

ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА В ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМЕ НА СВЯЗАННО-СВОБОДНЫХ И СВОБОДНО-СВОБОДНЫХ ПЕРЕХОДАХ СИСТЕМЫ Н-Н⁺

В.С.Лебедев, Л.П.Пресняков, И.И.Собельман

Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, 117924 Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 июля 2000 г.

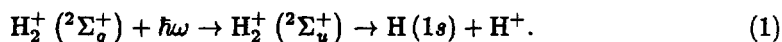
Проведен теоретический анализ радиационных переходов в системе протон – атом водорода в широкой области длин волн и температур равновесной водородной плазмы. Установлено, что при $T \sim 1500 - 3500$ К поглощение света в результате фотодиссоциации и переходов в непрерывном спектре иона H_2^+ вносит сравнимый вклад с фотопоглощением системой электрон – атом водорода в окрестности максимума планковского распределения.

PACS: 31.50.+w, 32.80.-t, 33.10.-n

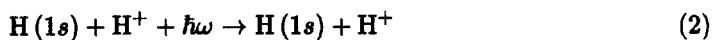
Исследование радиационных характеристик водородной плазмы, содержащей помимо атомов и молекул Н и H_2 также ионы H^- и H_2^+ , допускает детальный теоретический анализ и представляет интерес для многих приложений. Известно, что в квазиравновесной водородной плазме с температурой $T \approx 6000$ К (характерной для фотосферы Солнца) основной вклад в поглощение света в видимой области спектра вносит отрицательный ион водорода H^- , концентрация которого мала и составляет $N_{H^-}/N_H \sim 10^{-8}$ от концентрации нейтрального атома водорода $H(1s)$. В инфракрасном диапазоне до порога процесса $H^-(1s^2\ ^1S) + \hbar\omega \rightarrow H(1s) + e$ ($\lambda > \lambda_{H^-}^{th} = 1.64$ мкм) фотопоглощение определяется свободно-свободными переходами $H(1s) + e + \hbar\omega \rightarrow H(1s) + e$. Коэффициенты фотопоглощения обоих процессов известны с высокой точностью [1, 2]. При $T \sim 6000 - 10000$ К концентрация $N_{H_2^+}$ молекулярного иона H_2^+ оказывается того же порядка, что и H^- , а с уменьшением температуры ($T < 3000$ К) становится много больше, чем H^- .

Количественное рассмотрение связанно-свободных и свободно-свободных радиационных переходов в системе Н-Н⁺ было впервые проведено Бейтсом на основе квазистатической теории фотопоглощения [3] и точных расчетов электронных термов [4] и сил осцилляторов [5] перехода $X^2\Sigma_g^+ \rightarrow A^2\Sigma_u^+$. Квантовые расчеты [6, 7] сечений фотодиссоциации иона H_2^+ (без учета вращательного возбуждения $J = 0$) были сориентированы на анализ пучковых экспериментов, а не радиационных характеристик плазмы. Совокупность имеющихся результатов свидетельствует [8], что для равновесной водородной плазмы с $T \sim 4500 - 10000$ К интегральный по спектру вклад фотопоглощения ионом H_2^+ мал ($< 7 - 10$ %) по сравнению с поглощением света ионом H^- .

В настоящей работе показано, что при температурах $T \sim 1400 - 3500$ К фотопоглощение системой атом водорода – протон в области длин волн $\lambda \sim 1.6 - 4$ мкм оказывается порядка или превышает фотопоглощение системой атом водорода – электрон. Выполнены расчеты вклада всех колебательно-вращательных уровней vJ иона H_2^+ в сечения и коэффициенты фотодиссоциационного поглощения (связанно-свободные переходы):



Аналогичные расчеты проведены для свободно-свободных переходов:



с изменением электронного состояния ${}^2\Sigma_g^+ \rightarrow {}^2\Sigma_u^+$ квазимолекулы $\text{H}-\text{H}^+$.

