

НЕРАВНОВЕСНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ МЕЖЗВЕЗДНОГО ЦИАНОАЦЕТИЛЕНА

И. И. Зинченко,* В. К. Херсонский

Приведены результаты расчетов населенностей 30 нижних вращательных уровней межзвездных молекул цианоацетилена. Вычисления проведены для значений полной концентрации газа $N \approx 10^2 \div 10^7 \text{ см}^{-3}$ и кинетической температуры $T_k \approx 10 \div 60 \text{ К}$, типичных для облаков межзвездной среды. Рассматривается случай малой оптической толщины во вращательных линиях. Обсуждаются также зависимости температур возбуждения и коэффициентов поглощения для рассматриваемых переходов от N и T_k . Выявляются области термализации и инверсной населенности вращательных уровней.

In the paper the results of calculations of the rotational levels populations for the interstellar cyanoacetylene are presented. The populations of 30 rotational levels are investigated. The calculations were made for gas concentration interval $N \approx 10^2 \div 10^7 \text{ cm}^{-3}$ and kinetic temperature range $T_k \approx 10 \div 60 \text{ K}$. The case of small optical depth in the rotational lines is considered. We also discuss the dependence of the excitation temperatures and absorption coefficients for the transitions under consideration upon N and T_k and separate the regions of the thermalization and inverse population of the rotational levels.

Молекула цианоацетилена эффективно используется для зондирования физических условий в плотных облаках межзвездного газа. Это обстоятельство связано с тем, что благодаря большому моменту инерции вращательные уровни HC_3N разделены сравнительно небольшими энергетическими интервалами. Поэтому даже при достаточно низких температурах газа $T_k \approx 10 \div 60 \text{ К}$ характерных для плотных конденсаций, возбуждается сразу много вращательных уровней, что обуславливает возможность наблюдения одновременно нескольких эмиссионных линий этой молекулы из одной и той же области исследуемого объекта. То есть в принципе оказывается возможным определить одновременно несколько параметров среды без привлечения каких-либо дополнительных предположений о значениях этих параметров.

Наряду с основной изотопической конфигурацией $\text{H}^{12}\text{C}_3^{14}\text{N}$ наблюдаются изотопзамещенные конфигурации $\text{H}^{13}\text{C}^{12}\text{C}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, $\text{H}^{12}\text{C}^{13}\text{C}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ и $\text{H}^{12}\text{C}^{12}\text{C}^{13}\text{C}^{14}\text{N}$. Энергии связи этих конфигураций различаются. Поэтому их равновесные относительные обилия зависят от температуры газа, что может быть использовано для определения T_k при наблюдениях линий, относящихся к разным изотопзамещенным молекулам.

Следует также отметить, что молекула HC_3N является вторым членом семейства цианополининов, которые наблюдаются в межзвездной среде вплоть до HC_{11}N . Такого рода молекулы с неразветвленными тройными связями ($\text{H}-\text{C} \equiv \text{C}-\text{C} \equiv \text{N}$) очень активно ведут себя в химических реакциях. Поэтому определение их относительного обилия может служить для изучения процессов химического синтеза в межзвездной среде.

Однако для решения всех этих вопросов необходимо достаточно точно знать зависимости условий формирования наблюдаемых линий от таких параметров межзвездной среды, как кинетическая температура газа T_k и его концентрация N . Причем эти зависимости должны быть рассчитаны для широкого интервала изменения N и T_k . Такого рода расчеты выполнены в недавней работе [1] для интервалов концентраций $10^3 \leq N \leq 10^6 \text{ см}^{-3}$ и температур $15 \leq T_k \leq 100 \text{ К}$. Но эти вычисления не очень точны. Дело в том, что в них для определения на-

* ИПФ АН СССР.

селенностей уровней n_J (J — вращательное квантовое число) при концентрациях $N < 4 \cdot 10^4 \text{ см}^{-3}$ учитывалось только 12 нижних вращательных уровней, а при $N < 10^6 \text{ см}^{-3}$ — 18 нижних уровней. Вместе с тем, как легко оценить, при концентрациях $N \approx 10^5 \div 10^6 \text{ см}^{-3}$, когда населенности близки к термодинамически равновесным величинам, верхние уровни, характеризующиеся квантовыми числами $J \approx 20 \div 30$ еще достаточно эффективно заселяются. Например, при $T_K \approx 60 \text{ К}$ $n_{10}/n_0 \approx 14.2$, $n_{20}/n_0 \approx 9.3$ и $n_{30}/n_0 \approx 8.5$. Таким образом, населенности уровней с $J \approx 20 \div 30$ оказываются того же порядка, что и населенности нижележащих уровней. Неучет этого обстоятельства в расчетах населенностей может привести к существенным ошибкам при дальнейшей интерпретации наблюдаемых спектров.

