

ФОТОДИССОЦИАЦИЯ МОЛЕКУЛ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ НЕЙТРОННОЙ ЗВЕЗДЫ

В. К. Херсонский

Рассчитано сечение фотодиссоциации молекулярного иона H_2^+ в магнитном поле 10^{12} — 10^{13} Гс, характерном для поверхности нейтронной звезды. Рассматривается фотораспад молекулы с колебательного уровня нижнего электронного состояния в непрерывный спектр этого же состояния. Ось молекулы направлена вдоль магнитного поля. Показано, что сечение фотодиссоциации возрастает с номером колебательного уровня v , а при $v \geq 16$ — 18 сечение уменьшается при увеличении магнитного поля.

The cross section of the photodissociation of H_2^+ molecular ion in the magnetic field 10^{12} — 10^{13} Gs is calculated. We considered the case when molecular axis is directed along the magnetic field and photodissociation goes from the vibrational levels of the low electron state to the continuum of this state. It is shown that the cross section increases when the vibrational level number v grows and at $v \geq 16$ — 18 this cross section decreases when the magnetic field increases.

Введение. В последние годы активно разрабатывается вопрос о структуре молекул, и в первую очередь простейшего молекулярного иона H_2^+ , в сильных магнитных полях $B=10^{12}$ — 10^{13} Гс, характерных для нейтронных звезд (см., например, последние работы на эту тему [1—4]). Важность исследований такого рода очевидна, поскольку они дают возможность получить спектроскопические данные молекул в таких полях и на их основе разработать целый ряд полезных методов для изучения физических условий в атмосферах нейтронных звезд, и в частности независимого метода измерения магнитного поля. Интерес к этой теме возникает еще и потому, что проницаемость потенциального барьера, разделяющего ядра в молекуле, в сильном магнитном поле существенно возрастает, что может приводить к увеличению скоростей реакций синтеза ядер и к катализу других ядерных реакций [5].

Существуют и другие интересные в астрофизических приложениях аспекты рассматриваемой проблемы, которые должны быть изучены. Среди них одним из важнейших является вопрос об обилии молекул в атмосфере нейтронной звезды, поскольку его решение дает возможность изучить целый ряд других вопросов, в том числе и упомянутые выше. В настоящее время предполагается, что в атмосферах старых остывших нейтронных звезд с температурой поверхности $T < 10^6$ К в небольших количествах молекулы могут присутствовать, поскольку их энергии связи в сильных магнитных полях возрастают до нескольких сотен электронвольт. Однако детально этот вопрос рассмотрен не был. Для его решения необходимо знать вероятности и сечения различных элементарных процессов, происходящих в атомно-молекулярном газе при $B=10^{12}$ — 10^{13} Гс, которые до сих пор рассмотрены не были. Одним из таких процессов является фотодиссоциация молекул ультрафиолетовыми и рентгеновскими фотонами. Если молекула находится в основном электронном состоянии, фотодиссоциация может идти либо путем возбуждения в верхние (связанные или несвязанные) электронные состояния с последующим распадом молекулы, либо с помощью перехода в непрерывный спектр основного электронного состояния.

Цель данной работы состоит в том, чтобы рассчитать сечение фотодиссоциации молекулярного иона водорода в сильном магнитном поле, которая происходит по второму из упомянутых выше каналов. Можно ожидать, что этот канал будет доминировать в тех случаях, когда энергия фотонов не столь велика,

чтобы были возможны переходы между различными электронными состояниями, но достаточна для переходов молекулы с различных колебательных уровней основного электронного состояния в непрерывный спектр этого же состояния. Мы обсудим зависимости сечения от номера колебательного уровня v , частоты фотона ω и величины магнитного поля. При этом будем рассматривать случай, когда ось молекулы направлена вдоль магнитного поля. Такая конфигурация имеет минимальную энергию. Иначе говоря, молекула находится в основном вращательном состоянии (прецессия оси молекулы вокруг направления магнитного поля). С одной стороны, этот случай является наиболее интересным в астрофизических приложениях. С другой стороны, для такой конфигурации имеются все данные для решения обсуждаемой задачи, а именно кривые потенциальной энергии, квадрупольные моменты H_2^+ и т. п. [4].

