

УДК 523.9-47, 524.3-6
PACS 95.30.-k, 95.30.Cq, 96.60.-j, 97.10.Ex

ПОПЕРЕЧНИЙ ПЕРЕРІЗ ФОТОЙОНІЗАЦІЇ ВІД'ЄМНИХ ЙОНІВ ВОДНЮ

М. Ваврух, О. Стельмах

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

На основі базисного квантовомеханічного підходу розраховано спектральну залежність поперечного перерізу фотойонізації від'ємних йонів водню. Досліджено роль обмінних міжелектронних кореляцій у цьому процесі. Виконано порівняння з розрахунками інших авторів, а також зі спостережуваними даними для Сонця.

Ключові слова: хвильова функція та енергія йона H^- , поперечний переріз фотойонізації H^- , сили осциляторів, електростатичні і обмінні кореляції.

1 Вступ

Однією з основних характеристик, що фігурує в теорії перенесення випромінювання у фотосферах зір, є коефіцієнт поглинання. Розрізняють коефіцієнт поглинання у спектральних лініях, або ж у континуумі (коефіцієнт неперервного поглинання). У мікроскопічному підході коефіцієнт поглинання розраховується або в рамках кінетичного рівняння для фотонів, або шляхом обчислення перерізів розсіяння фотонів на атомних об'єктах (електронах, атомах, йонах, молекулах). В обох випадках необхідна інформація про ступінь йонізації середовища та концентрації частинок. Слід відзначити, що теорія коефіцієнта поглинання у неперервному спектрі розроблена у значно меншій мірі, ніж коефіцієнта поглинання в лініях. Така ситуація зумовлена необхідністю врахування значної кількості різних елементарних процесів взаємодії фотонів з атомними об'єктами. Відзначимо також, що коефіцієнт неперервного поглинання є повільно змінною функцією довжини хвилі.

З аналізу спектру Сонця випливає, що в області довжин хвиль від 4000Å до 9000Å коефіцієнт неперервного поглинання зростає приблизно у два рази, при дальшому збільшенні довжини хвилі він зменшується, досягаючи чітко вираженого мінімуму при $\lambda \approx 16 \cdot 10^3\text{Å}$, а далі знову зростає. Така поведінка коефіцієнта неперервного поглинання виявлена Е.Мілном ще у 1922 році (див.[1]). Аналіз результатів спектروفотометричних спостережень, а також даних відносно кольору та ефективних температур зір свідчать про те, що аналогічна поведінка коефіцієнта неперервного

поглинання характерна для зір з ефективними температурами $4 \cdot 10^3 - 10^4 \text{ K}$. Пошук механізмів, що формують коефіцієнт неперервного поглинання у видимій та інфрачервоній ділянках спектру, був однією з головних задач астрофізики 20-го століття.

Р.Вільдт [2, 3] обґрунтував ідею про те, що джерелом неперервного поглинання в атмосфері Сонця у видимій та ближній інфрачервоній областях можуть бути негативні йони водню: атмосфера складається переважно з атомів нейтрального водню, наявність "вільних" електронів забезпечується багатоелектронними атомами інших хімічних елементів (що легше йонізуються), тому створюються сприятливі умови для утворення йонів H^- . Оскільки потенціал йонізації негативного йона водню складає $0,0555... Ry \approx 0,75 \text{ еВ}$, то фотойонізація цих йонів може забезпечити неперервне поглинання в області довжин хвиль $\lambda \leq 16,5 \cdot 10^3 \text{ \AA}$. В інфрачервоній області спектру важливу роль відіграє механізм розсіяння фотонів на "вільних" електронах, який маскує парціальний внесок йонів H^- в області мінімуму коефіцієнта поглинання. Негативні йони інших хімічних елементів теж беруть участь у формуванні коефіцієнта поглинання в інфрачервоній і видимій ділянках спектру, тим більше, що для багатьох із них потенціал йонізації (у вакуумі) ще менший, ніж для йона H^- ($0,045 Ry$ для літію, $0,040 Ry$ для натрію, $0,036 Ry$ для калію). Однак концентрація атомів важких хімічних елементів є мізерною порівняно з концентрацією водню, тому вплив негативних йонів цих елементів є незначним.

Перші коректні розрахунки коефіцієнта неперервного поглинання при врахуванні фотойонізації йонів H^- (з утворенням атома водню в основному стані) та поглинання фотонів "вільними" електронами були виконані у роботах [4, 5]. При деяких додаткових припущеннях це дозволило якісно пояснити відомі на той час спостережувані дані для Сонця. У пізніших роботах було виконано чисельні розрахунки поперечного перерізу реакції фотойонізації йона H^- з використанням багатопараметричних варіаційних функцій [6-8]. Співставлення одержаних результатів із спостережуваними даними для Сонця утруднене тим, що в області мінімуму коефіцієнта поглинання важко виділити зі спостережуваних даних парціальний внесок фотойонізації йонів H^- .

Проблема дослідження коефіцієнта неперервного поглинання залишається актуальною і зараз, про що свідчать роботи [9-11]. Тепер накопичено спостережувані дані про коефіцієнт неперервного поглинання Сонця та інших зір у різних областях оптичного спектру, а тому розрахунки спектральної, температурної та концентраційної залежності коефіцієнта поглинання фотосфер для зір різних спектральних класів у рамках мікроскопічної теорії є однією з актуальних задач астрофізики з таких причин: у переважній більшості робіт враховуються лише два механізми – фотойонізація йонів водню та поглинання фотонів „вільними“ електронами; використовується наближення локальної термодинамічної рівноваги на основі простих співвідношень Саха; розрахунки проводяться в основному для Сонця та зір з низькими ефективними температурами фотосфер; є суттєві розбіжності результатів різних авторів.

Задача про розрахунок коефіцієнта неперервного поглинання має два аспекти – квантовомеханічний і статистичний. Квантовомеханічний аспект зводиться до розрахунку поперечних перерізів процесів взаємодії фотонів з мікроскопічними об'єктами (електронами, атомами, позитивними і негативними йонами, молекулами). Розрахунок концентрацій відповідних мікрооб'єктів у частково йонізованій плазмі фотосфер складає статистичний аспект задачі. У цій роботі на основі першопринци-

пних квантовомеханічних розрахунків нами досліджено поперечний переріз процесу фотойонізації йона H^- без використання феноменологічних параметрів та модельних уявлень.

2 Базисно-варіаційний опис стану йона H^-

Базисний підхід, запропонований у роботі [12] для опису електронної підсистеми в об'єктах, де можуть співіснувати локалізовані і делокалізовані стани, ґрунтується на використанні спеціальних одночастинкових базисів (повних ортонормованих систем) хвильових функцій. У теорії зіткнень та атомних кореляцій природно використовувати базиси типу

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

де $\Phi_j(\mathbf{r})$ – ортонормовані одночастинкові локалізовані хвильові функції об'єкта ($1 \leq j \leq n$), а асимптотика функції $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ на нескінченності збігається з плоскою хвилею $\varphi_{\mathbf{k}}^{(o)}(\mathbf{r}) = V^{-1/2} \exp(i(\mathbf{k}, \mathbf{r}))$. Базиси $\{\varphi_\sigma(\mathbf{r})\}$ та $\{\varphi_{\mathbf{k}}^{(o)}(\mathbf{r})\}$ пов'язані канонічним перетворенням

$$\varphi_\sigma(\mathbf{r}) = \hat{U}(\mathbf{r})\varphi_{\mathbf{k}}^{(o)}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

де $\hat{U}(\mathbf{r})$ – унітарний оператор ($\hat{U}^+\hat{U} = \hat{I}$), який діє на функції змінної \mathbf{r} і визначається набором функцій, що належать до підпростору $\{\Phi_j(\mathbf{r})\}$. Асимптотика $\hat{U}(\mathbf{r})$ при $r \gg r_o$ (де r_o – „розміри“ об'єкта) збігається з одиничним оператором \hat{I} завдяки експоненційному характеру функцій $\Phi_j(\mathbf{r})$. У ролі $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ можна використати так звані ортогоналізовані плоскі хвилі

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \left\{ \exp(i(\mathbf{k}, \mathbf{r})) - \sum_j \Phi_j^*(\mathbf{k})\Phi_j(\mathbf{r}) \right\}, \quad (3)$$

які за побудовою ортогональні до всіх функцій підпростору $\{\Phi_j(\mathbf{r})\}$ (тут $\Phi_j(\mathbf{k})$ – фур'є-зображення $\Phi_j(\mathbf{r})$). У цьому випадку

$$\hat{U}(\mathbf{r}) \approx 1 - \hat{P}(r) = 1 - \sum_j |\Phi_j(\mathbf{r})\rangle \langle \Phi_j(\mathbf{r})|. \quad (4)$$

Неортогональність функцій із підпростору $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ має порядок $\frac{N}{V}r_o^3$ і є малою величиною у випадку, коли концентрація силових центрів $\frac{N}{V}$, на яких реалізуються локалізовані стани електронів, є малою.

Згідно з ідеєю базисного підходу координатну частину хвильової функції системи двох електронів у полі протона представимо у вигляді білінійного розкладу за базисом одночастинкових функцій

$$\psi_c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} a_{\sigma_1, \sigma_2} \varphi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2) \quad (5)$$

з невідомими коефіцієнтами a_{σ_1, σ_2} . Як відомо, в йоні H^- реалізується синглетний стан електронів, тому функція $\psi_c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ є симетричною відносно перестановки $\mathbf{r}_1 \rightleftharpoons \mathbf{r}_2$, внаслідок чого $a_{\sigma_1, \sigma_2} = a_{\sigma_2, \sigma_1}$.