Цель данной работы состоит в изучении зависимостей населенностей нижних вращательных уровней HC_3N от концентрации и кинетической температуры газа в широких интервалах изменения ($N \approx 10^2 \div 10^7 \text{ см}^{-3}$, $10 \leq T_K \leq 60 \text{ К}$), которые являются наиболее интересными с точки зрения приложения полученных результатов к интерпретации наблюдений. Расчеты населенностей проведены с учетом 40 нижних состояний. Это позволило получить достаточно точные результаты для уровней $0 \leq J \leq 30$ и выявить те области концентраций газа, где температура возбуждения и коэффициент поглощения в линии становятся отрицательными.

Методика расчета населенностей. Как следует из наблюдений вращательных переходов молекулы HC_3N [2, 3], эмиссионные линии, как правило, являются оптически тонкими. Методика расчета населенностей в случае малой оптической толщины во вращательных линиях обсуждалась нами детально в работах [4, 5]. Вращательные уровни молекулы HC_3N обладают сверхтонкой структурой, связанной с наличием у ядра азота спина $I = 1$. Однако, как отмечено в [4, 5], при малой оптической толщине во вращательных линиях подуровни сверхтонкой структуры, характеризующиеся квантовым числом полного углового момента F , заселены пропорционально их статистическим весам, т. е. $n_{JF}/n_{JF'} = (2F' + 1)/(2F + 1)$. Иначе говоря, их населенности n_{JF} могут быть легко рассчитаны, если известны суммарные населенности вращательных уровней $n_J = \sum_F n_{JF}$.

Поэтому в дальнейшем мы не будем учитывать сверхтонкое расщепление. Для расчета населенностей вращательных уровней, как известно, используется следующая система уравнений баланса:

$$n_J \sum_{J'} W_{JJ'} = \sum_{J'} n_{J'} W_{J'J}; \quad \sum_J n_J = 1. \quad (1)$$

В этих уравнениях $W_{JJ'}$ — полная вероятность перехода $J \rightarrow J'$:

$$W_{JJ'} = R_{JJ'} + C_{JJ'}, \quad (2)$$

где $R_{JJ'}$, $C_{JJ'}$ — радиационная и столкновительная вероятности перехода $J \rightarrow J'$. Суммирование в (1) формально должно выполняться в пределах $0 \leq J < \infty$. Однако пробные вычисления показывают, что уровни $J \geq 40$ в рассматриваемых интервалах концентраций и кинетических температур практически не влияют на уровни с $J \approx 20$ и мало влияют на уровни с $20 \leq J \leq 30$. Поэтому в наших расчетах суммирование в системе уравнений (1) проводится в пределах $0 \leq J \leq 40$.

Радиационные вероятности переходов определяются известными соотношениями

$$R_{JJ'} = \begin{cases} A_{JJ'}(1 + \rho_{JJ'}) & \text{при } J' < J; \\ \frac{2J' + 1}{2J + 1} A_{J'J} \rho_{JJ'} & \text{при } J' > J. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь $A_{JJ'}$ — вероятность спонтанного перехода $J \rightarrow J'$; $\rho_{JJ'}$ — число фотонов в ячейке фазового объема на частоте $\nu_{JJ'}$. Эта последняя величина зависит от температуры излучения в линии $T_R(J, J')$:

$$\rho_{JJ'} = \left\{ \exp \left[\frac{h\nu_{JJ'}}{kT_R(J, J')} \right] - 1 \right\}^{-1}. \quad (4)$$

Температура излучения в общем случае может оказаться различной в разных линиях. Однако при малой оптической толщине можно считать, что лишь реликтовое излучение эффективно участвует в заселении уровней, т. е. принять, что $T_R(J, J') = T_B = 2.76$ К. Вероятности спонтанных переходов легко определяются по известной формуле

$$A_{JJ'} = \frac{64\pi^4 \mu^2}{3hc^3} \nu_{JJ'}^3 \frac{J}{2J+1}, \quad J' = J-1, \quad (5)$$

где h и c — постоянная Планка и скорость света, $\mu = 3.72$ деб — дипольный момент. Частота перехода определяется вращательными постоянными B_0 и D_0 (индекс 0 относит эти константы к основному колебательному состоянию):

$$\nu_{J, J-1} = 2B_0 J - 4D_0 J^3. \quad (6)$$

Для HC_3N $B_0 = 4549.0669$ МГц и $D_0 = 0.0006$ МГц.

