

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

Радиационные переходы молекулярного иона  $H_2^+$

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

*Проведен теоретический анализ процессов непрерывного поглощения света видимого, ИК- и УФ-диапазона спектра в квазиравновесной водородной плазме с эффективной температурой между 1500 и 25000 К. Поглощение света обусловлено фотодиссоциацией молекулярного иона  $H_2^+$  из большой группы возбужденных колебательно-вращательных уровней основного терма и свободно-свободными радиационными переходами при столкновениях протонов  $H^+$  с атомами водорода  $H(1s)$ . Рассматриваемые фотопереходы происходят с изменением электронного состояния  $^2\Sigma_g^+ \rightarrow ^2\Sigma_u^+$  молекулярного (квазимолекулярного) иона  $H_2^+$ . Квантовое и квазиклассическое описание парциальных сечений фотодиссоциации и эффективных сечений фотопоглощения при столкновениях частиц проведено на основе теории неадиабатических переходов между кривыми потенциальной энергии двухатомной молекулы. Изложен аналитический подход для расчета интегрального вклада всевозможных колебательно-вращательных уровней в сечение фотодиссоциации, усредненное по бoльцмановскому распределению. Детально изучен вклад связанно-свободных и свободно-свободных переходов в полный коэффициент поглощения света системой  $H_2^+$  в зависимости от температуры и длины волны. Представлены результаты недавних расчетов эффективных сечений фотопереходов и коэффициентов фотопоглощения и проведено их сравнение с уже имеющимися результатами. Особое внимание уделено рассмотрению относительной роли положительных молекулярных ионов,  $H_2^+$ , и отрицательных атомарных ионов,  $H^-$ , в полный коэффициент фотопоглощения квазиравновесной водородной плазмы.*

PACS numbers: 31.15.-p, 31.50.Gh, 33.80.-b

Содержание

1. Введение (491).
  2. Исходные квантовые формулы (493).
  3. Связанно-свободные радиационные переходы (495).
    - 3.1. Парциальные сечения фотодиссоциации из возбужденного колебательно-вращательного состояния. 3.2. Усреднение по бoльцмановскому распределению и коэффициент фотодиссоциационного поглощения.
  4. Свободно-свободные переходы и полный коэффициент поглощения (499).
    - 4.1. Вклад непрерывного спектра в коэффициент фотопоглощения. 4.2 Интегральный вклад связанно-свободных и свободно-свободных переходов.
  5. Обсуждение результатов (501).
    - 5.1. Сечения фотодиссоциации. 5.2. Коэффициенты фотопоглощения. 5.3. Относительное поглощение ионами  $H_2^+$  и  $H^-$  в локально равновесной водородной плазме.
  6. Заключение (508).
- Список литературы (509).

В.С. Лебедев, Л.П. Пресняков, И.И. Собельман. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Ленинский просп. 53, Российская Федерация  
 Тел. (095) 132-68-70  
 E-mail: vlebedev@sci.lebedev.ru

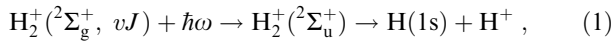
Статья поступила 23 сентября 2002 г.

1. Введение

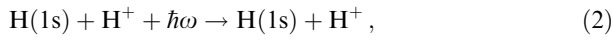
Исследование связанно-свободных и свободно-свободных радиационных переходов в водородной плазме в условиях локального термодинамического равновесия позволяет получать важную информацию о наиболее эффективных источниках непрерывного фотопоглощения в звездных атмосферах. Известно, что в квазиравновесной водородной плазме с эффективной температурой  $T_{\text{eff}} \approx 6000$  К (характерной для фотосферы Солнца) основной вклад в поглощение света в видимой области спектра вносит процесс фотоотрыва электрона от отрицательного иона  $H^-$ , концентрация которого мала и составляет  $N_{H^-}/N_H \sim 10^{-8}$  от концентрации нейтрального атома водорода  $H(1s)$ . В инфракрасной области до порога процесса фотоотрыва электрона от иона  $H^-$  фотопоглощение определяется свободно-свободными радиационными переходами электрона в поле атома водорода  $H(1s)$  (см., например, [1, 2]). Другой известный пример — процессы столкновительно-индуцированного поглощения света с участием молекул водорода  $H_2-H_2$ ,  $H_2-H$  и  $H_2-He$ , которые играют определяющую роль в фотопоглощении инфракрасного излучения в плотных атмосферах холодных звезд с низким содержанием элементов более тяжелых, чем водород и гелий (см. [3–6] и приведенные там ссылки).

В данной статье мы обсудим роль радиационных переходов простейшей двухатомной системы  $H-H^+$  в фотопоглощении квазиравновесной водородной плазмы

с температурой в диапазоне 1400–25000 К. Отметим, что при  $T \sim 5000 - 15000$  К полная концентрация  $N_{\text{H}_2^+}$  связанных молекулярных ионов водорода  $\text{H}_2^+$  в нижнем электронном состоянии  $X^2\Sigma_g^+$  оказывается того же порядка, что и концентрация ионов  $\text{H}^-$ , а с уменьшением температуры  $T < 3000 - 3500$  К становится много больше, чем  $N_{\text{H}^-}$ . В рассматриваемом диапазоне температур фотодиссоциация молекулярного иона  $\text{H}_2^+$  в инфракрасной, видимой и ближней ультрафиолетовой областях спектра происходит из большого числа колебательно-вращательных состояний и приводит к образованию протона и нейтрального атома водорода в конечном канале реакции



где  $v$  и  $J$  — колебательные и вращательные квантовые числа. Наряду со связанно-свободным переходом (1) значительный вклад в фотопоглощение вносят также свободно-свободные радиационные переходы



индуцированные столкновениями протонов с атомами водорода в основном состоянии. Оба процесса (1) и (2) происходят в результате перехода электрона между четным  $X^2\Sigma_g^+$  и нечетным  $A^2\Sigma_u^+$  термами молекулярного (квазимолекулярного)  $\text{H}_2^+$ , при котором изменяется симметрия волновой функции электрона (см. рис. 1). Следует отметить, что даже при достаточно высоких температурах концентрация нейтральных молекул водорода  $\text{H}_2$  в основном электронном состоянии  $1^1\Sigma_g^+$  на несколько порядков величины превышает концентрацию ионов  $\text{H}_2^+$  (например, в фотосфере Солнца  $N_{\text{H}_2}/N_{\text{H}_2^+} \sim 10^4 - 10^5$ ). Однако для молекулы водорода основной (связанный)  $1^1\Sigma_g^+$  и первый возбужденный (отталкивательный)  $3^1\Sigma_u^+$  термы имеют различную мультиплетность; интеркомбинационный электронный переход между ними сильно подавлен, так как требует изменения спина.

Основы классической и полуклассической теории радиационных процессов, сопровождаемых переходами между различными электронными термами молекулы, были сформулированы в работах Крамерса и Тер-Хаара [7], Яблонского [8] и Бейтса [9]. Возможная роль связанно-свободных (1) и свободно-свободных переходов (2) в системе  $\text{H}-\text{H}^+$  для некоторых звездных атмосфер была впервые отмечена в работе [10]. Молекулярный ион  $\text{H}_2^+$  является наиболее простой из всех возможных двухатомных молекул. Поэтому его теории посвящено большое количество работ.

Наиболее весомый вклад в теорию иона  $\text{H}_2^+$  и радиационных переходов  $^2\Sigma_g^+ \rightarrow ^2\Sigma_u^+$  внесен работами Бейтса с сотрудниками [11–13]. В работе [13] вычислялись энергии расщепления термов системы  $\text{H}_2^+$ , в [11] — силы осцилляторов радиационного электронного перехода  $^2\Sigma_g^+ \rightarrow ^2\Sigma_u^+$ , которые затем были также рассчитаны в [14]. Первое количественное рассмотрение радиационных процессов (1), (2) проведено Бейтсом в работе [12], где были выполнены полуклассические расчеты интегрального коэффициента поглощения света  $K_T(\omega)$  в широкой области частот переходов ( $500 \leq v/c \leq 26000 \text{ см}^{-1}$ ) для температур в диапазоне 2500–12000 К. Основываясь на квантовых расчетах сил осцилляторов при фиксированном межъядерном расстоянии  $R$  и рассматривая ядра

$\text{H}$  и  $\text{H}^+$  как классические частицы с вероятностью  $W_T(R) \propto 4\pi R^2 \exp[-U(R)/kT]$  распределения координат  $R$  в связанном  $U_g(R)$  и отталкивательном  $U_u(R)$  термах, в [12] получили простую аналитическую формулу для величины  $K_T(\omega)$ . Таким образом, в рамках предложенной в [9, 12] модели о неподвижных центрах  $\text{H}$  и  $\text{H}^+$  с использованием классической функции распределения межъядерного расстояния  $R$  в двухатомной системе с заданным потенциалом взаимодействия  $U(R)$  Бейтс вообще избежал расчета сечений фотодиссоциационного поглощения для определенного колебательно-вращательного состояния  $vJ$  и последующего суммирования по этим состояниям.

Затем в работе [15] для коротковолновой части спектра  $22 \times 10^3 \leq v/c \leq 115 \times 10^3 \text{ см}^{-1}$  (т.е. для энергий квантов  $2,7 < \hbar\omega < 14,3$  эВ) исследовалось влияние квантового характера движения ядер в процессе фотодиссоциации (3) иона  $\text{H}_2^+$  при относительно невысоких температурах  $T = 1000$  и  $2500$  К и было проведено сравнение полученных результатов по коэффициентам поглощения с полуклассическими расчетами [12]. Далее, на основе расчетов [12] были составлены таблицы и получены соответствующие аппроксимационные формулы для коэффициентов поглощения света на связанно-свободных и свободно-свободных переходах  $^2\Sigma_g^+ \rightarrow ^2\Sigma_u^+$  молекулярного (квазимолекулярного) иона  $\text{H}_2^+$  [16, 17]. Следует также отметить работу [18], в которой выполнена полуклассическая оценка интегральной энергии электромагнитного излучения, возникающего в процессе перезарядки протонов на атомах водорода. Последующий анализ вклада фотодиссоциации иона  $\text{H}_2^+$  (1) и радиационных столкновительных переходов (2) в фотопоглощение солнечной атмосферы проведен в работах [19–21]. В недавних работах [22, 23] проанализирована роль фотопоглощения системой  $\text{H}_2^+$  в локально равновесной водородной плазме в широком диапазоне длин волн и температур, типичных для звездных атмосфер.

Первые результаты по измерению сечений фотодиссоциации иона  $\text{H}_2^+$  были представлены в [24, 25]. Квантовомеханические расчеты сечений процесса фотодиссоциации (1) с фиксированных колебательных уровней  $v$  проведены в работах [26, 27] для случая малых вращательных квантовых чисел  $J = 0$  и  $1$ . Для электронных матричных элементов перехода  $^2\Sigma_g^+ \rightarrow ^2\Sigma_u^+$  были использованы цитированные выше данные Бейтса. В [27] суммировались по  $v$  полученные сечения с использованием распределения Франка–Кондона, характерного для образования ионов  $\text{H}_2^+$  в процессах фотоионизации нейтральных молекул водорода  $\text{H}_2$  или при их бомбардировке электронами (молекулы  $\text{H}_2$  при этом находятся при низкой, комнатной, температуре). Очевидно, что условия, подразумеваемые в расчетах типа [26, 27], далеки от тех, что имеют место в звездных фотосферах.

Численные квантовомеханические расчеты парциальных сечений  $\sigma_{vJ}(\lambda)$  фотодиссоциации из фиксированных колебательно-вращательных уровней  $vJ$  иона  $\text{H}_2^+$  ( $X^2\Sigma_g^+$ ) выполнены в работе [28] для вращательных квантовых чисел  $0 \leq J \leq 8$ . Полученные при этом результаты были использованы для вычисления больцмановски усредненных сечений  $\sigma_T(\lambda)$  в диапазоне температур  $2500 < T < 26000$  К и длин волн  $50 \leq \lambda \leq 2500$  нм. Детальный анализ поведения больцмановски усредненных сечений  $\sigma_T(\lambda)$  в зависимости от длины световой волны  $\lambda$  и температуры  $T$  проведен в работе [29]. Численные

квантовомеханические расчеты [29] для иона  $\text{H}_2^+(\text{X}^2\Sigma_g^+)$  относятся к широкой области длин волн в интервале между 50 нм и 20 мкм и температур в диапазоне 3150–25200 К и учитывают суммирование парциальных сечений  $\sigma_{vJ}(\lambda)$  по огромному числу колебательно-вращательных состояний.

К настоящему времени накоплен обширный экспериментальный материал и получено значительное количество теоретических результатов по фотодиссоциации различных молекул. Общий алгоритм для вычисления сечений фотодиссоциации и коэффициентов поглощения света молекулами, представляющими интерес для астрофизических приложений, изложен в [30]. Однако детальные квантовомеханические расчеты коэффициентов фотодиссоциационного поглощения света, учитывающие суммарный вклад большого числа колебательно-вращательных состояний, выполнены лишь для ограниченного числа простейших двухатомных систем (таких как  $\text{H}_2^+$  и  $\text{He}_2^+$ ).

В работах [21–23] развит аналитический подход, который дает возможность описывать процессы непрерывного поглощения света двухатомными молекулами и ионами в видимом, инфракрасном и ультрафиолетовом диапазонах спектра. Этот подход был использован для расчета сечений радиационных процессов (1), (2) и интегрального коэффициента фотопоглощения с учетом болцмановского распределения по колебательно-вращательным уровням и вклада непрерывного спектра системы  $\text{H}-\text{H}^+$ . При этом учтено, что при достаточно высоких температурах ( $T > 1500-3000$  К) одновременно возбуждено большое количество колебательных и вращательных уровней основного электронного состояния  $^2\Sigma_g^+$ .

В данном обзоре изложены основные теоретические результаты по фотодиссоциации (1) молекулярного иона  $\text{H}_2^+$  и свободно-свободным переходам (2), полученные в последние годы. Проведено их сопоставление с проведенными ранее расчетами эффективных сечений и коэффициентов фотопоглощения. Обсуждаются зависимости парциальных сечений фотодиссоциации  $\sigma_{vJ}(\omega)$  от колебательного  $v$  и вращательного  $J$  квантовых чисел, включая случай высоковозбужденных уровней  $vJ$ , расположенных вблизи диссоциационного предела основного электронного термина иона  $\text{H}_2^+$ . Приведены аналитические формулы, которые в рамках приближения квазинепрерывного спектра корректно описывают интегральный вклад всех колебательно-вращательных уровней в усредненное по болцмановскому распределению сечение фотодиссоциации  $\sigma_T(\omega)$  при заданной температуре  $T$  локально равновесной водородной плазмы.

Представленные здесь результаты конкретных расчетов охватывают широкую область длин волн переходов и температур  $T = 1500-25000$  К. При этом значительное внимание уделено анализу относительного вклада связанно-свободных (1) и свободно-свободных (2) радиационных переходов, а также изучению поведения полного коэффициента фотопоглощения в зависимости от длины световой волны и температуры плазмы. Рассмотрен также вопрос о предельном переходе квантовых результатов для полного коэффициента фотопоглощения в простые аналитические выражения, соответствующие полуклассической модели Бейтса [12].

Особое внимание в данной работе уделено сопоставлению величин интегрального коэффициента поглоще-

ния света в процессах (1) и (2) с участием молекулярного (квазимолекулярного) иона  $\text{H}_2^+$  с соответствующими коэффициентами фотопоглощения на связанно-свободных переходах отрицательного иона  $\text{H}^-$ :

$$\text{H}^-(1s^2) + \hbar\omega \rightarrow \text{H}(1s) + e \tag{3}$$

и свободно-свободных переходах электрона в поле атома водорода:

$$\text{H}(1s) + e + \hbar\omega \rightarrow \text{H}(1s) + e. \tag{4}$$

Полученные при этом результаты представляют интерес для астрофизических приложений и позволяют составить более полное представление об относительной роли ионов  $\text{H}_2^+$  и  $\text{H}^-$  в различных областях длин волн и температур локально равновесной водородной плазмы.

## 2. Исходные квантовые формулы

Приведем исходные формулы для сечений связанно-свободных и свободно-свободных радиационных переходов и коэффициентов поглощения света двухатомной системой. Ориентируясь здесь, главным образом, на приложения к простейшей двухатомной системе  $\text{H}_2^+$ , для определенности рассмотрим переходы между начальным связанным и конечным отталкивательным терминами, сходящимися к одному диссоциационному пределу. Кривые потенциальной энергии для этого случая изображены на рис. 1. Будем также считать, что при радиационном переходе между электронными терминами  $U_i$  и  $U_f$  не происходит изменения проекции  $L$  орбитального углового момента молекулы на межъядерную ось. Это также соответствует рассматриваемому в данной статье случаю переходов  $^2\Sigma_g^+ \rightarrow ^2\Sigma_u^+$ . Тогда парциальное сечение фотодиссоциации

$$\text{AB}(i, vJ) + \hbar\omega \rightarrow \text{AB}(f, E') \rightarrow \text{A} + \text{B} \tag{5}$$

с заданного колебательно-вращательного уровня энергии  $vJ$  начального связанного электронного термина  $U_i(R)$  молекулы в непрерывный спектр отталкивательного термина  $U_f(R)$  с энергией  $E'$  определяется следующим

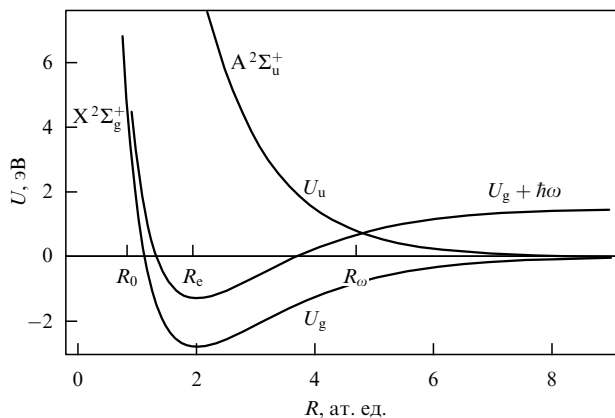


Рис. 1. Схема, иллюстрирующая поглощение света молекулярным ионом  $\text{H}_2^+$  при электронном переходе между его основным (четным)  $^2\Sigma_g^+$  и первым возбужденным (нечетным)  $^2\Sigma_u^+$  терминами.  $R_\omega$  — точка пересечения кривых потенциальной энергии  $U_g + \hbar\omega$  и  $U_u$ .

