САМОСОГЛАСОВАННЫЙ УЧЕТ СРЕДЫ ПРИ РАСЧЕТЕ КОЭФФИЦИЕНТА НЕПРЕРЫВНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ЗВЕЗДНЫХ ФОТОСФЕРАХ

М. В. Ваврух, О. Н. Стельмах, С. В. Смеречинский

Львовский национальный университет имени Ивана Франко, кафедра астрофизики
ул. Кирилла и Мефодия, 8, Львов, 79005, Украина
e-mail: vavrukh@physics.wups.lviv.ua

Предложена самосогласованная схема учета эффекта экранирования кулоновских взаимодействий в частично ионизованной плазме, на основе которой выполнен корректный расчет ионизационного равновесия в рамках обобщенных соотношений Саха для водородной и водородно-гелиевой моделей фотосфер. Установлена немонотонная температурная зависимость параметра экранирования и равновесной концентрации ионов H^-, определяющих коэффициент непрерывного поглощения в видимой и инфракрасной областях спектра. Разработан простой способ вычисления поперечного сечения фотоионизации ионов H^- с учетом влияния эффектов экранирования.

ВВЕДЕНИЕ

Описание элементарных процессов взаимодействия фотонов с атомными объектами звездных фотосфер обычно производится без самосогласованного учета среды – частично ионизованной плазмы. Расчеты коэффициента непрерывного поглощения основываются на использовании энергетического спектра и волновых функций изолированных атомов и ионов (см., например, [6]), при этом концентрации соответствующих частиц находятся из упрощенных соотношений Саха [1]. Однако наличие свободных зарядов в плазме является причиной экранирования взаимодействий, вследствие чего изменяется энергетический спектр и волновые функции атомов, ионов и молекул, что влияет как на величину поперечных сечений соответствующих реакций, так и на ионизационное равновесие. Хотя звездные фотосферы отличаются низкой плотностью вещества и поэтому небольшой концентрацией заряженных частиц, количественное исследование влияния эффектов экранирования является актуальной задачей.

Как известно, процесс фотоионизации отрицательных ионов водорода дает основной вклад в формирование коэффициента непрерывного поглощения в видимой и инфракрасной областях спектра для звезд средних спектральных классов. В связи с этим мы рассчитаем концентрацию ионов H^- в рамках самосогласованного учета экранирования на примерах водородной и водородно-гелиевой моделей равновесной плазмы в области суммарной концентрации тяжелых частиц $(10^{-8}–10^{-6})$ см$^{-3}$ и эффективных температур $(5 \cdot 10^3–5 \cdot 10^4)$ K, а также поперечное сечение фотоионизации отрицательных ионов водорода.

ИОНИЗАЦИОННОЕ РАВНОВЕСИЕ В МОДЕЛИ ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ

В случае чисто водородной модели будем учитывать наличие нейтральных атомов H^0, протонов, электронов и отрицательных ионов H^-. В приближении закона действующих масс [4] двум возможным стадиям ионизации соответствуют уравнения:

$$\frac{Z_{H^0} Z_e^*}{Z_{H^-}} = \frac{n_{H^0} n_e}{n_{H^-}}, \quad \frac{Z_p Z_e^*}{Z_{H^0}} = \frac{n_p n_e}{n_{H^0}}, \tag{1}$$

где n_{H^-}, n_{H^0}, n_p, n_e – плотности ионов, атомов, протонов и электронов, а Z_{H^-}, Z_{H^0}, Z_p – соответствующие одночастичные статистические суммы ионов, атомов и протонов, Z_e^* – статистическая сумма свободного электрона в расчете на единицу объема. В случае слабо неидеальной невырожденной системы экранирование сводится к замене кулоновского потенциала электрон-протонного взаимодействия в атоме на экранированный потенциал Дебая [5]:

$$\hat{V}(r) = -\frac{e^2}{r} \exp(-\kappa\, r) = -\frac{e^2}{\rho a_0} \exp(-\xi\, \rho), \tag{2}$$

