

ИОН МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ НЕЙТРОННОЙ ЗВЕЗДЫ. ВЕРОЯТНОСТИ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ

В. К. Херсонский

Проведены расчеты вероятностей колебательно-вращательных переходов в основном электронном состоянии молекулярного иона H_2^+ , находящегося в магнитном поле, типичном для поверхности нейтронной звезды $B=10^{12}-10^{13}$ Гс. Рассмотрены правила отбора для проекции момента количества движения на направление магнитного поля. Обсуждаются поляризационные характеристики и угловое распределение излучения. Полученные данные могут быть использованы для оценок возможностей наблюдений линий H_2^+ из области сильного магнитного поля вблизи поверхности нейтронной звезды.

Probabilities of vibration-rotation transitions in the ground electron state of molecular ion H_2^+ in strong magnetic field typical for surface of a neutron star ($B=10^{12}-10^{13}$ G) are calculated. We discuss the selection rules for projection of the angular momentum on the magnetic field direction. We also consider polarization characteristics and angular distribution of radiation. The obtained data may be used for study of formation conditions of H_2^+ lines in the region of strong magnetic field near the neutron star surface.

Изучение свойств атомов и молекул в сильных магнитных полях, типичных для поверхности нейтронных звезд, представляет значительный интерес, поскольку такие исследования позволяют оценить возможности наблюдений атомных и молекулярных линий из области сильного поля, а также рассмотреть методы зондирования физических условий вблизи поверхности нейтронной звезды. Для этого в первую очередь необходимо знать спектроскопические характеристики атомов и молекул в магнитных полях $B=10^{12}-10^{13}$ Гс.

Детальное изучение свойств атомов водорода и гелия было проведено в ряде работ (см., например, работы [1—4]). Свойства молекул в сильных магнитных полях известны значительно хуже. Простейшая из них, молекулярный ион H_2^+ , изучалась в нескольких работах. Например, в работах [5—7] рассматривалась потенциальная кривая H_2^+ для случая, когда ось молекулы направлена вдоль магнитного поля. Более сложный случай, когда ось молекулы отклоняется от направления магнитного поля на произвольный угол θ , был рассмотрен в работах [8, 9], где рассчитана потенциальная поверхность и квадрупольный момент иона H_2^+ для величины магнитного поля в интервале $10^{12}-10^{13}$ Гс. Квантование потенциальной поверхности, выполненное в работе [10], показало, что молекулярный ион водорода в сильном магнитном поле обладает сложным колебательно-вращательным энергетическим спектром, характеристики которого определяются величиной магнитного поля. Вычисления, проведенные в этой работе, позволяют рассчитать частоты колебательно-вращательных переходов. Приближенные значения вероятностей чисто колебательных переходов в H_2^+ при таких магнитных полях впервые определялись в работе [11].

Цель данной работы состоит в вычислении вероятностей колебательно-вращательных переходов. Рассчитываются коэффициенты Эйнштейна для спонтанных переходов при рассматриваемых магнитных полях, обсуждается угловое распределение и поляризация излучения. Необходимые данные о тензоре квадрупольного момента и об энергиях колебательно-вращательных уровней взяты из работ [9] и [10].

1. Постановка задачи. Согласно общей формуле теории возмущений [12], вероятность перехода $dW_{a \rightarrow b}^{\rho}$ из состояния a в состояние b , сопровождающегося излучением фотона с волновым вектором в интервале $[k, k+dk]$ и поляризацией $e_{k\rho}$ ($\rho=1, 2$), равна

$$dW_{a \rightarrow b}^{\rho} = \frac{2\pi}{\hbar} |\hat{H}_{an_{k\rho}, bn_{k\rho+1}}|^2 \delta(E_b - E_a + \hbar\omega) \frac{V dk}{(2\pi)^3}. \quad (1)$$

В этой формуле V — нормировочный объем; E_a, E_b — энергии состояний a и b ; ω — частота фотона; \hat{H} — оператор взаимодействия электромагнитного излучения с квантовой системой [13]:

$$\hat{H}_{an_{k\rho}, bn_{k\rho+1}} = -\frac{1}{c} \sqrt{\frac{2\pi c^2 (\bar{n}_{k\rho} + 1) \hbar}{\omega V}} e_{k\rho} \sum_{i=e, a, b} e_i \langle a | \hat{v}_i e^{ikr_i} | b \rangle, \quad (2)$$