Несколько сложнее решается вопрос о вероятностях столкновительных переходов при соударениях HC_3N с молекулами H_2 , которые составляют основную компоненту газа в плотных молекулярных облаках. Какие-либо данные о сечениях неупругих соударений для пары $\text{HC}_3\text{N} - \text{H}_2$ отсутствуют. Поэтому для расчетов населенностей в работе [1] были использованы результаты теоретических расчетов [6] скоростей вращательных возбуждений молекулы HC_3N при ее столкновении с атомами гелия. В работе [7] показано, что эти численные результаты могут быть представлены аналитическими выражениями

$$C_{JJ'} = N \sum_{s=|J-J'|}^{J+J'} (C_{J0s0}^{J'0})^2 W_s(T), \quad J' > J, \quad (7)$$

где

$$W_s(T) = (2s+1) a_s \left(\frac{hB_0}{kT_K} \right)^{1/2} \exp \left\{ - \left(\frac{T_0}{T_K} \right)^{1/2} [s(s+1)]^{2/3} \right\}. \quad (8)$$

В этих формулах $C_{J0s0}^{J'0}$ — коэффициент Клебша—Гордана [8]; $T_0 = 0.51$ К, а коэффициенты a_s приведены в таблице для $1 \leq s \leq 10$. Переходы, вовлекающие в (7) слагаемые с $s > 10$, практически несущественны для расчета населенностей.

Коэффициенты a_s в формуле (8)

| s | $a_s, \text{см}^3/\text{с}$ | s | $a_s, \text{см}^3/\text{с}$ |
|-----|-----------------------------|-----|-----------------------------|
| 1 | 1.5 (-9) | 6 | 2.4 (-10) |
| 2 | 5.0 (-10) | 7 | 3.3 (-10) |
| 3 | 3.2 (-10) | 8 | 2.3 (-10) |
| 4 | 2.4 (-10) | 9 | 3.7 (-10) |
| 5 | 1.6 (-10) | 10 | 6.5 (-10) |

Знание радиационных и столкновительных вероятностей переходов позволяет рассчитать населенности вращательных уровней. Обсуждение результатов таких расчетов проведено в следующем разделе.

Величины b_J , температуры возбуждения и коэффициенты поглощения. На рис. 1 приведены зависимости величин $b_J = n_J/n_J^*$, показывающие отклонение населенности уровня n_J от термодинамически равновесного значения n_J^* как функции от концентрации при трех значениях кинетической температуры газа. При этом населенность n_J^* определяется соотношением

$$n_J^* = \frac{2J+1}{Z(T_K)} \exp \left\{ - \frac{E_J}{kT_K} \right\}, \quad (9)$$

где

$$E_J = hB_0 J(J+1) - hD_0 [J(J+1)]^2; \quad Z(T_K) \approx \frac{kT_K}{hB_0} \left\{ 1 + \frac{1}{3} \frac{hB_0}{kT_K} + \frac{1}{15} \left(\frac{hB_0}{kT_K} \right)^2 + \dots \right\}. \quad (10)$$