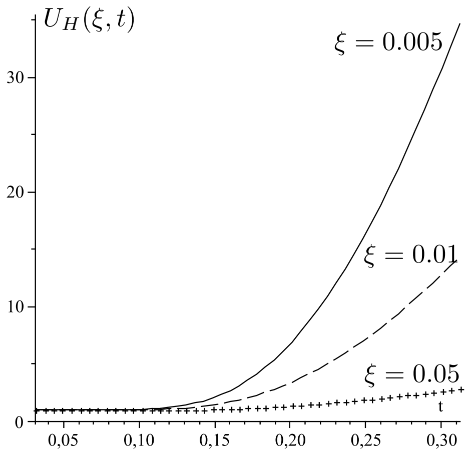

Рис. 1. Температурная зависимость функции $U_H(\xi, t)$ при постоянном значении ξ

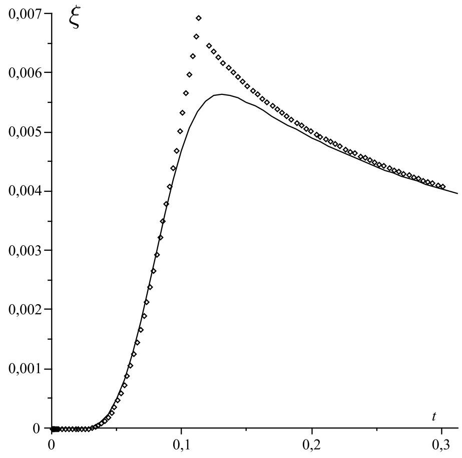

Рис. 2. Температурная зависимость параметра экранирования ξ при $n^* = 10^{-7}$

где $\xi \equiv \kappa a_0 = a_0 \left(4\pi e^2 \left[n_e + n_p + n_{H^-}\right] [k_B T]^{-1}\right)^{1/2}$ – безразмерный параметр экранирования ($\rho = r a_0^{-1}$, a_0 – радиус Бора). Уравнение Шредингера с потенциалом (2) обладает конечным ($\sim \xi^{-1}$) числом собственных значений $E_{n,l}(\xi)$, переходящих в непрерывный спектр при некоторых критических значениях $\xi_{n,l}$. Эта задача в достаточной степени исследована численными и аналитическими методами (см. [2, 3, 7] и ссылки в [2, 3]). В частности, в работе авторов [2] получены точные аналитические решения для множества состояний с безузловыми радиальными функциями (1s, 2p, 3d, 4f, ...), а в работе [3] найдены приближенные выражения для $E_{n,l}(\xi)$ как функции ξ для произвольных значений квантовых чисел n, l. Результаты этой работы нами использованы для расчета статистической суммы атома водорода с учетом экранирования.

Перейдем к безразмерным температуре, энергии и общей концентрации тяжелых частиц:

$$t = k_B T \left\{\frac{e^2}{2a_0}\right\}^{-1}, \quad \varepsilon_{n,l}(\xi) = E_{n,l}(\xi) \left\{\frac{e^2}{2a_0}\right\}^{-1}, \quad n^* = \frac{\rho}{m_H} a_0^3, \tag{3}$$

где ρ – плотность, m_H – масса атома водорода. Ион водорода обладает лишь одним связанным состоянием с энергией $E_{H^-}(\xi)$. В вакууме $E_{H^-}(0) = -1.0555\ldots Ry$, а при учете слабого экранирования ($\xi \ll 1$):

$$E_{H^-}(\xi) = \varepsilon_{H^-}(\xi) Ry, \quad \varepsilon_{H^-}(\xi) = -1.0555\ldots + 2\xi + \ldots . \tag{4}$$

Поскольку энергия основного состояния электрона в атоме в этой области ξ равна $E_{1,0}(\xi) = \{-1 + 2\xi + \ldots\} Ry$, то в фотосферной плазме энергия ионизации иона H^- почти не зависит от ξ и равна $E_{1,0}(\xi) - E_{H^-}(\xi) = I_1(\xi) Ry$, $I_1(\xi) \approx 0.0555\ldots Ry$. С точностью до m_e/m_p справедливы равенства:

$$Z_{H^0} = 2 Z_p\, U_H(\xi, t) \exp\left(-\frac{\varepsilon_{1,0}(\xi)}{t}\right), \quad Z_{H^-} = Z_{H^0} \left[2U_H(\xi,t)\right]^{-1} \exp\left(\frac{I_1(\xi)}{t}\right), \tag{5}$$