выражением (см., например, [31, 32]):

$$\sigma_{vJ}^{\text{p.d.}}(\omega) = \frac{4\pi^2\omega}{3c(2J+1)} \left[ (J+1) |d_{E',J+1;vJ}^{(f,i)}|^2 + J |d_{E',J-1;vJ}^{(f,i)}|^2 \right], \quad (6)$$

$$\hbar\omega = |E_{vJ}| + E', \quad E' = \frac{\hbar^2(q')^2}{2\mu}. \quad (7)$$

Здесь  $c$  — скорость света;  $|E_{vJ}|$  — энергия связи молекулы АВ( $i, vJ$ ) в состоянии с колебательным квантовым числом  $v$  и вращательным квантовым числом  $J$ ;  $q'$  и  $E'$  — волновое число и кинетическая энергия ( $E' > 0$ ) разлетающихся частиц А и В в асимптотической области межъядерных расстояний,  $R \rightarrow \infty$ . Результат (6) просуммирован по двум возможным значениям  $J' = J \pm 1$  орбитального углового момента относительного движения атомных частиц в конечном состоянии  $f$ . Отсчет потенциальной энергии  $U_i(R)$  и  $U_f(R)$  здесь и ниже ведется от границы диссоциации молекулы (т.е.  $U_i(\infty) = U_f(\infty) = 0$ , поскольку расщепление термов при  $R \rightarrow \infty$  в рассматриваемом нами случае отсутствует). Колебательно-вращательная энергия  $E_{vJ}$  в состоянии  $vJ$  дискретного спектра молекулы также отсчитывается от ее диссоциационного предела  $U_i(\infty) = 0$  и связана с энергией  $\mathcal{E}_{vJ} > 0$  в (14), отсчитанной от положения уровня  $v = 0, J = 0$ , соотношением  $|E_{vJ}| = D_0 - \mathcal{E}_{vJ}$ , где  $D_0 \equiv |E_{v=0, J=0}|$  — энергия диссоциации молекулы АВ в начальном электронном состоянии  $i$ . Таким образом, величина  $E_{vJ}$  содержит только полную энергию относительного движения ядер в потенциальной яме  $U_i(R)$  и изменяется в диапазоне  $-D_0 \leq E_{vJ} < 0$ .

Матричный элемент  $d_{E'J',vJ}^{(f,i)}$  дипольного момента перехода  ${}^2\Sigma_g^+, v, J \rightarrow {}^2\Sigma_u^+, E, J'$  по радиальным волновым функциям  $\chi(R)$  относительного движения частиц А и В в дискретном спектре начального связанного электронного состояния  $U_i$  и в непрерывном спектре конечного отталкивательного состояния  $U_f$  имеет вид

$$d_{E'J',vJ}^{(f,i)} = \left\langle \chi_{E'J'}^{(u)}(R) | d_{fi}(R) | \chi_{vJ}^{(g)}(R) \right\rangle = \int_0^\infty (\chi_{E'J'}^{(f)}(R))^* d_{fi}(R) \chi_{vJ}^{(i)}(R) R^2 dR. \quad (8)$$

Здесь  $d_{fi}(R)$  — электронный матричный элемент перехода между термами  $U_i \rightarrow U_f$

$$\mathbf{d}_{fi}(\mathbf{R}) = \left\langle \phi_f(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \left| e \sum_j \mathbf{r}_j \right| \phi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \right\rangle = \int \phi_f^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \left( e \sum_j \mathbf{r}_j \right) \phi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d\mathbf{r} \quad (9)$$

по адиабатическим волновым функциям  $\phi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  и  $\phi_f(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  электронной оболочки молекулы АВ,  $\mathbf{r}_j$  — радиус-вектор  $j$ -го электрона относительно центра масс молекулы АВ ( $n$  — полное число электронов;  $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$ , и  $d\mathbf{r} = d\mathbf{r}_1 \times \dots \times d\mathbf{r}_n$ );  $\mathbf{R}$  — радиус-вектор, соединяющий ядра А и В, причем электронный матричный элемент перехода направлен вдоль межъядерной оси, т.е.  $\mathbf{d}_{fi} \parallel \mathbf{R}$ .

Дипольный матричный элемент электронного перехода (9) связан с соответствующей силой осциллятора перехода  $f_{fi}(R_{\omega})$  на частоте  $\omega = \Delta U_{\text{ug}}(R_{\omega})/\hbar$  соотноше-

нием

$$f_{fi}(R_{\omega}) = \frac{2}{3} \frac{m_e \omega}{\hbar e^2} |d_{fi}(R_{\omega})|^2, \quad (10)$$

где  $m_e$  и  $e$  — масса и заряд электрона. Ядерные волновые функции в (8) нормированы следующим образом:

$$\int_0^\infty |\chi_{vJ}^{(i)}(R)|^2 R^2 dR = 1, \quad \int_0^\infty (\chi_{E'J'}^{(f)}(R))^* \chi_{EJ}^{(f)}(R) R^2 dR = \delta(E - E'). \quad (11)$$

При достаточно высоких температурах, когда тепловая энергия  $kT$  оказывается того же порядка величины или превышает энергию нижнего колебательного кванта молекулы  $\hbar\omega_e$ , суммарный коэффициент фотодиссоциационного поглощения  $k_T^{\text{p.d.}}(\omega)$ ,  $\text{см}^{-1}$ , определяется вкладом большого числа колебательно-вращательных уровней  $vJ$ . Для заданной энергии фотона  $\hbar\omega$  величина  $k_T^{\text{p.d.}}(\omega)$  может быть представлена в виде

$$k_T^{\text{p.d.}}(\omega) = \sigma_T^{\text{p.d.}}(\omega) N_{\text{AB}}, \quad N_{\text{AB}} = \sum_{vJ} N_{\text{AB}}^{(vJ)}, \quad (12)$$

т.е. выражается через суммарную концентрацию  $N_{\text{AB}} = \sum_{vJ} N_{\text{AB}}(vJ)$  молекул в связанном электронном состоянии  $i$  и усредненное по бальмановскому распределению сечение фотодиссоциации  $\sigma_T^{\text{p.d.}}(\omega)$  при заданной температуре  $T$

$$\sigma_T^{\text{p.d.}}(\omega) = \sum_{vJ} \sigma_{vJ}^{\text{p.d.}}(\omega) \frac{N_{\text{AB}}^{(vJ)}}{N_{\text{AB}}} = \frac{\exp(-D_0/kT)}{Z_{v,r}} \sum_{vJ} (2J+1) \sigma_{vJ}^{\text{p.d.}}(\omega) \exp\left(-\frac{E_{vJ}}{kT}\right). \quad (13)$$

Здесь  $D_0$  — энергия диссоциации молекулы, а  $Z_{v,r}$  — колебательно-вращательная статистическая сумма молекулы в начальном связанном электронном состоянии  $i$ :

$$Z_{v,r} = \sum_{vJ} (2J+1) \exp\left(-\frac{E_{vJ}}{kT}\right). \quad (14)$$

Следует отметить, что статистическая сумма  $Z_{v,r}$  относится здесь (как и обычно) к основному колебательно-вращательному уровню двухатомной молекулы, т.е.  $\mathcal{E}_{v=0, J=0} = 0$ . Поэтому величина  $E_{vJ}$  в (14) связана с введенной ранее энергией  $E_{vJ}$  (отсчитанной от границы диссоциации молекулярного иона  $\text{H}_2^+({}^2\Sigma_g^+)$ ) соотношением  $\mathcal{E}_{vJ} = E_{vJ} + D_0$ .

С помощью закона действующих масс [33]

$$\frac{N_{\text{AB}}}{N_{\text{A}} N_{\text{B}}} = \frac{Z_{v,r} g_{\text{AB}}}{\alpha g_{\text{A}} g_{\text{B}}} \left( \frac{2\pi\hbar^2}{\mu kT} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{D_0}{kT}\right) \quad (15)$$

полная концентрация  $N_{\text{AB}}$  молекул АВ в связанном состоянии начального электронного терма  $i$  может быть выражена через произведение концентраций  $N_{\text{A}}$  и  $N_{\text{B}}$  атомов, находящихся в непрерывном спектре. Здесь фактор симметрии в (15) равен  $\alpha = 1$  и  $\alpha = 2$  соответственно для гетероядерных и гомоядерных молекул. Он учитывает, что для молекулы, состоящей из одинаковых ядер, два взаимно противоположных направления

межъядерной оси соответствуют в действительности одному и тому же квантовому состоянию двухатомной системы.

Приведем теперь исходные формулы для эффективных сечений и коэффициентов свободно-свободных радиационных переходов:

$$A + B + \hbar\omega \rightarrow (A + B)_i + \hbar\omega \rightarrow (A + B)_f \rightarrow A + B. \quad (16)$$

Так же, как и в случае фотодиссоциации (5), процесс поглощения фотона (16) происходит в результате электронного перехода между начальным  $i$  и конечным  $f$  термами квазимолекулы АВ, образующейся в ходе столкновения атомов А и В. Квантовое выражение для коэффициента поглощения света  $k_T^{\text{fr-fr}}(\omega)$  в процессе (16) может быть получено с использованием общей формулы для дипольно-разрешенных переходов в континууме (см., например, [31]). Для радиационных переходов (16) сталкивающихся частиц А и В из континуума начального электронного состояния  $i$  с энергией  $E$  в континуум конечного электронного состояния  $f$  с энергией  $E'$  коэффициент поглощения имеет вид

$$k_T^{\text{fr-fr}}(\omega) = \eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega) N_A N_B, \quad \eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega) = \langle V \sigma_{E',E}^{(f,i)} \rangle_T, \quad (17)$$

$$\sigma_{E',E}^{(f,i)}(\omega) = \frac{1}{\alpha} \frac{g_{AB}}{g_A g_B} \frac{8\pi^4 \hbar \omega}{3c q^2} \sum_J \left[ (J+1) |d_{E',J+1;EJ}^{(f,i)}|^2 + J |d_{E',J-1;EJ}^{(f,i)}|^2 \right]. \quad (18)$$

Здесь  $\sigma_{E',E}^{(f,i)}$  — эффективное сечение,  $\text{см}^4 \text{с}$ , а  $\eta_T^{\text{fr-fr}}$  — константа скорости процесса фотопоглощения (16),  $\text{см}^5$ ,  $k_{A-B}^{\text{fr-fr}}$  — соответствующий коэффициент поглощения,  $\text{см}^{-1}$ ;  $V = (2E/\mu)^{1/2}$ ,  $q = \mu V/\hbar$  — относительная скорость и волновое число сталкивающихся частиц А и В при  $R \rightarrow \infty$ , а  $J$  — квантовое число орбитального углового момента относительного движения атомов в начальном состоянии (причем  $J = q\rho$  в квазиклассическом приближении, где  $\rho$  — прицельный параметр). Электронные статистические веса молекулы в начальном связанном состоянии  $i$ , а также свободных частиц А и В обозначены соответственно  $g_{AB}$ ,  $g_A$  и  $g_B$ ,  $\mu$  — приведенная масса молекулы,  $\alpha$  — фактор симметрии, равный соответственно 1 для гетероядерных молекул и 2 для гомоядерных молекул. Скобки в (17) означают усреднение по максвелловскому распределению скоростей при заданной температуре газа (плазмы)  $T$ .

Следует отметить, что так же, как и представленная выше формула (6) для сечения фотодиссоциации, формула (18) относится к случаю переходов между электронными термами  $U_i$  и  $U_f$  с  $\Delta A = 0$ . При этом коэффициент фотопоглощения при свободно-свободном переходе сталкивающихся атомов может быть представлен в виде (см., например, [32, 34])

$$k_T^{\text{fr-fr}}(\omega) = \frac{1}{\alpha} \frac{g_{AB}}{g_A g_B} N_A N_B \left( \frac{2\pi\hbar^2}{\mu k T} \right)^{3/2} \frac{4\pi^2 \omega}{3c} \times \int_0^\infty dE \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \sum_J \left[ (J+1) |d_{E',J+1;EJ}^{(f,i)}|^2 + J |d_{E',J-1;EJ}^{(f,i)}|^2 \right]. \quad (19)$$

Энергии  $E$  и  $E'$  удовлетворяют закону сохранения энергии для процесса (16):

$$E' = E + \hbar\omega, \quad E = \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu}, \quad E' = \frac{\hbar^2 (q')^2}{2\mu}. \quad (20)$$

Дипольные матричные элементы  $d_{E',J',EJ}^{(f,i)} = \langle \chi_{E',J'}^{(f)}(R) | d_{fi}(R) | \chi_{EJ}^{(i)}(R) \rangle$  для свободно-свободного перехода отличаются от (8) лишь заменой начальной ядерной волновой функции дискретного спектра  $\chi_{vJ}^{(i)}(R)$  соответствующей волновой функцией непрерывного спектра  $\chi_{EJ}^{(i)}(R)$  с нормировкой на  $\delta$ -функцию энергии.

### 3. Связанно-свободные радиационные переходы

#### 3.1. Парциальные сечения фотодиссоциации из возбужденного колебательно-вращательного состояния

При вычислении парциального сечения фотодиссоциации (6) для интересующего нас здесь случая достаточно высоких колебательно-вращательных уровней  $vJ$  следует учесть, что для заданной частоты перехода  $\omega$  основной вклад в интеграл по межъядерным расстояниям в (8) вносит небольшая окрестность точки  $R_\omega$ , в которой пересекаются кривые потенциальной энергии  $U_i(R) + \hbar\omega$  и  $U_f(R)$  компаунд-системы (молекула + фотон), т.е. когда

$$\Delta U_{fi}(R_\omega) = U_f(R_\omega) - U_i(R_\omega) = \hbar\omega. \quad (21)$$

Поэтому расчет радиального матричного элемента дипольного момента (8) можно выполнить квазиклассическим методом Ландау [35] (см. также [36], с. 399–401) или в рамках подхода, основанного на квантовом решении задачи о неадиабатических переходах в модели линейных пересекающихся термов. В рамках такого подхода в работе Райса [37] получена известная формула для вероятности неадиабатического перехода, содержащая функцию Эйри. Эта формула применима, когда классические точки поворота  $R = a_{vJ}$  находятся как вдали, так и вблизи от точки пересечения  $R_\omega$  кривых потенциальной энергии. Отметим, что формула Райса была первоначально выведена в импульсном представлении для наклонов кривых потенциальной энергии одного и того же знака. Соответствующий метод расчета вероятностей неадиабатических переходов между двумя различными электронными термами квазимолекулы изложен в задаче 3 к § 90 в [36] при рассмотрении столкновений второго рода.

Дальнейшее обобщение результата [37] проведено в работах [38–43] в следующих двух направлениях: а) учет более реального поведения кривых потенциальной энергии при больших расстояниях от точки пересечения  $R_\omega$ ; б) рассмотрение потенциальных кривых с наклонами различных знаков. Результат, аналогичный [37], подтвержден в случае слабой связи независимо от знака наклонов кривых потенциальной энергии. Подробное изложение наиболее важных результатов в этой области содержится в [44]. Недавние расчеты [23] наглядно продемонстрировали, что линейная модель приводит к хорошему количественному согласию с имеющимися численными квантовомеханическими расчетами сечений фотодиссоциации молекулярного иона  $\text{H}_2^+$  из первых принципов.

Таким образом, в рамках указанного подхода для ядерных волновых функций дискретного  $\chi_{vJ}^{(i)}(R)$  и непрерывного  $\chi_{E'J'}^{(f)}(R)$  спектров берутся точные решения задачи об одномерном движении ядер в однородном поле, которые с точностью до соответствующих нормировочных постоянных сводятся к функциям Эйри (см. [36], § 24). Применение такого подхода к вычислению дипольных матричных элементов радиационных переходов между электронными термами молекулы и использование исходной формулы (6) для связанно-свободного перехода приводит к следующему выражению для сечения фотодиссоциации (5) с заданного колебательно-вращательного уровня  $vJ$  [23]:

$$\sigma_{vJ}^{(1)}(\omega) = \frac{8\pi^3(2\mu)^{1/2}\omega}{3cT_{vJ}} \frac{|d_{fi}(R_\omega)|^2}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} |\beta(R_\omega)|^{1/2} \times \text{Ai}^2 \left\{ -\beta(R_\omega) \left[ E_{vJ} - U_i(R_\omega) - \frac{\hbar^2(J+1/2)^2}{2\mu R_\omega^2} \right] \right\}. \quad (22)$$

Здесь  $\text{Ai}(x)$  — функция Эйри (см. [45]):

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos \left( \frac{u^3}{3} + ux \right) du, \quad (23)$$

причем принятое для нее в настоящее время обозначение (23) отличается от определения функции  $\Phi(x)$ , данного Фоком (см., например, [36]), на величину  $\pi^{1/2}$ ; величина  $T_{vJ}$  — период колебательно-вращательного движения ядер в связанном электронном состоянии  $U_i(R)$  на уровне энергии  $E_{vJ}$ , который может быть вычислен по формуле

$$T_{vJ} = \frac{2\pi\hbar}{|E_{vJ} - E_{v\pm 1, J}|};$$

$\Delta F_{fi}(R_\omega)$  — разность наклонов кривых потенциальной энергии в точке их пересечения  $R = R_\omega$ :

$$\Delta F_{fi}(R_\omega) = \left| \frac{dU_f(R)}{dR} - \frac{dU_i(R)}{dR} \right|_{R=R_\omega}. \quad (24)$$

Величина  $\beta$  в (22) имеет вид

$$\beta(R_\omega) = \left( \frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left| \frac{\Delta F_{fi}(R_\omega)}{F_f^{(J')}(R_\omega) F_i^{(J)}(R_\omega)} \right|^{2/3}, \quad (25)$$

где  $F_i^{(J)}(R_\omega)$  и  $F_f^{(J')}(R_\omega)$  — наклоны кривых потенциальной энергии в начальном и конечном электронном состояниях с учетом центробежной энергии:

$$F_i^{(J)}(R_\omega) = -\frac{d}{dR} \left( U_i + \frac{\hbar^2(J+1/2)^2}{2\mu R^2} \right) \Big|_{R=R_\omega} = F_i^{(J=0)}(R_\omega) + \frac{\hbar^2(J+1/2)^2}{\mu R_\omega^3}, \quad (26)$$

$$F_f^{(J')}(R_\omega) = -\frac{d}{dR} \left( U_f + \frac{\hbar^2(J'+1/2)^2}{2\mu R^2} \right) \Big|_{R=R_\omega} = F_f^{(J'=0)}(R_\omega) + \frac{\hbar^2(J'+1/2)^2}{\mu R_\omega^3}. \quad (27)$$

С помощью выражений (24)–(27) и (10) квантовая формула (22) для сечения фотодиссоциации может быть

переписана в виде

$$\sigma_{vJ}^{\text{p.d.}}(\omega) = \frac{4\pi^3\alpha\hbar^3}{m_e T_{vJ}} \left( \frac{2\mu}{\hbar^2 \Delta F_{fi}(R_\omega)} \right)^{2/3} \times \frac{f_{fi}(R_\omega) \text{Ai}^2(-\xi)}{|F_f^{(J')}(R_\omega) F_i^{(J)}(R_\omega)|^{1/3}}, \quad (28)$$

где  $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$  — постоянная тонкой структуры, а величина  $\xi$  определяется выражением

$$\xi = \beta(R_\omega) \left[ E_{vJ} - U_i(R_\omega) - \frac{\hbar^2(J+1/2)^2}{2\mu R_\omega^2} \right]. \quad (29)$$

Дальнейшие упрощения связаны с использованием известной асимптотики функции Эйри

$$\text{Ai}(-\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}|\xi|^{1/4}} \sin \left( \frac{2}{3}|\xi|^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) \quad (30)$$

в классически разрешенной области ( $\xi > 0$ ) движения ядер А и В между точками поворота  $a_1(vJ) \leq R_\omega \leq a_2(vJ)$ , т. е. когда

$$E_{vJ} - U_i(R_\omega) - \frac{\hbar^2(J+1/2)^2}{2\mu R_\omega^2} \geq 0.$$

Усредним с помощью (30) результат (22) по периоду быстроосциллирующей части функции  $\text{Ai}^2(-\xi)$  в классически разрешенной области:

$$\langle \text{Ai}^2(-\xi) \rangle = \frac{1}{2\pi|\xi|^{1/2}} \quad (31)$$

и пренебрежем ее экспоненциально малым затуханием в классически запрещенной области ( $\xi < 0$ ).

