

## РАДИАТИВНАЯ АССОЦИАЦИЯ МОЛЕКУЛ LiH В МЕЖЗВЕЗДНОЙ СРЕДЕ

Н. Г. Бочкарев\*, В. К. Херсонский

На основе имеющихся данных по сечениям фотодиссоциации молекулы LiH рассчитана температурная зависимость скорости радиативной ассоциации этой молекулы для интервала температур  $50 \text{ K} \leq T \leq 2500 \text{ K}$ .

On the basis of the available data from photodissociation cross-sections of LiH molecule a temperature dependence is calculated of the radiative association rate of this molecule for the temperature intervals  $50 \text{ K} \leq T \leq 2500 \text{ K}$ .

1. В последнее время в астрофизической литературе большое внимание уделяется вопросу о роли легких гидридов, таких как NaH, LiH и др., в методах определения физических условий в межзвездной среде [1]. Молекула LiH с этой точки зрения представляет значительный интерес, поскольку в случае ее обнаружения можно было бы попытаться разработать независимый метод определения обилия межзвездного лития и сопоставить эти данные с существующими представлениями об образовании лития в звездах и обмене газом между этими звездами и межзвездной средой. Более того, изучение градиента обилия межзвездного лития в направлении галактического радиуса позволило бы отделить количество лития, образованного в звездах, от количества лития, образованного в процессе первичного нуклеосинтеза (попытки решения аналогичной задачи относительно дейтерия были предприняты несколько лет назад [2]).

В работе [3] отмечено, что если LiH может образоваться в облаках первичного газа вследствие рассеяния излучения на этих молекулах, на сантиметровых и миллиметровых волнах должны наблюдаться пространственные флуктуации температуры фонового реликтового излучения, которые могут дать важную информацию об эволюции протообъектов на ранних стадиях расширения Вселенной, а также позволят оценить первичный химический состав газа.

Для решения всех упомянутых вопросов необходимо прежде всего сделать корректные оценки ожидаемого обилия LiH в различных условиях, характерных для межзвездной среды. В свою очередь, чтобы сделать такие оценки, необходимо знать сечения или скорости различных элементарных процессов, имеющих отношение к образованию и разрушению молекул LiH. Одним из таких процессов является радиативная ассоциация LiH, которая может произойти при столкновении атомов Li и H. Цель данной работы состоит в оценке скорости реакции  $\text{Li} + \text{H} \rightarrow \text{LiH} + h\nu$  в широком интервале температур газа.

2. Расчет скорости или сечения радиативной ассоциации LiH требует учета всех возможных каналов этого процесса и знания вероятностей электромагнитных переходов в этих каналах. Для решения поставленной задачи воспользуемся тем обстоятельством, что, как выяснено в работе [1], из всех радиационных переходов между основным электронным состоянием молекулы и ближайшим к нему возбужденным состоянием наиболее вероятными являются  $B^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$  и  $A^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ , причем первый из них является доминирующим. Кроме того, в работе [1] рассчитано сечение фотодиссоциации LiH  $\sigma_d$ , т. е. процесса, обратного рассматриваемому. В данном случае это сечение может быть использовано для определения сечения радиативной ассоциации  $\sigma_a$  с по-

\* Н. Г. Бочкарев — сотрудник ГАИШ МГУ.

мощью принципа детального равновесия. Последующее усреднение  $\sigma_a$  с максвелловским распределением скоростей даст искомую величину скорости радиативной ассоциации  $R_a(T)$  как функцию температуры газа.