Сечение фотодиссоциации. В рассматриваемом случае, когда ось молекулы направлена вдоль магнитного поля, сечение фотодиссоциации можно вычислить таким же образом, как это делается в отсутствие магнитного поля, поскольку колебания ядер в молекулярной потенциальной яме происходят вдоль поля и оно не влияет на их движение. Однако магнитное поле влияет на форму кривой потенциальной энергии в молекуле, а именно углубляет ее и уменьшает межъядерное расстояние [1—4]. Таким образом, оно должно существенно влиять на сечения различных элементарных процессов и, в частности, на фотодиссоциацию. Учтем также, что рассматриваемый переход из дискретного спектра в непрерывный без изменения электронного состояния запрещен в электрическом дипольном приближении из-за симметрии молекулы. Этот переход, однако, разрешен в электрическом квадрупольном приближении. С учетом этого обстоятельства сечение фотодиссоциации можно представить в виде

$$\sigma_{vq}(\omega) = \frac{8\pi^3}{15} \frac{M\omega^3}{\hbar^2 q c^3} |I_{qv}|^2, \quad (1)$$

где M — приведенная масса молекулярного иона H_2^+ ; q — абсолютная величина волнового вектора разлетающихся атомов,

$$q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2M [\hbar\omega - (D_e - E_v)]}; \quad (2)$$

D_e — энергия диссоциации; E_v — энергия колебательного уровня в основном электронном состоянии иона; I_{qv} — матричный элемент квадрупольного момента,

$$I_{qv} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_q(z) Q(z) \psi_v(z) dz. \quad (3)$$

В этой формуле $Q(z)$ — zz -компонента тензора квадрупольного момента. В рассматриваемом случае, когда вращательные возбуждения отсутствуют, только эта компонента дает вклад в обсуждаемые переходы. ψ_q и ψ_v — волновые функции непрерывного и дискретного спектров, которые являются

Параметры, определяющие функциональную зависимость $Q(z)$ [формула (10)] при различных значениях величины магнитного поля

$B, 10^{12}$ Гс	$A_Q, 10^{-27}$ ед. CGSE	$B_Q, 10^{-27}$ ед. CGSE	β
1	-0.808	0.129	11.67
5	-0.450	0.110	6.18
10	-0.440	0.182	3.46

решениями уравнения Шредингера для заданной кривой потенциальной энергии. В работе [4] показано, что эта кривая хорошо аппроксимируется потенциальной функцией осциллятора Пешля—Теллера

$$U(z) = D_e \left[\frac{\text{sh}^4(xz_e)}{\text{sh}^2(xz)} - \frac{\text{ch}^4(xz_e)}{\text{ch}^2(xz)} \right] - |E_a|, \quad (4)$$

где z_e — равновесное межъядерное расстояние; x — постоянная, определяющая крутизну $U(z)$. Согласно [4],

$$\begin{aligned} |E_a| &\simeq 2.54 \cdot 10^{-2} B^{0.312} \text{ эВ}; \quad D_e \simeq 1.08 \cdot 10^{-4} B^{0.480} \text{ эВ}; \\ z_e &\simeq 7.16 \cdot 10^2 B^{0.303} \text{ \AA}; \quad x \simeq 5.43 \cdot 10^{-4} B^{0.285} \text{ \AA}^{-1}. \end{aligned} \quad (5)$$