Підставляючи розклад (5) у рівняння Шредингера

$$\begin{aligned}\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\psi_c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= E\psi_c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \\ \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \hat{h}(\mathbf{r}_1) + \hat{h}(\mathbf{r}_2) + e^2|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1}, \quad \hat{h}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r},\end{aligned}\quad (6)$$

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

$$\begin{aligned}\sum_{\sigma'_1, \sigma'_2} \left\{ a_{\sigma'_1, \sigma'_2} H_{\sigma_2, \sigma_1 | \sigma'_1, \sigma'_2} - E \delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \delta_{\sigma_2, \sigma'_2} \right\} &= 0, \\ H_{\sigma_2, \sigma_1 | \sigma'_1, \sigma'_2} &= \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_{\sigma_2}^*(\mathbf{r}_2) \varphi_{\sigma_1}^*(\mathbf{r}_1) \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \varphi_{\sigma'_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\sigma'_2}(\mathbf{r}_2).\end{aligned}\quad (7)$$

Введемо деяку допоміжну функцію $\psi^{(o)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, що є близькою до шуканого розв'язку рівняння (6), і представимо її також у вигляді розкладу за базисними функціями

$$\psi^{(o)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} S_{\sigma_1, \sigma_2} \varphi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2).\quad (8)$$

Коефіцієнти цього розкладу

$$S_{\sigma_1, \sigma_2} = \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_{\sigma_1}^*(\mathbf{r}_1) \varphi_{\sigma_2}^*(\mathbf{r}_2) \psi^{(o)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\quad (9)$$

відіграють роль 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 (7) до системи неоднорідних рівнянь

$$\begin{aligned}\sum_{\sigma'_1, \sigma'_2} \alpha_{\sigma'_1, \sigma'_2} H_{\sigma_2, \sigma_1 | \sigma'_1, \sigma'_2} - E \alpha_{\sigma_1, \sigma_2} &= E S_{\sigma_1, \sigma_2} - H_{\sigma_1, \sigma_2}, \\ H_{\sigma_1, \sigma_2} &= \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_{\sigma_2}^*(\mathbf{r}_2) \varphi_{\sigma_1}^*(\mathbf{r}_1) \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi^{(o)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).\end{aligned}\quad (10)$$

Домножуючи кожне з рівнянь (10) на S_{σ_1, σ_2} і підсумовуючи за σ_1 і σ_2 , одержуємо рівняння для енергії йона:

$$\begin{aligned}E \sum_{\sigma_1, \sigma_2} |S_{\sigma_1, \sigma_2}|^2 &= E_0 + \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \alpha_{\sigma_1, \sigma_2} (H_{\sigma_1, \sigma_2}^* - E S_{\sigma_1, \sigma_2}^*), \\ E_0 &= \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \left(\psi^{(o)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right)^* \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi^{(o)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).\end{aligned}\quad (11)$$

При цьому $\sum_{\sigma_1, \sigma_2} |S_{\sigma_1, \sigma_2}|^2 = 1$ для випадку нормованої функції $\psi^{(o)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$.

Вважаючи $\alpha_{\sigma_1, \sigma_2}$ малими величинами, розв'язуватимемо систему рівнянь (10) наближено. У першому порядку теорії збурень

$$\alpha_{\sigma_1, \sigma_2}^{(1)} = -\frac{H_{\sigma_1, \sigma_2} - E_0 S_{\sigma_1, \sigma_2}}{H_{\sigma_2, \sigma_1 | \sigma_1, \sigma_2} + (1 - \delta_{\sigma_1, \sigma_2}) H_{\sigma_2, \sigma_1 | \sigma_2, \sigma_1} - E_0},\quad (12)$$

чому відповідає такий вираз для енергії

$$E = E_0 + \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \Delta E_{\sigma_1, \sigma_2}, \quad \Delta E_{\sigma_1, \sigma_2} = \alpha_{\sigma_1, \sigma_2}^{(1)} (H_{\sigma_1, \sigma_2}^* - E_0 S_{\sigma_1, \sigma_2}^*)\quad (13)$$

і така хвильова функція

$$\psi_c^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi^{(o)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \alpha_{\sigma_1, \sigma_2}^{(1)} \varphi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2). \quad (14)$$

Очевидно, що у ролі $\psi^{(o)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ можна було б використати багатопараметричні варіаційні функції типу функцій Гарта-Герцберга [13] чи Шварца [14]. Нами сконструйована функція $\psi^{(o)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ у вигляді розкладу за ортонормованими двоелектронними хвильовими функціями

$$\psi^{(o)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{l=0}^{l_o} \Gamma_l \psi_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (15)$$

що має невелике число параметрів. При цьому $\psi_o(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ вибрана у вигляді функції Шулля-Льовдіна [15] з невідомими параметрами

$$\begin{aligned} \psi_o(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= C_o \{ e^{-\alpha\rho_1} e^{-\beta\rho_2} + e^{-\alpha\rho_2} e^{-\beta\rho_1} \}, \\ C_o &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\alpha^{3/2} \beta^{3/2} (\alpha + \beta)^3}{[(\alpha + \beta)^6 + 64\alpha^3 \beta^3]^{1/2}}, \end{aligned} \quad (16)$$

а при $l \geq 1$

$$\psi_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{(2l+1)^{1/2}}{4\pi} a_0^{-3} R_l(\rho_1) R_l(\rho_2) P_l(\cos \vartheta), \quad (17)$$

де $P_l(x)$ – поліном Лежандра l -го порядку, ϑ – кут між векторами \mathbf{r}_1 і \mathbf{r}_2 ,

$$R_l(\rho) = (2\gamma_l)^{l+3/2} [(2l+2)!]^{-1/2} \rho^l e^{-\gamma_l \rho}. \quad (18)$$

Параметри Γ_l визначаються із секулярної задачі

$$\sum_{l=0}^{l_o} \Gamma_l \{ H_{kl} - E \delta_{k,l} \} = 0, \quad 0 \leq k \leq l_o, \quad (19)$$

а параметри $\alpha, \beta, \gamma_1, \dots, \gamma_{l_o}$ є варіаційними і знаходяться з умови мінімального значення найменшого кореня рівняння

$$\| H_{kl} - E \delta_{k,l} \| = 0. \quad (20)$$

Тут H_{kl} є матричними елементами гамільтоніану, розрахованими на функціях $\psi_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$,

$$H_{kl} = \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_k^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (21)$$

Всі вони обчислюються в аналітичному вигляді. При $l_o = 3$ одержано такі значення параметрів:

$$\begin{aligned} \alpha &= 1.0384, \quad \beta = 0.3298, \quad \gamma_1 = 1.1380, \quad \gamma_2 = 1.5810, \quad \gamma_3 = 2.1050; \\ \Gamma_o &= 0.99447, \quad \Gamma_1 = -0.102258, \quad \Gamma_2 = -0.023426, \quad \Gamma_3 = -0.008372. \end{aligned} \quad (22)$$

У цьому варіанті розрахунку $E_{H^-} = -1.05239...Ry$.

В іншому варіанті функція $\psi_o(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ була вибрана у вигляді, що нагадує функцію з робіт [16-17],

$$\begin{aligned} \psi_o(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N \{ & e^{-\alpha\rho_1} + \gamma e^{-\beta\rho_1} \} \{ e^{-\alpha\rho_2} + \gamma e^{-\beta\rho_2} \} \\ & \times \left\{ 1 + c \{ \rho_1^2 + \rho_2^2 \}^{1/2} + b(\rho_1 - \rho_2)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (23)$$

Складові, що описують кутові кореляції, вибирались у такому ж вигляді, як у функції (15). При $l_o = 3$ і значеннях параметрів $\alpha = 0.848$, $\beta = 0.471$, $\gamma = 0.112$, $c = 0.259$, $b = 0.109$ енергія йона H^- складає $-1.05346...Ry$, а коефіцієнти розкладу хвильової функції є такими:

$$\Gamma_o = 0.993106, \Gamma_1 = -0.11448, \Gamma_2 = -0.02358, \Gamma_3 = -0.00892. \quad (24)$$

Розглянемо внески теорії збурень до енергії йона H^- та поправки до хвильової функції нульового наближення у варіанті (14). Оскільки функція $\psi_c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ описує локалізований стан пари електронів у полі протона, ми обмежимося набором 6 хвильових функцій атома водню

$$\{\varphi_\sigma\} \equiv (\varphi_{1s}, \varphi_{2s}, \varphi_{2p,0}, \varphi_{2p,1}, \varphi_{2p,-1}, \varphi_{3s}). \quad (25)$$

У таблиці 1 наведено коефіцієнти розкладу S_{σ_1, σ_2} , значення матричних елементів оператора двоелектронної взаємодії

$$\begin{aligned} v_{\sigma_1, \sigma_2} &= \sum_{l=0}^{l_o} v_{\sigma_1, \sigma_2}^l, \\ v_{\sigma_1, \sigma_2}^l &= \Gamma_l \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^2 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1} \varphi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (26)$$

матричні елементи гамільтоніану H_{σ_1, σ_2} (див. (10)), коефіцієнти $\alpha_{\sigma_1, \sigma_2}^{(1)}$ та внески до

Табл. 1: Коефіцієнти розкладу хвильових функцій, внески до енергії нульового наближення, матричні елементи $\tilde{H}_{ij} \equiv H_{\sigma_2, \sigma_1 | \sigma_1, \sigma_2} + (1 + \delta_{i,j}) H_{\sigma_2, \sigma_1 | \sigma_2, \sigma_1}$ ($i = \sigma_1, j = \sigma_2$)