где $\bar{n}_{k\rho}$ — среднее число фотонов данной поляризации, попадающих в интервал волновых векторов $[k, k+dk]$ (в результате излучения в конечном состоянии число фотонов увеличивается на 1); \hat{v}_i — оператор скорости i -й частицы, входящей в состав иона H_2^+ ; $\hat{P}_i = -i\hbar\nabla_i$ — оператор обобщенного импульса; A — векторный потенциал, который выбран в калибровке $A = [B \times r_i]/2$ и $\nabla A_i = 0$, r_i — радиус-вектор i -й частицы; $e_e = -e$, $e_a = e_b = e$; e — заряд электрона; индексы e, a и b относятся к электрону, протонам a и b соответственно; $|a\rangle$ и $|b\rangle$ — волновые функции начального и конечного состояний. Суммирование в формуле (2) проводится по всем трем частицам.

В дальнейшем мы будем рассматривать формулы только для спонтанного излучения. Поэтому всюду ниже положим $\bar{n}_{k\rho} = 0$. Кроме того, выражение (1) можно проинтегрировать по частоте $dk = (\omega^2/c^3) d\omega d\Omega$ ($d\Omega$ — элемент телесного угла, в котором излучен фотон). Такое интегрирование [13] с учетом δ -функции в (1) приводит к следующему выражению для вероятностей спонтанных переходов:

$$dW_{a \rightarrow b}^{\rho} = \frac{\omega_{ab}}{2\pi\hbar c^3} \left| e_{k\rho} \sum_{i=e, a, b} e_i \langle a | \hat{v}_i e^{ikr_i} | b \rangle \right|^2 d\Omega, \quad (3)$$

где $\omega_{ab} = (E_a - E_b)/\hbar$. Вектор $e_{k\rho}$, определяющий поляризацию испущенного фотона, может быть разложен по спиральным ортам, определяемым согласно формулам [14]:

$$e'_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (e_{\vartheta} \pm i e_{\varphi}); \quad e'_0 = e_k, \quad (4)$$

где $e_k, e_{\vartheta}, e_{\varphi}$ — сферические орты, направление которых показано на рис. 1. Такое разложение в общем виде может быть представлено выражением

$$e_{k\rho} = \sum_{\mu=-1}^1 g_{\rho\mu} e'_{\mu}, \quad \rho = 1, 2; \quad \mu = \pm 1. \quad (5)$$

Двум возможным циркулярным поляризациям фотона соответствует следующая матрица преобразования:

$$g_{\rho\mu} = \begin{array}{c|cc} & \mu & \\ \hline \rho & 1 & -1 \\ \hline 1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{array} \quad (6)$$

Иной вид имеет матрица преобразования $g_{\rho\mu}$, соответствующая двум возможным линейным поляризациям фотонов. Например, если одна из плоскостей поляризации ($\rho = 1$) совпадает с плоскостью, содержащей векторы B и k ($e_{k1} = e_{\vartheta}$),

а вторая ($\rho = 2$) соответственно перпендикулярна к этой плоскости ($e_{k2} = e_\varphi$), матрица $g_{\rho\mu}$ имеет вид

$$g_{\rho\mu} = \begin{array}{c|cc} & \mu & \\ \hline \rho & 1 & -1 \\ \hline 1 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \hline 2 & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \end{array} \quad (7)$$

Для дальнейшего преобразования формулы (3) используем обычное разложение экспоненты в матричном элементе по степеням kr_i с учетом того обстоя-