Тогда из выражений (22) и (29) непосредственно следует простое квазиклассическое выражение для парциального сечения фотодиссоциации молекулы с фиксированного колебательно-вращательного уровня  $vJ$ , усредненное по периоду осцилляций:

$$\sigma_{vJ}^{\text{p.d.}}(\omega) = \frac{8\pi^2\omega}{3cT_{vJ}} \frac{|d_{fi}(R_\omega)|^2}{\Delta F_{fi}(R_\omega) V_{vJ}(R_\omega)}. \quad (32)$$

Здесь

$$V_{vJ}(R_\omega) = \sqrt{\frac{2}{\mu} \left[ E_{vJ} - U_i(R_\omega) - \frac{\hbar^2(J+1/2)^2}{2\mu R_\omega^2} \right]} \quad (33)$$

— относительная скорость движения ядер молекулы в точке пересечения  $R_\omega$  кривых потенциальной энергии (21).

Выражение (32) применимо в классически разрешенной области ( $\xi > 0$ ) межъядерного расстояния  $a_1(vJ) \leq R_\omega \leq a_2(vJ)$  вдали от точек поворота (т.е. при достаточно больших значениях разности энергий  $E_{vJ} - U_i(R_\omega) - \hbar^2(J+1/2)^2/2\mu R_\omega^2$ ). Здесь  $a_1(vJ)$  и  $a_2(vJ)$  соответственно левая и правая точки поворота при движении по кривой потенциальной энергии  $U_i(R)$  начального (связанного) электронного состояния молекулы. Отметим, что результат (32) может быть также получен непосредственно из исходного выражения для сечения фотодиссоциации (6), если воспользоваться

результатами квазиклассической теории Ландау (см. [36], с. 399–401) для расчета дипольного матричного элемента перехода ядер системы Н–Н<sup>+</sup> в точке пересечения кривых потенциальной энергии.

Как видно из (22)–(29), квантовый результат для парциального сечения фотодиссоциации отличается от квазиклассического лишь при малых значениях разности

$$E_{vJ} - U_i(R_\omega) - \frac{\hbar^2(J+1/2)^2}{2\mu R_\omega^2}.$$

В частности, учет квантового характера движения ядер делает конечным величину сечения в точках поворота и позволяет описать его быстрое затухание в классически запрещенных областях  $R < a_1(vJ)$  и  $R > a_2(vJ)$ .

Удобно переписать выражение (32) в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{vJ}^{\text{p,d}}(\omega) &= \\ &= \frac{2^{3/2}\pi^2\alpha\hbar^2\sqrt{\mu}f_{fi}(R_\omega)}{m_e T_{vJ}\Delta F_{fi}(R_\omega)\sqrt{E_{vJ} - U_i(R_\omega) - \hbar^2(J+1/2)^2/2\mu R_\omega^2}}, \end{aligned} \quad (34)$$

содержащем явную зависимость от энергии  $E_{vJ}$  колебательно-вращательного уровня и квантового числа  $J$ .

Очевидно, что формулы (32) и (34) могут быть непосредственно получены из исходного выражения для сечения фотодиссоциации (6) с помощью квазиклассического приближения для ядерных волновых функций и стандартного квазиклассического варианта теории Ландау (см. [36]) для матричных элементов перехода. В квазиклассическом приближении радиальные волновые функции относительного движения частиц А и В в непрерывном спектре по классически разрешенной области межъядерного расстояния имеют вид

$$\begin{aligned} \chi_{EJ}(R) &= \frac{C_E}{R\sqrt{V_{EJ}(R)}} \cos \Phi(R), \\ \Phi(R) &= \int_{a_1(E)}^R q_{EJ}(R) dR - \frac{\pi}{4}, \\ q_{EJ}(R) &= \frac{\mu V_{EJ}(R)}{\hbar} = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ E - U(R) - \frac{\hbar^2(J+1/2)^2}{2\mu R^2} \right]}, \end{aligned} \quad (35)$$

где  $q_{EJ}(R)$  и  $V_{EJ}(R)$  — радиальное волновое число и относительная скорость частиц. Величины  $\Phi(R)$  и  $C_E = (2/\pi\hbar)^{1/2}$  — фаза и нормировочная постоянная волновой функции в континууме молекулы ( $E > 0$ ). Результат для волновой функции  $\chi_{vJ}^{(i)}(R)$  дискретного спектра ( $E_{vJ} < 0$ ) отличается от (35) только конкретной величиной нормировочной постоянной  $C_{vJ} = 2/\sqrt{T_{vJ}}$  и заменой энергии  $E \rightarrow E_{vJ}$ . Следует подчеркнуть, что эти нормировочные факторы были использованы при получении как квантового (22), так и квазиклассического (32) выражений. Это обеспечивало полное соответствие указанных соотношений вдали от классических точек поворота.

Для свободно-свободных переходов (16) без изменения проекции ( $\Delta L = 0$ ) орбитального момента электронной оболочки квазимолекулы АВ аналогичное рассмотрение приводит к следующему результату для суммы квадратов модулей матричных элементов дипольного

момента [23]:

$$\begin{aligned} &\frac{J+1}{2J+1} |d_{E',J+1;EJ}^{(f,i)}|^2 + \frac{J}{2J+1} |d_{E',J-1;EJ}^{(f,i)}|^2 = \\ &= \left(\frac{\mu}{2}\right)^{1/2} \frac{|d_{fi}(R_\omega)|^2}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} |\beta(R_\omega)|^{1/2} \times \\ &\times \text{Ai}^2 \left\{ -\beta(R_\omega) \left[ E - U_i(R_\omega) - \frac{\hbar^2(J+1/2)^2}{2\mu R_\omega^2} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (37)$$

вычисленных по волновым функциям относительного движения частиц А и В в непрерывном спектре ( $E = \hbar^2 q^2/2\mu > 0$ ,  $E' = E + \hbar\omega > 0$ ).

Следует отметить, что представленные выше квантовые и квазиклассические формулы применимы при условии, что разность наклонов кривых потенциальной энергии не слишком мала. Специальный случай, когда наклоны кривых потенциальной энергии начального и конечного термов близки друг к другу, рассмотрен в работе [46] на основе квазиклассического приближения.

### 3.2. Усреднение по бoльцмановскому распределению и коэффициент фотодиссоциационного поглощения

При достаточно высоких температурах, которые реализуются в звездных фотосферах, одновременно возбужденными, как правило, оказывается большое количество колебательно-вращательных уровней  $vJ$ . В такой ситуации основной характеристикой связанно-свободного перехода (5) является сечение фотодиссоциации  $\sigma_T(\omega)$  (13), усредненное по бoльцмановской функции распределения с учетом вклада всех колебательно-вращательных уровней, которые вносят вклад в непрерывное фотопоглощение при заданной энергии кванта  $\hbar\omega$ . Согласно (12) в условиях локального термодинамического равновесия эта величина позволяет определить суммарный коэффициент фотодиссоциационного поглощения по известной полной концентрации молекул в начальном связанном состоянии. Следует отметить, что имеющиеся выражения для  $\sigma_T^{\text{p,d}}$  были получены [47, 48] в рамках чисто классического рассмотрения колебательного движения молекулы в предположении, что вращательными эффектами можно полностью пренебречь. В работе [49] показано, как корректным образом следует одновременно учесть колебательные и вращательные эффекты в условиях, когда их совместное влияние особенно существенно, а в недавней работе [23] получены аналитические формулы для сечения  $\sigma_T^{\text{p,d}}(\omega)$  и интегрального коэффициента фотодиссоциационного поглощения  $k_T^{\text{p,d}}(\omega)$ .

При вычислении усредненного по бoльцмановскому распределению сечения фотодиссоциации  $\sigma_T^{\text{p,d}}(\omega)$  суммирование в (13) по колебательно-вращательным уровням  $vJ$  может быть заменено интегрированием по  $dv$  и  $dJ$ . При этом оно может быть выполнено способом, аналогичным развитому в работе [49] при расчете константы скорости процесса ассоциативной ионизации высоковозбужденного атома, просуммированной по всем возможным колебательно-вращательным уровням молекулярного иона в конечном канале реакции, и в работе [50] при вычислении статистической суммы молекулы. Такой способ расчета соответствует замене дискретного спектра энергетических колебательно-вращательных уровней молекулы квазинепрерывным. Он широко используется также в физике высоковозбужденных атомных состояний (см., например, [51]). В рамках указанного приближения

выражение (13) может быть переписано в виде

$$\sigma_T^{\text{p.d}}(\omega) = \frac{\exp(-D_0/kT)}{Z_{v,r}} \int_0^{v_{\max}} dv \times \\ \times \int_0^{J_{\max}(v)} 2J dJ \sigma_{v,J}^{\text{p.d}}(\omega) \exp\left(-\frac{E_{vJ}}{kT}\right). \quad (38)$$

Далее, следуя [49], используем соотношение Бора–Зоммерфельда

$$dv = \frac{T_{vJ}}{2\pi\hbar} dE_{vJ}, \quad T_{vJ} = \oint \frac{dR}{V_{vJ}(R)}, \quad (39)$$

согласно которому интегрирование по колебательному квантовому числу  $v$  можно заменить интегрированием по энергии квазинепрерывного спектра молекулы ( $-D_0 \leq E < 0$ ). Это дает

$$\sigma_T^{\text{p.d}}(\omega) = \frac{\exp(-D_0/kT)}{2\pi\hbar Z_{v,r}} \int_{E_{\min}}^0 dE_{vJ} \exp\left(-\frac{E_{vJ}}{kT}\right) \times \\ \times \int_0^{J_{\max}} 2JT_{vJ} \sigma_{v,J}^{\text{p.d}}(\omega) dJ. \quad (40)$$

В рамках приближения квазинепрерывного спектра квантовые числа  $v$  и  $J$  (а следовательно, и колебательно-вращательная энергия  $E_{vJ}$  молекулы) в (38)–(40) являются непрерывными величинами в соответствии с принципом соответствия между квантовыми и классическими величинами. Таким образом, для энергии молекулы в связанном состоянии можно использовать то же обозначение  $E_{vJ} \rightarrow E$  (где  $E < 0$ ), что и в случае непрерывного спектра (где  $E > 0$ ). Тогда, подставляя аналитическую формулу (22) для парциального сечения фотодиссоциации  $\sigma_{v,J}^{\text{p.d}}(\omega)$  из заданного колебательно-вращательного состояния в (40), получаем следующее выражение для усредненного по бальцмановскому распределению сечения фотодиссоциации:

$$\sigma_T^{\text{p.d}}(\omega) = \frac{4\pi^2 \sqrt{2\mu\omega}}{3\hbar c Z_{v,r}} \frac{|d_{fi}(R_\omega)|^2}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \exp\left(-\frac{D_0}{kT}\right) \times \\ \times \int_{E_{\min}^{\text{p.d}}}^0 dE \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \int_0^{J_{\max}} 2J dJ \sqrt{\beta} \times \\ \times \text{Ai}^2\left\{-\beta\left[E - U_i(R_\omega) - \frac{\hbar^2 J^2}{2\mu R_\omega^2}\right]\right\}. \quad (41)$$

Эта формула учитывает относительное движение ядер как по классически разрешенной, так и по классически запрещенной областям межъядерного расстояния. Интегрирование по вращательному квантовому числу в (41) осуществляется в пределах  $0 \leq J < J_{\max}(E)$ , где  $J_{\max}(E)$  — максимально возможное значение  $J$  при заданной энергии  $E$  в квазинепрерывном спектре ( $E < 0$ ). При квантовом описании относительного движения ядер нижний предел  $E_{\min}$  интегрирования по энергии  $E$  в (41) определяется из закона сохранения энергии для процесса фотодиссоциации (7), т.е.

$$E_{\min}^{\text{p.d}} = \max\{-\hbar\omega, -D_0\} \quad (E_{\min}^{\text{p.d}} < 0). \quad (42)$$

Здесь учтено, что при больших энергиях кванта  $\hbar\omega$  минимально возможное для процесса фотодиссоциации

значение энергии молекулы в начальном связанном состоянии ограничено основным колебательно-вращательным уровнем энергии  $E_{v=0, J=0} = -D_0$ .

Далее, следуя [23], вводим безразмерные переменные

$$\varepsilon = \frac{E - U_i(R_\omega)}{kT}, \quad v = \frac{\hbar^2 J^2}{2\mu R_\omega^2 kT}. \quad (43)$$

Тогда усредненное по бальцмановскому распределению сечение принимает вид

$$\sigma_T^{\text{p.d}}(\omega) = \frac{16\pi^3}{3c} \frac{\omega R_\omega^2 |d_{fi}(R_\omega)|^2}{\Delta F_{fi}(R_\omega) Z_{v,r}} \left(\frac{\mu kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \times \\ \times \exp\left(-\frac{D_0 + U_i(R_\omega)}{kT}\right) \Theta_T^{\text{p.d}}(\omega), \quad (44)$$

$$\Theta_T^{\text{p.d}}(\omega) = 2\sqrt{\pi} \int_{\varepsilon_{\min}^{\text{p.d}}}^{\varepsilon_{\max}^{\text{p.d}}} d\varepsilon \exp(-\varepsilon) \times \\ \times \int_0^\infty dv \sqrt{A_v} \text{Ai}^2[-A_v(\varepsilon - v)]. \quad (45)$$

Для заданной частоты фотона  $\omega$  и температуры газа (плазмы)  $T$  величина  $A_v$  определяется выражением (см. (25))

$$A_v \equiv kT\beta(R_\omega) = kT \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left| \frac{\Delta F_{fi}(R_\omega)}{F_i^{(v)}(R_\omega) F_f^{(v)}(R_\omega)} \right|^{2/3}, \quad (46)$$

где наклоны кривых потенциальной энергии  $F_i^{(v)}(R_\omega)$ ,  $F_f^{(v)}(R_\omega)$  и их разность  $\Delta F_{fi}(R_\omega)$  в точке пересечения  $R_\omega$  (21) могут быть найдены по формулам (24), (26), (27), (43). Отметим, что в (46) мы положили величину  $v' = \hbar^2(J')^2/2\mu R_\omega^2 kT$  безразмерной центробежной энергии в конечном состоянии равной соответствующему значению в начальном состоянии (43). Это оправдано, поскольку основной вклад в интеграл (45) вносят значения  $J \gg 1$ , так что различия между величинами  $J$  и  $J' = J \pm 1$  в формулах (26) и (27) (а следовательно, и между  $v$  и  $v'$  в (46)) малы и ими можно пренебречь.