Суммарный по всем состояниям νJ коэффициент фотодиссоциационного поглощения $k_T^{(1)}(\omega)$ [см^{-1}] на частоте ω (отнесенный к полной концентрации $N_{\text{H}_2^+}$ молекулярных ионов H_2^+) выражается через усредненное по бальцмановскому распределению сечение $\sigma_T^{(1)}(\omega)$ [см^2] процесса (1) при заданной температуре плазмы:

$$k_T^{(1)}(\omega) = \sigma_T^{(1)}(\omega)N_{\text{H}_2^+}, \quad \sigma_T^{(1)}(\omega) = \frac{1}{Z_{\nu,r}} \sum_{\nu J} (2J+1)\sigma_{\nu J}^{(1)}(\omega)e^{-\epsilon_{\nu J}/kT}. \quad (3)$$

Здесь $\sigma_{\nu J}^{(1)}(\omega)$ – парциальное сечение фотодиссоциации с уровня энергии $\epsilon_{\nu J}$; $Z_{\nu,r}$ – колебательно-вращательная статистическая сумма иона H_2^+ в основном электронном состоянии $X^2\Sigma_g^+$.

Теоретическое рассмотрение фотопроцессов (1) и (2) проведено в работе единым образом на основе теории неадиабатических переходов между электронными термами двухатомной системы [9] в приближении квазинепрерывного спектра колебательно-вращательных уровней νJ . Это оправдано, поскольку в видимой инфракрасной и ближней ультрафиолетовой областях спектра основной вклад в полный коэффициент фотопоглощения вносит большое число уровней νJ с высокими значениями квантовых чисел ν и J . Для каждой заданной частоты ω фотопереходы происходят в узкой окрестности точки R_ω , в которой пересекаются кривые потенциальной энергии системы в начальном, $\text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+) + \hbar\omega$, и конечном, $\text{H}_2^+(A^2\Sigma_u^+)$, состояниях, то есть когда расщепление четного и нечетного термов молекулярного иона становится равным энергии кванта $U_u(R_\omega) - U_g(R_\omega) = \hbar\omega$. В оптическом диапазоне величина $R_\omega \gg R_e$, где $R_e = 1.058 \text{ \AA}$ – равновесное межъядерное расстояние в основном состоянии $X^2\Sigma_g^+$. Пересекающиеся кривые потенциальной энергии четного связанного, $U_g(R)$, и нечетного отталкивательного, $U_u(R)$, термов имеют наклоны разного знака. В зависимости от величины ω точка R_ω может быть расположена как в классически разрешенной ($R < a$), так и в классически запрещенной ($R > a$) областях за правой точкой поворота $R = a$ в терме $U_g(R)$.

Расчет радиальных матричных элементов дипольного момента по волновым функциям относительного движения ядер и парциальных сечений неадиабатических переходов проведен на основе квантовой формулы Ландау – Лифшица [9]. Результат выражается в виде функции Эйри и позволяет описать вклады как в классически разрешенной, так и в запрещенной областях движения протонов. При вычислении усредненного по бальцмановскому распределению сечения фотодиссоциации $\sigma_T^{(1)}(\omega)$ суммирование в (3) по колебательно-вращательным уровням νJ заменено на интегрирование по $d\nu$ и dJ и выполнено методом, развитым в работе [10]. Вычисление коэффициента фотопоглощения в непрерывном спектре системы H_2^+ проведено аналогично случаю связанно-свободных переходов.

Коэффициент фотопоглощения $k_T^{(2)}(\omega)$ [см^{-1}] в процессе (2) пропорционален произведению концентраций $N_{\text{H}}N_{\text{H}^+}$ атомов $\text{H}(1s)$ и протонов H^+ в свободном состоянии. Поскольку полная равновесная концентрация $N_{\text{H}_2^+}$ ионов $\text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+)$ может быть выражена в (3) с помощью закона действующих масс через $N_{\text{H}}N_{\text{H}^+}$, удобно

вести полный коэффициент поглощения света $k_T(\omega)$ в процессах (1) и (2):

$$k_T(\omega) = k_T^{(1)}(\omega) + k_T^{(2)}(\omega) = \eta_T(\omega) N_H N_{H^+}, \quad K_T(\omega) = k_T(\omega) \left[1 - e^{-\hbar\omega/kT} \right], \quad (4)$$

где $\eta_T(\omega)$ [см⁵] – константа скорости фотопоглощения. Величина $K_T(\omega)$ в (4) описывает результирующий коэффициент поглощения света на частоте ω с учетом вынужденного излучения.