Волновые функции ψ_g и ψ_v для кривой потенциальной энергии (4) известны [6] и в обозначениях, используемых в данной работе, имеют вид:

$$\begin{aligned} \psi_v(z) &= N_v t^{(2\gamma-1)/4} (1-t)^{(a-\gamma)/2-v} F(-v, a-v; \gamma; t); \\ \psi_g(z) &= C_g t^{(2\gamma-1)/4} (1-t)^{iq/2x} F\left(\frac{\gamma+a}{2} + \frac{iq}{2x}, \frac{\gamma-a}{2} + \frac{iq}{2x}; \gamma; t\right), \end{aligned} \quad (6)$$

где $t = \text{th}^2(xz)$ и N_v и C_g — нормировочные постоянные:

$$\begin{aligned} N_v &= \frac{1}{\sqrt{2} \Gamma(\gamma)} \left[\frac{2x(a-\gamma-2v) \Gamma(a-v) \Gamma(\gamma+v)}{v! \Gamma(a-\gamma-v+1)} \right]^{1/2}; \\ C_g &= \frac{1}{\sqrt{4\pi} \Gamma(\gamma)} \left| \Gamma\left(\frac{\gamma+a}{2} + \frac{iq}{2x}\right) \Gamma\left(\frac{\gamma-a}{2} + \frac{iq}{2x}\right) / \left[\Gamma\left(\frac{iq}{x}\right) \right] \right|. \end{aligned} \quad (7)$$

В этих формулах $\Gamma(x)$ — гамма-функция Эйлера, также

$$\begin{aligned} a &= \left[\frac{1}{4} + \frac{2MD_e}{\hbar^2 x^2} \text{ch}^4(xz_e) \right]^{1/2}, \\ \gamma &= 1 + \left[\frac{1}{4} + \frac{2MD_e}{\hbar^2 x^2} \text{sh}^4(xz_e) \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Кроме того, энергия колебательного уровня E_v легко выражается через постоянные (8):

$$E_v = -\frac{\hbar^2 x^2}{2M} (a - \gamma - 2v)^2, \quad (9)$$

причем эта энергия отсчитывается непосредственно от границы непрерывного спектра. zz -компонента тензора квадрупольного момента $Q(z)$ рассчитана нами в работе [4]. Для вычисления интеграла (3) удобно аппроксимировать величину $Q(z)$ формулой

$$Q(z) = A_Q + B_Q / (1-t)^\beta. \quad (10)$$

В этой формуле величина t определена после формулы (6). Параметры A_Q , B_Q , β для трех значений величины магнитного поля приведены в таблице. Подстановка (6) и (10) в интеграл (3) приводит к результату

$$\begin{aligned} I_{qv} &= (-1)^v \frac{C_g N_v B_Q}{2x} \cdot \frac{\Gamma^2(\gamma) \Gamma(a-\gamma-v+1)}{\Gamma(\gamma+v) \Gamma(a-v)} \sum_{n=0}^v (-1)^n \binom{v}{n} \times \\ &\times \frac{\Gamma(a-v+n)}{\Gamma(a-2v-\gamma+n+1) \Gamma(-v+n-\beta) \Gamma(a-v+n-\beta)} \times \\ &\times \left| \Gamma\left(\frac{a-\gamma}{2} + \frac{iq}{2x} - v + n - \beta\right) \right|^2. \end{aligned} \quad (11)$$

Используя эту формулу для матричного элемента I_{qv} , выражение для сечения фотодиссоциации (1) после громоздких преобразований можно записать в виде

$$\sigma_{vq}(\omega) = \Lambda_v \Delta(f) S^2(f), \quad (12)$$

где f — величина, выраженная через частоту фотона и пороговую частоту $\omega_{\text{пор}}$:

$$f = \frac{\omega - \omega_{\text{пор}}}{\omega_{\text{пор}}}; \quad \omega_{\text{пор}} = \frac{|E_v|}{\hbar} = \frac{\hbar \kappa^2}{2M} (a - \gamma - 2v)^2, \quad (13)$$