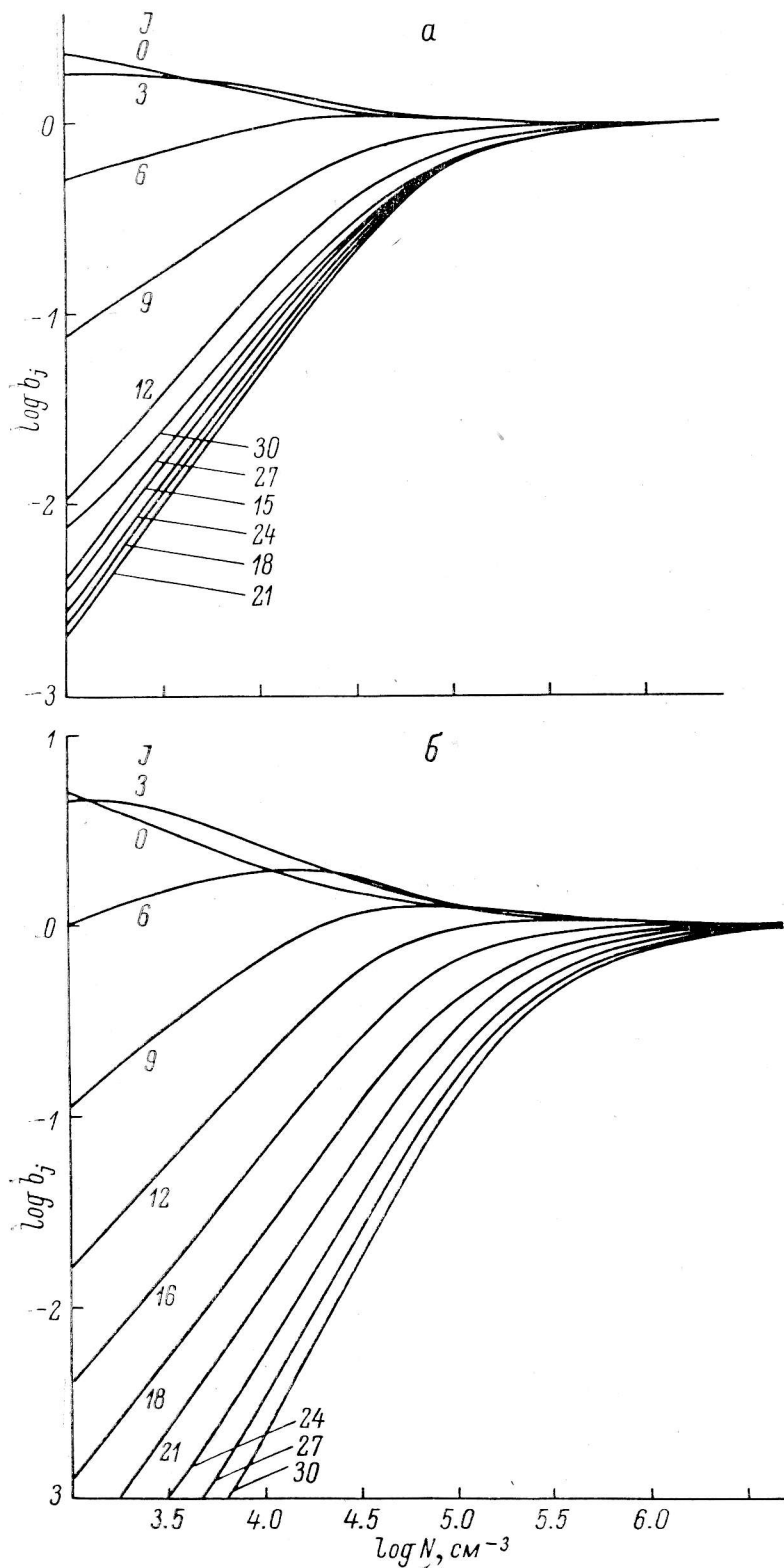


Рис. 1. Величины b_j в зависимости от концентрации газа при различных кинетических температурах.

T_k : а — 10, б — 30, в — 60.

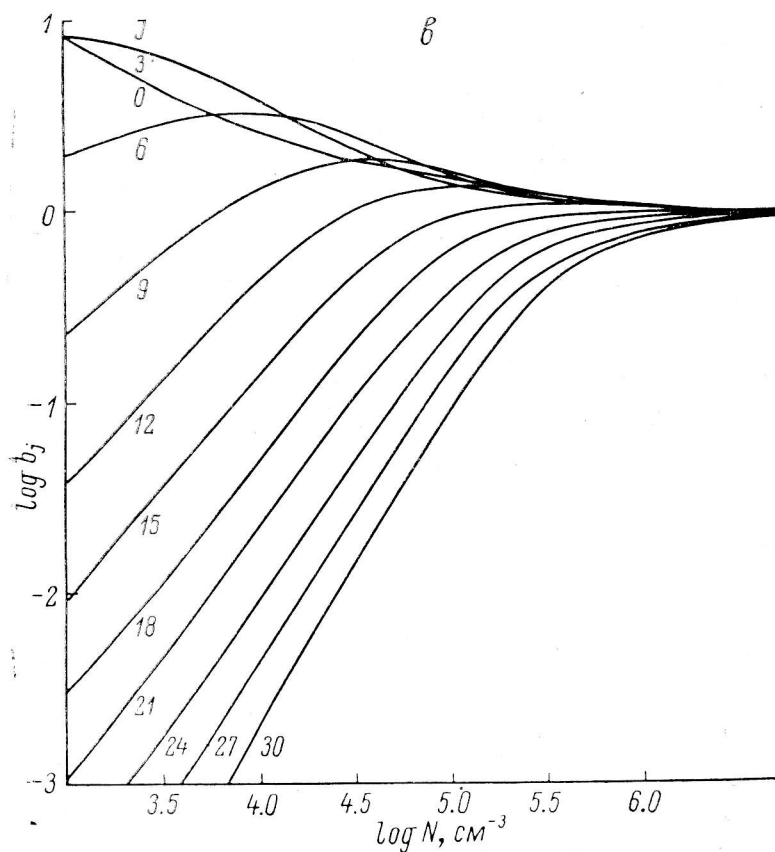


Рис. 1. (Продолжение)