Результат для интегрального коэффициента фотопоглощения $k_T(\omega)$ имеет вид

$$k_T(\omega) = 4\pi^3 \alpha \left(\frac{\hbar^2}{m} \right) \frac{R_\omega^2 f_{ug}(R_\omega)}{\Delta F_{ug}(R_\omega)} \exp \left(-\frac{U_g(R_\omega)}{kT} \right) \Theta_T(\omega) N_H N_{H^+}. \quad (5)$$

Здесь $f_{ug}(R_\omega)$ – сила осцилляторов электронного перехода $^2\Sigma_g^+ \rightarrow ^2\Sigma_u^+$ при межъядерном расстоянии R_ω ; $\Delta F_{ug}(R_\omega) = |dU_u/dR - dU_g/dR|_{R=R_\omega}$ – разность наклонов кривых потенциальной энергии связанного, U_g , и отталкивательного, U_u , термов иона H_2^+ , коррелирующих с электронным состоянием $H(1s) + H^+$ при $R \rightarrow \infty$ ($U_g(\infty) = U_u(\infty) = 0$); m – масса электрона; $\alpha = e^2/\hbar c$ – постоянная тонкой структуры. Безразмерный фактор $\Theta_T(\omega)$ описывает отличие квазиклассического результата ($\Theta_T^{WKB}(\omega) = 1$) от квантового, учитывающего подбарьерные переходы и реальное поведение вероятностей переходов вблизи классических точек поворота:

$$\Theta_T(\omega) = 2\sqrt{\pi} \int_{\beta_{\min}}^{\infty} e^{-\beta} d\beta \int_0^{\infty} \Lambda_\xi^{1/2} \text{Ai}^2[-\Lambda_\xi(\beta - \xi)] d\xi. \quad (6)$$

Здесь $\text{Ai}(x)$ – функция Эйри, $\beta_{\min} = -U_u(R_\omega)/kT < 0$, а величина Λ_ξ выражается через наклоны четного, $F_g^{(\xi)} = -d(U_g + \mathcal{E})/dR$, и нечетного, $F_u^{(\xi)} = -d(U_u + \mathcal{E})/dR$, термов иона H_2^+ (μ – его приведенная масса) с учетом центробежной энергии $\mathcal{E} = \hbar^2 J^2/2\mu R^2$ и их разность ΔF_{ug} в точке R_ω :

$$\Lambda_\xi = \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{1/3} \frac{kT |\Delta F_{ug}(R_\omega)|^{2/3}}{\left| F_g^{(\xi)}(R_\omega) F_u^{(\xi)}(R_\omega) \right|^{2/3}}, \quad \xi = \frac{\mathcal{E}(R_\omega)}{kT}. \quad (7)$$

При $\Theta_T(\omega) = 1$ результат (5) совпадает с квазистатической формулой [3].

Результаты расчета сечения $\sigma_T^{(1)}(\omega)$ фотодиссоциации иона H_2^+ представлены на рис.1 для различных значений температуры водородной плазмы. Для кривых потенциальной энергии и сил осцилляторов переходов всюду в данной работе использовались численные данные [4, 5, 11]. При каждом значении T сечение имеет ярко выраженный максимум σ_T^{\max} , величина которого уменьшается с ростом температуры, а его положение $\omega_{\max}(T)$ смещается в сторону малых частот. Это объясняется увеличением вклада высоких энергетических уровней vJ с ростом T .

Характерные значения сечений в максимуме оказываются порядка $10^{-18} - 10^{-17}$ см². На рис.2 приведены результаты расчета суммарной константы скорости поглощения света $\eta_T(\lambda)$ системой $H-H^+$ с учетом вклада процессов (1) и (2). Видно, что за исключением случая очень высоких температур зависимость $\eta_T(\lambda)$ оказывается очень резкой в окрестности максимума, а характерные величины изменяются на несколько порядков при изменении T от 1500 до 10000 К. В длинноволновой области $\lambda > 1.5$ мкм значения η_T изменяются в диапазоне $\sim 10^{-39} - 10^{-38}$ см⁵.