В рассматриваемом здесь случае начального связанного состояния  $U_i(R) < 0$  и конечного отталкивательного состояния  $U_f(R) > 0$  (сходящихся к одному диссоциационному пределу  $U_i(\infty) = U_f(\infty) = 0$ ) нижний и верхний пределы интегрирования по безразмерной центробежной энергии в (45) равны соответственно

$$\varepsilon_{\min}^{\text{p.d}} = \frac{E_{\min}^{\text{p.d}} - U_i(R_\omega)}{kT} = -\frac{\hbar\omega + U_i(R_\omega)}{kT} = \\ = -\frac{U_f(R_\omega)}{kT} < 0, \quad (47)$$

$$\varepsilon_{\max}^{\text{p.d}} = -\frac{U_i(R_\omega)}{kT} \equiv \frac{|U_i(R_\omega)|}{kT} > 0. \quad (48)$$

Простое квазиклассическое выражение для усредненного по бальцмановскому распределению сечения фотодиссоциации (5) может быть получено с использованием известного асимптотического выражения для функции Эйри после усреднения по периоду быстрых осцилляций. Необходимо также учесть, что в квазиклассическом приближении интегрирование по безразмерной центробежной энергии  $v$  должно реально проводиться в пределах  $0 \leq v \leq \varepsilon$ . Это соответствует рассмотрению отно-



сительного движения ядер молекулы лишь по классически разрешенной области межъядерного расстояния. При этом нижний предел интегрирования (47) по безразмерной энергии  $\varepsilon$  в (45) должен быть положен равным  $\varepsilon_{\min}^{\text{p.d.}} = 0$ , поскольку  $E_{\min}^{\text{p.d.}} = U_i(R_\omega) < 0$  (подробнее см. [23, 49]). Кроме того, для заданной частоты перехода  $\omega$  верхний предел интегрирования по вращательному квантовому числу в (41) определяется из соотношения  $\hbar^2 J^2 / 2\mu R_\omega^2 = E - U_i(R_\omega)$ . Таким образом, в квазиклассическом приближении верхний предел интегрирования по безразмерной центробежной энергии  $v_{\max} = \varepsilon$  (см. (43)). В результате предельный переход от квантовых выражений (44) и (45) к квазиклассическому приближению непосредственно следует из следующего соотношения:

$$\begin{aligned} \Theta_T^{\text{p.d.}}(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\varepsilon_{\max}^{\text{p.d.}}} d\varepsilon \exp(-\varepsilon) \int_0^\varepsilon \frac{dv}{(\varepsilon - v)^{1/2}} = \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\varepsilon_{\max}^{\text{p.d.}}} \varepsilon^{1/2} \exp(-\varepsilon) d\varepsilon = \frac{\gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/kT)}{\Gamma(3/2)}, \end{aligned} \quad (49)$$

где  $\gamma(3/2, z)$  — неполная гамма-функция порядка  $3/2$  (см. [45]):

$$\begin{aligned} \gamma\left(\frac{3}{2}, z\right) &= \int_0^z t^{1/2} \exp(-t) dt, \\ \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) &= \gamma\left(\frac{3}{2}, \infty\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \end{aligned} \quad (50)$$

Соответствующий квазиклассический результат для усредненного по бoльцмановскому распределению сечения фотодиссоциации  $\sigma_T^{\text{p.d.}}(\omega)$ , см<sup>2</sup>, может быть описан простой аналитической формулой

$$\begin{aligned} \sigma_T^{\text{p.d.}}(\omega) &= \frac{16\pi^3}{3c} \frac{\omega R_\omega^2 |d_{fi}(R_\omega)|^2}{\Delta F_{fi}(R_\omega) Z_{v,r}} \left(\frac{\mu kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \times \\ &\times \exp\left(-\frac{D_0 + U_i(R_\omega)}{kT}\right) \frac{\gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/kT)}{\Gamma(3/2)}. \end{aligned} \quad (51)$$

Квазиклассические выражения (49) и (51) применимы в области частот переходов  $\hbar\omega < \Delta U_{fi}(R_0)$ , т.е. когда  $R_\omega > R_0$ . Здесь точка  $R_0$  находится из соотношения  $U_i(R_0) = 0$ . В противоположном случае  $\hbar\omega > \Delta U_{fi}(R_0)$  квазиклассическое описание относительного движения ядер только по классически разрешенной области межъядерного расстояния приводит к нулевому значению для интегрального вклада дискретного спектра молекулы в фотопоглощение, обусловленное связанно-свободными переходами. Это означает, что бoльцмановски усредненное сечение  $\sigma_T^{\text{p.d.}}(\omega)$  становится равным нулю при  $R_\omega < R_0$ , т.е. фотодиссоциация молекулы (5) с большими передачами энергии  $\hbar\omega > \Delta U_{fi}(R_0)$  невозможна, если мы пренебрегаем движением по классически запрещенной области движения ядер.

Сечение  $\sigma_T^{\text{p.d.}}(\omega)$ , определяемое формулами (44)–(48) и (51), является функцией частоты  $\omega = \Delta U_{fi}(R_\omega)/\hbar$  и температуры  $T$ . Эти формулы дают возможность рассчитать коэффициент фотодиссоциационного поглощения (12) по заданному значению полной концентрации молекул АВ в дискретном спектре основного терма  $U_i$ . С использованием закона действующих масс (15) результат для коэффициента поглощения света может быть выражен через произведение концентраций  $N_A$  и  $N_B$  атомов в

непрерывном спектре. Это особенно удобно для астрофизических приложений. При этом мы исходим из выражений (12), (15), (44) и принимаем во внимание известное соотношение (10) между квадратом дипольного матричного элемента перехода и силой осциллятора перехода. В результате квантовая формула для интегрального коэффициента фотодиссоциационного поглощения  $k_T^{\text{p.d.}}(\omega)$ , см<sup>-1</sup>, при связанно-свободных переходах (5) выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} k_T^{\text{p.d.}}(\omega) &= \eta_T^{\text{p.d.}}(\omega) N_A N_B = \\ &= \frac{1}{\alpha} \frac{g_{AB}}{g_A g_B} N_A N_B 8\pi^3 \alpha \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{R_\omega^2 f_{fi}(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \times \\ &\times \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{kT}\right) \Theta_T^{\text{p.d.}}(\omega), \end{aligned} \quad (52)$$

где  $\alpha = e^2/\hbar c$ . Безразмерный фактор  $\Theta_T^{\text{p.d.}}(\omega)$  определяется выражением (45). Формула (52) приобретает особенно простой вид в квазиклассическом приближении:

$$\begin{aligned} k_T^{\text{p.d.}}(\omega) &= \frac{1}{\alpha} \frac{g_{AB}}{g_A g_B} N_A N_B 8\pi^3 \alpha \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{R_\omega^2 f_{fi}(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \times \\ &\times \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{kT}\right) \frac{\gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/kT)}{\Gamma(3/2)}, \end{aligned} \quad (53)$$

когда фактор  $\Theta_T^{\text{p.d.}}(\omega)$  сводится к квазиклассическому выражению (49). Как было отмечено выше, выражение (53) применимо в области  $\hbar\omega < \Delta U_{fi}(R_0)$ , т.е. когда  $R_\omega > R_0$ . В то же время  $k_T^{\text{p.d.}}(\omega) = 0$  при  $\hbar\omega > \Delta U_{fi}(R_0)$ , если учитывать движение ядер лишь по классически разрешенной области.

## 4. Свободно-свободные переходы и полный коэффициент поглощения

### 4.1. Вклад непрерывного спектра в коэффициент фотопоглощения

Вычисление коэффициента поглощения света (17) в процессе свободно-свободных переходов (16) проводится на основе того же метода [49], что и при выводе формул для коэффициентов фотодиссоциационного поглощения (см. [23]). Замена суммирования по  $J$  в исходной формуле (19) на интегрирование по  $dJ$  дает

$$\begin{aligned} k_T^{\text{fr-fr}}(\omega) &= \frac{1}{\alpha} \frac{g_{AB}}{g_A g_B} N_A N_B \left(\frac{2\pi\hbar^2}{\mu kT}\right)^{3/2} \frac{4\pi^2\omega}{3c} \times \\ &\times \int_0^\infty dE \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \int_0^\infty 2J dJ |d_{E', J \pm 1; E, J}^{(f, i)}|^2. \end{aligned} \quad (54)$$

Отметим, что интегрирование по квантовым числам  $J$  орбитального углового момента относительного движения сталкивающихся атомов эквивалентно интегрированию по прицельным параметрам  $\rho = J/q$  ( $q$  — волновое число при  $R \rightarrow \infty$ ). Интегрирование по энергии в (54) проводится по максвелловской функции распределения.

После подстановки квантового выражения (37) для квадрата модуля дипольного матричного элемента в (54) интегральный вклад свободно-свободных переходов (16) в коэффициент поглощения света может быть записан в

виде

$$k_T^{\text{fr-fr}}(\omega) = \frac{1}{\alpha} \frac{g_{AB}}{g_A g_B} N_A N_B \left( \frac{2\pi\hbar^2}{\mu kT} \right)^{3/2} \frac{2\pi^2 \sqrt{2\mu\omega}}{3c} \times \\ \times \frac{|d_{fi}(R_\omega)|^2}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \int_0^\infty dE \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \times \\ \times \int_0^\infty d(J^2) \sqrt{\beta_J(R_\omega)} \times \\ \times \text{Ai}^2 \left\{ -\beta_J(R_\omega) \left[ E - U_i(R_\omega) - \frac{\hbar^2 J^2}{2\mu R_\omega^2} \right] \right\}. \quad (55)$$

Интеграл по энергии в (55) берется в пределах  $0 \leq E < \infty$  в отличие от случая связанно-свободных переходов, для которых  $E_{\min}^{\text{p,d}} \leq E < 0$  (см. (12) и (41)).

Используя безразмерные переменные (43), формулу (55) можно переписать в виде

$$k_T^{\text{fr-fr}}(\omega) = \eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega) N_A N_B = \\ = \frac{1}{\alpha} \frac{g_{AB}}{g_A g_B} N_A N_B \frac{16\pi^3}{3c} \frac{\omega R_\omega^2 |d_{fi}(R_\omega)|^2}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \times \\ \times \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{kT}\right) \Theta_T^{\text{fr-fr}}(\omega). \quad (56)$$

Для свободно-свободных переходов безразмерный фактор

$$\Theta_T^{\text{fr-fr}}(\omega) = 2\sqrt{\pi} \int_{\varepsilon_{\min}^{\text{fr-fr}}}^\infty d\varepsilon \exp(-\varepsilon) \times \\ \times \int_0^\infty dv \sqrt{\Lambda_v} \text{Ai}^2[-\Lambda_v(\varepsilon - v)] \quad (57)$$

со следующим нижним пределом интегрирования:

$$\varepsilon_{\min}^{\text{fr-fr}} = \varepsilon_{\max}^{\text{p,d}} = \frac{|U_i(R_\omega)|}{kT} > 0. \quad (58)$$

Так же, как и в случае связанно-свободных радиационных переходов, расчет интегралов в (57) может быть выполнен в аналитическом виде при использовании квазиклассического приближения (подробнее см. [49]). Это дает [23]

$$\Theta_T^{\text{fr-fr}}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\varepsilon_{\min}^{\text{fr-fr}}}^\infty d\varepsilon \exp(-\varepsilon) \int_0^\varepsilon \frac{dv}{(\varepsilon - v)^{1/2}} = \\ = \frac{\Gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/kT)}{\Gamma(3/2)} \quad (59)$$

при  $\hbar\omega < \Delta U_{fi}(R_0)$ . Здесь  $\Gamma(3/2, z)$  — неполная гамма-функция порядка  $3/2$ , определяемая соотношением [45]

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}, z\right) = \int_z^\infty t^{1/2} \exp(-t) dt = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) - \gamma\left(\frac{3}{2}, z\right). \quad (60)$$

Таким образом, простое аналитическое выражение для коэффициента поглощения  $k_T^{\text{fr-fr}}(\omega)$ , содержащее явную зависимость от потенциальной энергии, имеет вид

$$k_T^{\text{fr-fr}}(\omega) = \eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega) N_A N_B = \frac{1}{\alpha} \frac{g_{AB}}{g_A g_B} N_A N_B 8\pi^3 \alpha \times \\ \times \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{R_\omega^2 f_{fi}(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{kT}\right) \times \\ \times \frac{\Gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/kT)}{\Gamma(3/2)}. \quad (61)$$

Квазиклассические выражения (59) и (61) применимы в области частот  $\hbar\omega < \Delta U_{fi}(R_0)$ , т.е. при  $R_\omega > R_0$ . При больших значениях частот переходов  $\hbar\omega > \Delta U_{fi}(R_0)$  фактор  $\Gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/kT)/\Gamma(3/2)$  в (61) должен быть заменен на единицу. Поскольку при этом интегральный вклад связанно-свободных переходов (5) в фотопоглощение отсутствует (в пренебрежении движением ядер по классически запрещенной области, см. раздел 3.1), то это означает, что в рассматриваемом приближении полный коэффициент поглощения света с частотами  $\hbar\omega > \Delta U_{fi}(R_0)$  полностью определяется свободно-свободными переходами (16).

#### 4.2. Интегральный вклад связанно-свободных и свободно-свободных переходов

Рассмотрим более детально вопрос об интегральном коэффициенте поглощения света в процессах (5) и (16). Как следует из сравнения формул (52) и (56), окончательные квантовые выражения для интегральных коэффициентов поглощения света  $k_T^{\text{p,d}}$  и  $k_T^{\text{fr-fr}}$  в процессах связанно-свободных и свободно-свободных переходов отличаются друг от друга лишь конкретными значениями нижнего и верхнего пределов интегрирования по безразмерной энергии. В частности, оба вклада оказываются пропорциональными произведению концентраций  $N_A N_B$  атомов А и В в непрерывном спектре. Это обстоятельство дает возможность получить более компактное выражение для суммарного коэффициента поглощения света в результате процессов (5) и (16), чем для каждого слагаемого в отдельности. В приближении квазинепрерывного спектра общая формула для суммарного коэффициента поглощения  $k_T(\omega)$ ,  $\text{см}^{-1}$ , имеет вид

$$k_T(\omega) = \eta_T(\omega) N_A N_B = k_T^{\text{p,d}}(\omega) + k_T^{\text{fr-fr}}(\omega). \quad (62)$$

Здесь  $\eta_T(\omega)$  — полная константа скорости фотопоглощения,  $\text{см}^5$ . С помощью выражений (45) и (57) получаем

$$k_T(\omega) = \frac{1}{\alpha} \frac{g_{AB}}{g_A g_B} N_A N_B 8\pi^3 \alpha \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{R_\omega^2 f_{fi}(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \times \\ \times \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{kT}\right) \Theta_T^{\text{tot}}(\omega). \quad (63)$$

Безразмерный фактор  $\Theta_T^{\text{tot}} = \Theta_T^{\text{p,d}} + \Theta_T^{\text{fr-fr}}$  может быть записан как

$$\Theta_T^{\text{tot}}(\omega) = 2\sqrt{\pi} \int_{\varepsilon_{\min}^{\text{p,d}}}^\infty d\varepsilon \exp(-\varepsilon) \int_0^\varepsilon dv \sqrt{\Lambda_v} \times \\ \times \text{Ai}^2[-\Lambda_v(\varepsilon - v)]. \quad (64)$$

Отметим, что отношение факторов  $\Theta_T^{\text{p,d}}(\omega)$  и  $\Theta_T^{\text{fr-fr}}(\omega)$  определяет относительный вклад связанно-свободных и свободно-свободных радиационных переходов (5) и (16) в полное фотопоглощение в зависимости от частоты фотона и температуры.

Предельный переход от общего квантового выражения (63) для коэффициента фотопоглощения к соответствующему квазиклассическому выражению для  $k_T(\omega)$  непосредственно следует из соотношения

$$\Theta_T^{\text{tot}}(\omega) = \Theta_T^{\text{p,d}}(\omega) + \Theta_T^{\text{fr-fr}}(\omega) \rightarrow \\ \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\varepsilon \exp(-\varepsilon) \int_0^\varepsilon \frac{dv}{(\varepsilon - v)^{1/2}} = 1 \quad (65)$$

в полном соответствии с формулами (49) и (59). Отметим, что при  $\Theta_T^{\text{tot}}(\omega) = 1$  результат (63) имеет наглядный физический смысл — коэффициент поглощения света на частоте  $\omega$  пропорционален силе осцилляторов  $f_{fi}(R_\omega)$  электронного перехода  $i \rightarrow f$  в точке пересечения термов (21), а также вероятности  $W_T(R_\omega) \propto 4\pi R_\omega^2 \times \exp[-U_i(R_\omega)/kT]$  частицам А и В находиться на расстоянии  $R_\omega$  друг от друга в начальном связанном состоянии  $U_i(R)$ . Больцмановский фактор  $\exp(-U_i/kT)$  в (63) определяет температурную зависимость суммарного коэффициента поглощения.

Формула (63) дает полный вклад прямых процессов (5) и (16) в коэффициент фотопоглощения молекулярной (квазимолекулярной) системой АВ. С учетом процессов вынужденного излучения результирующий коэффициент  $K_T(\omega)$ , см<sup>-1</sup>, и соответствующая константа скорости  $\zeta_T(\omega)$ , см<sup>5</sup>, поглощения света на частоте  $\omega$  в условиях термодинамического равновесия даются известным соотношением

$$K_T(\omega) = \zeta_T(\omega) N_A N_B = k_T(\omega) \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \right]. \quad (66)$$

С учетом (63) и (66) выражение для коэффициента фотопоглощения  $K_T(\omega)$  приобретает простой вид

$$K_T(\omega) = \frac{1}{\alpha} \frac{g_{AB}}{g_{A}g_{B}} N_A N_B 8\pi^3 \alpha \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{R_\omega^2 f_{fi}(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \times \left[ \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{U_f(R_\omega)}{kT}\right) \right] \Theta_T^{\text{tot}}(\omega). \quad (67)$$

Этот результат может быть также получен непосредственно из (52) и (56) для вкладов связанно-свободных и свободно-свободных радиационных переходов с помощью соотношения (66).

Результат (67) для полного коэффициента непрерывного фотопоглощения  $K_T(\omega)$  с квазиклассическим фактором  $\Theta_T^{\text{tot}}(\omega) = 1$  полностью согласуется с известным полуклассическим выражением Бейтса [12], полученным им в квазистатическом приближении. Таким образом, безразмерный фактор  $\Theta_T^{\text{tot}}(\omega)$  описывает отношение квантового результата [23] к полуклассическому результату [12], т.е.  $\Theta_T^{\text{tot}}(\omega) = K_T^{(q)}(\omega)/K_T^{(cl)}(\omega)$ . Следует обратить внимание на то, что квантовый результат (см. (63) и (67)) учитывает относительное движение ядер как по классически разрешенной, так и по классически запрещенной областям межъядерного расстояния и корректно описывает истинное поведение вероятности радиационного перехода в непосредственной окрестности точек поворота.