где

$$U_H(\xi, t) = 1 + \sum_{n\geq 2} \sum_{l \geq 0} (2l+1) \exp\left\{\frac{1}{t}\left[\varepsilon_{1,0}(\xi) - \varepsilon_{n,l}(\xi)\right]\right\} - \tag{6}$$

перенормированная статистическая сумма относительно внутренних степеней свободы атома (без учета спина электрона). На рис. 1 представлена зависимость $U_H(\xi, t)$ от температуры при фиксированных ξ, рассчитанная по данным работы [3]. При низких температурах ($T \leq 1.5 \cdot 10^4$ K) $U_H(\xi, t)$ мало отличается от единицы, однако сильно возрастает при более высоких температурах.

Как увидим в дальнейшем, концентрация ионов водорода n_{H^-} на несколько порядков ниже концентрации электронов либо протонов. Поэтому для упрощения расчета зависимости параметра ξ от температуры и общей плотности частиц можно пренебречь наличием отрицательных ионов, используя

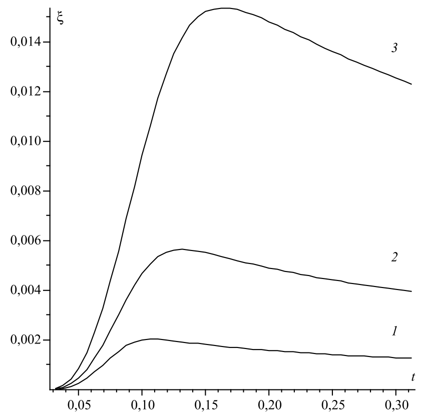

Рис. 3. Решение уравнения (7) при $n^* = 10^{-8}$ (кривая 1), $n^* = 10^{-7}$ (кривая 2), $n^* = 10^{-6}$ (кривая 3)

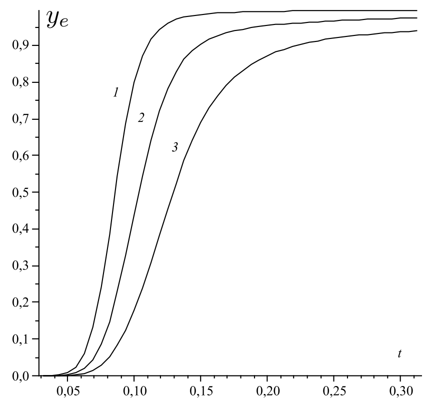

Рис. 4. Температурная зависимость относительной концентрации электронов при $n^* = 10^{-8}$ (кривая 1), $n^* = 10^{-7}$ (кривая 2), $n^* = 10^{-6}$ (кривая 3)

лишь второе из соотношений (1). Исходя из определения ξ, получаем следующее самосогласованное уравнение для параметра экранирования:

$$(4\pi)^{3/2}\left(\frac{\xi}{4\sqrt{\pi}}\right)^4 t^{1/2}U_H(\xi,t)\exp\left[-\frac{\varepsilon_{1,0}(\xi)}{t}\right]+\left(\frac{\xi}{4\sqrt{\pi}}\right)^2 t = n^*. \tag{7}$$

Учитывая, что n^* является малым параметром, находим следующую асимптотику решения этого уравнения при высоких и низких температурах:

$$\xi \Longrightarrow \begin{cases} 4\sqrt{\pi}\left(\dfrac{n^*}{t}\right)^{1/2}+\ldots, & t \geq \dfrac{1}{5}; \\ 4^{5/8}\pi^{1/8}\dfrac{(n^*)^{1/4}}{t^{1/8}}\exp\left[-\dfrac{1}{4t}\right]+\ldots, & t \leq \dfrac{1}{10} \end{cases} \tag{8}$$

(см. точечные кривые на рис. 2). Численное решение (сплошные кривые на рис. 2) получено нами с использованием интерполяции функции $U_H(\xi,t)$ на интервале $0.005 \leq \xi \leq 0.015$. Характерной особенностью температурной зависимости ξ является наличие максимума, положение которого смещается в область более высоких температур при увеличении плотности плазмы. Высота максимума имеет аналогичную зависимость от плотности. Максимум расположен в области $(2-3)\cdot 10^4$ K. Зависимость ξ от плотности плазмы является существенной (рис. 3), но для фотосферы Солнца $\xi \approx 10^{-2}$.