$\sigma_1; \sigma_2$	1s; 1s	1s; 2s	1s; 3s	2s; 2s	2s; 3s	2p, 0; 2p, 0	2p, 1; 2p, -1
S_{ij}	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
$v_{ij}^{(1)}$	-0.030902	-0.000252	0.000164	-0.002357	-0.001134	-0.005854	-0.005854
$v_{ij}^{(2)}$	-0.003660	0.00028	0.0000364	-0.0003012	-0.0000942	-0.0011956	-0.0011956
$v_{ij}^{(3)}$	-0.000873	-0.000011	0.0000053	-0.0000597	-0.0000297	-0.000156	-0.000156
v_{ij}	0.730006	-0.085673	0.002973	0.004705	0.003913	0.0327614	0.0327614
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

енергії нульового наближення $\Delta E_{\sigma_1, \sigma_2}$. Як видно з таблиці, найсуттєвішими є внески станів $2p$, а їхній загальний внесок близький до $-0.003 Ry$. Внески інших станів мають порядок $10^{-5} Ry$. Акуратне підсумовування внесків теорії збурень приводить до значення $E = -1.055472... Ry$, так що відносна похибка визначення енергії йона H^- складає приблизно 0.003%. Добра збіжність матричних елементів H_{σ_1, σ_2} свідчить про те, що вибраний нами базис $\{\varphi_\sigma\}$ має цілком достатню розмірність, а збіжність v_{σ_1, σ_2}^l відносно індекса l свідчить про те, що розклад (15) також є достатнім. Поправки до функції $\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, яка не враховує кутових кореляцій, за рахунок s -станів ($1s, 2s, 3s, \dots$) є дуже малими.

Знайдена нами у базисно-варіаційному підході хвильова функція (15), що має 5 варіаційних параметрів, дає значення енергії йона H^- краще, ніж 20-параметрична хвильова функція Гарта-Герцберга [13]. Одержане значення енергії відрізняється від значення, знайденого за допомогою 70-параметричної функції Шварца [14], на величину $-1,3 \cdot 10^{-5} Ry$ і на $2,7 \cdot 10^{-5} Ry$ від результату Пекеріса, одержаного на основі 444-параметричної функції [18]. Хвильова функція (14) має просту форму, зручну для аналітичного розрахунку матричних елементів оператора імпульсу.

3 Хвильова функція кінцевого стану процесу фотойонізації

У результаті низькоенергетичної фотойонізації йона H^- утворюється атом водню в основному стані і електрон, що знаходиться у його полі і має енергію $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$. Як і хвильову функцію йона H^- , у цьому випадку координатну хвильову функцію електронів можна також зобразити білінійним розкладом за функціями базису $\{\varphi_\sigma(\mathbf{r})\}$ (з обов'язковим використанням функцій підпростору $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$), або ж розкладом

$$\Psi_{c'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma} \{\varphi_{\sigma}(\mathbf{r}_1) F_{\sigma}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_2) + \varphi_{\sigma}(\mathbf{r}_2) F_{\sigma}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_1)\}, \quad (27)$$

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

$$F_{1s}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_2) \approx \varphi_{\mathbf{k}}^{(o)}(\mathbf{r}), \quad F_{\sigma}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_2) \approx 0 \quad \text{при } \sigma \neq 1s. \quad (28)$$

Ми вибрали синглетний стан електронів, оскільки для триплетного стану матричний елемент оператора $(\hat{\mathbf{P}}_1 + \hat{\mathbf{P}}_2)$ на функціях $\Psi_c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, $\Psi_{c'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ був би рівним нулеві.

Хвильові функції $\Psi_c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ і $\Psi_{c'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ є власними функціями того самого гамільтоніана, що відповідають різним власним значенням його, тому вони є ортогональними між собою. Оскільки при наближеному розрахунку функції основного стану ми обмежились використанням локалізованих базисних функцій, тому і в формулі (27) обмежимося тими ж локалізованими функціями ($\{\sigma\} = 1s; 2s; 2p, 0; 2p, -1; 2p, 1; 3s$). З умови ортогональності $\Psi_c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ і $\Psi_{c'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ випливає вимога ортогональності невідомих $F_{\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ до базисних функцій локалізованих станів

$$\int d\mathbf{r} F_{\sigma_1}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \varphi_{\sigma_2}(\mathbf{r}) = 0 \quad (29)$$

при $\sigma_1, \sigma_2 \in \{\sigma\}$. Якби задача розрахунку функцій $\Psi_c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, $\Psi_{c'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ розв'язувалась точно, з використанням повних і ортогональних систем $\{\varphi_\sigma(\mathbf{r})\}$, то ортогональність цих функцій і умова (38) виконувались би автоматично. При наближеному розв'язанні задачі умова (29) може бути використана для оптимізації процедури знаходження коректних наближень для функцій $F_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{r})$. Підставляючи розклад (27) у рівняння Шредингера та враховуючи умову (29), одержуємо таку систему зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь для функцій $F_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \equiv F_\sigma(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} & \left\{ \hat{T} - \varepsilon_k + E_\sigma - E_1 + \nu_\sigma(\mathbf{r}) \right\} F_\sigma(\mathbf{r}) + \\ & + \varphi_\sigma(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}_2 \varphi_\sigma^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} F_\sigma(\mathbf{r}_2) = - \sum_{\sigma' (\neq \sigma)} \hat{M}_{\sigma'}(\mathbf{r}) F_{\sigma'}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (30)$$

де

$$\hat{M}_{\sigma'}(\mathbf{r}) F_{\sigma'}(\mathbf{r}) \equiv \omega_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r}) F_{\sigma'}(\mathbf{r}) + \varphi_{\sigma'}(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}_2 \varphi_\sigma^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} F_{\sigma'}(\mathbf{r}_2). \quad (31)$$

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 (30) використано такі позначення:

$$\begin{aligned} \omega_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{r}_2 \varphi_\sigma^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} \varphi_{\sigma'}(\mathbf{r}_2); \\ \nu_\sigma(\mathbf{r}) &= -\frac{e^2}{r} + \omega_{\sigma, \sigma}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (32)$$

Введемо систему функцій Гріна, що задовольняють рівняння

$$\left\{ \hat{T} - \varepsilon_k + E_\sigma - E_1 \right\} G_\sigma^{(o)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (33)$$

Використовуючи розв'язки цих рівнянь

$$G_\sigma^{(o)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\exp(i(\mathbf{q}, \mathbf{r} - \mathbf{r}'))}{\varepsilon_q - \varepsilon_k + E_\sigma - E_1}, \quad (34)$$

приведемо систему (30) до інтегральної форми:

$$\begin{aligned} F_\sigma(\mathbf{r}) &= F_\sigma^{(o)}(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}' G_\sigma^{(o)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left\{ \nu_\sigma(\mathbf{r}') F_\sigma(\mathbf{r}') \right. \\ & \left. + \varphi_\sigma(\mathbf{r}') \int d\mathbf{r}_2 \varphi_\sigma^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2|} F_\sigma(\mathbf{r}_2) + \sum_{\sigma' (\neq \sigma)} \hat{M}_{\sigma'}(\mathbf{r}') F_{\sigma'}(\mathbf{r}') \right\}. \end{aligned} \quad (35)$$

Згідно з граничними умовами задачі

$$F_{1s}^{(o)}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}^{(o)}(\mathbf{r}); \quad F_\sigma^{(o)}(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{при} \quad \sigma \neq 1s. \quad (36)$$

У відповідності до умови (29)

$$(1 - \hat{P}(\mathbf{r}))F_{\sigma}(\mathbf{r}) = F_{\sigma}(\mathbf{r}). \quad (37)$$

Використаємо цю рівність, щоб перетворити рівняння (35), а саме подіємо оператором $1 - \hat{P}(\mathbf{r})$ на ліві і праві сторони рівнянь (35). В результаті одержуємо еквівалентну систему рівнянь: при $\sigma = 1s$

$$F_{1s}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}' G_{1s}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left\{ \nu_{1s}(\mathbf{r}') F_{1s}(\mathbf{r}') + \right. \\ \left. + \varphi_{1s}(\mathbf{r}') \int d\mathbf{r}_2 \varphi_{1s}^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2|} F_{1s}(\mathbf{r}_2) + \sum_{\sigma' (\neq 1s)} \hat{M}_{\sigma'}(\mathbf{r}') F_{\sigma'}(\mathbf{r}') \right\}, \quad (38)$$

при $\sigma \neq 1s$

$$F_{\sigma}(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' G_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left\{ \nu_{\sigma}(\mathbf{r}') F_{\sigma}(\mathbf{r}') + \right. \\ \left. + \varphi_{\sigma}(\mathbf{r}') \int d\mathbf{r}_2 \varphi_{\sigma}^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2|} F_{\sigma}(\mathbf{r}_2) + \sum_{\sigma' (\neq \sigma)} \hat{M}_{\sigma'}(\mathbf{r}') F_{\sigma'}(\mathbf{r}') \right\}. \quad (39)$$

У цих рівняннях

$$G_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = (1 - \hat{P}(\mathbf{r}))G_{\sigma}^{(o)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\exp(-i(\mathbf{q}, \mathbf{r}')) \varphi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})}{\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + E_{\sigma} - E_1}. \quad (40)$$