На этих рисунках можно видеть следующие основные закономерности. При больших концентрациях газа величины $b_J \rightarrow 1$ для любых J . То есть, как и следовало ожидать, при больших концентрациях газа населенности стремятся к термодинамически равновесным значениям при температуре, равной кинетической температуре газа. При малых концентрациях, когда столкновения перестают играть существенную роль в заселении уровней, последние также термализуются, однако при температуре, равной температуре излучения (в данном случае $T_B = 2.76$ К). В этом случае

$$b_J = \frac{Z(T_R)}{Z(T_K)} \exp \left[-\frac{E_J}{k} \left(\frac{1}{T_B} - \frac{1}{T_K} \right) \right] \quad (11)$$

и сильно зависит от J .

В промежуточной области концентраций газа величины b_J для нижних уровней могут превышать единицу, т. е. в этой области можно ожидать инверсию населенностей вращательных уровней.

Этот вывод подтверждается данными, приведенными на рис. 2, где изображена зависимость температуры возбуждения для нижних вращательных переходов

$$T_{\text{ex}}(J, J') = \frac{E_J - E_{J'}}{k} \left[\ln \left(\frac{g_J n_{J'}}{g_{J'} n_J} \right) \right]^{-1}, \quad g_J = 2J + 1, \quad (12)$$

как функция концентрации газа при различных значениях кинетической температуры. При больших концентрациях газа температура возбуждения становится равной кинетической температуре, т. е. уровни заселяются в соответствии с термодинамическим равновесием при температуре T_K . При малых концентрациях газа поле излучения доминирует в заселении уровней над столкновениями и температура возбуждения стремится к температуре поля излучения. В промежуточной области концентрации температура возбуждения для переходов между