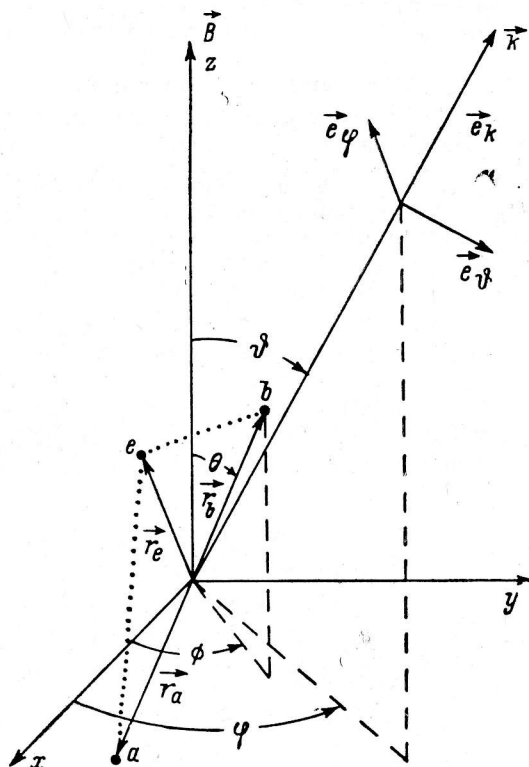


Рис. 1. Положение векторов, характеризующих направление и поляризацию излучения и направление молекулярной оси в системе координат, связанной с магнитным полем.

тельства, что длина волны рассматриваемых переходов много больше размеров молекулярного иона H_2^+ . Первый член такого разложения соответствует электрическому дипольному приближению. Как это легко показать, в силу симметрии рассматриваемого молекулярного иона радиационные переходы в электрическом дипольном приближении запрещены. Поэтому мы рассмотрим электрическое квадрупольное приближение, оставляя в разложении экспоненты лишь линейный по kr_i член. Именно,

$$dW_{a \rightarrow b}^{\rho} = \frac{\omega_{ab}}{2\pi\hbar c^3} \left| \langle a | \sum_{i=e, a, b} e_i (e_{k\rho} \cdot \hat{v}_i) (k \cdot r_i) | b \rangle \right|^2 d\Omega. \quad (8)$$

Учтем также, что

$$\langle a | \hat{v}_i (k \cdot r_i) | b \rangle = \langle a | b \rangle \hat{v}_i (k \cdot r_i) + \langle a | (k \cdot r_i) \hat{v}_i | b \rangle = \hat{v}_i (k \cdot r_i) \delta_{ab} + \langle a | (k \cdot r_i) \hat{v}_i | b \rangle. \quad (9)$$

Из этой формулы видно, что первый член в правой части для $a \neq b$ обращается в нуль. Теперь вероятность радиационного перехода $a \neq b$ может быть записана в виде

$$dW_{a \rightarrow b}^2 = \frac{\omega_{ab}}{2\pi\hbar c^3} \left| \left\langle a \left| \sum_{i=e, a, b} e_i (k \cdot r_i) (e_{k\rho} \cdot \hat{v}_i) \right| b \right\rangle \right|^2 d\Omega. \quad (10)$$

Используя связь спиральных и циклических ортов [14]:

$$e'_\mu = \sum_{\nu=-1}^1 D_{\nu\mu}^1(\varphi, \vartheta, 0) e_\nu, \quad k = k e'_0 = k \sum_{\nu'=-1}^1 D_{\nu'0}^1(\varphi, \vartheta, 0) e_{\nu'}, \quad (11)$$

где $D_{\nu\mu}^1$ — D -функция Вигнера, оператор перехода можно преобразовать к выражению

$$(k \cdot r_i) (e_{k\rho} \cdot \hat{v}_i) = k \sum_{\mu} g_{\rho\mu} \sum_{\nu\nu'} D_{\nu\mu}^1(\varphi, \vartheta, 0) D_{\nu'0}^1(\varphi, \vartheta, 0) r_{i\nu} \hat{v}_{i\nu'}, \quad (12)$$

где $r_{i\nu}$, $\hat{v}_{i\nu}$ — циклические компоненты радиус-вектора r_i и оператора скорости \hat{v}_i . Далее используем тождество

$$r_{i\nu} \hat{v}_{i\nu} \equiv \frac{1}{2} (r_{i\nu} \hat{v}_{i\nu} + r_{i\nu'} \hat{v}_{i\nu'}) + \frac{1}{2} (r_{i\nu} \hat{v}_{i\nu} - r_{i\nu'} \hat{v}_{i\nu'}) \quad (13)$$

и правило дифференцирования операторов по времени. Тогда получим

$$\begin{aligned} \langle a | r_{i\nu} \hat{v}_{i\nu} + r_{i\nu'} \hat{v}_{i\nu'} | b \rangle &= \left\langle a \left| \frac{d}{dt} (r_{i\nu} r_{i\nu'}) \right| b \right\rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a | \hat{H}_0 r_{i\nu} r_{i\nu'} - r_{i\nu} r_{i\nu'} \hat{H}_0 | b \rangle = \\ &= i\omega_{ab} \langle a | r_{i\nu} r_{i\nu'} | b \rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь \hat{H}_0 — гамильтониан H_0^{\pm} в магнитном поле. Этот оператор подробно обсуждался нами в работах [8] и [10]. В отношении формулы (14) необходимо отметить следующее обстоятельство.

