THAT FORMS THE CONTINUOUS
ABSORPTION COEFFICIENT IN THE PHOTOSPHERE OF SUN-LIKE STARS**

M. V. Vavrukh, O. M. Stelmakh
*Ivan Franko National University of Lviv, Department of Astrophysics,
8, Kyryla i Mefodija St., Lviv, UA-79005, Ukraine*

The spectral features of the effective relative cross-section for the negative hydrogen ion photoionization in the Solar photosphere near the maximum ($\lambda \sim 8200 \text{ \AA}$) were explained for the first time in the frames of quantum-mechanical calculations of the main low energy processes of the photon-matter interaction, which forms the absorption coefficient in G-class stars. On the basis of the suggested basic-variative approach the ions H^- photoionization cross-section is calculated. The hypothesis about the peculiarities of the neutral hydrogen atom photoionization in an environment of partially ionized plasma is suggested. This leads to the spectral dependence of the cross-section different from the conventional one in the vicinity of the treshold wavelength.