## 5. Обсуждение результатов

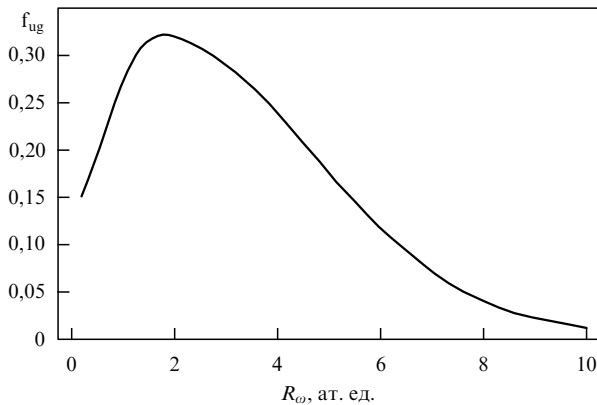
Обсудим недавние результаты по непрерывному поглощению света видимого, ИК- и УФ-диапазонов спектра простейшей двухатомной системой Н<sub>2</sub><sup>+</sup> в результате радиационных переходов (1) и (2). Рисунок 1, где приведены кривые потенциальной энергии  $U_g(R)$  и  $U_u(R)$ , соответствующие четному и нечетному электронным термам молекулярного иона Н<sub>2</sub><sup>+</sup>, поясняет физический механизм рассматриваемых радиационных переходов. Как было отмечено выше, такие переходы происходят в окрестности точки пересечения  $R_\omega$  потенциальных кривых  $U_g(R) + \hbar\omega$  и  $U_u(R)$  (см. (21)). Межъядерное расстоя-

ние  $R_0$  (которое определяется из соотношения  $U_g(R_0) = 0$ ) составляет  $1,12a_0$  (где  $a_0$  — боровский радиус). Минимум кривой потенциальной энергии  $U_g(R_e) = -2,79$  эВ основного электронного состояния  $X^2\Sigma_g^+$  достигается при  $R_e = 2,0a_0$ . Энергия расщепления четного и нечетного термов составляет  $\Delta U_{gu} = 11,84$  эВ при  $R = R_e$ . Поэтому связанно-свободные переходы  $X^2\Sigma_g^+, vJ \rightarrow A^2\Sigma_u^+, E, J \pm 1$  из низколежащих колебательно-вращательных состояний  $vJ$  с малыми значениями  $v$  и  $J$  (т.е.  $R_\omega \sim (1,6-2,6)a_0$  вблизи дна потенциальной ямы  $U_g(R)$ ) соответствуют достаточно большим энергиям фотона ( $\hbar\omega \approx 8-16$  эВ) и малым длинам волн ( $\lambda \approx 800-1600$  Å). С другой стороны, фотодиссоциационное поглощение в ближней инфракрасной, видимой и ближней ультрафиолетовой областях спектра с энергиями фотона  $0,25 < \hbar\omega < 6$  эВ (т.е.  $0,2 < \lambda < 5$  мкм) происходит преимущественно из возбужденных и высоковозбужденных колебательно-вращательных состояний  $vJ$  иона Н<sub>2</sub><sup>+</sup>. Основной вклад в сечения таких переходов (1) и (2) вносит область притяжения ( $R_e < R_\omega$ ) кривой потенциальной энергии  $U_g(R)$  при  $3 < R_\omega < 7a_0$ .

Детальное представление о соотношении между энергией фотона  $\hbar\omega = \Delta U_{ug}(R_\omega)$ , соответствующей длине волны излучения  $\lambda$  и межъядерным расстоянием  $R_\omega$  (см. (21)) можно получить из табл. 1, в которой при-

**Таблица 1.** Длина волны  $\lambda = 2\pi c/\omega$  и энергия фотона  $\hbar\omega = \Delta U_{ug}(R_\omega)$ , потенциальная энергия  $U_g(R_\omega)$  нижнего электронного состояния  $X^2\Sigma_g^+$  и сила осцилляторов  $f_{ug}(R_\omega)$  электронного перехода  $X^2\Sigma_g^+ \rightarrow A^2\Sigma_u^+$  в точке  $R_\omega$  пересечения термов  $U_g + \hbar\omega$  и  $U_u$  компанд-системы молекулярный ион Н<sub>2</sub><sup>+</sup> + фотон ( $a_0$  — боровский радиус)

$R_\omega, a_0$	$\Delta U_{ug}, \text{эВ}$	$U_g, \text{эВ}$	$f_{ug}$	$\lambda, \text{мкм}$
0,2	38,804	97,181	0,150	0,0320
0,4	35,103	32,633	0,175	0,0353
0,6	31,212	13,474	0,207	0,0397
0,8	27,525	5,320	0,240	0,0450
1,0	24,137	1,312	0,269	0,0514
1,2	21,048	-0,788	0,292	0,0589
1,4	18,286	-1,904	0,309	0,0678
1,6	15,851	-2,474	0,317	0,0782
1,8	13,701	-2,728	0,321	0,0905
2,0	11,840	-2,793	0,319	0,1047
2,2	10,226	-2,744	0,315	0,1212
2,4	8,836	-2,627	0,310	0,1403
2,6	7,633	-2,472	0,304	0,1624
2,8	6,596	-2,295	0,297	0,1880
3,0	5,701	-2,110	0,289	0,2175
3,2	4,925	-1,925	0,281	0,2517
3,4	4,256	-1,744	0,271	0,2913
3,6	3,676	-1,570	0,261	0,3372
3,8	3,173	-1,407	0,250	0,3908
4,0	2,735	-1,254	0,238	0,4533
4,2	2,356	-1,113	0,225	0,5261
4,4	2,027	-0,984	0,213	0,6116
4,6	1,744	-0,866	0,200	0,7108
4,8	1,497	-0,760	0,188	0,8284
5,0	1,282	-0,665	0,175	0,9673
5,5	0,865	-0,469	0,145	1,4328
6,0	0,580	-0,326	0,116	2,1390
6,5	0,386	-0,224	0,093	3,2086
7,0	0,253	-0,152	0,070	4,8991
7,5	0,166	-0,103	0,052	7,4691
8,0	0,109	-0,070	0,039	11,3904
8,5	0,071	-0,047	0,028	17,5236
9,0	0,046	-0,032	0,021	26,8009
10,0	0,019	-0,016	0,011	65,0878



**Рис. 2.** Сила осцилляторов  $f_{\text{ug}}(R_\omega)$  электронного перехода  ${}^2\Sigma_g^+ \rightarrow {}^2\Sigma_u^+$  в молекулярном ионе  $\text{H}_2^+$  в зависимости от межъядерного расстояния  $R_\omega$  по данным квантовомеханических расчетов [11, 14].

ведены также значения потенциальной энергии  $U_g(R_\omega)$  основного электронного состояния молекулярного иона  $\text{H}_2^+$  в точке  $R_\omega$  и силы осцилляторов  $f_{\text{ug}}(R_\omega)$  электронного перехода  $X^2\Sigma_g^+ \rightarrow A^2\Sigma_u^+$ . Все представленные в этой таблице соотношения между межъядерными расстояниями  $R_\omega$  и значениями энергий фотонов  $\hbar\omega$  (длин волн переходов  $\lambda$ ) получены с помощью результатов квантовомеханических расчетов величин расщепления  $\Delta U_{\text{ug}}(R_\omega)$  четного и нечетного электронных термов иона  $\text{H}_2^+$  [13]. Значения потенциальной энергии основного электронного состояния  $U_g(R_\omega)$  определены с помощью детальных расчетов [13, 52], а силы осцилляторов электронного перехода  $X^2\Sigma_g^+ \rightarrow A^2\Sigma_u^+$  были вычислены в работах [11, 14]. На рисунке 2 приведена кривая  $f_{\text{ug}}(R_\omega)$ . Следует также отметить, что значения энергии нижнего колебательного кванта, вращательной постоянной и энергии диссоциации молекулярного иона  $\text{H}_2^+$  в основном электронном состоянии, по данным [53], равны соответственно  $\hbar\omega_e = 0,288$  эВ,  $B_e = 3,74 \times 10^{-3}$  эВ и  $D_0 = 2,651$  эВ.

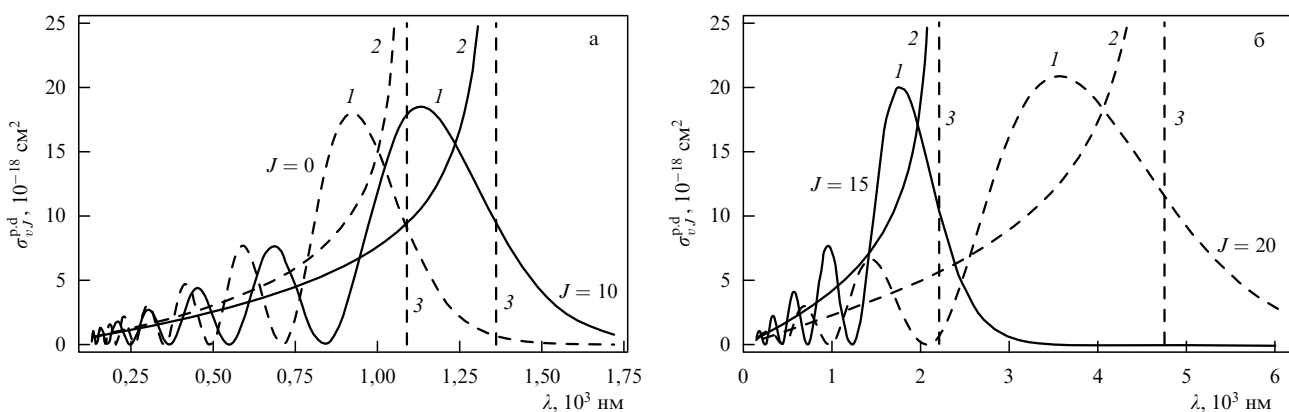
### 5.1. Сечения фотодиссоциации

Как показано в [23], аналитическое выражение (22) позволяет описать зависимость парциальных сечений фотодиссоциации от длины волны  $\lambda$  для возбужденных

колебательно-вращательных уровней. В частности, с помощью этого выражения удастся количественно воспроизвести результаты первых численных расчетов [26, 27] сечений фотодиссоциации  $\sigma_{v,J}^{(1)}(\lambda)$  молекулярного иона  $\text{H}_2^+(v, J=0)$  из состояний с колебательными квантовыми числами  $v = 7, 8, 9$  при  $J = 0$ , а также результаты расчетов [28], проведенных для  $v = 7$  при значениях вращательного квантового числа  $J = 0$  и  $J = 8$ . Кроме того, дополнительно к уже имеющимся результатам численных расчетов сечений для случаев малых и промежуточных значений  $J$  недавние расчеты [23] были выполнены также для возбужденных колебательно-вращательных состояний с большими значениями вращательного квантового числа. Значения энергий колебательно-вращательных уровней  $E_{v,J}$  иона  $\text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+)$  в этих расчетах были взяты из [52, 54].

На рисунке 3 приведены типичные зависимости парциальных сечений фотодиссоциации  $\sigma_{v,J}^{\text{p.d.}}$  молекулярного иона  $\text{H}_2^+$  от длины световой волны  $\lambda$ . Расчеты [23] были выполнены для фиксированного колебательного квантового числа  $v = 10$  и нескольких различных значений вращательного квантового числа  $J = 0, J = 10$  (рис. 3а) и  $J = 15, J = 20$  (рис. 3б). Кривые 1 соответствуют квантовым результатам, полученным с помощью формулы (28), кривые 2 — результаты квазиклассического расчета парциальных сечений фотодиссоциации (усредненных по осцилляциям), полученных с помощью простой формулы (34) в классически разрешенной области длин волн  $\lambda < \lambda_{\text{cl}}$ . Для заданных значений  $v$  и  $J$  вертикальные линии 3 указывают положения длин волн  $\lambda_{\text{cl}} \equiv \lambda_{\text{cl}}(v, J)$ , для которых точка пересечения  $R_\omega$  кривых потенциальной энергии (21) совпадает с правой классической точкой поворота  $a_2(v, J)$  при относительном движении ядер молекулы в ее основном электронном состоянии (т.е.  $U_g[a_2(v, J)] = E_{v,J}$ ). Характерная особенность процесса фотодиссоциации из возбужденных колебательно-вращательных состояний — осцилляционное поведение парциальных сечений  $\sigma_{v,J}^{\text{p.d.}}$  в зависимости от длины волны  $\lambda$ . На рисунке 3а, б показаны только несколько таких осцилляций, расположенных слева от точки  $\lambda_{\text{cl}}(v, J)$ . Общее число максимумов в зависимости  $\sigma_{v,J}^{\text{p.d.}}(\lambda)$  равно  $v + 1$  для заданного колебательно-вращательного состояния  $vJ$ .

Сравнение кривых 1 и 2 показывает, что квазиклассические и квантовые сечения фотодиссоциации (усреднен-



**Рис. 3.** Парциальные сечения  $\sigma_{v,J}^{\text{p.d.}}$  фотодиссоциации молекулярного иона  $\text{H}_2^+({}^2\Sigma_g^+, vJ)$  с заданного колебательного ( $v = 10$ ) и различных вращательных состояний в зависимости от длины волны  $\lambda$ : (а)  $J = 0$  и  $J = 10$ , (б)  $J = 15$  и  $J = 20$ .

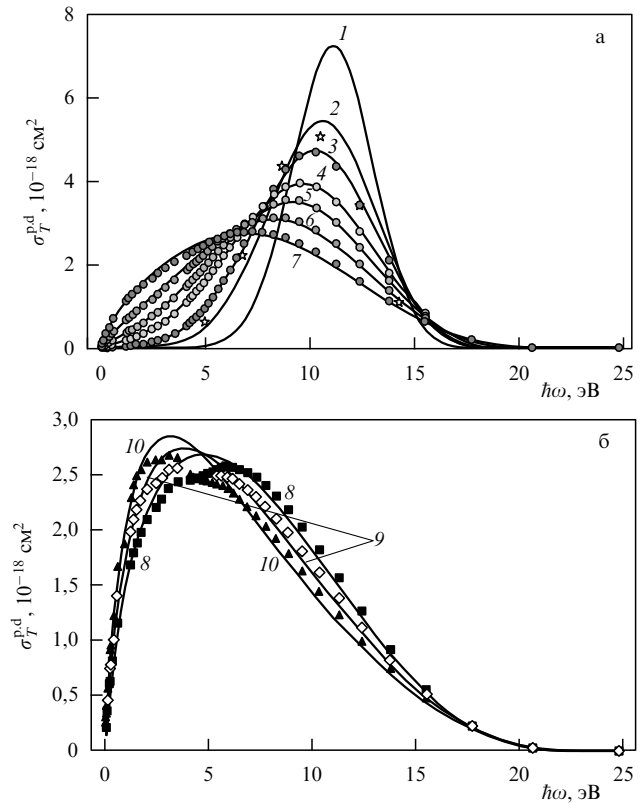
ные по периоду осцилляций) практически совпадают при  $\lambda \ll \lambda_{\text{cl}}(v, J)$ , т.е. в классически разрешенной области вдали от правой точки поворота  $R_{\omega} \ll a_2(v, J)$ . В то же время простая формула (34) приводит к качественно неверному поведению парциального сечения в непосредственной окрестности точки  $\lambda_{\text{cl}}(v, J)$ . В частности, сечение фотодиссоциации, определяемое выражением (34), стремится к бесконечности при  $\lambda \rightarrow \lambda_{\text{cl}}(v, J)$ , если  $\lambda < \lambda_{\text{cl}}(v, J)$ . Более того, при пренебрежении движением ядер в классически запрещенной области за правой точкой поворота квазиклассический подход (34) приводит к нулевому значению сечения  $\sigma_{v,J}^{\text{p,d}}(\lambda)$  в области длин волн  $\lambda > \lambda_{\text{cl}}(v, J)$  (см. рис. 3).

Рисунок 3 дает наглядное представление о зависимости парциального сечения  $\sigma_{v,J}^{\text{p,d}}(\lambda)$  от величины вращательного квантового числа  $J$ . В частности, из рис. 3а, б следует, что эта зависимость становится особенно сильной для высоковозбужденных колебательно-вращательных состояний (особенно для состояний  $vJ$ , расположенных вблизи диссоциационного предела иона  $\text{H}_2^+(\text{X}^2\Sigma_g^+)$ ). Для фиксированного значения  $v$  увеличение вращательного квантового числа приводит к существенному сдвигу величины  $\lambda_{\text{cl}}$  в сторону больших длин волн. Например, для вращательного квантового числа  $v = 10$  значения  $\lambda_{\text{cl}}$  составляют 1,09; 1,36; 2,20 и 4,75 мкм соответственно при  $J$ , равном 0; 10; 15 и 20 (рис. 3а, б). При этом общая картина осцилляционного поведения парциального сечения в зависимости от  $\lambda$  заметно смещается в длинноволновую область (см. результаты при  $J = 15$  и  $J = 20$ ).

Обсудим теперь поведение усредненных по больцмановскому распределению сечений фотодиссоциации  $\sigma_T^{\text{p,d}}(\omega)$  молекулярного иона  $\text{H}_2^+$  в зависимости от энергии фотона. Как видно из рис. 4а, б, для каждого заданного значения  $T$  сечение  $\sigma_T^{\text{p,d}}(\omega)$  имеет ярко выраженный максимум, положение которого,  $\omega_{\text{max}}$ , смещается в сторону малых частот при увеличении температуры. Это объясняется увеличением вклада высоких энергетических уровней  $vJ$  с ростом  $T$ . Характерные значения сечений фотодиссоциации  $\sigma_T^{\text{p,d}}(\omega)$  в максимальной оказываются порядка  $10^{-18} - 10^{-17} \text{ см}^2$  в исследованной области  $T = 1500 - 25200 \text{ К}$ .

Особый интерес представляет проверка применимости представленного здесь аналитического подхода для расчета сечения фотодиссоциации  $\sigma_T^{\text{p,d}}(\omega)$  в широкой области температур равновесной водородной плазмы. На рисунках 4а, б проведено детальное сравнение результатов расчетов сечений  $\sigma_T^{\text{p,d}}(\omega)$ , полученных в рамках теории [23], с численными квантовыми расчетами [29] для иона  $\text{H}_2^+$  из первых принципов при  $T = 3150 - 25200 \text{ К}$ , а также с результатами первых квантовых расчетов [15] при  $T = 2500 \text{ К}$ . Следует отметить, что численные расчеты [29] были выполнены с учетом вклада всех колебательно-вращательных уровней ( $0 \leq v \leq 18$ ); максимальное число  $J_{\text{max}}$  вращательных уровней составляло 35, а полное число колебательно-вращательных уровней в [29] было равно 423. Первые же расчеты [15] при относительно невысоких температурах учитывали семь колебательных уровней с вращательными квантовыми числами  $J \leq 8$ .

В целом, результаты, полученные с помощью простой формулы (51), находятся в хорошем согласии с численными расчетами [29] из первых принципов для всех температур в диапазоне  $3150 - 25200 \text{ К}$ , исследованных в [29]. Например, при  $3150 \leq T \leq 8400 \text{ К}$  результаты расчетов [23] сечений фотодиссоциации  $\sigma_T^{\text{p,d}}(\omega)$  согла-



**Рис. 4.** Усредненные по больцмановскому распределению сечения  $\sigma_T^{\text{p,d}}$  фотодиссоциации молекулярного иона  $\text{H}_2^+(\text{X}^2\Sigma_g^+)$  в зависимости от энергии кванта  $\hbar\omega$ . Сплошные кривые — результаты расчетов [23] для различных температур: 1 — 1500 К, 2 — 2500 К, 3 — 3150 К, 4 — 4200 К, 5 — 5040 К, 6 — 6300 К, 7 — 8400 К (рис. 4а) и 8 — 12600 К, 9 — 16800 К, 10 — 25200 К (рис. 4б). Точки на рис. 4а соответствуют результатам [29] для температур в диапазоне 3150–8400 К. Звезды — результаты расчета [15] при  $T = 2500 \text{ К}$ . Квадраты, ромбы и треугольники на рис. 4б — результаты расчетов [29] для температур, равных соответственно 12600, 16800 и 25200 К.