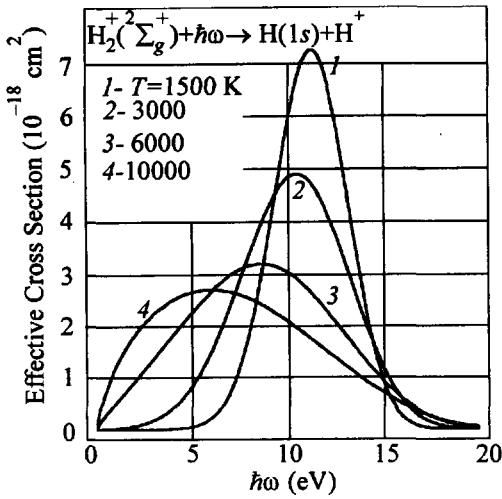


Рис.1. Зависимость усредненного по бoльцмановскому распределению сечения $\sigma_T^{(1)}(\omega)$ фотодиссоциации иона H_2^+ от энергии кванта $\hbar\omega$ при различных температурах

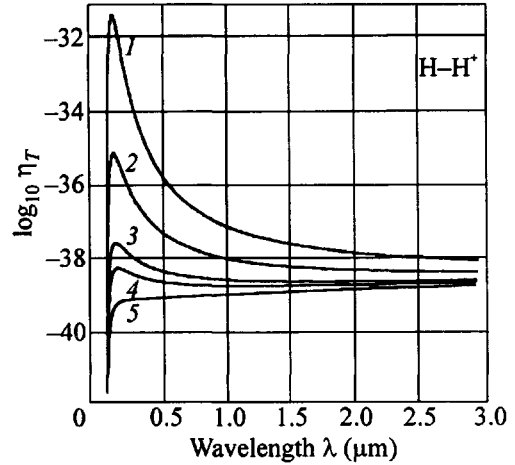


Рис.2. Зависимость полной константы скорости фотопоглощения $\eta_T^{H_2^+} = k_T^{H_2^+} / N_H N_{H^+}$ (см⁵) системой $H-H^+$ от длины волны фотона λ . Цифры у кривых 1, 2, 3, 4, 5 – соответствующие значения $T = 1500, 2500, 3000, 4500, 5800$ К

Рис.3 демонстрирует зависимость относительного вклада $\zeta = k_T^{(2)} / k_T$ свободно-свободных переходов (2) в полный коэффициент поглощения света от длины волны фотона λ . При $T = 1500$ К и $T = 3000$ К в области максимума планковского распределения ($\lambda_{max} = 1.93$ мкм и $\lambda_{max} = 0.97$ мкм) отношение ζ составляет около 15–20%. С увеличением температуры и длины волны вклад свободно-свободных переходов (2) быстро возрастает и становится преобладающим.

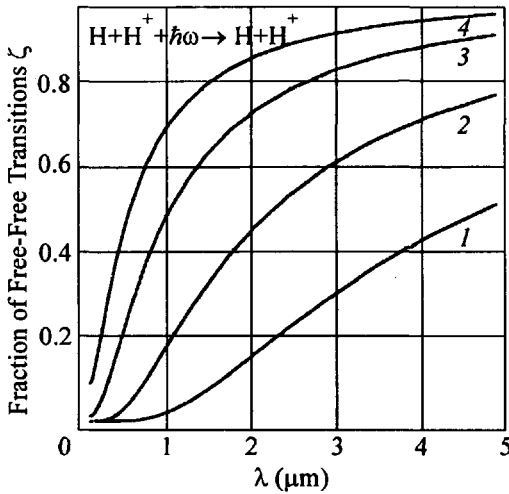


Рис.3. Отношение $\zeta = k_T^{(2)} / k_T$ коэффициента поглощения света $k_T^{(2)}$ в непрерывном спектре системы $H-H^+$ к его полной величине $k_T = k_T^{(1)} + k_T^{(2)}$, включающей вклады процессов (1) и (2). Кривые 1, 2, 3, 4 соответствуют $T = 1500, 3000, 6000, 10000$ К