Переход от матричных элементов оператора скорости к матричным элементам операторов координат в (14) справедлив лишь при точных волновых функциях, описывающих собственные состояния Гамильтониана. Мы же в дальнейшем для $|a\rangle$ и $|b\rangle$ будем использовать приближенные волновые функции, полученные в работах [8] и [10]. Таким образом, переход (14) является приближенным. Для оценки точности вычислений необходимо было бы провести расчеты матричных элементов двумя методами: используя в расчетах исходный оператор $r_{i\nu} \hat{v}_{i\nu}$ и преобразованный $r_{i\nu} r_{i\nu'}$. Сравнение результатов, полученных этими двумя методами, позволило бы оценить точность волновых функций, используемых для вычисления матричных элементов. Однако ввиду большой громоздкости этих расчетов в данной работе мы ограничимся расчетом, использующим преобразование (14).

В этом случае произведение циклических компонент векторов $r_{i\nu} r_{i\nu'}$ можно преобразовать к компонентам тензора квадрупольного момента, что существенно облегчает дальнейшие вычисления.

Разность операторов $r_{i\nu} \hat{v}_{i\nu} - r_{i\nu'} \hat{v}_{i\nu'}$ в (13) может быть переписана в виде

$$r_{i\nu} \hat{v}_{i\nu} - r_{i\nu'} \hat{v}_{i\nu'} = -i \operatorname{sgn}(\nu - \nu') [r_i \cdot \hat{v}_i]_{\nu+\nu'}, \quad (15)$$

что с точностью до размерного множителя совпадает с оператором магнитного момента, связанного с движением i -й частицы. Эта часть оператора перехода соответствует магнитно-дипольным переходам и здесь рассматриваться не будет.

Таким образом, интересуясь лишь электрическими квадрупольными переходами, получаем

$$\begin{aligned} \langle a | (k \cdot r_i) (e_{k\rho} \cdot \hat{v}_i) | b \rangle &= \frac{i\omega_{ab} k}{2} \sum_{\mu} g_{\rho\mu} \sum_{\nu\nu'} D_{\nu'0}^1(\varphi, \vartheta, 0) D_{\nu\mu}^1(\varphi, \vartheta, 0) \langle a | r_\nu r_{\nu'} | b \rangle = \\ &= \frac{i\omega_{ab}^3}{2c} \sum_{\lambda\mu\kappa} g_{\rho\mu} C_{1\mu 10}^{\lambda\mu} D_{\kappa\mu}^\lambda(\varphi, \vartheta, 0) \left\langle a \left| \sum_{\nu\nu'} C_{1\nu 1\nu'}^{\lambda\kappa} r_{i\nu} r_{i\nu'} \right| b \right\rangle, \end{aligned} \quad (16)$$

где было использовано разложение Клебша—Гордана для произведения D -функций Вигнера [14]. $C_{d\delta f\varphi}^{e\gamma}$ — коэффициент Клебша—Гордана. Величина λ может принимать в общем случае значения 0, 1, 2; κ — проекция момента λ на ось

квантования, $\kappa=0, \pm 1, \pm 2$. Циклические компоненты вектора r_i определены в системе координат, связанной с магнитным полем. Для проведения дальнейших расчетов их удобно преобразовать к системе координат, связанной с молекулярной осью, т. е. (см. [14]):

$$\begin{aligned} r_{i\nu} &= \sum_{\sigma=-1}^1 \bar{r}_{i\sigma} D_{\sigma\nu}^1(0, \theta, \Phi), \\ r_{i\nu'} &= \sum_{\sigma'=-1}^1 \bar{r}_{i\sigma'} D_{\sigma'\nu'}^1(0, \theta, \Phi). \end{aligned} \quad \sigma, \sigma' = 0, \pm 1, \quad (17)$$