При расчете равновесных концентраций частиц з учетом ионов H^- воспользуемся найденной зависимостью ξ от температуры и плотности. Введем безразмерные $n^*_{H^-} = n_{H^-}a_0^3$, $n^*_{H^0} = n_{H^0}a_0^3$, $n^*_e = n_e a_0^3$, $n^*_p = n_p a_0^3$ и относительные концентрации частиц:

$$y_{H^-} = \frac{n^*_{H^-}}{n^*},\quad y_{H^0} = \frac{n^*_{H^0}}{n^*},\quad y_p = \frac{n^*_p}{n^*},\quad y_e = \frac{n^*_e}{n^*},\quad n^* = n^*_{H^0}+n^*_{H^-}+n^*_p \tag{9}$$

с естественным условием нормировки

$$y_{H^-}+y_{H^0}+y_p = 1. \tag{10}$$

Из уравнений (1), (9) находим

$$\begin{aligned} y_{H^-} &= y_e^2\left\{y_e^2+y_eC_{H_0}+C_{H_0}C_p\right\}^{-1}, \\ C_{H_0} &= \frac{4}{n^*}\left(\frac{t}{4\pi}\right)^{3/2}U_H(\xi,t)\exp\left[-\frac{1}{t}I_1(\xi)\right], \\ C_p &= \frac{1}{n^*}\left(\frac{t}{4\pi}\right)^{3/2}\frac{1}{U_H(\xi,t)}\exp\left[-\frac{1}{t}I_2(\xi)\right], \end{aligned} \tag{11}$$

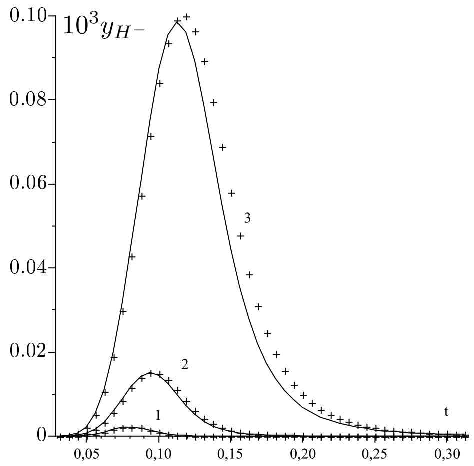

Рис. 5. Температурная зависимость относительной концентрации отрицательных ионов водорода в водородной модели при $n^* = 10^{-8}$ (кривая 1), $n^* = 10^{-7}$ (кривая 2), $n^* = 10^{-6}$ (кривая 3). Крестики соответствуют приближению $U_H(\xi, t) = 1$ и кулоновскому спектру энергетических уровней атома

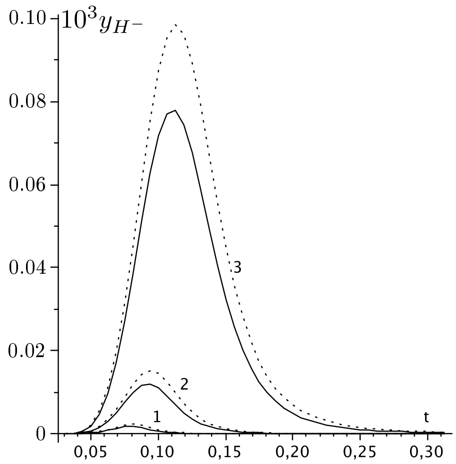

Рис. 6. Температурная зависимость относительной концентрации отрицательных ионов водорода при $n^* = 10^{-8}$ (кривая 1), $n^* = 10^{-7}$ (кривая 2), $n^* = 10^{-6}$ (кривая 3). Сплошные кривые соответствуют водородно-гелиевой модели, пунктирные – водородной