а величины Λ_v , $\Delta(f)$ и $S(f)$ определяются следующими выражениями:]

$$\Lambda_v = \frac{\pi}{15} \cdot \frac{\hbar \kappa^4 B_Q^2}{M^2 c^3} \cdot \frac{4^{2\beta+2v+1}}{v!} (a - \gamma - 2v)^7 \sin^2 \pi \mu \times \\ \times \frac{\Gamma(a - \gamma - v + 1) \Gamma^2(v + \beta + 1) \Gamma(a - v)}{\Gamma(\gamma + v) \Gamma^2(a - \gamma - 2v + 1) \Gamma^2(a - v - \beta)} \Gamma^2\left(\frac{a + \gamma}{2}\right) \Gamma^2\left(\frac{a - \gamma}{2}\right), \quad (14)$$

где $\mu = \beta - [\beta]$ ($[\beta] \equiv m$ — целая часть числа β);

$$\Delta(f) = (1 + f)^3 \frac{\text{sh}(\pi q/x)}{\sin^2[(a - \gamma)\pi/2] + \text{sh}^2[\pi q/2x]} \left[(a - \gamma)^2 + \frac{q^2}{x^2} \right]^{-2(\mu+1)} \times \\ \times \left| \Gamma\left(\frac{a + \gamma}{2} + \frac{iq}{2x}\right) \Gamma\left(\frac{a - \gamma}{2} + \frac{iq}{2x}\right) \left[\Gamma\left(\frac{a + \gamma}{2}\right) \Gamma\left(\frac{a - \gamma}{2}\right) \right] \right|^2; \quad (15)$$

$$S(f) = \sum_{n=0}^v \frac{(-v)_n (a - v)_n}{4^n n! (a - \gamma - 2v + 1)_n (-v - \beta)_n (a - v - \beta)_n} \times \\ \times \prod_{s=1}^{v+m-n} \left[(a - \gamma - 2\mu - 2s)^2 + \frac{q^2}{x^2} \right]^{-1}. \quad (16)$$

Причем, согласно формулам (2) и (13),

$$\frac{q}{x} = (a - \gamma - 2v) \sqrt{f}. \quad (17)$$

Наконец, выражение, стоящее во второй строке формулы (15), при $(a \pm \gamma)/2 \gg 1$ (именно это имеет место в рассматриваемом случае) может быть заменено приближенной величиной

$$\left[\frac{(a^2 - \gamma^2)^2 + 2(a^2 + \gamma^2)(q/x)^2 + (q/x)^4}{(a^2 - \gamma^2)^2} \right]^{(a-1)/2} \left[\left(\frac{a - \gamma}{a + \gamma} \right)^2 \frac{(a + \gamma)^2 + (q/x)^2}{(a - \gamma)^2 + (q/x)^2} \right]^{\gamma/2} \times \\ \times \exp \left[-\frac{q}{x} \arccos \frac{a^2 - \gamma^2 - (q/x)^2}{\sqrt{(a^2 - \gamma^2)^2 + 2(a^2 + \gamma^2)(q/x)^2 + (q/x)^4}} \right]. \quad (18)$$

Формула (12) при учете (15) и (18) дает возможность получить численные результаты для сечения фотодиссоциации H_2^+ в отмеченных выше приближениях.

Обсуждение численных результатов. На рис. 1 представлены результаты расчета сечения фотодиссоциации H_2^+ для трех величин магнитного поля: $B = 10^{12}$, $5 \cdot 10^{12}$ и 10^{13} Гс. Прежде всего следует отметить, что как и при $B=0$, эти кривые обладают четко выраженным резонансным характером — при частоте, приближающейся к $\omega \approx 2 \omega_{\text{пор}}$ ($f \rightarrow 1$), все кривые имеют резкий завал [7]. Резкое увеличение сечения фотодиссоциации при увеличении номера колебательного уровня v также подобно тому, что имеет место при $B=0$ [7]. Таким образом, фотодиссоциация облегчается, если молекула предварительно возбуждена на высокие колебательные уровни.