Здесь $\bar{r}_{i\sigma}, \bar{r}_{i\sigma'}$ — циклические компоненты вектора r_i в системе координат, связанной с осью H_z^0 . Далее проведем следующие преобразования:

$$\begin{aligned} \sum_{\nu\nu'} C_{1\nu\nu'}^{\lambda\kappa} r_{i\nu} r_{i\nu'} &= \sum_{\sigma\sigma'} \bar{r}_{i\sigma} \bar{r}_{i\sigma'} \sum_{\nu\nu'} C_{1\nu\nu'}^{\lambda\kappa} D_{\sigma\nu}^1(0, \theta, \Phi) D_{\sigma'\nu'}^1(0, \theta, \Phi) = \sum_{\xi=-\lambda}^{\lambda} D_{\xi z}^{\lambda}(0, \theta, \Phi) \times \\ &\times \sum_{\sigma\sigma'} C_{1\sigma\sigma'}^{1\xi} \bar{r}_{i\sigma} \bar{r}_{i\sigma'} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\lambda+1}} r_i^2 C_{1010}^{\lambda 0} \sum_{\xi=-\lambda}^{\lambda} D_{\xi z}^{\lambda}(0, \theta, \Phi) Y_{\lambda\xi}(\bar{\vartheta}_i, \bar{\varphi}_i), \end{aligned} \quad (18)$$

где снова использовано разложение Клебша—Гордана для D -функции Вигнера, а также соотношение между циклическими компонентами радиус-вектора i -частицы и сферическими функциями $Y_{\lambda\mu}(\bar{\vartheta}_i, \bar{\varphi}_i)$ угловых координат этой частицы. Так как $C_{1010}^{\lambda 0} = 0$, λ может принимать значения 0 или 2. Однако лишь при $\lambda=2$ матричный элемент перехода (16), а следовательно, и вероятность перехода $a \rightarrow b$ могут быть отличны от нуля. Таким образом, всюду ниже мы принимаем $\lambda=2$ и

$$\sum_{\nu\nu'} C_{1\nu\nu'}^{\lambda\kappa} r_{i\nu} r_{i\nu'} = \delta_{\lambda 2} \sqrt{\frac{8\pi}{15}} r_i^2 \sum_{\xi=-2}^2 D_{\xi z}^2(0, \theta, \Phi) Y_{2\xi}(\bar{\vartheta}_i, \bar{\varphi}_i). \quad (19)$$

Учтем, что $r_a = -r_b = R/2$, где R — вектор межъядерного расстояния. Кроме того, в системе, связанной с осью молекулы, эти векторы направлены по оси z , т. е. $\vartheta_a = 0, \vartheta_b = \pi$. Отсюда следует, что

$$\sum_i e_i r_i^2 \sqrt{\frac{8\pi}{15}} Y_{2\xi}(\bar{\vartheta}_i, \bar{\varphi}_i) = -e r_e^2 \sqrt{\frac{8\pi}{15}} Y_{2\xi}(\bar{\vartheta}_e, \bar{\varphi}_e) + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{3}} e R^2 \delta_{\xi 0}. \quad (20)$$

В адиабатическом приближении электронные и ядерные движения разделяются. Соответственно этому разделяются также и волновые функции, описывающие эти движения, т. е.

$$|a\rangle = |\Psi_{ea}\rangle |\Psi_{na}\rangle, \quad |b\rangle = |\Psi_{eb}\rangle |\Psi_{nb}\rangle. \quad (21)$$

В данной работе рассматриваются колебательно-вращательные переходы внутри одного и того же электронного состояния, т. е. $\Psi_{ea} = \Psi_{eb}$. Используя результаты работы [9] и свойства сферических функций, легко показать, что

$$\begin{aligned} \langle a | \sum_{i=\sigma, \sigma'} e_i \sum_{\nu\nu'} C_{1\nu\nu'}^{\lambda\kappa} r_{i\nu} r_{i\nu'} | b \rangle &= \langle \Psi_{na} | \sum_{\xi} D_{\xi z}^2(0, \theta, \Phi) \langle \Psi_{ea} | \frac{e}{\sqrt{6}} R^2 \delta_{\xi 0} - \\ &- e r_e^2 \sqrt{\frac{8\pi}{15}} Y_{2\xi}(\bar{\vartheta}_e, \bar{\varphi}_e) | \Psi_{ea} \rangle | \Psi_{na} \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \langle \Psi_{na} | \sum_{\xi} D_{\xi z}^2(0, \theta, \Phi) Q_{2\xi}^*(R, \theta) | \Psi_{nb} \rangle, \end{aligned} \quad (22)$$