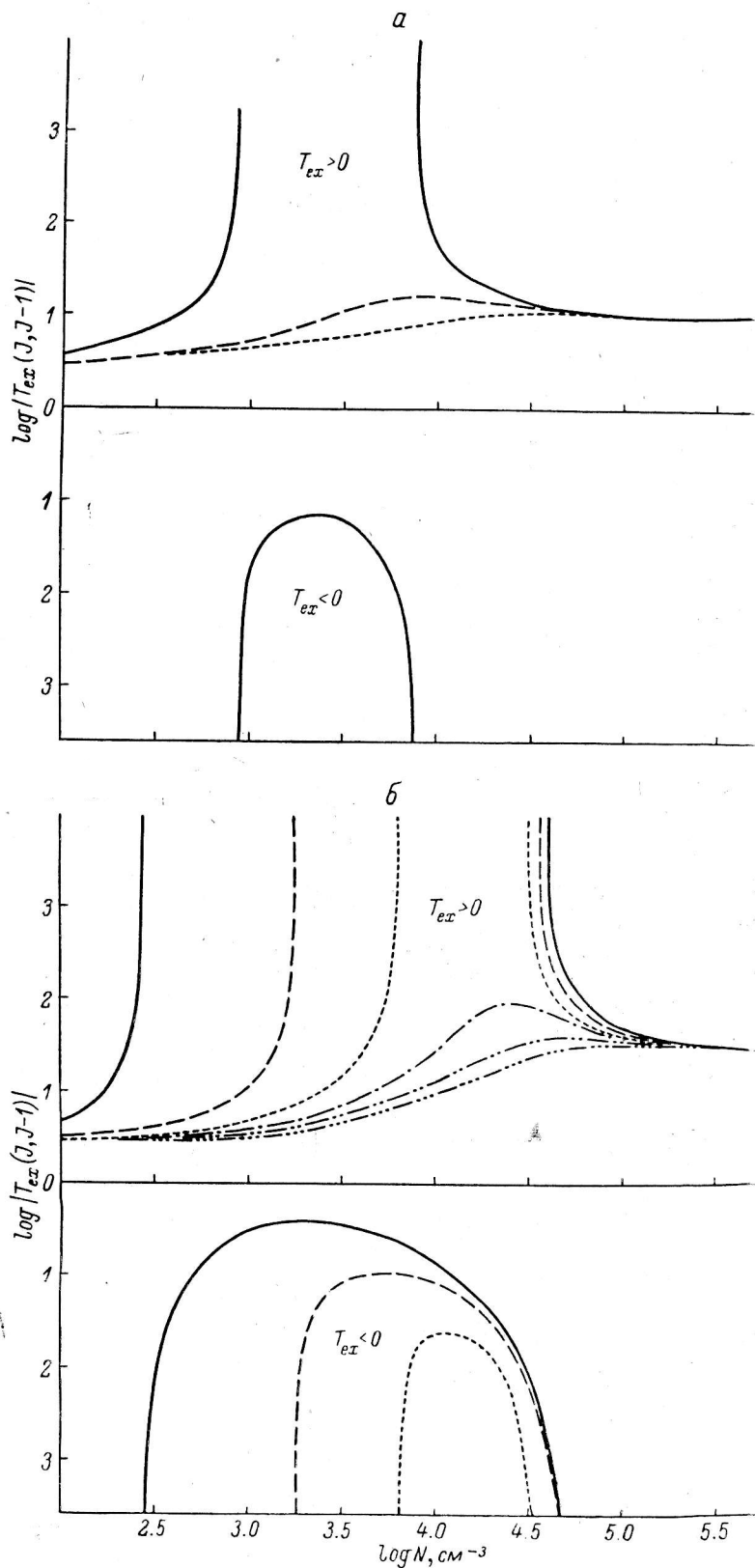


Рис. 2. Температуры возбуждения для нижних вращательных переходов HC_3N как функции концентрации газа при различных кинетических температурах.
 T_R : а — 10, б — 30, в — 60.

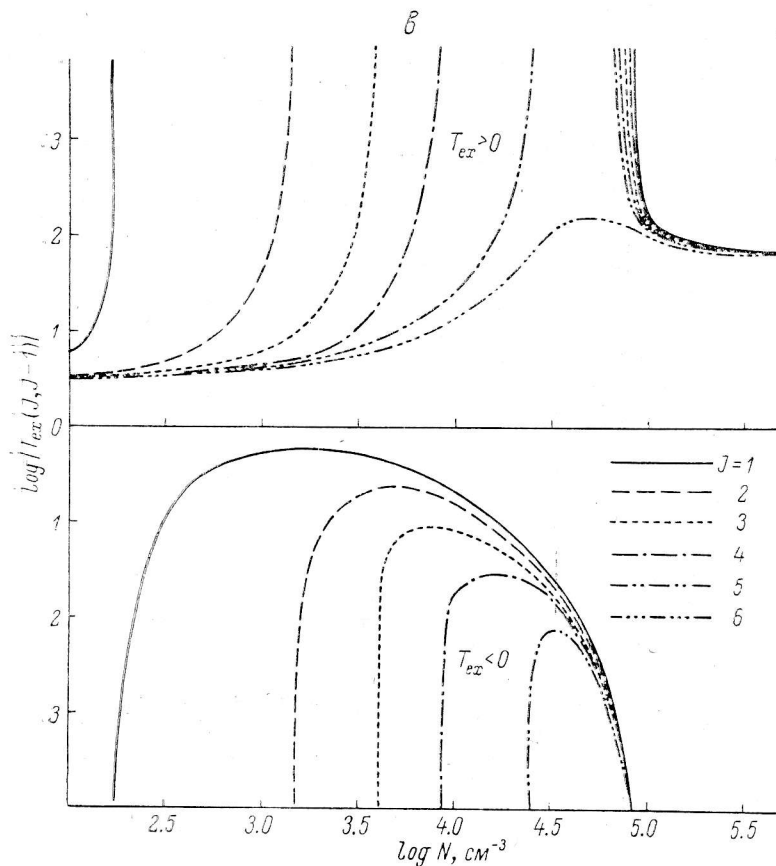


Рис. 2. (Продолжение)

нижними вращательными уровнями становится отрицательной. Это означает, что соответствующие уровни заселены инверсно и среда может усиливать излучение с длиной волны этих переходов. При увеличении кинетической температуры газа все большее число переходов характеризуется отрицательной температурой возбуждения. При этом область концентраций, где для данного перехода $T_{ex}(J, J') < 0$, расширяется.