Магнитное поле $B=0$ вносит свою специфику в поведение сечения. Из рис. 1 видно, что сечения с одним и тем же значением v лежат тем ниже, чем сильнее магнитное поле. Это относится не ко всем колебательным уровням. Из рис. 2, где изображены максимальные значения сечений $(\sigma_{v,q})_{\text{max}}$ как функции колебательного квантового числа v , видно, что при $v \leq 16 \div 18$ сечения при данном значении v возрастают с увеличением B . Однако в этой области ($v \leq 16$) их абсолютная величина столь мала, что не представляет какого-либо интереса для приложений. Таким образом, в практически интересном случае $v \geq 18$ магнитное поле уменьшает сечение фотодиссоциации, т. е. способствует увеличению устойчивости молекул относительно фоторазрушения. Причем этот

эффект проявляется тем лучше, чем больше колебательное квантовое число (рис. 1 и рис. 2). Например, при $\nu = 24$, $(\sigma_{\nu q})_{\max} \approx 10^{-12} \text{ см}^2$ при $B = 10^{12} \text{ Гс}$ и $(\sigma_{\nu q})_{\max} \approx 10^{-21} \text{ см}^2$ при $B = 10^{13} \text{ Гс}$.

Заключение. В работе выполнены расчеты сечения фотодиссоциации молекулярного иона H_2^+ в сильном магнитном поле, характерном для поверхности

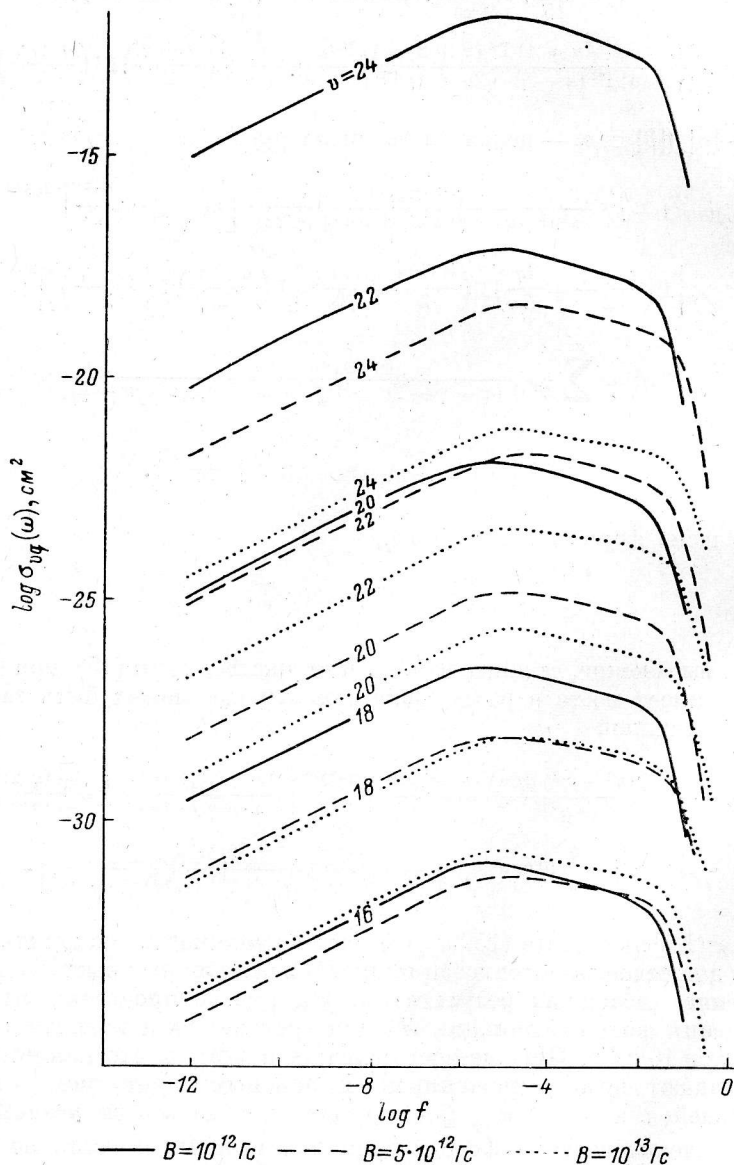


Рис. 1. Частотная зависимость сечения фотодиссоциации H_2^+ для различных величин колебательных квантовых чисел ν при трех значениях магнитного поля $f = (\omega - \omega_{\text{пор}}) / \omega_{\text{пор}}$.

