

## МАТРИЦА СИТОНА ДЛЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ В МОЛЕКУЛЕ ВОДОРОДА

В. К. Херсонский

В работе представлены расчеты каскадной матрицы Ситона для колебательных переходов в молекуле водорода с учетом десяти колебательных уровней.

The calculations of the cascade Seaton matrix for the vibrational transitions in the hydrogen molecule are presented in this paper. Ten vibrational levels are considered.

Молекулярный водород представляет собой основной компонент плотной фазы межзвездной среды. Он определяет собой массу и многие физические характеристики гигантских газово-пылевых комплексов, холодных и компактных глобул, областей, где интенсивно идут процессы звездообразования. Естественно поэтому, что различные физические параметры, характеризующие состояние газа из молекул  $H_2$ , такие как, например, степень ионизации, температура возбуждения, населенности уровней и др., представляют значительный интерес и исследуются теоретическими и экспериментальными методами.

До настоящего времени, однако, основное внимание уделялось главным образом вращательной структуре основного колебательного состояния молекулярного водорода, поскольку типичные кинетические температуры в нейтральной межзвездной среде ( $\sim 100$  K) много меньше характеристических температур возбуждения колебательных уровней (эти температуры представляют собой величины порядка нескольких тысяч градусов). Тем не менее существует ряд процессов, таких как, например, рекомбинация  $H_2$  в реакции  $H+H^-$ , деактивация верхнего электронного состояния в возбужденное колебательное состояние основного электронного терма и др., которые приводят к образованию молекул  $H_2$  в возбужденных колебательных состояниях. Поскольку спонтанные вероятности колебательных переходов достаточно велики ( $10^{-6}$ — $10^{-9}$  с $^{-1}$ ) [1], то распад возбужденных колебательных состояний должен происходить не за счет столкновений, а главным образом путем каскадных переходов в основное колебательное состояние. В этом случае важнейшую роль в расчетах физических характеристик газа играет каскадная матрица Ситона  $C_{v'v}$  [2] ( $v', v$  — квантовые числа, характеризующие колебательные состояния), элементы которой представляют собой полную вероятность перехода с уровня  $v'$  на уровень  $v$  всеми возможными путями через промежуточные состояния. Такая матрица до настоящего времени рассчитана не была. Цель данной заметки состоит в расчете этой матрицы.

Как известно, каскадная матрица Ситона в общем случае определяется системой рекуррентных соотношений

$$C_{v'v} = \beta_{v'} \sum_{v''=v}^{v'-1} A_{v'v''} C_{vv''}; \quad C_{vv} = 1 \quad (v' \geq v). \quad (1)$$

В этом выражении  $A_{v'v''}$  — радиационная спонтанная вероятность колебательного перехода  $v' \rightarrow v''$ ;

$$\beta_{v'} = \left( \sum_{v''=0}^{v'-1} A_{v'v''} \right)^{-1} \quad (2)$$

— время жизни возбужденного колебательного состояния.

В основном электронном состоянии молекулы водорода  $X^1\Sigma_g^+$  имеется 14 колебательных уровней, энергии которых приближенно определяются формулой

$$E_v \approx h\nu_e \left( v + \frac{1}{2} \right) \left[ 1 + x_e \left( v + \frac{1}{2} \right) \right], \quad (3)$$

где  $h\nu_e \approx 6344$  К и  $x_e \approx 0.0285$ .

Наибольший интерес для приложений представляют уровни с  $v \leq 6 \div 8$ . Поэтому в данном расчете учтены не все 14 уровней, а лишь первые 10. Четыре верхних уровня ( $v=11 \div 14$ ) в большинстве случаев мало влияют на каскадное заселение уровней с  $v < 8$ , и их учет при этих условиях лишь неоправданно усложнит расчеты.

При расчете следует учесть следующее обстоятельство. Потенциальная кривая, описывающая основное электронное состояние  $H_2$ , является в значительной степени ангармоничной. Вследствие этого в электрическом квадрупольном приближении оказываются разрешенными не только колебательные переходы с  $\Delta v = |v' - v| = 1$ , но и переходы с произвольными значениями  $\Delta v$  (необходимо при этом отметить, что при увеличении  $\Delta v$ , исключая значения  $\Delta v = 1, 2, 3$ , величины  $A_{v'v}$  убывают). Кроме того, как легко видеть из (1) и (2), все элементы матрицы  $C_{v0}$  равны единице. Действительно,

$$C_{10} = \beta_1 A_{10} C_{00} = 1;$$

$$C_{20} = \beta_2 (A_{21} C_{10} + A_{20} C_{00}) = \beta_2 (A_{21} + A_{20}) = 1$$

и т. д.

Для проведения расчетов каскадной матрицы необходимо знать корректные значения величин  $A_{v'v}$ . В работе [1] были рассчитаны вероятности колебательно-вращательных переходов в молекуле  $H_2$ . Это наиболее точные данные, имеющиеся в настоящее время. Необходимые для данной работы величины колебательных спонтанных вероятностей  $A_{v'v}$  были получены из данных работы [1] путем суммирования их по конечным и усреднения по начальным вращательным состояниям.

$v'$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	1.000										
1	1.000	1.000									
2	1.000	0.677	1.000								
3	1.000	0.791	0.475	1.000							
4	1.000	0.748	0.682	0.347	1.000						
5	1.000	0.764	0.608	0.605	0.263	1.000					
6	1.000	0.759	0.631	0.523	0.537	0.205	1.000				
7	1.000	0.760	0.626	0.542	0.474	0.463	0.155	1.000			
8	1.000	0.760	0.626	0.542	0.475	0.439	0.402	0.092	1.000		
9	1.000	0.760	0.626	0.540	0.482	0.421	0.420	0.321	0.052	1.000	
10	1.000	0.760	0.626	0.540	0.480	0.429	0.383	0.400	0.231	0.027	1.000

Результаты расчетов каскадной матрицы приведены в таблице. Из этой таблицы, в частности, видно, что величины элементов матрицы Ситона в целом уменьшаются с увеличением  $\Delta v$ , что является отражением аналогичной зависимости от  $\Delta v$  вероятностей колебательных переходов.

#### Литература

1. Turner J., Kirby-Docken, Dalgarno A. The quadrupole vibration-rotation transition probabilities of molecular hydrogen. — *Astrophys. J., Suppl.*, 1977, 35, p. 281—292.
2. Каплан С. А., Пикельнер С. Б. Физика межзвездной среды. М.: Наука, 1979. 32 с.

Поступила в редакцию 05.10.81