Застосуємо до розв'язування рівнянь (38), (39) метод ітерацій. У першому борнівському наближенні одержуємо

$$F_{1s}^{(1)}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}' G_{1s}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left\{ \nu_{1s}(\mathbf{r}') \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') + \right. \\ \left. + \varphi_{1s}(\mathbf{r}') \int d\mathbf{r}_2 \varphi_{1s}^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2|} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_2) \right\} = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \chi_{1s}(\mathbf{k}|\mathbf{r}), \quad (41)$$

а при $\sigma \neq 1s$

$$F_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' G_{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left\{ \omega_{\sigma, 1s}(\mathbf{r}') \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') + \right. \\ \left. + \varphi_{1s}(\mathbf{r}') \int d\mathbf{r}_2 \varphi_{\sigma}^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2|} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_2) \right\} = \chi_{\sigma}(\mathbf{k}|\mathbf{r}), \quad (42)$$

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

Із формул (41), (42) видно, що борнівські розклади застосовні, незважаючи на те, що ми розглядаємо низькоенергетичний процес. Покажемо це на прикладі функції $F_{1s}^{(1)}(\mathbf{r})$. Дійсно, у фігурній дужці формули (41) фігурують як від'ємний хартрівський потенціал

$$\nu_{1s}(r) = -\frac{e^2}{r} \left(1 + \frac{r}{a_0} \right) e^{-2r/a_0}, \quad (43)$$

так і додатній обмінний потенціал

$$\int d\mathbf{r}_2 \varphi_{1s}(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_2). \quad (44)$$

Вони частково компенсуються, а також мають різну залежність від \mathbf{r} , тому сума цих потенціалів є знакозмінною функцією. Крім того, у $\chi_{1s}(\mathbf{k}|\mathbf{r})$, $\chi_{\sigma}(\mathbf{k}|\mathbf{r})$ матричні елементи потенціалів є малими завдяки наявності ортогоналізованих плоских хвиль $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$, $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_2)$. Тому функція $\chi_{1s}(\mathbf{k}|\mathbf{r})$ є малою порівняно з тим варіантом, коли ми використовували б рівняння (35) безпосередньо.

Плоскохвильову складову обмінного доданку у формулі (41) зобразимо у вигляді розкладу за сферичними функціями, використовуючи розклад потенціалу двоелектронної взаємодії та плоских хвиль за цими ж функціями (див. напр. [19]):

$$\begin{aligned} e^2 \varphi_{1s}(\mathbf{r}_1) \int \frac{d\mathbf{r}_2 \varphi_{1s}(\mathbf{r}_2) \varphi_{\mathbf{k}}^{(o)}(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \\ = \frac{16}{\sqrt{V}} \pi \frac{e^2}{a_o} e^{-\rho_1} \sum_{l \geq 0} \frac{i^l}{2l+1} g_l(k|\rho_1) \sum_{m=-l}^l (Y_l^m(\mathbf{k}))^* Y_l^m(\rho_1), \end{aligned} \quad (45)$$

де

$$g_l(k|\rho_1) = \int_0^{\infty} d\rho_2 \rho_2^2 e^{-\rho_2} j_l(k\rho_2) a_l(\rho_1, \rho_2), \quad (46)$$

$a_l(\rho_1, \rho_2) = \rho_{<}^l \rho_{>}^{-l-1}$, $j_l(x)$ – сферична функція Бесселя першого роду l -го порядку, а $Y_l^m(\rho)$, $Y_l^m(\mathbf{k})$ – сферичні функції у координатному просторі та просторі хвильових векторів відповідно. Домножуючи вираз (45) на $\exp(-i(\mathbf{q}, \mathbf{r}_1))$ та інтегруючи за змінною \mathbf{r}_1 , одержуємо його зображення Фур'є

$$\begin{aligned} \frac{16\pi e^2 a_o^2}{\sqrt{V}} \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} (Y_l^m(\mathbf{k}))^* Y_l^m(\mathbf{q}) a_l^{1s}(ka_o, qa_o) \\ = \frac{16\pi e^2 a_o^2}{\sqrt{V}} \sum_{l \geq 0} P_l(t) a_l^{1s}(ka_o, qa_o), \end{aligned} \quad (47)$$

де $P_l(t)$ – поліном Лежандра l -го порядку, t – косинус кута між векторами \mathbf{k} і \mathbf{q} , а множники

$$a_l^{1s}(qa_o, ka_o) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} d\rho_1 d\rho_2 \rho_1^2 \rho_2^2 e^{-(\rho_1 + \rho_2)} j_l(ka_o \rho_1) j_l(qa_o \rho_2) a_l(\rho_1, \rho_2) \quad (48)$$

виражаються в елементарних функціях при довільних l . Зокрема

$$a_0^{1s}(k, q) = \frac{2}{(1+k^2)^2} \left\{ \frac{1}{1+q^2} - \frac{6+q^2-3k^2}{16+8(q^2+k^2)+(q^2-k^2)^2} \right\}. \quad (49)$$

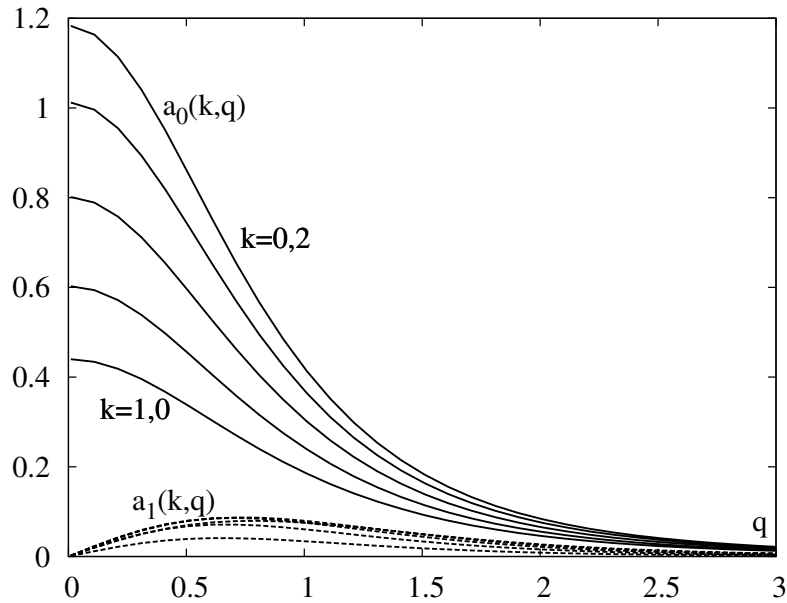


Рис. 1: Коефіцієнтні функції $a_0^{1s}(k, q)$ і $a_1^{1s}(k, q)$ у розкладі (47).

Ряд (47) є швидкозбіжним, бо коефіцієнтні функції $a_l^{1s}(qa_o, ka_o)$ зменшуються з ростом l , що ілюструє рисунок 1. При цьому функція $a_0^{1s}(qa_o, ka_o)$ зменшується при зростанні k , а функція $a_1^{1s}(qa_o, ka_o)$ – зростає.

Обмежуючись у формулі (36) доданком $\sigma = 1s$, одержуємо хартрі-фоківське наближення, яке використовувалось у серії робіт Чандрасекхара і Джона (див. [5,7]). Оскільки у цих роботах не враховувалась умова ортогональності (29), тому обмінний потенціал у такому варіанті дорівнює

$$(E_1 - \varepsilon_k) \int d\mathbf{r}_1 \varphi_{1s}^*(\mathbf{r}_1) \varphi_{\mathbf{k}}^{(o)}(\mathbf{r}_1) + \int d\mathbf{r}_1 \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \varphi_{1s}^*(\mathbf{r}_1) \varphi_{\mathbf{k}}^{(o)}(\mathbf{r}_1) \quad (50)$$

і є великою від'ємною величиною. Через те застосування борнівського наближення є незаконним і у цих роботах використовувалися розклади за парціальними хвилями, як і в більшості робіт, присвячених розрахунку поперечного перерізу фотойонізації від'ємного йона водню.

У зв'язку з тим, що у нашому підході матричні елементи сумарного потенціалу є малими, ми використовуємо борнівське наближення і перша борнівська поправка до ортогоналізованої плоскої хвилі зображається у вигляді

$$\chi_{1s}(\mathbf{k}|\mathbf{r}) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\varphi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})}{\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}} V_{1s}(\mathbf{k}, \mathbf{q}), \quad (51)$$

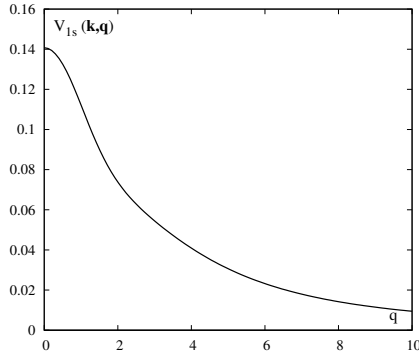


Рис. 2: Залежність матричного елемента $V_{1s}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ (в одиницях $4\pi e^2 a_o^2$) від безрозмірного хвильового числа $q = |\mathbf{q}|a_o$ при $k = |\mathbf{k}|a_o = 1$

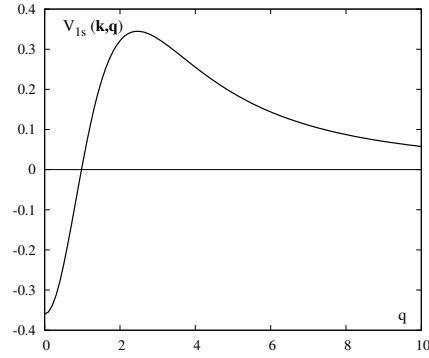


Рис. 3: Залежність матричного елемента $V_{1s}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ (в одиницях $4\pi e^2 a_o^2$) від безрозмірного хвильового числа $q = |\mathbf{q}|a_o$ при $k = |\mathbf{k}|a_o = 0.25$