3. Для установления связи между  $\sigma_a$  и  $\sigma_d$  воспользуемся общепринятой процедурой [4]. Изменение обилия молекул  $N(\text{LiH})$  со временем можно выразить соотношением

$$\frac{dN(\text{LiH})}{dt} = R_a N(\text{Li}) N(\text{H}) - R_d N(\text{LiH}), \quad (1)$$

которое учитывает образование молекул в процессе радиативной ассоциации со скоростью  $R_a$  при концентрациях атомов Li и H, равных  $N(\text{Li})$  и  $N(\text{H})$  соответственно, и разрушение их при фотодиссоциации со скоростью  $R_d$ . При равновесии  $dN(\text{LiH})/dt=0$  и

$$\frac{R_a}{R_d} = K = \frac{N(\text{LiH})}{N(\text{Li}) N(\text{H})} = \left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2} \frac{z_{\text{Li}} z_{\text{H}}}{z_{\text{LiH}}} \exp\left(-\frac{D_0}{kT}\right), \quad (2)$$

где  $K$  — константа равновесия рассматриваемой реакции;  $m = m_{\text{Li}} m_{\text{H}} / (m_{\text{Li}} + m_{\text{H}})$  — приведенная масса молекулы;  $z_{\text{Li}}$ ,  $z_{\text{H}}$ ,  $z_{\text{LiH}}$  — статистические суммы атомов Li, H и молекулы LiH;  $D_0$  — энергия диссоциации.

Рассмотрим теперь детальный баланс между переходами в обе стороны. Число актов радиативной ассоциации за 1 с в 1 см<sup>3</sup> в интервале относительных скоростей атомов  $[v, v+dv]$  есть

$$z_a = N(\text{Li}) N(\text{H}) f(v) v dv \sigma_a, \quad (3)$$

где

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right).$$

Число актов фотодиссоциации за 1 с в 1 см<sup>3</sup> в интервале частот фотонов  $[\nu, \nu+d\nu]$  есть

$$z_d^* = N_n(\text{LiH}) \frac{U_\nu}{h\nu} d\nu c \sigma_d \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right)\right), \quad (4)$$

где

$$U_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1\right]^{-1}$$

и  $N_n(\text{LiH})$  — концентрация молекул LiH в состоянии, характеризуемом совокупностью квантовых чисел  $n$ .  $N_n$  может быть выражено через полную концентрацию молекул  $N(\text{LiH})$ :

$$\begin{aligned} N(\text{LiH}) &= \sum_{n=0}^{\infty} N_n = N_0 \left(1 + \frac{N_1}{N_0} + \frac{N_2}{N_0} + \dots\right) = \\ &= \frac{N_0}{g_0} \sum_{n=0}^{\infty} g_n \exp\left[-\frac{E_n - E_0}{kT}\right] = \frac{N_0}{g_0} z_{\text{LiH}}, \end{aligned} \quad (5)$$

где использовано больцмановское выражение для отношений населенностей уровней;  $g_n$  — статистические веса уровней. С помощью (5) легко получить, что

$$N_n(\text{LiH}) = N_0 \frac{g_n}{g_0} \exp\left(-\frac{E_n - E_0}{kT}\right) = g_n \frac{N(\text{LiH})}{z_{\text{LiH}}} \exp\left(-\frac{E_n + D_0}{kT}\right), \quad (6)$$

где учтено также, что  $E_0 = -D_0$  (энергия диссоциации выбрана положительной, а энергия  $E_n$  — отрицательной). Приравнивая (3) и (4) с учетом (6), имеем:

$$\sigma_a = \sigma_d \frac{g_n}{z_{\text{LiH}}} \cdot \frac{U_\nu}{f(v)} \cdot \left(\frac{d\nu}{dv}\right) \frac{c}{h\nu v} \cdot \frac{N(\text{LiH})}{N(\text{Li}) N(\text{H})} \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right)\right] \exp\left(-\frac{E_n + D_0}{kT}\right). \quad (7)$$

Подставим в это выражение формулу (2) и учтем связь между частотой фотона и относительной скоростью движения атомов:

$$h\nu = \frac{mv^2}{2} - (E_n + D_0).$$

Тогда, раскрывая значения функций  $U$  и  $f(v)$  в (7), получаем:

$$[\sigma_a = \frac{2g_n}{z_{Li}z_H} \left(\frac{h\nu}{mc}\right)^2 \sigma_d. \quad (8)$$

Это выражение с точностью до множителя  $2/z_{Li}$  совпадает с известным выражением связи сечений фотоэффекта и фоторекомбинации для атомов. Отметим попутно, что если атомы Li и H находятся в основном состоянии, то  $z_{Li} = z_H = 2S + 1 = 2$ , где  $S = 1/2$  спин электрона.