где $Q_{2\xi}(R, \theta)$ — циклические компоненты тензора квадрупольного момента,

$$Q_{2\xi} = \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \int \rho(r) Y_{2\xi}(\vartheta_r, \varphi_r) r^2 dV, \quad (23)$$

декартовы компоненты которого рассчитаны в работе [9] как функции межъядерного расстояния R и угла θ ; $\rho(r)$ — плотность распределения зарядов в молекуле

$$\rho(r) = e\delta\left(r - \frac{R}{2}\right) + e\delta\left(r + \frac{R}{2}\right) - e |\Psi_{ea}(r)|^2.$$

С учетом (22) вероятность перехода $a \rightarrow b$ после некоторых преобразований может быть представлена в виде

$$dW_{a \rightarrow b}^0 = \frac{\omega_{ab}^5}{12\pi\hbar c^5} \left| \sum_{\mu, \lambda} g_{\rho\mu} C_{1\mu, 10}^{2\mu} D_{-\lambda\mu}^2(\varphi, \vartheta, 0) \sum_{\xi} \langle \Psi_{na} | D_{\xi}^{2*}(\Phi, \theta, 0) Q_{2-\xi}^*(R, \theta) | \Psi_{nb} \rangle \right|^2 d\Omega. \quad (24)$$

В работе [10] при обсуждении колебательно-вращательного энергетического спектра H_2^+ в сильном магнитном поле было показано, что при некоторой специальной аппроксимации поверхности потенциальной энергии молекулярного иона, для вычисления энергий большинства колебательно-вращательных уровней можно ограничиться первым порядком теории возмущений. Это означает, что колебательно-вращательное движение ядер может быть описано волновыми функциями в нулевом порядке теории возмущений. Такие функции изучены в работе [10]. Используя цилиндрические координаты (ось z направлена по B), эти функции можно представить в виде:

$$\begin{aligned} |\Psi_{na}\rangle &\equiv \Psi_{N'\Lambda'v'}(\rho, \Phi, z) = \frac{\exp(-i\Lambda'\Phi)}{\sqrt{2\pi}} \chi_{N'\Lambda'}(\rho) \eta_{v'}(z); \\ |\Psi_{nb}\rangle &\equiv \Psi_{N\Lambda v}(\rho, \Phi, z) = \frac{\exp(-i\Lambda\Phi)}{\sqrt{2\pi}} \chi_{N\Lambda}(\rho) \eta_v(z), \end{aligned} \quad (25)$$

где

$$\begin{aligned} \chi_{N\Lambda}(\rho) &= G_{N\Lambda} e^{-x/2} x^{|\Lambda|/2} {}_1F_1(-N, 1+|\Lambda|, x); \\ \eta_v(z) &= C_v \xi^{(2\gamma-1)/4} (1-\xi)^{(a-\gamma)/2-v} {}_2F_1(-v, a-v; \gamma; \xi) \end{aligned} \quad (26)$$

и

$$\begin{aligned} x &= \frac{\sqrt{\alpha_B}}{2} \left(\frac{\rho}{a_B} \right)^2; \quad \xi = \text{th}^2(\alpha_p z), \\ G_{N\Lambda} &= \frac{\alpha_B^{1/4}}{a_B |\Lambda|!} \sqrt{\frac{(N+|\Lambda|)!}{N!}}; \end{aligned} \quad (27)$$

$$C_v = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \left[\frac{\alpha_p (a-\gamma-2v) \Gamma(a-v) \Gamma(\gamma+v)}{v! \Gamma(a-\gamma-v+1)} \right]^{1/2}. \quad (28)$$

В этих формулах использованы следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \alpha_B &= \sqrt{\frac{\hbar}{\mu_n \omega_B}}; \quad \alpha_B = 1 + \frac{8A}{\mu_n \omega_B^2}; \quad \omega_B = \frac{eB}{m_p c}; \\ a &= \left[\frac{1}{4} + \frac{2\mu_n D_e}{\hbar^2 \alpha_p^2} \text{ch}^4(\alpha_p z_e) \right]^{1/2}; \\ \gamma &= \left[\frac{1}{4} + \frac{2\mu_n D_e}{\hbar^2 \alpha_p^2} \text{sh}^4(\alpha_p z_e) \right]^{1/2} + 1. \end{aligned} \quad (29)$$