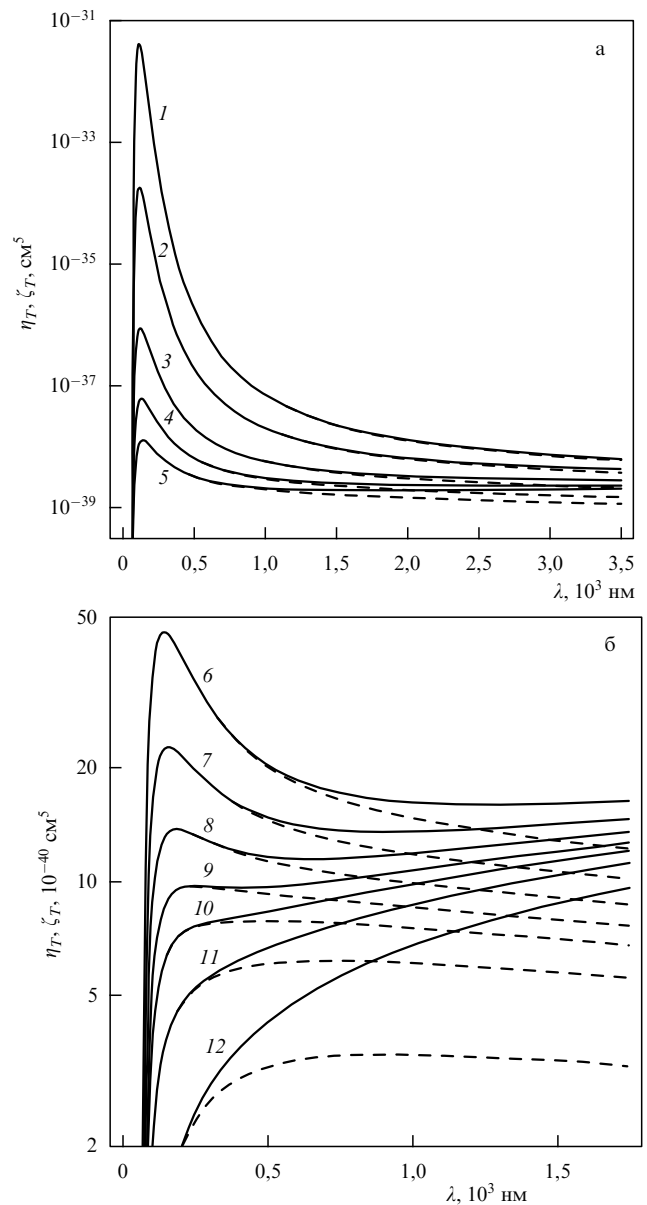
суются с расчетами [29] с точностью до нескольких процентов во всей исследованной области энергий фотона (рис. 4а). При высоких температурах  $12600 \leq T \leq 25200 \text{ К}$  имеются некоторые отличия между нашими результатами [23] и расчетами [29], которые, однако, не превышают 10 % (рис. 4б). Эти небольшие отличия проявляются лишь в окрестности максимума ( $\omega \approx \omega_{\text{max}}$ ) сечения фотодиссоциации, где величины  $\sigma_T^{\text{p,d}}(\omega)$ , рассчитанные в [29] при температурах  $T \geq 12600 \text{ К}$ , испытывают некоторое нерегулярное поведение. Отметим, что наша теория приводит к гладкой зависимости сечения от частоты (включая и область вблизи  $\omega_{\text{max}}$ ) для всех рассмотренных температур в диапазоне  $1500 - 25000 \text{ К}$ . Более того, применимость использованного нами подхода дополнительно проверялась в работе [50], где было проведено прямое сравнение расчетов статистической суммы молекулярного иона  $\text{H}_2^+$  (выполненных в приближении квазинепрерывного спектра колебательно-вращательных уровней) с квантовыми расчетами из первых принципов. Как следует из этого сравнения, при повышении температуры точность такого подхода возрастает. Это является естественным, поскольку приближение квазинепрерывного спектра работает тем лучше, чем большее число уровней вносит вклад в сумму по всем состояниям.

Представленные на рис. 4а результаты [23] охватывают также случай относительно невысоких температур  $T = 2500$  К и  $1500$  К и длин волн, включая видимый и ИК-диапазоны спектра. Предыдущие квантовые расчеты [15] при  $T = 2500$  К были проведены лишь для нескольких значений  $\lambda$  в диапазоне  $87 \leq \lambda \leq 455$  нм. Как видно из рис. 4а, при  $T = 2500$  К результаты расчетов [23] и [15] при  $T = 2500$  К согласуются в пределах 25 % для длин волн в области  $100 \leq \lambda \leq 455$  нм. Как отмечено в [23], для молекулярного иона  $\text{H}_2^+$  температуры порядка  $1000$  К являются нижним пределом применимости изложенного здесь подхода. Однако следует иметь в виду, что его точность существенно зависит от длины волны перехода. В частности, при невысоких значениях  $T$  он оказывается более оправданным в длинноволновой области, за которую ответственны большие межъядерные расстояния (где основной вклад вносят высоковольтные колебательно-вращательные уровни).

## 5.2. Коэффициенты фотопоглощения

Обсудим основные закономерности в поведении интегрального коэффициента поглощения света системой  $\text{H}_2^+$  в процессах (1) и (2). Результаты расчетов [22, 23] полной константы скорости фотопоглощения  $\eta_T = k_T/N_{\text{H}}N_{\text{H}^+}$  по формуле (63) показаны сплошными кривыми на рис. 5 для различных температур в диапазоне  $1500$ – $4000$  К (рис. 5а), а также  $5000$ – $20000$  К (рис. 5б). Видно, что, за исключением случая высоких температур  $T > 9000$  К, кривые наглядно демонстрируют качественно аналогичный характер зависимости константы скорости фотопоглощения  $\eta_T$  от длины волны  $\lambda$ . В частности, для температур в диапазоне  $T \sim 1500$ – $6000$  К зависимость  $\eta_T(\lambda)$  оказывается очень резкой в окрестности максимума в УФ-области спектра. В зависимости от конкретной величины  $T$  пики на кривых  $\eta_T(\lambda)$  появляются при  $\lambda_{\text{max}} \approx 0,11$ – $0,13$  мкм. В то же время обращают на себя внимание большие количественные различия в коэффициентах поглощения: максимальные значения  $\eta_T$  отличаются друг от друга на несколько порядков величины при изменении  $T$  от  $1500$  до  $6000$  К. При этом интегральная константа скорости фотопоглощения оказывается особенно большой при невысоких температурах (см. кривые 1 и 2 на рис. 5а). Вместе с тем в ИК-области спектра при  $\lambda > 1,5$  мкм типичные значения  $\eta_T$  оказываются порядка  $10^{-39}$ – $10^{-38}$  см<sup>5</sup> во всей исследованной области  $T$  от  $1500$  до  $20000$  К. В диапазоне температур  $1500 < T < 6000$  К константа скорости фотопоглощения испытывает сильное уменьшение в видимой области спектра с увеличением  $\lambda$ . Однако такое поведение становится менее ярко выраженным при высоких температурах  $T \sim 7000$ – $8000$  К. Более того, пики в УФ-области спектра, как и само уменьшение величины  $\eta_T$  в видимом диапазоне, исчезают, начиная с  $T > 9000$  К (рис. 5б). При этом характерные значения константы скорости фотопоглощения изменяются в диапазоне  $\approx 2 \times 10^{-40}$ – $2 \times 10^{-39}$  см<sup>5</sup> при  $7000 < T < 20000$  К.

Чтобы продемонстрировать роль вынужденного излучения в различных областях длин волн и температур локально равновесной водородной плазмы, мы представили на рис. 5а,б результаты расчета [23] константы скорости фотопоглощения  $\zeta_T$  (штриховые кривые), учитывающие дополнительно фактор  $[1 - \exp(-hc/kT\lambda)]$  (см. (66)). Как и следовало ожидать, поправка на вынужденное излучение становится осо-



**Рис. 5.** Зависимости полных констант скоростей фотопоглощения иона  $\text{H}_2^+$  в результате связанно-свободных и свободно-свободных переходов от длины волны  $\lambda$  при различных температурах  $T$ . Сплошные кривые (1 —  $1500$  К, 2 —  $2000$  К, 3 —  $3000$  К, 4 —  $6000$  К, 5 —  $12000$  К (рис. 5а) и 6 —  $6000$  К, 7 —  $7000$  К, 8 —  $8000$  К, 9 —  $9000$  К, 10 —  $10000$  К, 11 —  $12000$  К, 12 —  $20000$  К (рис. 5б)) — результаты расчетов [22, 23] величины  $\eta_T$  по формулам (63), (64). Штриховые кривые — соответствующие расчеты константы скорости фотопоглощения  $\zeta_T$  с учетом вынужденного излучения (66).

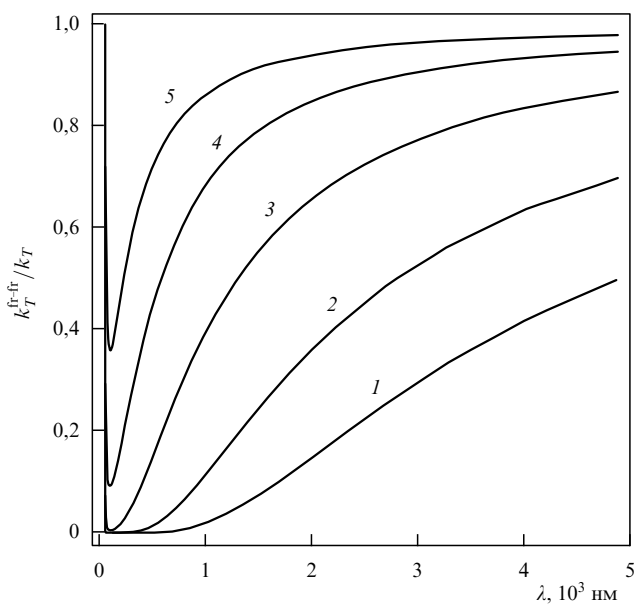
бенно существенной в длинноволновой области спектра при высоких температурах. При малых же значениях  $\lambda$  и  $T$  сплошные и штриховые кривые на рис. 5а практически совпадают.

Следует отметить, что наши результаты для полной константы скорости  $\zeta_T(\lambda)$  поглощения света ионом  $\text{H}_2^+$ , полученные с помощью формул (64) и (67), находятся в хорошем согласии с результатами полуклассических расчетов [12, 29] в рамках теории Бейтса [9], выполненных для температур в диапазоне  $2500$ – $15000$  К. Это неудивительно, поскольку (как показано в разделе 5.1) квазиклассический подход обеспечивает высокую точ-

ность при расчете интегрального вклада процесса фотодиссоциации со всех возможных колебательно-вращательных уровней. Тот же самый вывод следует из сравнения наших результатов для интегрального вклада свободно-свободных радиационных переходов в коэффициент поглощения света (17) с соответствующими полуклассическими расчетами. Это означает, что для надежного определения вкладов связанно-свободных и свободно-свободных переходов в фотопоглощение можно использовать простые аналитические выражения из разделов 3.1 и 3.2 вместо более сложных формул, содержащих интегралы от функции Эйри.

В дополнение к исследованным ранее областям  $T$  и  $\lambda$  на рис. 5а, б представлен ряд новых результатов для константы скорости фотопоглощения. В частности, приведены результаты расчетов [22, 23], охватывающих область относительно невысоких температур  $T = 1500$  К и  $2500$  К, при которых константы скоростей фотопоглощения ионом  $\text{H}_2^+$  оказываются особенно большими (см. кривые 1 и 2 на рис. 5а). Эти результаты представляют интерес для сравнения относительной роли фотопоглощения ионами  $\text{H}_2^+$  и  $\text{H}^-$  в низкотемпературной водородной плазме. Кроме того, на рис. 5б представлены результаты для констант скоростей фотопоглощения  $\eta_T$  и  $\zeta_T$  ионом  $\text{H}_2^+$  при очень высоких температурах ( $T = 20000$  К). Видно, что в этом случае роль эффектов вынужденного излучения в фотопоглощении термодинамически равновесной плазмой становится особенно существенной (см. сплошные и штриховые кривые на рис. 5б).

Интересно обсудить вклад свободно-свободных радиационных переходов (2) при столкновениях протона с атомом водорода  $\text{H}(1s)$  в полное фотопоглощение системой  $\text{H}_2^+$  в зависимости от длины волны  $\lambda$ . На рисунке 6 для различных температур  $T$  представлены результаты расчетов [22, 23] отношения  $\delta = k_T^{\text{fr-fr}}/k_T$



**Рис. 6.** Отношение коэффициента поглощения света  $k_T^{\text{fr-fr}}$  в результате свободно-свободных радиационных переходов (2) системы  $\text{H}-\text{H}^+$  к полному коэффициенту поглощения  $k_T = k_T^{\text{b-d}} + k_T^{\text{fr-fr}}$  в зависимости от длины волны  $\lambda$ . Кривые 1, 2, 3, 4 и 5 соответствуют температурам 1500, 2500, 5000, 10000 и 25000 К.

коэффициента поглощения света  $k_T^{\text{fr-fr}}$  в процессе (2) к полной величине  $k_T = k_T^{\text{b-d}} + k_T^{\text{fr-fr}}$ , которая дополнительно учитывает интегральный вклад связанно-свободных переходов (1). Видно, что при достаточно низких температурах  $T = 1500$  К и  $2500$  К отношение  $\delta$  составляет около 10–15 % вблизи соответствующего максимума ( $\lambda_{\text{max}} \approx 2$  мкм и  $\lambda_{\text{max}} \approx 1$  мкм) кривой планковского распределения. Однако при увеличении температуры и длины волны вклад свободно-свободных переходов (2) быстро возрастает и становится преобладающим. Например, при  $T = 5000, 10000, 20000$  К относительный вклад свободно-свободных переходов системы  $\text{H}_2^+$  в фотопоглощение равновесной водородной плазмы равен  $\delta \approx 40, 68, 86$  % при  $\lambda = 1$  мкм и  $\delta \approx 66, 85, 94$  % при  $\lambda = 2$  мкм. Более того, как следует из рис. 6, при высоких температурах роль свободно-свободных радиационных переходов становится весьма существенной не только в ИК-диапазоне, но также и в видимой области спектра.

### 5.3. Относительное поглощение ионами $\text{H}_2^+$ и $\text{H}^-$ в локально равновесной водородной плазме

Проведем сравнительный анализ относительной роли рассматриваемых здесь процессов (1), (2) поглощения света ионом  $\text{H}_2^+$  и процессов фотопоглощения ионом  $\text{H}^-$  в результате радиационных переходов (3), (4). Отметим, что в локально равновесной водородной плазме с температурой  $T \approx 6000$  К (характерной для фотосферы Солнца) доминирующая роль процесса (3) фотоотрыва электрона от отрицательного иона  $\text{H}^-$  в видимой области спектра хорошо известна. Однако в ИК-области при  $\lambda > \lambda_{\text{H}^-}^{\text{th}}$  (где  $\lambda_{\text{H}^-}^{\text{th}} = 1,644$  мкм — длина волны, соответствующая порогу процесса фотоотрыва электрона (3)) основной вклад в поглощение света в плазме с  $T \approx 6000$  К вносят свободно-свободные радиационные переходы электрона в поле атома водорода (4).

Как следует из результатов работ [16, 17, 19, 20] и недавних расчетов [21], в солнечной фотосфере полный вклад радиационных процессов (1) и (2) с участием молекулярного (квазимолекулярного) иона  $\text{H}_2^+$  мал ( $\lesssim 8$ ) по сравнению с вкладом иона  $\text{H}^-$ . Некоторые результаты, касающиеся роли ионов  $\text{H}^-$  и  $\text{H}_2^+$  в звездных атмосферах с невысокой температурой, приведены в работах [4, 22]. Подробный анализ относительной роли процессов (1), (2) и (3), (4) в непрерывном поглощении света квазиравновесной водородной плазмой проведен в [23] для широкого диапазона параметров  $\lambda$  и  $T$ .

Полный коэффициент поглощения света  $k_T^{\text{H}^-}$ ,  $\text{см}^{-1}$ , системой  $\text{H}^-$  может быть представлен в виде

$$k_T^{\text{H}^-}(\omega) = k_T^{(3)}(\omega) + k_T^{(4)}(\omega) = \eta_T^{\text{H}^-}(\omega) N_{\text{H}} N_{\text{e}}, \quad (68)$$

$$k_T^{(3)} = \sigma_{\text{H}^-} N_{\text{H}^-}, \quad k_T^{(4)} = \eta_T^{(4)} N_{\text{H}} N_{\text{e}}.$$

Здесь  $\sigma_{\text{H}^-}$  — сечение фотоотрыва электрона от отрицательного иона  $\text{H}^-(1s^2)$ ,  $\text{см}^2$ ,  $\eta_T^{(4)}$  — константа скорости процесса фотопоглощения (4),  $\text{см}^5$ ,  $\eta_T^{\text{H}^-}$  — полная константа скорости,  $\text{см}^5$ , и, соответственно,  $k_T^{\text{H}^-}$  — полный коэффициент поглощения света ионом  $\text{H}^-$ ,  $\text{см}^{-1}$ ;  $k_T^{(3)}$  и  $k_T^{(4)}$  — коэффициенты поглощения света в результате связанно-свободных (3) и свободно-свободных (4) переходов. Отметим, что в настоящее время сечение процесса (3) и константа скорости фотопоглощения (4) известны с высокой точностью (см., например, [55, 56]).

Концентрацию ионов  $H^-(1s^2)$  можно вычислить по формуле

$$N_{H^-} = \frac{g_{H^-}}{g_e g_H} \left( \frac{2\pi\hbar^2}{m_e kT} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{\epsilon_{H^-}}{kT}\right) N_H N_e, \quad (69)$$

где  $\epsilon_{H^-} = 0,754$  эВ — энергия связи электрона в отрицательном ионе  $H^-(1s^2\ ^1S_0)$ ;  $g_{H^-} = 1$  — статистический вес состояния  $1s^2$ ,  $g_e = 2$ , а  $g_{H(1s)} = 2$  — статистический вес атома водорода в основном состоянии  $1s$ .