где $I_2(\xi) \equiv -\varepsilon_{1,0}(\xi)$ – энергия ионизации атома в плазме. Используя условие электронейтральности ($n_e = n_p - n_{H^-}$), находим уравнение для относительной электронной концентрации:

$$y_e = \left\{C_{H^0} C_p - y_e^2\right\} \left\{y_e^2 + y_e C_{H^0} + C_{H^0} C_p\right\}^{-1}. \tag{12}$$

Функции y_e (рис. 4), а также y_p, y_{H^0} являются монотонными функциями температуры и плотности. Температурная зависимость относительной концентрации ионов H^- имеет максимум, расположенный в области $(12-19) \cdot 10^3$ K. Максимум сдвигается в сторону более высоких температур при увеличении общей плотности плазмы (рис. 5).

ВОДОРОДНО-ГЕЛИЕВАЯ ПЛАЗМА

В случае водородно-гелиевой плазмы к уравнениям (1) следует добавить еще два уравнения, соответствующие одно- и двукратной ионизации гелия. В связи с тем, что первый потенциал ионизации изолированного атома гелия (в ридбергах) равен $I_3^0 = 1.81\ldots$, а второй – $I_4^0 = 4.00Ry$, то рассматриваемая нами область температур допускает приближение $U_{He}(\xi, t) = 1$, а изменение потенциалов ионизации за счет экранирования мы учли в линейном приближении по параметру ξ:

$$I_3(\xi) = I_3^0 - 6\xi + \ldots\ ; \quad I_4(\xi) = I_4^0 - 4\xi + \ldots\ . \tag{13}$$

В этой модели параметр экранирования равен

$$\xi = a_0 \left\{\frac{4\pi e^2}{k_B T}\left[n_e + n_p + n_{He^+} + n_{H^-} + 4n_{He^{++}}\right]\right\}^{1/2}. \tag{14}$$

При расчетах мы пренебрегали слагаемыми n_{H^-} и $n_{He^{++}}$ в формуле (14). Температурную зависимость безразмерной плотности ионов водорода y_{H^-} для звезд с химическим составом Солнца ($X = 0.75$, $Y = 0.25$) иллюстрирует рис. 6.

РАСЧЕТ ПОПЕРЕЧНОГО СЕЧЕНИЯ ФОТОИОНИЗАЦИИ ИОНОВ H^-

Рассчитывая матричный элемент $\mathbf{P}$ оператора электрона на волновых функциях начального ($\Psi_{H^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$) и конечного ($\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$) состояний двухэлектронной задачи, выделим в нем размерный множитель:

$$\mathbf{P}(\mathbf{k}) = \left\langle \Psi_{H^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right| -i\hbar\nabla_1 \left| \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\rangle = \frac{\hbar}{a_0}\left(\frac{a_0^3}{V}\right)^{1/2} \prod(\mathbf{k}). \tag{15}$$

Вклад процесса фотоионизации ионов H^- можно представить в следующем виде:

$$\kappa(\omega) = \frac{16}{3}\frac{\alpha}{a_0}\,n^*_{H^-}\frac{(\omega^* - \omega^*_1)^{1/2}}{\omega^*}\left(1 - e^{-\frac{\omega^*}{t}}\right)\int d\Omega_{\mathbf{k}}\left|\prod(\mathbf{q})\right|^2, \tag{16}$$

где α – постоянная тонкой структуры, $\mathbf{q} \equiv \frac{\mathbf{k}}{k}(\omega^* - \omega^*_1)^{1/2}$, $\omega^* = \hbar\omega\left(\frac{e^2}{2a_0}\right)^{-1}$, интегрирование ведется по угловым переменным вектора $\mathbf{q}$, $\omega^*_1 \equiv I_1(\xi)$ – энергия ионизации иона H^- в ридбергах. Мы использовали вариационную волновую функцию иона H^-, учитывающую как радиальные, так и угловые корреляции:

$$\Psi_{H^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Gamma_0\psi_0(r_1, r_2) + \sum_{l\geq 1}^{l_0}\Gamma_l P_l(\cos\gamma)R_l(r_1)R_l(r_2), \tag{17}$$