де

$$V_{1s}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \nu_{1s}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \sum_{\sigma} \varphi_{\sigma}^*(\mathbf{k}) \{ \nu_{1s}^{\sigma}(-\mathbf{q}) + \omega_{1s,\sigma}^{1s}(-\mathbf{q}) \} + \quad (52)$$

$$+ 16\pi e^2 a_o^2 \sum_{l \geq 0} P_l(t) a_l^{1s}(ka_o, qa_o).$$

При цьому

$$\nu_{1s}^{\sigma}(-\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{q}, \mathbf{r})} \nu_{1s}(\mathbf{r}) \varphi_{\sigma}(\mathbf{r}); \quad (53)$$

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

Рисунок 2 ілюструє залежність матричного елемента $V_{1s}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ (в одиницях $4\pi e^2 a_o^2$) від безрозмірного хвильового числа $q = |\mathbf{q}|a_o$ при $k = |\mathbf{k}|a_o = 0.25$, а рисунок 3 – при $k = 1.0$. При цьому у формулах (52) у сумі $\sum_{\sigma} \dots$ для спрощення розрахунку враховано тільки один доданок $\sigma = 1s$, що відповідає найпростішому базису. Як видно з рисунків, матричний елемент сумарного потенціалу є малою величиною, яка при малих k є знакозмінною функцією, а при великих – додатною монотонно спадною функцією.

Як видно з формул (40), (42), борнівські поправки $\chi_{\sigma}(\mathbf{k}|\mathbf{r})$ для довільних σ можна зобразити у вигляді, аналогічному до (51), а саме

$$\chi_{\sigma}(\mathbf{k}|\mathbf{r}) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\varphi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})}{\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + E_{\sigma} - E_1} V_{\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}), \quad (54)$$

де за аналогією до формули (51) у випадку s -станів

$$\begin{aligned}
 V_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \omega_{\sigma,1s}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \sum_{\sigma_1} \varphi_{\sigma_1}^*(\mathbf{k}) \{ \omega_{\sigma_1,1s}^{\sigma_1}(-\mathbf{q}) + \omega_{\sigma_1,1s}^{1s}(-\mathbf{q}) \} \\
 &+ 16\pi e^2 a_o^2 \sum_{l \geq 0} P_l(t) a_l^\sigma(k_*, q_*), \\
 a_l^\sigma(k_*, q_*) &= \int_0^\infty \int_0^\infty d\rho_1 d\rho_2 \rho_1^2 \rho_2^2 e^{-\rho_1} \tilde{\varphi}_\sigma(\rho_2) a_l(\rho_1, \rho_2) j_l(k\rho_1) j_l(q\rho_2), \\
 \tilde{\varphi}_\sigma(\rho) &= \sqrt{\pi} a_o^{3/2} \varphi_\sigma(r).
 \end{aligned} \tag{55}$$

Коефіцієнти $a_l^\sigma(k_*, q_*)$ при $\sigma \neq 1s$ також виражаються в елементарних функціях, як і $a_l^{1s}(k_*, q_*)$.

4 Розрахунок матричних елементів оператора імпульсу

Згідно з формулами (14), (27) матричний елемент оператора імпульсу електрона для процесу фотойонізації йона H^- запишемо у такому вигляді:

$$\mathbf{P}_{c,c'}(\mathbf{k}) = \langle \Psi_c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \hat{\mathbf{p}}_1 | \Psi_{c'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle = \tag{56}$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \sum_{l \geq 0} \Gamma_l \psi_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \times \\
 &\times \sum_{\sigma} [F_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{r}_2) \nabla_1 \varphi_\sigma(\mathbf{r}_1) + \varphi_\sigma(\mathbf{r}_2) \nabla_1 F_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{r}_1)] \tag{57}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &- \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \alpha_{\sigma_1, \sigma_2}^* \varphi_{\sigma_1}^*(\mathbf{r}_1) \varphi_{\sigma_2}^*(\mathbf{r}_2) \times \\
 &\times [\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_2) \nabla_1 \varphi_{1s}(\mathbf{r}_1) + \varphi_{1s}(\mathbf{r}_2) \nabla_1 \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1)] + \dots
 \end{aligned}$$

У зв'язку із доброю збіжністю розкладів для хвильових функцій досить обмежитись складовими $\psi_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ із невеликими значеннями l . Головні внески породжуються функціями $\psi_o(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ та $\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, інші рівні нулеві завдяки тому, що інтеграли за кутовими змінними від $P_l(\cos \gamma)$, або ж від $\cos \theta_1 P_l(\cos \gamma)$ занолюються. Найбільш суттєві поправки до функції $\psi^{(o)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ за рахунок теорії збурень дають $2p$ -стани.

Враховуючи, що борнівські поправки $\chi_\sigma(\mathbf{k}|\mathbf{r})$ є малими величинами, виділимо головні доданки $\mathbf{P}_{c,c'}(\mathbf{k})$, зображаючи його у вигляді такого розкладу:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_{c,c'}(\mathbf{k}) &= \mathbf{P}_{0,1}(\mathbf{k}) + \mathbf{P}_{1,1}(\mathbf{k}) + \sum_{\sigma} \{ \mathbf{P}_{0,2}^\sigma(\mathbf{k}) + \mathbf{P}_{1,2}^\sigma(\mathbf{k}) \} + \\
 &+ \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \alpha_{\sigma_1, \sigma_2}^* \Delta \mathbf{P}_{\sigma_1, \sigma_2}(\mathbf{k}) + \dots \tag{58}
 \end{aligned}$$

Тут у перших двох членах розкладу замість функції $F_{1s}(\mathbf{k}|\mathbf{r})$ фігурує її нульове наближення – ортогоналізована плоска хвиля $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, а в інших доданках замість

$F_\sigma(\mathbf{k}|\mathbf{r})$ виступає борнівська поправка $\chi_\sigma(\mathbf{k}|\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{0,1}(\mathbf{k}) &= -\frac{i\hbar\Gamma_o}{\sqrt{2}} \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_o(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \varphi_{1s}(\mathbf{r}_2) \nabla_1 \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1); \\ \mathbf{P}_{1,1}(\mathbf{k}) &= -\frac{i\hbar\Gamma_1}{\sqrt{2}} \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \{ \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_2) \nabla_1 \varphi_{1s}(\mathbf{r}_1) + \\ &\quad + \varphi_{1s}(\mathbf{r}_2) \nabla_1 \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1) \}; \\ \mathbf{P}_{0,2}^\sigma(\mathbf{k}) &= -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \Gamma_o \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_o(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \{ \varphi_\sigma(\mathbf{r}_2) \nabla_1 \chi_\sigma(\mathbf{k}|\mathbf{r}_1) + \\ &\quad + \chi_\sigma(\mathbf{k}|\mathbf{r}_2) \nabla_1 \varphi_\sigma(\mathbf{r}_1) \}; \\ \mathbf{P}_{1,1}^\sigma(\mathbf{k}) &= -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \Gamma_1 \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \{ \varphi_\sigma(\mathbf{r}_2) \nabla_1 \chi_\sigma(\mathbf{k}|\mathbf{r}_1) + \\ &\quad + \chi_\sigma(\mathbf{k}|\mathbf{r}_2) \nabla_1 \varphi_\sigma(\mathbf{r}_1) \}. \end{aligned} \quad (59)$$

Доданки $\Delta\mathbf{P}_{\sigma_1, \sigma_2}(\mathbf{k})$ породжені поправкою до функції $\psi^o(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ (див.(14), (55)). Як видно з формул (57) та (58), детальний розрахунок матричного елемента є досить громіздким. У зв'язку з цим насамперед розрахуємо його у простішому базисі, який включає лише s -функції атома водню. У такому варіанті доданки $\mathbf{P}_{0,1}(\mathbf{k})$, $\mathbf{P}_{1,1}(\mathbf{k})$ розраховуються в аналітичному вигляді:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{0,1}(\mathbf{k}) &= 32\sqrt{2}\pi^{3/2} \left(\frac{a_o^3}{V} \right)^{1/2} \Gamma_o c_o \hbar \mathbf{k} \{ \alpha(1+\beta)^{-3} [\alpha^2 + (ka_o)^2]^{-2} + \\ &\quad + \beta(1+\alpha)^{-3} [\beta^2 + (ka_o)^2]^{-2} \}; \\ \mathbf{P}_{1,1}(\mathbf{k}) &= -128 \frac{(2\pi)^{1/2}}{\sqrt{3}} \left(\frac{a_o^3}{V} \right)^{1/2} \Gamma_1 \hbar \mathbf{k} \gamma_1^6 (1+\gamma_1)^{-4} [\gamma_1^2 + (ka_o)^2]^{-3}. \end{aligned} \quad (60)$$