При практическом определении концентрации и кинетической температуры газа из наблюдательных данных большую роль играют зависимости коэффициентов поглощения для различных переходов от N и T_K . Коэффициенты поглощения для переходов $J-1 \rightarrow J$, помноженные на доплеровскую ширину линий (во многих случаях именно эта величина определяется из наблюдений), т. е.

$$\nu_{J-1, J} \Delta \nu_D = \frac{A_{J, J-1}}{8\pi} \lambda_{J, J-1}^2 n_{J-1} \left[1 - \frac{n_J^2 (2J-1)}{n_{J-1} (2J+1)} \right], \quad (13)$$

как функции концентрации газа при различных кинетических температурах представлены на рис. 3. Как следует из этих зависимостей, при $N \geq 10^{5.5} \text{ см}^{-3}$ коэффициенты поглощения мало изменяются с ростом концентрации и близки к своим термодинамически равновесным значениям при $T_{ex}(J, J-1) = T_K$. В этом случае их расчет существенно упрощается, так как населенности могут быть определены из Больцмановских выражений. В промежуточной области концентраций коэффициенты поглощения для переходов между нижними вращательными уровнями становятся отрицательными (на рис. 3 это показано только для переходов $J=0 \rightarrow 1$ и $J=3 \rightarrow 4$; коэффициент поглощения для перехода $J=4 \rightarrow 5$ при $T_K \approx 60 \text{ К}$ еще остается положительным во всей рассматриваемой области концентраций). Следовательно, и оптическая толщина для этих переходов является отрицательной величиной, что приводит к сла-

бому мазерному усилению (для большого усиления необходимо, чтобы оптическая толщина в рассматриваемой линии была больше единицы).

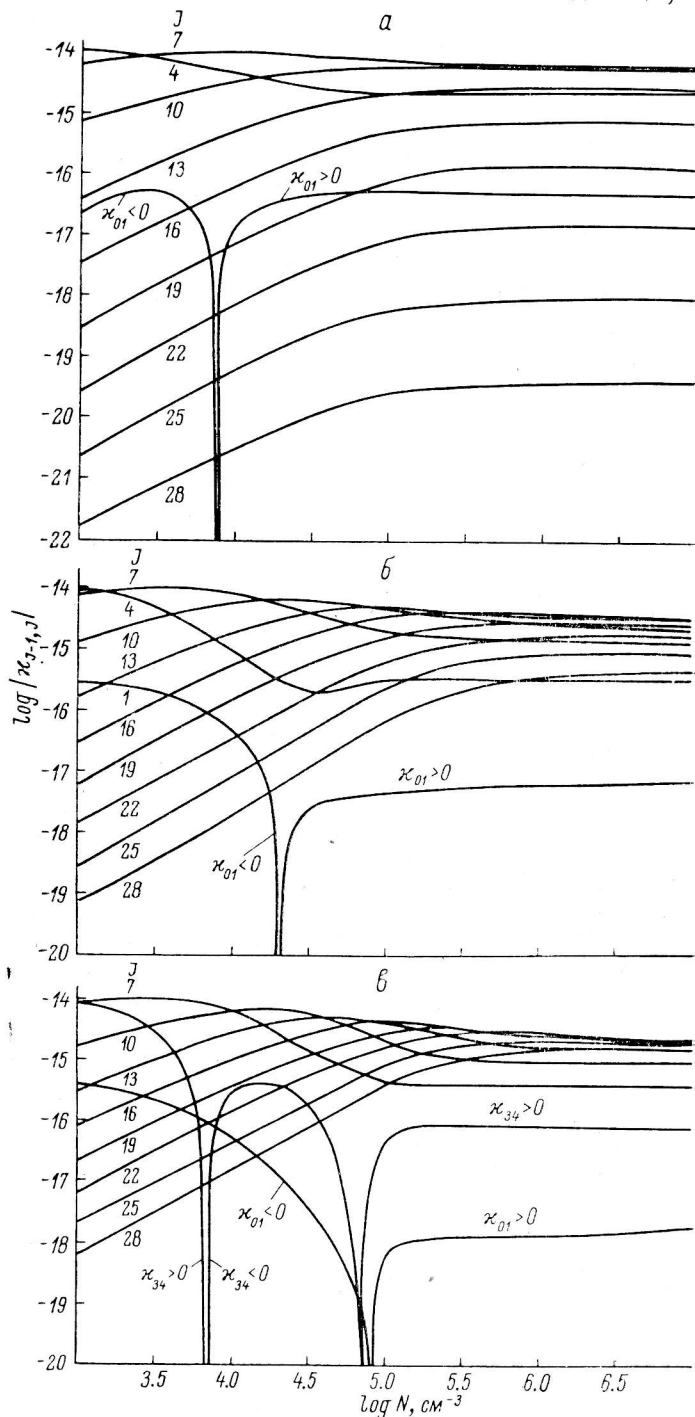


Рис. 3. Зависимости коэффициентов поглощения для вращательных переходов HC_3N от концентрации газа при различных кинетических температурах.

T_k : а — 10, б — 30, в — 60.

Заключение. Проведенные выше расчеты позволяют сделать выводы.