Представляет интерес сравнение коэффициентов $k_T^{H_2^+} = \eta_T^{H_2^+} N_H N_{H^+}$ и $k_T^{H^-} = \eta_T^{H^-} N_H N_e$ фотопоглощения системами $H-H^+$ и $H-e$ в условиях, когда концентрации протонов и электронов равны $N_{H^+} = N_e$. Для $T \geq 4500$ К такое сравнение проведе-

но в [8]. Результаты сравнения констант скоростей фотопоглощения $\eta_T^{H_2^+}$ и $\eta_T^{H^-}$ для $T = 1400$ К приведены на рис.4. Видно, что соответствующие коэффициенты фотопоглощения сравниваются при $\lambda \approx 2$ мкм, что соответствует максимуму кривой планковского распределения (ее ширина по полувысоте составляет $1.27 < \lambda < 3.76$ мкм). В области $1.64 < \lambda < 2$ мкм, то есть вплоть до порога $\lambda_{H^-}^{th}$, вклад исследованных в работе радиационных процессов оказывается определяющим. С увеличением T роль поглощения инфракрасного излучения системой $H-H^+$ снижается по сравнению с системой $e-H$. Однако процессы (1), (2) продолжают вносить существенный вклад в полный коэффициент фотопоглощения в водородной плазме при $T < 3000 - 3500$ К. Так, например, при $T = 2800$ К отношение величин $k_T^{H_2^+} / k_T^{H^-}$ в пороге фотонейтрализации $\lambda_{H^-}^{th} = 1.64$ мкм и при $\lambda = 2$ мкм составляет соответственно 37% и 24%.

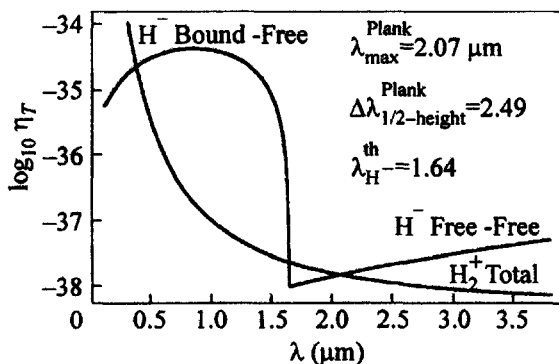


Рис.4. Сравнение полных констант скоростей поглощения света $\eta_T^{H_2^+}$ и $\eta_T^{H^-}$ положительными, H_2^+ , и отрицательными, H^- , ионами водородной плазмы ($T = 1400$ К) с учетом вкладов связанно-свободных и свободно-свободных переходов

Проведенные расчеты фотопоглощения системой $H-H^+$ представляют непосредственный интерес для фотосфер звезд с низкими температурами $\sim 1500 - 3500$ К. Среди таких звезд имеются классы звезд с резко обедненным содержанием элементов, более тяжелых нежели H и He (см. [12]). Для них процессы фотопоглощения в значительной мере определяются водородной компонентой атмосферы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты # 99-02-16602 и # 00-02-17245) и INTAS (# 99-01326).

1. M.Venuti and P.Decleva, J. Phys. **B30**, 4839 (1997).
2. K.L.Bell and K.A.Berrington, J. Phys. **B20**, 801 (1987).
3. D.R.Bates, Monthly Notices Roy. Astron. Soc. **111**, 303 (1951); *ibid.* **112**, 40 (1952).
4. D.R.Bates, K.Ledsham, and A.L.Stewart, Philos. Trans. Roy. Soc. **A246**, 215 (1953).
5. D.R.Bates, J. Chem. Phys. **19**, 1122 (1951).
6. Ю.Д.Оксюк, Оптика и спектроскопия, **23**, 214 (1967) [Opt. Spectrosc. **23**, 115 (1967)].
7. G.H.Dunn, Phys. Rev. **A172**, 172 (1968).
8. В.С.Лебедев, Л.П.Пресняков, И.И.Собельман, Астроном. ж. **77**, 3090 (2000) [Astronomy Reports **44**, 338 (2000)].
9. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва, 1974.
10. V.S.Lebedev, J. Phys. **B24**, 1993 (1991).
11. D.M.Bishop and L.M.Cheung, J. Phys. **B11**, 3133 (1978).
12. A.Unsöld and B.Baschek, *The New Cosmos*, Springer-Verlag, Berlin, 1991.