Доданки $\mathbf{P}_{0,2}^\sigma(\mathbf{k})$ є однотипними. Використовуючи формулу (54), інтегруючи за векторами \mathbf{r}_1 та \mathbf{r}_2 і переходячи від суми за вектором \mathbf{q} до інтегралу, а також вводячи безрозмірні змінні $k_* = ka_o$, $q_* = qa_o$, одержуємо такий вираз:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{0,2}^\sigma(\mathbf{k}) &= -\frac{\hbar}{a_o} \Gamma_o C_o \left(\frac{a_o^3}{V} \right)^{1/2} \frac{\mathbf{k}}{k} 8\sqrt{2}\pi \int_0^\infty dq_* \frac{\mathbf{q}_*^3}{q_*^2 - k_*^2 + 1 - n_\sigma^{-2}} \times \\ &\quad \times \left(J_\sigma(\beta) \frac{\alpha}{(q_*^2 + \alpha^2)^2} + J_\sigma(\alpha) \frac{\beta}{(q_*^2 + \beta^2)^2} \right) \int_{-1}^1 dt t \tilde{V}_{1s}(\mathbf{k}_*, \mathbf{q}_*). \end{aligned} \quad (61)$$

Тут використано такі позначення

$$\begin{aligned} \tilde{V}_\sigma(\mathbf{k}_*, \mathbf{q}_*|t) &\equiv V_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \{ 4\pi e^2 a_o^2 \}^{-1}; \\ J_\sigma(\alpha) &= \pi^{-1/2} a_o^{3/2} \int d\rho \varphi_\sigma(\mathbf{r}) e^{-\alpha\rho}; \quad \rho = \mathbf{r}/a_o; \\ J_{1s}(\alpha) &= 8(1+\alpha)^{-3}; \quad J_{2s}(\alpha) = 2\sqrt{2}(\alpha-1) \left(\frac{1}{2} + \alpha \right)^{-4}; \dots, \end{aligned} \quad (62)$$

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 $\mathbf{P}_{0,2}^\sigma(\mathbf{k})$:

$$\mathbf{P}_{1,2}^\sigma(\mathbf{k}) = -\frac{\mathbf{k} \hbar \Gamma_1}{k a_o} \left(\frac{a_o^3}{V}\right)^{1/2} \gamma_1^6 S_\sigma(\gamma_1) \frac{512}{3\sqrt{\pi}} \times \int_0^\infty \frac{dq_* q_*^3}{q_*^2 - k_*^2 + 1 - n_\sigma^{-2}} (\gamma_1^2 + q_*^2)^{-3} \int_{-1}^1 dt t \hat{V}_\sigma(\mathbf{k}_*, \mathbf{q}_*|t), \quad (63)$$

де

$$S_\sigma(\gamma_1) = \sqrt{\pi} (2\gamma_1)^{-5/2} \int_0^\infty d\rho \rho^2 R_1(\rho) \frac{\partial}{\partial \rho} \varphi_\sigma(\rho); \quad (64)$$

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

В результаті інтегрування за змінною t маємо:

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

$$f_{2s}(k_*, q_*) \equiv \int_{-1}^1 dt t \tilde{V}_{2s}(\mathbf{k}_*, \mathbf{q}_*|t) = 16\sqrt{2} k_* q_* \left\{ \frac{9}{4} + (k_* + q_*)^2 \right\}^{-2} \left\{ \frac{9}{4} + (k_* - q_*)^2 \right\}^{-2} + \frac{8}{3} a_1^{2s}(k_*, q_*). \quad (65)$$

Таким чином розрахунок матричних елементів $\mathbf{P}_{0,2}^\sigma(\mathbf{k})$, $\mathbf{P}_{1,2}^\sigma(\mathbf{k})$ зводиться до обчислення однократного інтегралу, підінтегральна функція якого має полюс у точці $q_o(k) = (k^2 - 1 + n_\sigma^{-2})^{1/2}$ при умові, що $k \geq (1 - n_\sigma^{-2})^{1/2}$. Для наступного розрахунку скористаємося співвідношенням

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(q - q_o(k) - i\varepsilon)} = \frac{\mathcal{P}}{q - q_o(k)} + i\pi\delta(q - q_o(k)), \quad (66)$$

що дозволяє виділити дійсну та уявну частини у матричних елементах:

$$\mathbf{P}_{0,2}^\sigma(\mathbf{k}) = A_{0,2}^\sigma \frac{\mathbf{k}}{k} \left(\frac{a_o^3}{V}\right)^{1/2} \frac{\hbar}{a_o} \{I_{0,2}^\sigma(k) + iJ_{0,2}^\sigma(k)\}, \quad (67)$$

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

Безрозмірні інтеграли $I_{0,2}^\sigma(k)$, $I_{1,2}^\sigma(k)$ розраховані нами чисельно і представлені за допомогою апроксимант Паде, а інтеграли $J_{0,2}^\sigma(k)$, $J_{1,2}^\sigma(k)$ мають аналітичне зображення. Вирази для інтегралів $I_{0,2}^\sigma(k)$, ..., $J_{1,2}^\sigma(k)$, а також коефіцієнти $A_{0,2}^\sigma$, $A_{1,2}^\sigma$ для станів $1s$, $2s$ є такими:

$$\begin{aligned} A_{0,2}^{1s} &= 64 \Gamma_o a_o (2\pi)^{1/2}; & A_{0,2}^{2s} &= 32 \Gamma_o a_o \sqrt{\pi}; \\ A_{1,2}^{1s} &= \frac{512}{\sqrt{6\pi}} \Gamma_1 \gamma_1^6 \frac{1}{(1+\gamma_1)^4}; & A_{1,2}^{2s} &= \frac{128}{3\sqrt{\pi}} \Gamma_1 \gamma_1^6 \frac{\gamma_1 - \frac{1}{2}}{(1+\gamma_1)^5}; \end{aligned} \quad (68)$$

Безрозмірні інтеграли, що фігурують у формулах (66), мають таке зображення:

$$\begin{aligned} I_{0,2}^{1s}(k) &= - \int_0^\infty \frac{dq q^3}{q^2 - k^2} \left\{ \frac{\alpha}{(\alpha^2 + q^2)^2} (1 + \beta)^{-3} + \frac{\beta}{(\beta^2 + q^2)^2} (1 + \alpha)^{-3} \right\} \times \\ &\quad \times f_{1s}(k, q); \\ J_{0,2}^{1s}(k) &= - \frac{\pi}{4} \left\{ \frac{k^2}{1 + k^2} - \ln(1 + k^2) + \frac{16}{3} k^2 a_1^{1s}(k, k) \right\} \times \\ &\quad \times \left\{ \frac{\alpha}{(1 + \beta)^3} (\alpha^2 + k^2)^{-2} + \frac{\beta}{(1 + \alpha)^3} (\beta^2 + k^2)^{-2} \right\}; \end{aligned} \quad (69)$$

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

$$\begin{aligned} c_1 &= -0.27961, & c_2 &= -0.174374, & c_3 &= 0.896962, & c_4 &= -0.334049, \\ d_o &= 3.18625, & d_1 &= -7.65579, & d_2 &= 23.5982, & d_3 &= -10.1513, \\ d_4 &= -12.8213, & d_5 &= 28.3342, & d_6 &= -13.0526, & d_7 &= 3.41433. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_{0,2}^{2s}(k) &= \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{dq q^3}{q^2 - k^2 + \frac{3}{4}} \left\{ \frac{\alpha(\beta - 1)}{(\alpha^2 + q^2)^2 (\frac{1}{2} + \beta)^4} + \frac{\beta(\alpha - 1)}{(\beta^2 + q^2)^2 (\frac{1}{2} + \alpha)^4} \right\} \times \\ &\quad \times f_{2s}(k, q); \end{aligned} \quad (70)$$

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

$$\begin{aligned} c_1 &= 0.772822, & c_2 &= -2.69749, & c_3 &= 3.54126, & c_4 &= -2.15752, \\ c_5 &= 0.504674, & d_o &= 3.11471, & d_1 &= -11.2358, & d_2 &= 27.0674, & d_3 &= -21.9333, \\ d_4 &= -12.8262, & d_5 &= 16.1737, & d_6 &= 12.9162, & d_7 &= -17.8086, & d_8 &= 5.18957. \end{aligned}$$

$$J_{0,2}^{2s}(k) = 0 \quad \text{при} \quad k \leq \frac{\sqrt{3}}{2}; \quad (71)$$

$$\begin{aligned} J_{0,2}^{2s}(k) &= \frac{\pi}{2} q_o^2(k) \left\{ \frac{\alpha(\beta - 1)}{(\frac{1}{2} + \beta)^4 (\alpha^2 + q_o^2(k))^2} + \frac{\beta(\alpha - 1)}{(\frac{1}{2} + \alpha)^4 (\beta^2 + q_o^2(k))^2} \right\} \times \\ &\quad \times f_{2s}(k, q_o(k)) \end{aligned}$$

при $k > \frac{\sqrt{3}}{2}$, де $q_o(k) = (k^2 - 3/4)^{1/2}$;

$$I_{1,2}^{1s}(k) = \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{dq q^3}{q^2 - k^2} \frac{1}{(\gamma_1^2 + q^2)^3} f_{1s}(k, q); \quad (72)$$

$$J_{1,2}^{1s}(k) = \frac{\pi k^2}{2} \frac{1}{(\gamma_1^2 + k^2)^3} f_{1s}(k, k);$$

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

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

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

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

$$I_{1,2}^{2s}(k) = \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{dq q^3}{q^2 - k^2 + \frac{3}{4}} \frac{1}{(\gamma_1^2 + q^2)^3} f_{2s}(k, q), \quad (73)$$

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

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

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

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

$$J_{1,2}^{2s}(k) = 0 \quad \text{при} \quad k \leq \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad (74)$$

$$J_{1,2}^{2s}(k) = \frac{\pi}{2} q_o^2(k) \frac{1}{(\gamma_1^2 + q_o^2)^3} f_{2s}(k, q_o(k))$$

при $k > \frac{\sqrt{3}}{2}$, де $q_o(k) = (k^2 - 3/4)^{1/2}$.