где $P_l(\cos\gamma)$ – полином Лежандра порядка l, γ – угол между векторами $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$,

$$\begin{aligned}&\psi_0(r_1, r_2) = C_0\{\exp[-\alpha\rho_1 - \beta\rho_2] + \exp[-\alpha\rho_2 - \beta\rho_1]\},\\ &R_l(\rho) = C_l\rho^l\exp(-\rho\gamma_l), \quad \rho_i \equiv a_0^{-1}|\mathbf{r}_i|.\end{aligned} \tag{18}$$

Параметры Γ_0, Γ_l найдены из секулярной задачи, а все другие параметры $(\alpha, \beta, \gamma_l)$ – из вариационного принципа (параметры C_0, C_l определяются из условия нормировки соответствующих слагаемых (17)). Все взаимодействия частиц – экранированы, поэтому найденные параметры являются функциями параметра экранирования ξ. В пределе $\xi = 0$ энергия иона H^- в рассчитанном приближении равна $-1.0539\ldots Ry$. Волновая функция конечного состояния построена в виде симметричной комбинации:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_{1s}(\mathbf{r}_1)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_2) + \psi_{1s}(\mathbf{r}_2)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1)\right\}, \tag{19}$$

в которой $\psi_{1s}(\mathbf{r})$ – волновая функция основного состояния электрона в атоме водорода с экранированным взаимодействием, а $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ – волновая функция электрона в поле атома водорода, рассчитанная в первом борновском приближении.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Немонотонная температурная зависимость концентрации отрицательных ионов водорода в частично ионизованной плазме следует из общих физических соображений. Однако немонотонная температурная зависимость параметра экранирования не является столь очевидной. Выполненный нами самосогласованный расчет концентрации ионов H^- свидетельствует о наличии максимума в области $(13-19)\cdot 10^3$ K, а влияние среды (эффекта экранирования) приводит к заметному изменению формы кривой $n^*_{H^-}(T)$. А именно, отклонение результатов, полученных при учете экранирования и без него, достигает порядка 25% (см. рис. 5 при $t=0.15$, $n^*=10^{-6}$). При этом влияние экранирования на величину сил осцилляторов процесса фотоионизации ионов H^- имеет тот же порядок величины. Температурная зависимость концентрации ионов H^- приводит к немонотонной температурной зависимости коэффициента непрерывного поглощения в видимой и инфракрасной области. Таким образом, влияние среды, а именно эффекта экранирования, следует учитывать при прецизионных расчетах характеристик звездных фотосфер. Что касается методической стороны, то расчет ионизационного равновесия без учета экранирования в принципе некорректен.

[1] *Бисноватый-Коган Г. С.* Физические основы теории звездной эволюции. – М.: Наука, 1989. – 672 с.

[2] *Ваврух М. В., Стельмах О. М., Тишко Н. Л., Коритко Р. І.* Локалізовані стани електрона в екранованому полі: точні розв'язки й наближений розрахунок енергетичного спектра // Журнал фізичних досліджень. – 2008. – **12**, № 3. – С. 3001-1–3001-14.

[3] *Ваврух М. В., Стельмах О. М., Тишко Н. Л.* Локалізовані стани електрона в екранованому полі: використання асимптотичних рядів // Журнал фізичних досліджень. – 2009. – **13**, № 2. – С. 2001-1–2001-10.

[4] *Вакарчук І. О.* Теорія зоряних спектрів. – Л.: Львівський нац. унів., 2002. – 358 с.

[5] *Эккер Г.* Теория полностью ионизованной плазмы. – М.: Мир, 1974. – 314 с.

[6] *Rau A. R. P.* The Negative Ion of Hydrogen // J. Astrophys. Astr. – 1996. – **17**. – P. 113–145.

[7] *Rogers F. J., Graboske H. C., Harwood D. J.* Bound Eigenstates of the Static Screened Coulomb Potential // Phys. Rev. A. – 1970. – **1**, N 6. – P. 1577–1586.