Полная концентрация  $N_{H_2^+} = \sum_{v,J} N_{v,J}$  положительных молекулярных ионов  $H_2^+$  может быть найдена с помощью закона действующих масс (15):

$$N_{H_2^+} = \frac{Z_{v,r} g_{H_2^+}}{\alpha_e g_H g_{H^+}} \left( \frac{2\pi\hbar^2}{\mu kT} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{D_0}{kT}\right) N_H N_{H^+}. \quad (70)$$

Здесь  $g_{H(1s)} = 2$ ,  $g_{H^+} = 1$ ,  $g_{H_2^+} = 2$ ,  $\alpha_e = 2$  и  $D_0 = 2,651$  эВ. Для внутренней статистической суммы  $Z = (g_{H_2^+}/\alpha_e) Z_{v,r}$  здесь используем квантовый результат [50], полученный с помощью имеющихся значений всех колебательно-вращательных уровней энергии [52, 54] иона  $H_2^+(X^2\Sigma_g^+)$ . Из таблицы 2, в которой представлены результаты расчетов концентраций ионов  $H_2^+$  и  $H^-$ , видно, что при достаточно высоких температурах ( $T \sim 5000-15000$  К) полная концентрация  $N_{H_2^+}$  молекулярного иона  $H_2^+$  и концентрация ионов  $H^-$  оказываются одного и того же порядка величины. Однако при понижении температуры в области  $T < 3000-3500$  К концентрация  $N_{H_2^+}$  ионов  $H_2^+$  быстро возрастает и значительно превышает величину  $N_{H^-}$  (рис. 7).

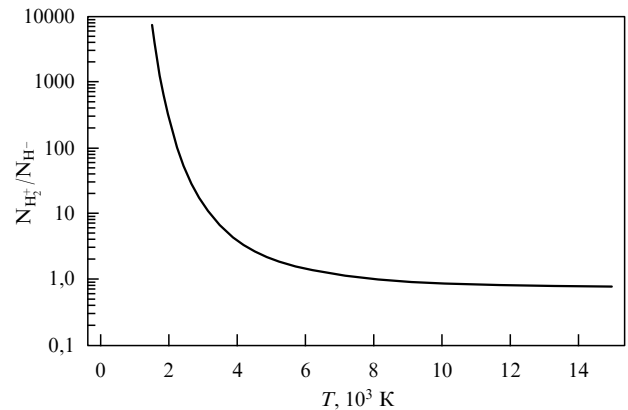
**Таблица 2.** Зависимости относительных концентраций положительных молекулярных ионов  $H_2^+(X^2\Sigma_g^+)$  ( $N_{H_2^+} = \sum_{v,J} N_{v,J}$ ) и отрицательных ионов  $H^-(^1S_0)$  от температуры равновесной водородной плазмы. Принято, что концентрации электронов и протонов равны  $N_e = N_{H^+}$ . Концентрации даны в единицах  $\text{см}^{-3}$

$T, \text{К}$	$N_{H_2^+}/N_H N_{H^+}, \text{см}^{-3}$	$N_{H^-}/N_H N_e, \text{см}^{-3}$	$N_{H_2^+}/N_{H^-}$
1500	$4,50 \times 10^{-15}$	$6,09 \times 10^{-19}$	7390
2000	$2,63 \times 10^{-17}$	$9,20 \times 10^{-20}$	286
2500	$1,24 \times 10^{-18}$	$2,74 \times 10^{-20}$	45,3
3000	$1,67 \times 10^{-19}$	$1,16 \times 10^{-20}$	14,3
3500	$4,08 \times 10^{-20}$	$6,09 \times 10^{-21}$	6,69
4000	$1,44 \times 10^{-20}$	$3,65 \times 10^{-21}$	3,96
5000	$3,50 \times 10^{-21}$	$1,69 \times 10^{-21}$	2,08
6000	$1,40 \times 10^{-21}$	$9,58 \times 10^{-22}$	1,46
8000	$4,52 \times 10^{-22}$	$4,32 \times 10^{-22}$	1,05
10000	$2,26 \times 10^{-22}$	$2,48 \times 10^{-22}$	0,91
15000	$8,18 \times 10^{-23}$	$1,01 \times 10^{-22}$	0,81

Из формул (62) и (68) следует, что в термодинамически равновесной водородной плазме с равными концентрациями электронов и протонов ( $N_{H^+} = N_e$ ) отношение

$$\rho_T(\lambda) = \frac{k_T^{H_2^+}(\lambda)}{k_T^{H^-}(\lambda)} = \frac{\eta_T^{H_2^+}(\lambda)}{\eta_T^{H^-}(\lambda)} = \frac{\zeta_T^{H_2^+}(\lambda)}{\zeta_T^{H^-}(\lambda)} \quad (71)$$

коэффициентов поглощения  $k_T^{H_2^+} = \eta_T^{H_2^+} N_H N_{H^+}$  и  $k_T^{H^-} = \eta_T^{H^-} N_H N_e$  является безразмерной величиной, которая зависит лишь от длины волны излучения  $\lambda$  и температуры  $T$ . Отметим, что последнее равенство в (71) непосредственно следует из соотношения (66), поскольку в условиях термодинамического равновесия



**Рис. 7.** Отношение полной концентрации  $N_{H_2^+} = \sum_{v,J} N_{v,J}$  положительных молекулярных ионов  $H_2^+(X^2\Sigma_g^+)$  к концентрации отрицательных ионов  $H^-(^1S_0)$  в зависимости от температуры равновесной водородной плазмы. Принято, что концентрации электронов и протонов равны:  $N_e = N_{H^+}$ .

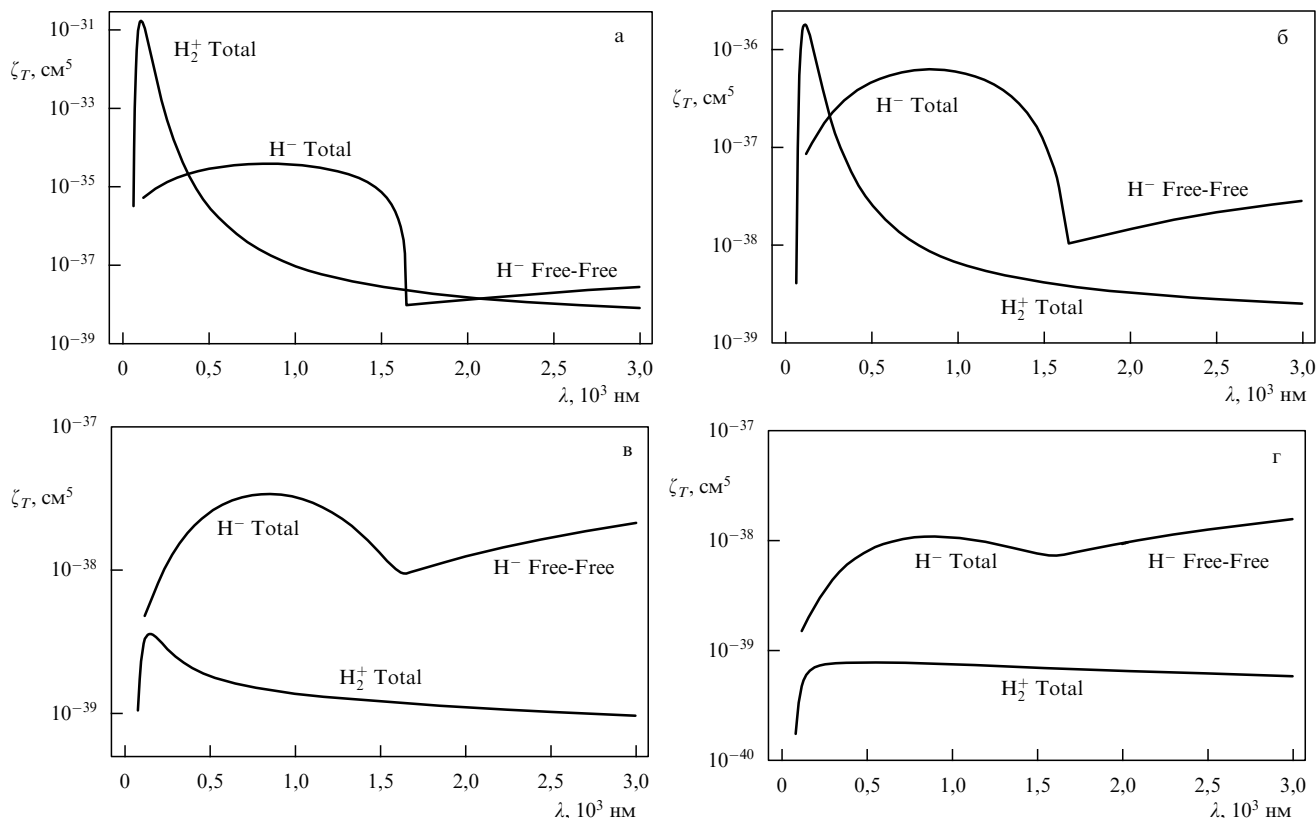
поправка на вынужденное излучение (т.е. фактор в квадратных скобках в (66)) одинаковым образом входит во все формулы для результирующего коэффициента поглощения за счет прямых и обратных процессов.

Сравним коэффициенты поглощения света ионами  $H_2^+$  и  $H^-$ . Поведение констант скоростей фотопоглощения  $\zeta_T^{H_2^+}(\lambda)$  и  $\zeta_T^{H^-}(\lambda)$  системами  $H_2^+$  и  $H^-$  показано на рис. 8а–г для различных температур (1400, 2800, 6300 и 10080 К) равновесной водородной плазмы. Расчеты интегрального коэффициента фотопоглощения молекулярным (квазимолекулярным) ионом  $H_2^+$  выполнены здесь по формулам (64) и (67) с учетом вкладов связанно-свободных (1) и свободно-свободных (2) переходов. Расчеты полного коэффициента поглощения системой  $H^-$  выполнены по формулам (68) и (69) с использованием имеющихся результатов [55, 56] для сечения фотоотрыва электрона  $\sigma_{H^-}$ ,  $\text{см}^2$ , (процесс (3)) и для константы скорости  $\eta_T^{(4)}$ ,  $\text{см}^5$ , радиационного процесса (4). Отметим, что на рис. 8а–г при расчетах полной константы скорости поглощения света  $\zeta_T^{H^-}$  для системы  $H^-$  также была учтена поправка на вынужденное излучение (фактор в квадратных скобках в (66)).

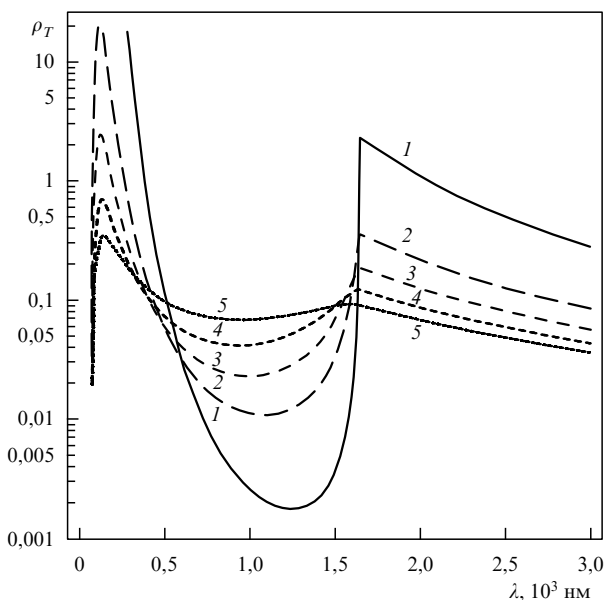
Как следует из рис. 8а–г, взаимное расположение кривых фотопоглощения  $\zeta_T^{H_2^+}(\lambda)$  и  $\zeta_T^{H^-}(\lambda)$  радикальным образом изменяется при переходе от низких к высоким температурам. Видно также, что характерные значения констант скоростей поглощения света как ионами  $H_2^+$ , так и  $H^-$  сильно зависят от длины световой волны. Обратим внимание на тот факт, что ниже порога  $\hbar\omega < \epsilon_{H^-} = 0,754$  эВ процесса фотоотрыва электрона от иона  $H^-$  (т.е. в ИК-области при  $\lambda > \lambda_{H^-}^{\text{th}} = 1,644$  мкм) полный коэффициент фотопоглощения системой  $H^-$  определяется лишь свободно-свободными переходами (4).

Детальное представление об относительной роли положительных молекулярных (квазимолекулярных) ионов  $H_2^+$  и отрицательных атомарных ионов  $H^-$  в фотопоглощении локально равновесной водородной плазмы дает рис. 9. На нем представлены недавние результаты расчетов [21, 23] относительного поглощения света  $\rho_T = \eta_T^{H_2^+}/\eta_T^{H^-}$  (71) системами  $H_2^+$  и  $H^-$  в различных областях длин волн и температур в диапазоне 1400–10080 К. Очевидно, что качественный вид зависимостей относительного поглощения от длины волны одинаков





**Рис. 8.** Сравнение полных констант скоростей поглощения света  $\zeta_T^{H_2^+}$  и  $\zeta_T^{H^-}$  системами H<sub>2</sub><sup>+</sup> и H<sup>-</sup> при температуре  $T = 1400$  К (а), 2800 К (б), 6300 К (в) и 10080 К (г). Расчеты проведены по формуле (67) с учетом поправки на вынужденное излучение (см. (66)) и учитывают суммарные вклады связанно-свободных и свободно-свободных радиационных переходов.



**Рис. 9.** Отношение  $\rho_T = k_T^{H_2^+} / k_T^{H^-}$  полных коэффициентов поглощения света положительными молекулярными (H<sub>2</sub><sup>+</sup>) и отрицательными атомарными (H<sup>-</sup>) ионами водорода в зависимости от длины волны  $\lambda$ . Кривые 1, 2, 3, 4 и 5 соответствуют температурам 1400, 2800, 4200, 6300 и 10080 К водородной плазмы в условиях локального термодинамического равновесия.

при совершенно различных  $T$ . Однако конкретные значения  $\rho_T$  отличаются друг от друга радикальным образом при низких, промежуточных и высоких температурах плазмы.

Рассмотрим сначала случай низких температур  $T = 1400$  К, когда максимум кривой планковского распределения достигается при  $\lambda_{max}^P = 2,07$  мкм, а ее полная ширина по полувысоте составляет  $\Delta\lambda_{1/2}^P = 2,49$  мкм (см. табл. 3). Поэтому наиболее существенная часть спектра расположена в ИК-области спектра между 1 и 4 мкм. Из рисунка 9 видно, что при  $T = 1400$  К (кривая 1) вклады ионов H<sub>2</sub><sup>+</sup> и H<sup>-</sup> в суммарный коэффициент поглощения равны друг другу в окрестности максимума планковской кривой  $\lambda \approx 2$  мкм. В области длин волн  $1,644 < \lambda < 2$  мкм, лежащей ниже порога  $\lambda_{H^-}^{th} = 1,644$  мкм процесса фотоотрыва электрона от отрицательного иона водорода (3) ( $\hbar\omega < \epsilon_{H^-}$ ), интегральные коэффициенты поглощения света ионом H<sub>2</sub><sup>+</sup> превышают соответствующую

**Таблица 3.** Относительное фотопоглощение  $\rho_T$  ионами H<sub>2</sub><sup>+</sup> и H<sup>-</sup> в максимуме кривой планковского распределения  $\lambda = \lambda_{max}^P$  и в точках  $\lambda = \lambda_1^P$  и  $\lambda = \lambda_2^P$ , соответствующих полувысоте ( $P_T(\lambda_1^P) = P_T(\lambda_2^P) = 0,5P_T(\lambda_{max}^P)$ ) планковской функции распределения  $P_T(\lambda)$  при заданной температуре  $T$

$T$ , К	1400	2800	3150	4200	6300	8400	10080
$\lambda_1^P$ , мкм	1,269	0,634	0,564	0,423	0,282	0,212	0,176
$\rho_T(\lambda_1^P)$ , %	0,18	2,6	3,92	8,9	20,2	27,8	30,4
$\lambda_{max}^P$ , мкм	2,07	1,035	0,920	0,690	0,460	0,345	0,287
$\rho_T(\lambda_{max}^P)$ , %	98,6	1,1	1,5	3,2	8,2	13,9	18,1
$\lambda_2^P$ , мкм	3,761	1,880	1,671	1,254	0,836	0,627	0,522
$\rho_T(\lambda_2^P)$ , %	15,2	26,0	28,4	3,0	4,3	7,0	9,4
$\rho_T(\lambda_{H^-}^{th})$ , %	215	36,7	29,6	19,2	12,5	10,2	9,3

щие коэффициенты фотопоглощения системой  $\text{H}^-$ . Отметим, что относительное фотопоглощение  $\rho_T(\lambda) \approx 2$  при  $\lambda = \lambda_{\text{H}^-}^{\text{th}}$ . Уменьшение длины волны ( $\lambda < \lambda_{\text{H}^-}^{\text{th}}$ ) приводит к резкому спаду величины  $\rho_T(\lambda)$  в видимой области спектра, что является результатом сильного увеличения коэффициента поглощения света слабосвязанным отрицательным ионом  $\text{H}^-$  в процессе (3). Значительное увеличение коэффициента поглощения света ионом  $\text{H}_2^+$  по сравнению с  $\text{H}^-$  происходит также в коротковолновой области спектра (в частности, величина  $\rho_T$  становится больше единицы при  $\lambda < 0,35$  мкм). Однако это обстоятельство не оказывает существенного влияния на интегральную по всему спектру величину коэффициента поглощения.

Кривая 2 на рис. 9 соответствует нашим результатам для относительного фотопоглощения  $\rho_T$  при  $T = 2800$  К, когда максимум кривой планковского распределения интенсивности и его ширина по полувысоте составляют соответственно  $\lambda_{\text{max}}^{\text{P}} = 1,04$  мкм и  $\Delta\lambda_{1/2}^{\text{P}} = 1,25$  мкм. Видно, что при  $\lambda > \lambda_{\text{H}^-}^{\text{th}}$  инфракрасное поглощение ионом  $\text{H}_2^+$  становится менее сильным по сравнению с фотопоглощением ионом  $\text{H}^-$  в результате свободно-свободных переходов. Но относительная роль поглощения ионом  $\text{H}_2^+$  выше порога процесса фотоотрыва электрона от иона  $\text{H}^-$  ( $\hbar\omega > \epsilon_{\text{H}^-} = 0,754$  эВ или  $\lambda < 1,644$  мкм) несколько возрастает. Тем не менее при  $T < 3000$  К (когда ИК-поглощение представляется особенно существенным) поглощение света ионом  $\text{H}_2^+$  вносит заметный вклад по сравнению с фотопоглощением иона  $\text{H}^-$  в области длин волн  $\lambda > \lambda_{\text{H}^-}^{\text{th}}$ . Например, при  $\lambda = 1,644, 2, 2,5$  и  $3$  мкм относительное фотопоглощение составляет соответственно 37, 22, 13 и 9 % при  $T = 2800$  К и 30, 19, 11 и 8 % при  $T = 3150$  К.