4. Как упоминалось выше, сечение  $\sigma_d$  было рассчитано в [1]. Аппроксимируем  $\sigma_d$  формулой, имеющей вид

$$\sigma_d = \sigma_0 \left(\frac{y}{y_m}\right)^\alpha \exp\left\{-\nu' \left(\frac{1}{y} - \frac{1}{y_m}\right) - \frac{1}{\nu''} (y - y_m)\right\}, \quad (9)$$

где  $y = \nu - \nu_0$ ;  $y_m = \nu_m - \nu_0$ ;  $\nu_m$  — частота на которой  $\sigma_d$  имеет максимум;  $\nu_0$  — величина, аналогичная пороговой частоте фотона (на самом деле, она несколько больше пороговой). Величины  $\nu_0$ ,  $\alpha$ ,  $\nu'$  и  $\nu''$  были выбраны из условия наилучшего сшивания формулы (9) с расчетами [1]. Постоянные величины, входящие в (9), имеют следующие значения:

$$\sigma_0 = 10^{-16} \text{ см}^2; \quad \alpha = 1.7739; \quad \nu_0 = 1.025 \cdot 10^{15} \text{ Гц}; \quad \nu' = 4.19 \cdot 10^{12} \text{ Гц}; \quad \nu'' = 3.22 \cdot 10^{13} \text{ Гц}.$$

Подстановка выражения (9) с учетом (8) в формулу для константы скорости

$$R_a(T) = \int_0^\infty \sigma_a f(v) v^3 dv$$

позволяет вычислить  $R_a$ . Окончательное выражение имеет вид:

$$R_a(T) = \Lambda \left(\frac{\lambda}{z}\right)^{\frac{3+\alpha}{2}} \left\{ \left(1 + \frac{z}{\lambda}\right) K_{1+\alpha}(2\sqrt{\lambda z}) + \left(\frac{2+\alpha}{\sqrt{\lambda z}} + 2\sqrt{\frac{z}{\lambda}}\right) K_{2+\alpha}(2\sqrt{\lambda z}) \right\}, \quad (10)$$

где

$$\Lambda = g_n \frac{4\pi}{c^2} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T}\right)^{3/2} \Omega \nu_0^{\alpha+3}; \quad \lambda = \frac{\nu'}{\nu_0}; \quad z = \frac{\nu_0}{\nu''} \left(1 + \frac{h\nu''}{kT}\right);$$

$$\Omega = \sigma_0 y_m^{-\alpha} \exp\left(\frac{\nu'}{y_m} + \frac{y_m}{\nu''}\right);$$

$K_\mu(x)$  — функция Макдональда.

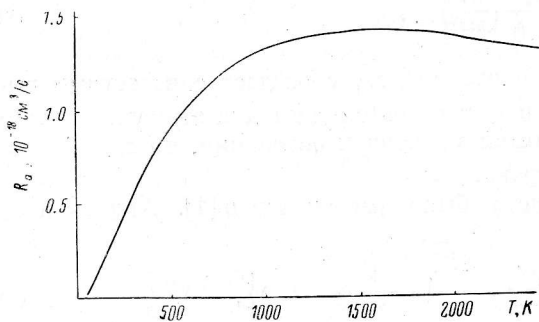
Температурная зависимость  $R_a(T)$  согласно формуле (10) представлена на рисунке для случая, когда радиативная ассоциация идет с образованием молекулы LiH в основном колебательно-вращательном состоянии. Из рисунка видно, что максимум величины  $R_a(T)$  лежит в области температур 1500—2000 К. Это обстоятельство качественно объясняется тем, что максимум  $R_a$  достигается, когда тепловая энергия частиц сравнивается с энергией фотонов в том интервале частот, где сечение  $\sigma_d$  (и приблизительно  $\sigma_a$ ) имеет максимальное значение, т. е.  $3kT/2 \approx h(\nu_m - \nu_0)$ , откуда следует, что  $T_m \approx 1400 \div 1700$  К.