а) При концентрациях газа $N > 10^{6.5} \text{ см}^{-3}$ практически все вращательные уровни с $0 \leq J \leq 30$ термализуются при температуре T_k , и их населенности могут быть рассчитаны по формулам (9) и (10).

б) Термализация уровней при температуре излучения T_B может происходить лишь при очень малых концентрациях газа $N \ll 10^3 \text{ см}^{-3}$. Согласно (11), в этой области концентраций величины b_j не зависят от N и должны быть представлены горизонтальными линиями на рис. 1. Такие концентрации не представляют существенного интереса для приложений, поскольку молекулы HC_3N могут существовать лишь в достаточно плотных облаках.

в) В промежуточной области концентрации самые нижние вращательные переходы HC_3N оказываются инвертированными, а их температуры возбуждения и коэффициенты поглощения отрицательны. В этой области концентраций возможно слабое мазерное усиление во вращательных линиях HC_3N , что должно учитываться при интерпретации наблюдений. Это особенно существенно в тех случаях, когда определяемое значение концентрации оказывается близким к величине, при которой $\kappa_{J-1, J} \rightarrow 0$, т. е. среда оказывается практически прозрачной.

Как упоминалось во введении и детально обсуждалось нами в работах [4, 5, 7], наблюдение нескольких оптически тонких линий одной и той же молекулы (в данном случае HC_3N) позволяет независимо определить такие характеристики межзвездных облаков, как, например, концентрация и кинетическая температура газа, а также излучающих молекул на луче зрения. К настоящему времени имеется несколько работ, посвященных наблюдениям различных линий HC_3N . Однако результаты этих работ не могут быть непосредственно использованы для определения физических условий в рассматриваемых облаках, поскольку они не являются методически однородными. Дело в том, что наблюдения различных линий (т. е. на различных частотах) проводятся, как правило, с различным угловым разрешением. То есть в разных линиях наблюдаются различные масштабы облака межзвездного газа. Поскольку облака неоднородны, оказывается, что излучение в разных линиях несет информацию о различных объемах среды. Об этом, в частности, свидетельствует наблюдательный факт, что относительные уширения $\Delta\nu/\nu = \Delta v/c$ различных линий, как правило, отличаются друг от друга. Для того чтобы последовательно решить задачу об определении физических условий в объекте путем сшивания наблюдений с расчетными данными, необходимо выполнить наблюдения нескольких линий с одной и той же диаграммой направленности. Такой набор данных будет относиться к одной и той же области изучаемого объекта, что сделает данную задачу вполне однозначной и позволит уверенно соотносить между собой результаты наблюдений различных линий одной и той же молекулы. В этом отношении цианоацетилен является очень удобной молекулой, поскольку она имеет много радиопереходов. Ее низкочастотные линии могут наблюдаться на больших радиотелескопах, а высокочастотные — на сравнительно небольших миллиметровых антеннах. При этом в принципе инструменты могут быть подобраны так, что и на низких и на высоких частотах диаграммы направленности будут приблизительно одинаковы, причем в обоих случаях может быть реализовано достаточно высокое пространственное разрешение.

Литература

1. Vanden Bout P. A., Loren R. B., Snell R. L. Cyanoacetylene as a density probe of molecular clouds. — *Astrophys. J.*, 1983, **271**, p. 161—169.
2. Morris M., Snell R. L., Vanden Bout P. A. Emission from highly excited rotational states of HC_3N in dense clouds. — *Astrophys. J.*, 1977, **216**, p. 738—746.
3. Cyanoacetylene in dense interstellar clouds / M. Morris, B. E. Turner, P. Palmer, B. Zuckerman. — *Astrophys. J.*, 1976, **205**, p. 82—93.
4. Зинченко И. И., Херсонский В. К. Возбуждение вращательных уровней межзвездной молекулы HCN . — *Астрон. журн.*, 1982, **59**, с. 676—682.
5. Зинченко И. И., Херсонский В. К. Межзвездные молекулы со сверхтонкой структурой. Возбуждение HCN и ее изотопических модификаций. — *Астрофиз. исслед.* (Изв. САО), 1982, **16**, с. 65—74.
6. Green S., Charman S. Collisional excitation of interstellar molecules: linear molecules CO , CS , OCS , and HC_3N . — *Astrophys. J. Suppl. Ser.*, 1978, **37**, p. 169—194.
7. Варшавович Д. А., Херсонский В. К. Вращательное возбуждение линейных молекул при столкновениях. — *ЖТФ*, 1981, **51**, с. 1569—1576.
8. Варшавович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975. 440 с.