5 Спектральна залежність поперечного перерізу фотойонізації йонів H^-

Для зручності наступних розрахунків виділимо у матричному елементі $\mathbf{P}_{c,c'}(\mathbf{k})$ безрозмірний множник,

$$\mathbf{P}_{c,c'}(\mathbf{k}) = e_3 \frac{\hbar}{a_o} \left(\frac{a_o^3}{V} \right)^{1/2} p_{c,c'}(k). \quad (75)$$

Як видно з формул (59) – (66), $p_{c,c'}(k)$ є безрозмірною комплексною скалярною функцією безрозмірного хвильового числа $k = |\mathbf{k}|a_o$. Згідно з формулою (5) сила осцилятора записується у вигляді

$$f_{c,c'}(\mathbf{k}) = \frac{16}{3}[k^2 + \Delta\varepsilon]^{-1} \frac{a_o^3}{V} |p_{c,c'}(k)|^2, \quad (76)$$

де $\Delta\varepsilon$ – потенціал йонізації йона H^- у рідбергах. Точність розрахунку сил осцилятора визначається вибором хвильових функцій початкового і кінцевого стану. Через це доцільно виконати тестування розрахунку $p_{c,c'}(k)$ за правилом сум (теоремою Томаса-Райхе-Куна) (див.[20]). У нашому випадку сума сил осцилятора процесу фотойонізації зводиться до виразу

$$F = \sum_{\mathbf{k}} f_{c,c'}(\mathbf{k}) = \frac{8}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{dk \cdot k^2}{k^2 + \Delta\varepsilon} |p_{c,c'}(k)|^2. \quad (77)$$

У таблиці 2 наведено зміну значень F при послідовному врахуванні доданків $\mathbf{P}_{0,1}$, $\mathbf{P}_{1,1}$, $\mathbf{P}_{0,2}^\sigma$, $\mathbf{P}_{1,2}^\sigma$. Відзначимо, що у роботі [6], 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 (при яких атом водню переходить у збуджений стан) повинна виконуватись рівність $F = 2$. Одержаний нами результат для суми сил осциляторів, як і результат роботи [6], задовольняють умову $F < 2$, вони близькі між собою, але важко визначити, який з них кращий, бо для цього треба було б враховувати всі інші канали процесу фотойонізації.

Табл. 2: Зміни суми сил осциляторів при зміні числа доданків у формулі (57)

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

Як видно з рис. 4, на якому наведено залежність $|p_{c,c'}(k)|^2$ 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 (57), 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 (57). Максимум кривої $|p_{c,c'}(k)|^2$ дещо зменшується при збільшенні числа доданків. Положення максимуму при цьому змінюється мало і знаходиться в околі точки $k \approx 0.2$. Як видно з рисунка, врахування у базисі локалізованих функцій хвильової функції $2s$ -стану відчутно змінює поведінку кривої в області великих хвильових векторів.

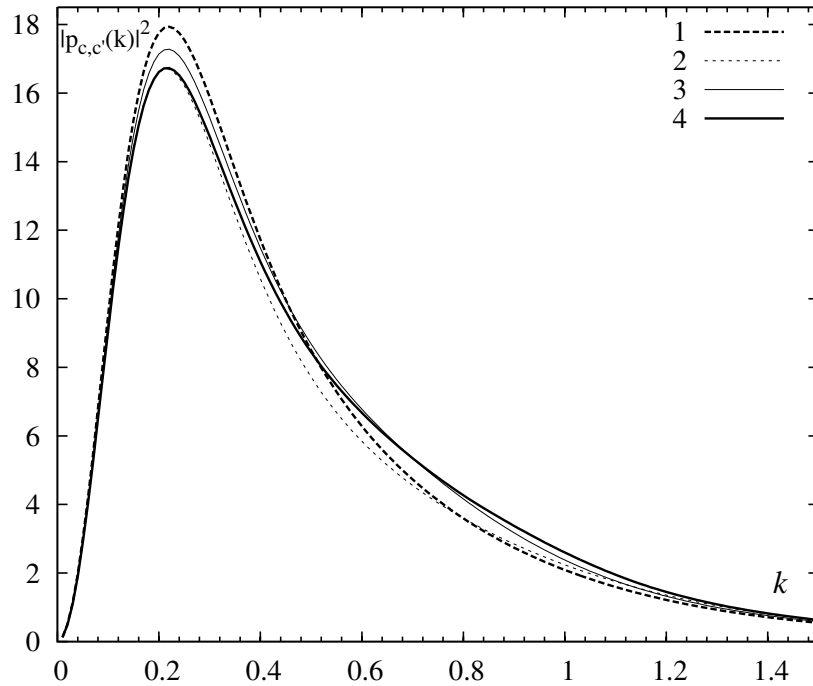


Рис. 4: Залежність $|p_{c,c'}(k)|^2$ від безрозмірного хвильового числа $k = |\mathbf{k}| a_o$

Поперечний переріз фотойонізації йона H^- дорівнює

$$\begin{aligned} \sigma_{H^-}(\omega) &= \frac{2\pi^2 e^2}{m c} \sum_{\mathbf{k}} f_{c,c'}(\mathbf{k}) \delta(\omega_{c,c'} - \omega) = \\ &= \frac{16}{3} \frac{e^2}{m c} \int_0^\infty \frac{dk \cdot k^2}{k^2 + \Delta\varepsilon} |p_{c,c'}(k)|^2 \delta\left(\frac{e^2}{2a_o \hbar} [k^2 + \Delta\varepsilon] - \omega\right) = \\ &= \frac{16}{3} \alpha_o a_o^2 \frac{(\omega^* - \omega_c^*)^{1/2}}{\omega^*} |p_{c,c'}([\omega^* - \omega_c^*]^{1/2})|^2, \end{aligned} \quad (78)$$

де α_o – стала тонкої структури, $\omega^* \equiv \hbar \omega \left(\frac{e^2}{2a_o}\right)^{-1}$ – безрозмірна частота, $\omega_c^* \equiv \Delta\varepsilon$.
У шкалі довжин хвиль

$$\sigma_{H^-}(\lambda) = \frac{16}{3} \alpha_o a_o^2 \lambda^* \left(\frac{\lambda_{max}^* - \lambda^*}{\lambda_{max}^* \lambda^*}\right)^{1/2} \left| p_{c,c'} \left(\left[\frac{\lambda_{max}^* - \lambda^*}{\lambda_{max}^* \lambda^*} \right]^{1/2} \right) \right|^2, \quad (79)$$

де $\lambda^* = \frac{\lambda}{\lambda_o}$, $\lambda_{max}^* = (\omega_c^*)^{-1} \approx 18.1818\dots$, а одиницею масштабу є $\lambda_o = 4\pi a_o \frac{\hbar c}{e^2} \approx 911, 27$.
Отже, процес фотойонізації йонів H^- дає внесок у коефіцієнт неперервного поглинання в області $\omega > \omega_c^*$, або $\lambda < \lambda_c^*$. Залежність поперечного перерізу цього процесу

від довжини хвилі наведено на рис. 5. Жирна крива побудована з врахуванням всіх доданків формули (57), пунктирна крива відповідає результатам найкращого варіанту розрахунку роботи [6], суцільна тонка лінія відповідає апроксимаційній формулі Джона[7], побудованій за результатами числових розрахунків інших авторів.

На рис. 6 зображено відносний поперечний переріз $(\sigma_{H^-}(\lambda)/\sigma_{H^-}(\lambda_1))$ при $\lambda_1 = 5280\text{\AA}$ процесу фотойонізації йонів H^- . Мітки відповідають спостережуваним даним для Сонця з роботи [21]. Пунктирна крива побудована за результатами роботи [6], а суцільна – за нашими розрахунками. Як бачимо, наші результати, як і результати роботи [6], в однаковій мірі добре описують спостережувані дані в області від 4000\AA до 13000\AA , крім невеликої ділянки в околі максимуму $(8 - 9) \cdot 10^3\text{\AA}$.

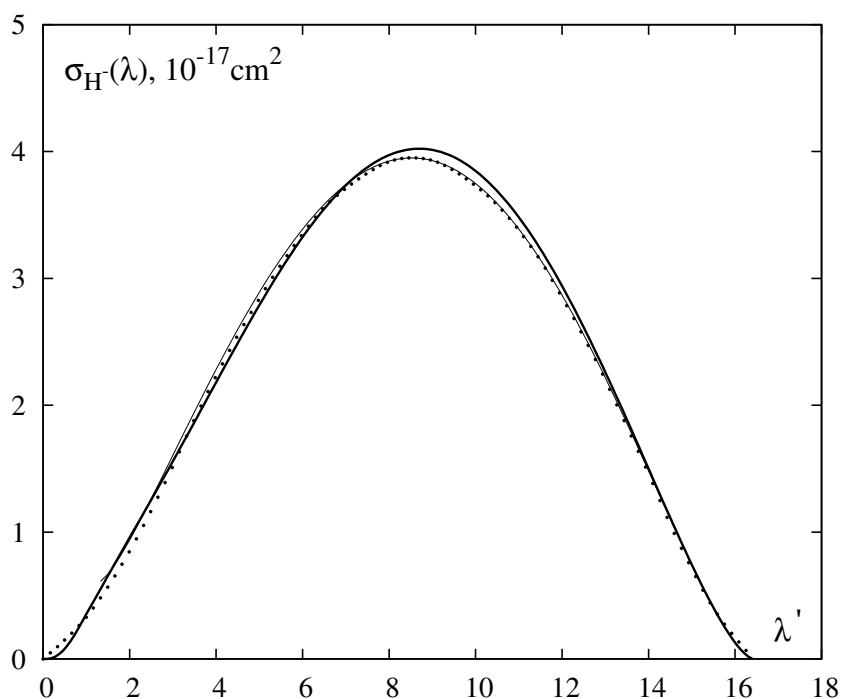


Рис. 5: Залежність поперечного перерізу процесу фотойонізації йона H^- від довжини хвилі $\lambda' = 10^{-3}\lambda$, де λ вимірюється в ангстремах

Висновки

Розрахована нами у базисно-варіаційному підході хвильова функція йона H^- має перевагу перед відомими багатопараметричними функціями, бо дозволяє виконувати більшість розрахунків в аналітичному вигляді, на кожному етапі здійснювати контроль обчислень і допускає використання іншими авторами.