Таким образом, константа скорости  $R_a$  принимает значения  $R_a < 10^{19}$  см<sup>3</sup>/с при  $T < 100$  К и достигает в максимуме величины  $4 \cdot 10^{-18}$  см<sup>3</sup>/с при  $T \approx 1500$  К.

Отметим также, что константа скорости фотодиссоциации  $R_d(T)$  может быть пересчитана из  $R_a(T)$  с помощью формулы (2). В связи с этим необходимо упомянуть о следующем обстоятельстве. Если в реальных астрофизических условиях термодинамическое равновесие не реализуется, температуры  $T$  в  $R_d$  и  $R_a$  имеют разный смысл, а именно, в  $R_a(T)$  величина  $T$  является кинетической температурой газа  $T_k$ , тогда как в  $R_d(T)$  она есть температура поля излучения.

5. Относительно полученных результатов необходимо сделать следующие замечания.

Во-первых, данный расчет произведен на основе знания сечения  $\sigma_d$  [1], которое получено для фотодиссоциации молекулы из основного колебательного состояния. В [5] показано, что сечение  $\sigma_d$  быстро растет с ростом номера колебательного уровня и может увеличиться на несколько порядков для фоторасщепления с уровней с колебательными квантовыми числами  $v=5-10$ . Соответственно этому и сечение радиативной ассоциации, а следовательно и  $R_a(T)$  может существенно (на несколько порядков) возрасти при образовании молекулы в возбужденных колебательных состояниях. Последующие радиационные ко-



— соответственно этому и сечение радиативной ассоциации, а следовательно и  $R_a(T)$  может существенно (на несколько порядков) возрасти при образовании молекулы в возбужденных колебательных состояниях. Последующие радиационные ко-

Температурная зависимость скорости радиативной ассоциации  $R_a(T)$  для молекулы LiH.

лебательные переходы в дискретном спектре приведут молекулу в основное колебательное состояние, причем этот канал является более вероятным, чем обратная фотодиссоциация из возбужденного состояния. Таким образом, полученные в данной работе значения  $R_a(T)$  необходимо рассматривать как нижние оценки.

Во-вторых, в работе [1] сделан вывод о том, что в сравнительно разреженных облаках межзвездного газа с  $N(H) < 2 \cdot 10^3 \text{ см}^{-3}$  обилие молекул LiH, вероятно, слишком мало, чтобы они могли быть обнаружены, поскольку в таких облаках разрушающее действие ультрафиолетового поля излучения звезд еще достаточно велико. Неменьший интерес представляет вопрос об обилии молекул LiH в гигантских газовой-пылевых комплексах, где могут достигаться плотности газа  $N(H_2) > 10^4 \text{ см}^{-3}$  и вплоть до  $10^6 \text{ см}^{-3}$ , тогда как УФ-поле излучения ослаблено настолько, что практически не разрушает молекулы. Правда, в этом случае, существенным может оказаться процесс переработки образовавшихся молекул LiH в молекулы  $H_2$  по обменной реакции  $LiH + H \rightarrow H_2 + Li$ , скорость которой не известна. Этот вопрос в настоящее время остается открытым.

#### Литература

1. Kirby K., Dalgarno A. NaH and LiH in diffuse interstellar clouds. — *Astrophys. J.*, 1978, 224, p. 444—447.
2. Penzias A. A. Interstellar HCN, HCO<sup>+</sup> and the galactic deuterium gradient. — *Astrophys. J.*, 1979, 228, p. 430—434.
3. Дубрович В. К. О молекулах космологического происхождения. — *Письма в АЖ*, 1977, 3, м. 243—245.
4. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
5. Херсонский В. К. Фотодиссоциация осциллятора Пешля—Теллера. — *Оптика и спектроскопия*, 1977, 43, с. 39—43.

Поступила в редакцию 03.05.82