нейтронной звезды, $B = 10^{12} \div 10^{13} \text{ Гс}$. Рассмотрен случай фоторазрушения молекул из произвольного колебательного состояния внутри основного электронного терма. Зависимость сечения фотодиссоциации от частоты фотона и от колебательного квантового числа качественно подобна той, которая имеет место в отсутствие магнитного поля. Однако, как показывают расчеты, при увеличении магнитного поля существенно уменьшаются сечения фотодиссоциации с высоких колебательных уровней. Это уменьшение имеет место именно в той области колебательных квантовых чисел, где сечения не малы и фотопроцессы могут

представлять интерес для астрофизических приложений. Таким образом, магнитное поле оказывает на молекулы стабилизирующий эффект и увеличивает их устойчивость относительно фоторазрушения.

Отметим также, что, хотя данные расчеты относятся к конкретной молекуле, представляется очевидным, что основные выводы из рассматриваемых зависимостей будут качественно применимы и для других молекул,

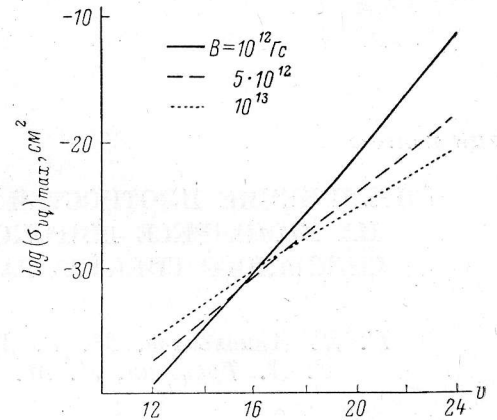


Рис. 2. Максимальное значение сечения фотодиссоциации $(\sigma_{dq})_{\max}$ как функция колебательного квантового числа ν при различных значениях магнитного поля.

в частности вывод о стабилизации молекул относительно фоторазрушения вблизи поверхности нейтронной звезды.

Литература

1. The H_2^+ molecule in strong magnetic fields, studied by method of linear combinations of orbitals / C. P. de Melo, T. K. Das, R. G. Ferreira, L. C. M. Miranda — Phys. Rev., 1978, A18, p. 12—14.
2. Ozaki J., Tomishima Y. Monte Carlo solutions of Schrödinger's equation for H_2^+ ion in strong magnetic fields. — J. Phys. Soc. Japan, 1980, 49, p. 1497—1504.
3. Ozaki J., Tomishima Y. Energies of the H_2^+ ion in strong magnetic fields. — Phys. Lett., 1981, 82A, p. 449—452.
4. Херсонский В. К. Ион молекулы водорода в сильном магнитном поле. — Оптика и спектроскопия, 1983, 55, с. 825—832.
5. Khersonskij V. K. Tunnel effect in molecules in the strong magnetic field of the neutron star. — Astrophys. and Sp. Sci., 1982, 87, p. 61—65.
6. Жирнов Н. И., Шадрин О. П. Расчеты факторов Франка—Кондона с волновыми функциями Пешля—Теллера. — Оптика и спектроскопия, 1968, 24, с. 890—893.
7. Херсонский В. К. Фотодиссоциация осциллятора Пешля—Теллера. — Оптика и спектроскопия, 1977, 43, с. 39—44.

Поступила в редакцию 2 ноября 1982 г.