Кривые 3 и 4 на рис. 9 иллюстрируют поведение отношения  $\rho_T$  при температурах  $T = 4200$  К и  $6300$  К. При  $T = 6300$  К основная часть интегральной интенсивности излучения соответствует видимой области спектра, поскольку максимум кривой планковского распределения и его ширина по полувысоте равны соответственно  $\lambda_{\text{max}}^{\text{P}} = 0,46$  мкм и  $\Delta\lambda_{1/2}^{\text{P}} = 0,55$  мкм. Как следует из табл. 3, относительный вклад  $\rho_T$  ионов  $\text{H}_2^+$  и  $\text{H}^-$  оказывается равным 20, 8 и 4 % соответственно при  $\lambda$ , равной 0,28, 0,46 и 0,83 мкм. В УФ-области спектра при  $\lambda \approx 0,1 - 0,2$  мкм этот вклад составляет  $\rho_T \approx 40 - 70$  %.

Дальнейшее повышение температуры приводит к увеличению интегрального вклада иона  $\text{H}_2^+$  в среднее значение  $\rho_T$  по всему спектру. Это непосредственно следует из наших расчетов [21, 23] при  $T = 8400$  К и  $T = 10080$  К. При таких значениях  $T$  положения максимумов планковской функции распределения смещаются в сторону коротких волн в УФ-область спектра и составляют соответственно  $\lambda_{\text{max}}^{\text{P}} = 0,35$  мкм и  $\lambda_{\text{max}}^{\text{P}} = 0,29$  мкм. Поэтому значительные величины отношения  $\rho_T \approx 25 - 30$  % достигаются уже в пределах ширины  $\Delta\lambda_{1/2}^{\text{P}}$  планковской кривой по полувысоте (см. табл. 3). При  $T = 10080$  К поведение относительного поглощения  $\rho_T$  в зависимости от длины волны  $\lambda$  демонстрирует кривая 5 на рис. 9.

## 6. Заключение

В статье проведен детальный анализ процессов непрерывного поглощения света, обусловленных связанно-свободными и свободно-свободными радиационными

переходами между двумя различными электронными термами двухатомной молекулы. Рассмотрение было ориентировано, главным образом, на приложение результатов к радиационным процессам (1) и (2) с участием простейшей двухатомной системы  $\text{H}_2^+$ . Указаны основные достижения в этой области со времени появления основополагающих работ Бейтса по фотопоглощению [9, 12], выполненных полуклассическим методом в рамках квазистатического приближения. Изложен развитый недавно теоретический подход [21–23], который основан на исходных квантовых формулах для эффективных сечений рассматриваемых процессов и теории неадиабатических переходов между кривыми потенциальной энергии двухатомной молекулы. Продемонстрирована возможность аналитического описания интегрального вклада всевозможных колебательно-вращательных уровней молекулы в усредненное по больцмановскому распределению сечение фотодиссоциации (5) и в соответствующий коэффициент поглощения света. При этом использовано приближение квазинепрерывного спектра колебательно-вращательных уровней и метод расчета, развитый в [49]. Аналогичным образом рассмотрено фотопоглощение в результате свободно-свободных радиационных переходов (16). Это позволило получить компактные формулы для суммарного коэффициента поглощения света в процессах (5) и (16) в термодинамически равновесной среде, содержащей атомарную и молекулярную компоненты.

На примере молекулярного иона  $\text{H}_2^+$  показано, что представленные в статье выражения для парциальных сечений фотодиссоциации  $\sigma_{v,J}^{\text{p,d}}(\omega)$  позволяют адекватно объяснить их поведение в зависимости от колебательного и вращательного квантовых чисел для возбужденных уровней (в том числе и для уровней, расположенных вблизи диссоциационного предела основного терма). Приведены простые аналитические формулы для усредненных по больцмановскому распределению сечений фотодиссоциации  $\sigma_T^{\text{p,d}}(\omega)$  при заданной температуре газа (плазмы). Для широкого диапазона частот и температур квазиравновесной водородной плазмы проведено сравнение результатов расчетов [22, 23] сечений фотодиссоциации  $\sigma_T^{\text{p,d}}(\omega)$  иона  $\text{H}_2^+$  с имеющимися для этого случая численными квантовомеханическими расчетами [29] из первых принципов.

Показано, что изложенный здесь аналитический метод обеспечивает высокую точность во всем исследованном диапазоне температур и частот переходов. Более того, установлено, что результаты для сечения фотодиссоциации  $\sigma_T^{\text{p,d}}(\omega)$ , полученные для иона  $\text{H}_2^+$  с помощью простой квазиклассической формулы (51), практически совпадают с квантовыми расчетами в наиболее интересной для приложений области температур  $kT > \hbar\omega_e$ . Это открывает широкие возможности для применения изложенного метода в расчетах суммарных сечений фотодиссоциации в случае более тяжелых двухатомных молекул и ионов, для которых проведение подобных квантовых расчетов из первых принципов связано со значительными трудностями.

Особое внимание уделено рассмотрению вопроса об интегральном вкладе связанно-свободных (5) и свободно-свободных (16) радиационных переходов молекулы (квазимолекулы) в полный коэффициент поглощения света. Представленное при этом выражение для полного коэффициента поглощения учитывает движе-

ние ядер молекулы как по классически разрешенной, так и по классически запрещенной областям межъядерного расстояния. При предельном переходе к классическому описанию движения ядер в системе  $\text{H}_2^+$  это выражение приводит к известной полуклассической формуле Бейтса, полученной им в рамках квазистатического приближения. Таким образом, изложенный здесь подход позволяет воспроизвести все наиболее существенные аналитические результаты полуклассической теории Бейтса для полного коэффициента фотопоглощения.

На примере конкретных расчетов для системы  $\text{H}_2^+$  продемонстрировано, что квазиклассическая теория поглощения света оказывается неприменимой для адекватного описания поведения парциальных сечений фотодиссоциации  $\sigma_{vJ}^{\text{p,d}}(\lambda)$  из селективно возбужденных уровней  $vJ$  в непосредственной окрестности длины волны  $\lambda_{\text{cl}}(vJ)$  и при длинах волн  $\lambda \geq \lambda_{\text{cl}}$ , соответствующих классически запрещенным областям движения ядер молекулы. Однако простая квазиклассическая формула (34) хорошо воспроизводит усредненное по осцилляциям сечение  $\sigma_{vJ}^{\text{p,d}}(\lambda)$  вдали от точек поворота (т.е. в области, которая вносит определяющий вклад в усредненное по бальмановскому распределению сечение фотодиссоциации и в суммарный коэффициент фотодиссоциационного поглощения). По этой причине различия между квантовыми и квазиклассическими результатами для интегральных характеристик фотодиссоциации оказываются чрезвычайно малыми во всем исследованном диапазоне длин волн. Аналогичный вывод следует из сравнения общих выражений для интегрального вклада свободно-свободных переходов в фотопоглощение с результатами полуклассических расчетов Бейтса.

Приведенные в статье результаты расчетов для молекулярного (квазимолекулярного) иона  $\text{H}_2^+$  дают достаточно полное представление о поведении интегрального вклада связанно-свободных (1) и свободно-свободных (2) радиационных переходов в полный коэффициент поглощения света. Эти расчеты охватывают ИК-, видимую и УФ-области спектра и широкий диапазон температур квазиравновесной водородной плазмы между 1500 и 25000 К. Из проведенного анализа можно сделать вывод, что основной вклад в полный коэффициент фотопоглощения в окрестности максимума кривой планковского распределения, как правило, вносят связанно-свободные переходы (1) из большого числа колебательно-вращательных состояний. Однако при высоких температурах вклад свободно-свободных переходов (2) становится определяющим в длинноволновой области спектра.

Для астрофизических приложений интерес представляет сравнительный анализ полных констант скоростей непрерывного поглощения света различными компонентами водородной плазмы. Мы здесь ограничились рассмотрением относительного вклада в фотопоглощение лишь ионных компонент:  $\text{H}_2^+$  и  $\text{H}^-$ . При этом, в дополнение к уже имеющимся результатам для солнечной фотосферы (см. [16, 17, 19, 20]) и отдельным моделям для относительно холодных звезд (см. [4] и приведенные там ссылки), мы представили здесь детальные расчеты [21–23] относительного фотопоглощения  $\rho_T$  ионами  $\text{H}_2^+$  и  $\text{H}^-$  в зависимости от длины волны для температур в диапазоне 1400–10080 К. Однако следует иметь в виду, что для получения реального представления о поведении и величина суммарного коэффициента фотопоглощения

в звездных атмосферах необходимо учитывать большое число разнообразных радиационных процессов. В частности, как уже было отмечено во введении, определяющую роль в поглощении инфракрасного излучения в плотных атмосферах холодных звезд с низким содержанием элементов более тяжелых, чем водород и гелий, играют процессы столкновительно-индуцированного поглощения света с участием молекул водорода  $\text{H}_2$ – $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2$ – $\text{H}$  и  $\text{H}_2$ – $\text{He}$  (см. [3–5]). Это связано с тем, что в таких условиях нейтральный водород находится преимущественно в молекулярном состоянии  $\text{H}_2$ , а концентрации ионных компонент значительно ниже, чем в случае солнечной фотосферы или атмосфер более горячих звезд. Однако в случае солнечной фотосферы при энергиях кванта  $\hbar\omega > 4,93$  эВ доминирующим становится поглощение с триплетного уровня  $3s3p\ ^3P$  атома Mg (см. [2]). Представление о роли различных фотопроцессов в атмосферах звезд может быть получено из [1–6].

Работа выполнена при финансовой поддержке INTAS (проект № 99-01326), РФФИ (проекты № 00-02-17245 и № 02-02-16274) и Федеральной целевой программы РФ "Интеграция".

## Список литературы

1. Mihalas D *Stellar Atmospheres* 2nd ed. (San Francisco: W.H. Freeman, 1978)
2. Unsöld A, Baschek B *The New Cosmos* 4th ed. (Berlin: Springer-Verlag, 1991)
3. Frommhold L *Collision-Induced Absorption in Gases* (Cambridge Monographs on Atomic, Molecular, and Chemical Physics, Vol. 2) (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1993)
4. Allard F, Hauschildt P H *Astron. J.* **445** 433 (1995)
5. Borysov A, in *Special Line Shapes* Vol. 10 *Proc. of the 14th ICSLS, State College, Pennsylvania, June 1998* (AIP Conf. Proc., Vol. 467, Ed. R M Herman) (New York: American Institute of Physics, 1999) p. 459
6. Jørgensen U G (Ed.) *Molecules in the Stellar Environment: Proc. of IAU Colloq. No. 146, Copenhagen, Denmark, May 24–29, 1993* (Lecture Notes in Physics, Vol. 428) (Berlin: Springer-Verlag, 1994)
7. Kramers H A, Ter Haar D *Bull. Astron. Inst. Neth.* **10** 137 (1946)
8. Jablonski A *Phys. Rev.* **68** 78 (1945)
9. Bates D R *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **111** 303 (1951)
10. Wildt R *Observatory* **64** 195 (1942); *Astron. J.* **54** 139 (1949)
11. Bates D R *J. Chem. Phys.* **19** 1122 (1951)
12. Bates D R *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **112** 40 (1952)
13. Bates D R, Ledsham K, Stewart A L *Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A* **246** 215 (1953)
14. Bishop D M, Cheung L M *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **11** 3133 (1978)
15. Buckingham R A, Reid S, Spence R *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **112** 382 (1952)
16. Gingerich O J, in *Proc. First Harvard-Smithsonian Conf. on Stellar Atmospheres* (SAO Special Report, No. 167, Eds E H Avrett, O J Gingerich, C A Whitney) (Cambridge: Smithsonian Inst. Astrophys. Observ., 1964) p. 17; *Solar Phys.* **18** 347 (1971)
17. Kurucz R L *ATLAS: A Computer Program for Calculating Model Stellar Atmospheres* (SAO Special Report, No. 309) (Cambridge: Smithsonian Inst. Astrophys. Observ., 1970) p. 15
18. Друкарев Г П, Михайлов А А *Онмука и спектры*. **37** 384 (1974)
19. Mihajlov A A, Dimitrijević M S *Astron. Astrophys.* **155** 319 (1986); **256** 305 (1992)
20. Mihajlov A A, Dimitrijević M S, Ignatović L M *Astron. Astrophys.* **276** 187 (1993)
21. Лебедев В С, Пресняков Л П, Собельман И И *Астрон. журн.* **77** 390 (2000)
22. Лебедев В С, Пресняков Л П, Собельман И И *Письма в ЖЭТФ* **72** 256 (2000)
23. Lebedev V S, Presnyakov L P *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** 4347 (2002)

24. Dunn G H, in *Atomic Collision Processes: Proc. of the 3rd Intern. Conf. on the Physics of Electronic and Atomic Collisions, London, 22–26 July 1963* (Ed. M R C McDowell) (Amsterdam: North-Holland, 1964) p. 997
25. von Busch F, Dunn G H *Phys. Rev. A* **5** 1726 (1972)
26. Оксюк Ю Д *Оптика и спектроскоп.* **23** 213 (1967)
27. Dunn G H *Phys. Rev.* **172** 1 (1968)
28. Argyros J D J. *Phys. B: At. Mol. Phys.* **7** 2025 (1974)
29. Stancil P C *Astrophys. J.* **430** 360 (1994)
30. Kirby K, van Dishoeck E F *Adv. Atom. Mol. Phys.* **25** 437 (1988)
31. Соболевман И И *Введение в теорию атомных спектров* 2-е изд. (М.: Наука, 1977)
32. Лебедев В С, Марченко В С *Труды ФИАН* **145** 79 (1984)
33. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Статистическая физика Ч. 1* (М.: Наука, 1976)
34. Лебедев В С, Марченко В С *Хим. физика* **1** 1589 (1982)
35. Landau L D *Phys. Z. Sowjetunion* **1** 88 (1932)
36. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика: Нерелятивистская теория* (М.: Наука, 1974)
37. Rice O K J. *Chem. Phys.* **1** 375 (1933)
38. Miller W H J. *Chem. Phys.* **48** 464 (1968)
39. Никитин Е Е, Овчинникова М Я *УФН* **104** 379 (1971)
40. Child M S *Mol. Phys.* **29** 1421 (1975)
41. Bieniek R J *Phys. Rev. A* **15** 1513 (1977)
42. Connor J N L J. *Chem. Phys.* **74** 1047 (1981)
43. Zhu C, Nakamura H J. *Chem. Phys.* **101** 10630 (1994)
44. Никитин Е Е, Уманский С Я *Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях* (М.: Атомиздат, 1979)
45. *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами* (Под ред. М Абрамовица, И Стиган) (М.: Наука, 1979)
46. Остроухова И, Шляпников Г В *ЖЭТФ* **77** 483 (1979)
47. Папернов С М, Шляпников Г В, Янсон М Л *ДАН СССР* **238** 324 (1978)
48. Yuan J-M, Bhattacharyya D K, George T F *Mol. Phys.* **47** 1195 (1982)
49. Lebedev V S J. *Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** 1993 (1991)
50. Lebedev V S *Phys. Reviews* (Ed. I M Khalatnikov) **21** (Pt. 1) 1 (2001)
51. Lebedev V S, Beigman I L *Physics of Highly Excited Atoms and Ions* (Springer Ser. on Atoms + Plasmas, Vol. 22) (Berlin: Springer-Verlag, 1998)
52. Wind H J. *Chem. Phys.* **42** 2371; **43** 2956 (1965)
53. Хьюберт К П, Герцберг Г *Константы двухатомных молекул Ч. I* (М.: Мир, 1984)
54. Гурвич Л В и др. *Термодинамические свойства индивидуальных веществ Т. I. Кн. 2* (Отв. ред. В П Глушко) 3-е изд. (М.: Наука, 1978)
55. Venuti M, Decleva P J. *Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** 4839 (1997)
56. Bell K L, Berrington K A J. *Phys. B: At. Mol. Phys.* **20** 801 (1987)

### Radiative transitions in the molecular ion $H_2^+$

V.S. Lebedev, L.P. Presnyakov, I.I. Sobel'man

*P.N. Lebedev Physics Institute, Russian Academy of Sciences,  
Leninskii prosp. 53, Moscow 119991, Russian Federation  
Tel. (7-095) 132-68 70  
E-mail: vlebedev@sci.lebedev.ru*

Continuous photoabsorption processes in the IR, visible and UV spectral regions are theoretically analyzed for a quasi-equilibrium hydrogen plasma at effective temperatures between 1500 K and 25000 K. The absorption of light in such a plasma is due to the molecular ion  $H_2^+$  photodissociating from the set of rovibrational states excited from its ground level; and to free-free radiative transitions induced by collisions of protons  $H^+$  with hydrogen atoms  $H(1s)$ . The phototransitions under study produce a change in the electronic state,  $^2\Sigma_g^+ \rightarrow ^2\Sigma_u^+$ , in the (quasi-)molecular ion  $H_2^+$ . Partial photodissociation cross sections and effective cross sections for collision-induced photoabsorption are described both quantum mechanically and quasiclassically using the theory of nonadiabatic transitions between the potential-energy curves of a diatomic molecule. An analytical approach for calculating the combined contribution from all possible rovibrational levels into the Boltzmann-averaged photodissociation cross sections is presented. The bound-free and free-free contributions into the total photoabsorption coefficient of the  $H_2^+$  system are studied in detail as a function of temperature and wavelength. Recently calculated values of photoabsorption coefficients and effective phototransition cross sections are presented and compared with previous results. Particular attention is given to the relative contribution of positive molecular ions,  $H_2^+$ , and negative atomic ions,  $H^-$ , to the photoabsorption coefficient of a quasi-equilibrium hydrogen plasma.

PACS numbers: **31.15** – p, **31.50**.Gh, **33.80** – b

Bibliography — 56 references

Received 23 September 2002