

ВЫСОКОВОЗБУЖДЕННЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ УРОВНИ МОЛЕКУЛЫ H_2 В АСТРОФИЗИКЕ

Я. Б. Зельдович, Т. В. Рузмайкина

Молекулы H_2 представляют большой астрофизический интерес. Многочисленные теоретические исследования (см., например, [1, 2]) и первые успешные внеатмосферные измерения [3] указывают на большое (вплоть до равенства концентрации H_2 и H) содержание молекул в некоторых облаках межзвездного водорода. То, что до недавнего времени эти молекулы не были обнаружены, обуславливается особенностью спектра H_2 . Все линии, возникающие из основного состояния находятся в ультрафиолетовой или далекой инфракрасной областях спектра, для которых земная атмосфера непрозрачна (см. таблицу).

	Термы	$1\Sigma_u^+ \rightarrow 1\Sigma_g^+$	$1\Pi_u \rightarrow 1\Sigma_g^+$
Электронные переходы	$\lambda(\nu = J = 0)$	1008 Å	1108 Å
Колесательные переходы	ν λ	0 – 1 2,2 мк	
Вращательные переходы	J λ	0 – 2 28 мк	1 – 3 16 мк

Цель настоящей статьи – обратить внимание на высоковозбужденные молекулы, у которых переходы между близкими электронными уровнями попадают в радиодиапазон. Изложенное ниже является развитием идеи Кардашева [4], согласно которой в астрофизических условиях возможно наблюдение радиолинии атомарного водорода с огромными, вплоть до нескольких сотен, номерами уровней.

Электронный спектр молекулы H_2 , у которой сильно возбужден один электрон, сходен в первом приближении со спектром атома водорода. Далекий электрон находится в поле центрального H_2^+ близком к кулоновскому на больших расстояниях. Поэтому для оценки вероятностей переходов между уровнями с большим n воспользуемся вероятностями рассчитанными для H . Напомним, что у высоковозбужденного атомарного водорода среди переходов между уровнями с большими n максимальную вероятность имеет переходы на соседний уровень $A_{n, n-1} = 6 \cdot 10^9 / n^5 \text{ сек}^{-1}$ [5]. Высоковозбужденная молекула H_2 способна диссоциировать на атомы $H(1S)$ или $H(1S)$ и $H(2S, 2P)$. Вероятность такого перехода, однако, очень мала для молекул, возбужденный электрон которых находится в состоянии с большим орбитальным моментом. Его ψ -функция исчезающе мала в центре, где отлична от нуля ψ -функции ядер и второго электрона.

Аналогично случаю атомарного водорода [5], населенность молекулярных уровней, для которых потенциал ионизации много меньше kT

близка (по крайней мере для $\ell \gg 1$) к населенности, имеющей место при кинетическом равновесии между высоковозбужденными уровнями H_2 , молекулярными ионами H_2^+ и свободными электронами. Отношение оптической просуммированной по ℓ толщ τ облака с размером R по лучу зрения в радиолинии $\tau(\nu_{n, n-1}) = (2 \cdot 10^{-5} / T^3 \nu_{n, n-1}) R N_e N_{H_2^+}$ к оптической толще в непрерывном спектре для близких ν , обусловленной поглощением при свободно-свободных переходах, равно (см. [4]):

$$\frac{\tau(\nu_{n, n-1})}{\tau(\nu)} \sim \frac{2 \cdot 10^{10}}{T^{3/2} n^3} \frac{N_{H_2^+}}{N_e}.$$

Предполагая, что H_2^+ образуется только при ионизации молекулы H_2 с высоких ($\nu \geq 5$) колебательных уровней основного состояния излучением с $\lambda \sim 1000 \text{ \AA}$, и используя обычно принимаемую интенсивность поля излучения [2], сечение ионизации H_2 [6], населенность возбужденных колебательных уровней [1] и скорость разрушения H_2^+ , взятые из [7], получим $N_{H_2^+} \geq 3 \cdot 10^{-6} (N_{H_2} / N_e)$, что для $T \sim 50^\circ \text{K}$, $n \sim 100$ ($\lambda \sim 40 \text{ см}$), $N_{H_2} / N \sim 0,1$, $N_e \sim 0,01 \text{ см}^{-3}$, $N \sim 10 \text{ см}^{-3}$ дает $\tau(\nu_{n, n-1}) / \tau(\nu) \gtrsim 1$.

Таким образом предварительные оценки свидетельствуют в пользу возможности обнаружения высоковозбужденных молекул. Практическому осуществлению рассмотренной идеи, по-видимому должно предшествовать решение ряда теоретических задач, и прежде всего, задачи о спектре возбужденных уровней.