Як впливає з виконаних розрахунків, точність обчислення поперечного перерізу

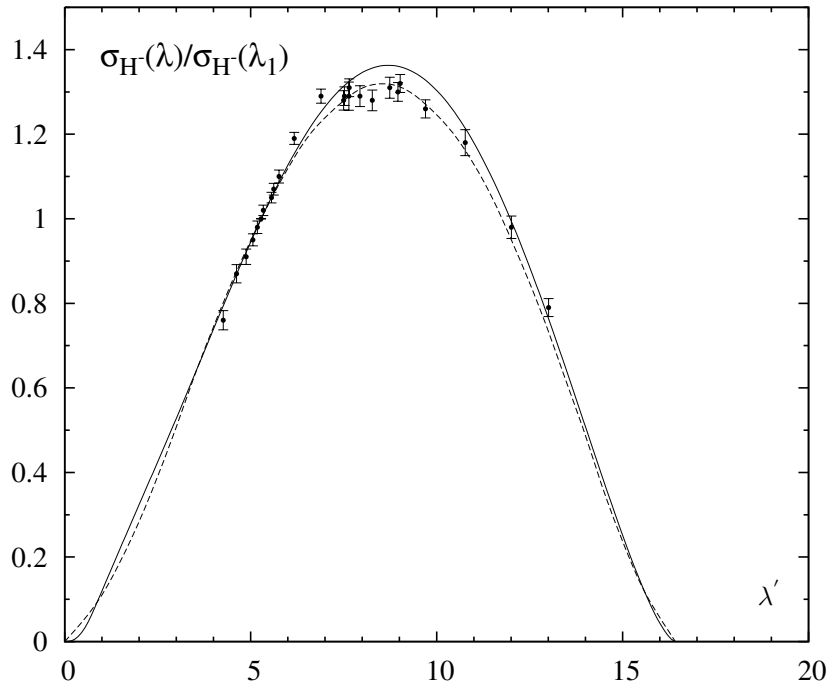


Рис. 6: Залежність відносного поперечного перерізу $\sigma_{H^-}(\lambda)/\sigma_{H^-}(\lambda_1)$ при $\lambda_1 = 5280\text{\AA}$ від довжини хвилі

фотойонізації йона H^- суттєво залежить від точності розрахунку хвильової функції кінцевого стану цього процесу. Тільки хвильова функція системи „електрон + атом водню“, розрахована у двоелектронному наближенні з врахуванням обмінних ефектів, приводить до коректних значень сил осциляторів, що задовольняють теорему Томаса-Райхе-Куна з достатньою точністю.

Основою нашого розрахунку хвильової функції кінцевого стану процесу фотойонізації негативного йона водню є базисний підхід. Як видно з рис. 5 і 6, результати розрахунків відчутно залежать від числа локалізованих функцій, що включені до базису одноелектронних функцій. У зв'язку з цим одержані результати не слід розглядати як остаточні, бо включення в базис локалізованих функцій інших збуджених станів атома водню може покращити результати.

Список використаної літератури

1. Чандрасекхар С. Перенос лучистой энергии / Чандрасекхар С. – Москва:ИЛ, 1953. – 432 р.
2. Wildt R. Negative ions of hydrogen and the opacity of stellar atmosphere / Wildt R. // *Astrophys. J.* – 1939.– V. 89. – P. 295 and V. 90.– P. 611.

3. Wildt R. The continuous spectrum of stellar atmospheres consisting omly of atoms and negative ions of hydrogen / Wildt R. // *Astrophys. J.* – 1941. – V. 93. – P. 47.
4. Chandrasekhar S. Some remarks on the negative ion and its absorption coefficient / Chandrasekhar S. // *Astrophys. J.* – 1944. – V. 100. – P. 176.
5. Chandrasekhar S. / On the continuous absorption coefficient of the negative hydrogen ion. III./ Chandrasekhar S., Breen F.H. // *Astrophys. J.* – 1946. – V. 104. – P. 430.
6. Geltman S. The bound-free absorption coefficient of the hydrogen negative ion / Geltman S. // *Phys. Rev.* – 1962. – V. 136. – P. 935.
7. John T.L. Continuous absorption by the negative hydrogen ion reconsidered / John T.L. // *Astron. Astrophys.* – 1988. – V. 193. – P. 189 – 192.
8. Rau A.R.P. The Negative Ion of Hydrogen / Rau A.R.P. // *Astrophys. Astr.* – 1996. – V. 17. – P. 113 – 145.
9. Cohen S. Search for the shape resonance in the negative ion of hydrogen in astrophysical plasmas./ Cohen S., Bryant H.C. // *RevMexAA (Serie de Conferencias)*. – 2000. – V.9. – P. 148 – 150.
10. Chuzhoy L. Feedback from firs radiation sources: H^- photodissociation / Chuzhoy L., Kuhlén M., Shapiro P.R. // *Astrophys. J.* – 2007. – V. 665. – P. L85 – L88.
11. Sadeghpour H. New H^- Photodetachment and Radiative Attachment Computations for Astrophysical Environments/ Sadeghpour H., Stancil P. C., McLaughlin B. M., Dalgarno A., Forrey R. C. // *Astrophys J.* – 2011. – V.43.
12. Ваврух М.В. Укр. фіз. журн./ Ваврух М.В., Солов'ян В.В. // –1991. – V. 36, №4. – P. 630.
13. Hart A. Twenty-Parameter Eigenfunctions and Energy Values of the Ground States of He and He-Like ions / Hart A., Herzberg G. // *Phys. Rev.* – 1957. – V. 106. –P. 79.
14. Schwartz C. Electron Scattering from Hydrogen / Schwartz C. // *Phys. Rev.* – 1961. – V. 123. – P. 1700.
15. Schull H. Correlation Splitting in Helium-Like Ions / Schull H., Löwdin P.-O. // *Journ. Chem. Phys.* – 1956. – V. 25. – P. 1035.
16. Green L.C. Correlation Energies and Angular Components of the Wave Function of the Ground States of H^- , He, Li^+ / Green L.C., Lewis M.N., Mulder M.M., Wyeth C.C., Woll J.W. // *Phys. Rev.* – 1954. – V. 93. – P. 273.
17. Green L.C. A Discussion of Analytic and Hartree-Fock Wave Function for $1s^2$ Configuration from H^- to CV / Green L.C., Lewis M.N., Mulder M.M., Woll J.W. // *Phys. Rev.* – 1954. – V. 93.–P. 757.
18. Pekeris C.L. 1^1S , 2^1S , and 2^3S States of H- and of He / Pekeris C.L. // *Phys. Rev.* – 1962 V. 126. – P. 1470.
19. Веселов М.Г. Теория атома / Веселов М.Г., Лабзовский Л.Н. – Москва: Наука, 1986. – 330 с.
20. Вакарчук І.О. Теорія зоряних спектрів / Вакарчук І.О. – Львів: В-ство ЛНУ імені Івана Франка, 2002. – 356 с.
21. Smith S. J. Relative Measurement of the Photodetachment Cross Section for H^- / Smith S. J., Burch D. S. // *Phys. Rev.* – 1959. – V. 116. – P. 5.

Стаття надійшла до редакції 4.09.2012
прийнята до друку 17.10.2012

PHOTOIONIZATION CROSS SECTION OF NEGATIVE HYDROGEN IONS

M. Vavruk, O. Stelmakh

*Ivan Franko National University of Lviv,
astrophysic department,
Kyrylo and Mefodiy St., 8, 79005 Lviv, Ukraine*

The spectral dependency of the photoionization cross section for negative hydrogen ions was calculated using quantum-mechanical reference system approach. The electrons exchange correlations were investigated. The comparisons with corresponding results of other authors, as well as with observed data for the Sun were done.

Key words: wave function and energy of ion H^- , oscillators' force, electrostatic and exchange correlations, photoionization's cross section.

ПОПЕРЕЧНОЕ СЕЧЕНИЕ ФОТОИОНИЗАЦИИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ ВОДОРОДА

М. Ваврух, О. Стельмах

*Львовский национальный университет имени Ивана Франко
кафедра астрофизики,
ул. Кирилла и Мефодия 8, 79005 Львов, Украина*

В рамках базисного квантовомеханического подхода рассчитана спектральная зависимость поперечного сечения фотоионизации отрицательных ионов водорода. Исследована роль обменных электронных корреляций в этом процессе. Выполнено сравнение с расчетами других авторов, а также с наблюдательными данными для Солнца.

Ключевые слова: волновая функция и энергия иона H^- , поперечное сечение фотоионизации H^- , силы осцилляторов, электростатические и обменные корреляции.