Уровни возбужденного электрона в молекуле H_2 расщеплены за счет некулоновских членов потенциала, создаваемого находящимся в центре H_2^+ . Это расщепление различно для молекул орто- и параводорода находящихся в нижайшем вращательном состоянии $j_{H_2^+} = 3/2$ и $1/2$ для орто- и пара- H_2^+ соответственно. В случае ортоводорода (и пара- H_2 в возбужденных вращательных состояниях) некулоновская поправка V определяется взаимодействием квадрупольного момента центрального H_2^+ с внешним электроном $V \sim (10^{-11} / n^3 \ell) [(J - 1/2) / (J + 1)] \text{ эрг}$ для $\ell \gg 1$, в параводороде взаимодействием магнитных моментов внутреннего и возбужденного электронов $V \sim 10^{-15} / n^3 \ell \text{ эрг}$ ($\ell \gg 1$).

Энергия высоких электронных уровней молекулы, у которой возбуждены колебание или вращение, превышает порог ионизации. Вследствие этого возможно явление автоионизации с одновременными переходами молекулы в более низкое вращательно-колебательное состояние¹⁾ или инверсией из орто- в парасостояние. Однако, как пока-

¹⁾ Явление резонанса между электронными $n \rightarrow n + 1$ и вращательными переходами $J \rightarrow J - 2$ имеет место для более низких уровней $n \sim 10 / (J - 1/2)^{1/3}$. В этой области возникнут аномальные поправки к энергии электронных уровней.

зывает расчет, вероятность этого процесса для молекул, возбужденный электрон которых обладает большим орбитальным моментом ℓ , крайне мала.

Следует отметить различие между высоковозбужденными H_2 и H_2^+ . В то время, как возбуждение одного электрона в H_2 оставляет в центре стабильную систему H_2^+ , высоковозбужденный молекулярный ион диссоциирует за время $10^{-14} n^2$ сек, много меньшее характерного времени спонтанных переходов между уровнями. Поэтому наблюдение радиотонких возбужденного H_2^+ крайне мало вероятно. Только нижайшее возбужденное состояние имеет неглубокий $(1,65 \cdot 10^{-3} \text{ эв})$ минимум, в котором содержится два связанных состояния [8]. Среди радиопереходов в H_2^+ заслуживают внимания переходы между уровнями сверхтонкого расщепления основного состояния H_2^+ [1]. Попытка использовать их для обнаружения H_2^+ пока не увенчалась успехом [9]. Существенно отличаются от H_2 и H_2^+ молекулы HD и их ионы HD^+ . Не будучи симметричными они обладают дипольным моментом. При этом в HD дипольный момент имеет малость m_e/m_p (в приближении бесконечно тяжелых ядер электронная структура симметрична). В основном электронном состоянии $d \sim \hbar^2/m_p e$. В HD^+ заряд также почти симметричен относительно ядер, а центр тяжести смещен к дейтрону, так что относительно центра тяжести $d \sim er/6$ (r — расстояние между ядрами). Наличие дипольного момента в HD и HD^+ приводит к тому, что вращательный переход $0 - 1$, соответствующий поглощению с $\lambda \sim 112 \text{ мк}$; активен, а также к специфическим поправкам к высоким электронным уровням HD за счет взаимодействия электрона с HD^+ остатком.

Благодарим М.Я.Овчинникову за многочисленные полезные дискуссии и помощь.

Институт прикладной математики
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
24 января 1972 г.

Литература

- [1] G.B.Field, W.B.Somerville, K.Dressler. Ann. Rev. Astr. and Ap., 4, 207, 1966.
- [2] D.J.Hollenbach, M.W.Werner, E.Salpeter, Ap. J., 163, 165, 1971.
- [3] G.R.Carruthers. Ap. J. Lett., 148, L141, 1967.
- [4] Н.С.Кардашев. АЖ, 36, 838, 1959.
- [5] С.А.Каплан, С.Б.Пикельнер. Межзвездная среда, М., 1963.
- [6] G.R.Cook, P.H.Metzger. J. Opt. Soc. Am., 54, 968, 1964.
- [7] T.Hirasawa. Progr. Theor. Phys., 42, 523, 1969.
- [8] А.В.Матвиенко, Л.И.Пономарев. ЖЭТФ, 57, 2084, 1969.
- [9] P.J.Encrenaz, E.Falgarone. Ap.Lett., 8, 187, 1971.