Здесь μ_n — приведенная масса ядер ($\mu_n = m/2$); ω_B — циклотронная частота протона; величины A , D_e , α_p , z_e являются параметрами функций, аппроксимирующих потенциальную поверхность [10]. Квантовые числа N и Λ характеризуют энергию вращательного движения ядер (прецессия межъядерной оси вокруг направления магнитного поля); N — номер уровня Ландау; Λ — проекция момента количества движения на направление магнитного поля. Квантовое число v характеризует колебательное движение ядер относительно общего центра тяжести иона вдоль межъядерной оси. Учет зависимости от Φ в волновых функциях (25) позволяет упростить выражение (24), поскольку интегрирование по Φ в матричном элементе, определяющем вероятность перехода, приводит к тому, что в сумме по λ остается лишь один член, соответствующий $\lambda = \Lambda - \Lambda'$. Вводя обозначение

$$Q_{N'\Lambda'v', N\Lambda v}^{(M)} \equiv \sum_{\xi} \langle N'\Lambda'v' | D_{M\xi}^{2*}(\Phi, \theta, 0) Q_{2-\xi}^*(R, \theta) | N\Lambda v \rangle, \quad (30)$$

выражение (24) можно переписать в виде

$$dW_{N'\Lambda'v' \rightarrow N\Lambda v}^{\rho} = \frac{\omega^5}{12\pi\hbar c^5} \sum_{\mu, \mu'} g_{\rho\mu} g_{\rho\mu'}^* C_{1\mu, 10}^{2\mu} C_{1\mu', 10}^{2\mu'} d_{\Lambda' - \Lambda, \mu}^2(\vartheta) d_{\Lambda' - \Lambda, \mu'}^2(\vartheta) |Q_{N'\Lambda'v', N\Lambda v}^{(\Lambda - \Lambda')}|^2 d\Omega. \quad (31)$$

При получении этой формулы в явном виде учтена зависимость D -функции Вигнера от угла φ . В общем случае

$$D_{\mu\mu'}^{\lambda}(\varphi, \vartheta, \delta) = \exp(-i\mu\varphi - i\mu'\delta) d_{\mu\mu'}^{\lambda}(\vartheta),$$

(см. [14]). Кроме того, можно указать правило отбора по проекции момента на направление магнитного поля Λ . При пространственной инверсии $R \rightarrow -R$ ($\rho \rightarrow \rho$, $\Phi \rightarrow \pi + \Phi$, $z \rightarrow -z$) оператор квадрупольного перехода $(k \cdot r_i)(e_{kp} \cdot \hat{v}_i)$ не изменяет знак. Следовательно, произведение волновых функций $\Psi_{N'\Lambda'v'}^*(\rho, \Phi, z) \Psi_{N\Lambda v}(\rho, \Phi, z)$ также должно быть инвариантным относительно этого преобразования, чтобы матричный элемент, представляющий собой интеграл по объему, оставался инвариантным по отношению к инверсии пространства. Так как функция $\eta_v(z)$ является четной, то

$$\Psi_{N'\Lambda'v'}^*(\rho, \pi + \Phi, -z) \Psi_{N\Lambda v}(\rho, \pi + \Phi, -z) = (-1)^{\Lambda - \Lambda'} \Psi_{N'\Lambda'v'}^*(\rho, \Phi, z) \Psi_{N\Lambda v}(\rho, \Phi, z),$$

откуда следует, что для рассматриваемых переходов справедливо правило отбора $\Lambda' - \Lambda = \text{четное}$, которое с учетом определения $|x| = |\Lambda - \Lambda'|$ можно записать в виде

$$\Delta\Lambda' \equiv \Lambda' - \Lambda = 0, \pm 2. \quad (32)$$

Формула (31) определяет дифференциальную вероятность перехода $N'\Lambda'v' \rightarrow N\Lambda v$ с излучением фотона, имеющего поляризацию e_{kp} , в элемент телесного угла $d\Omega$. Чтобы получить полную вероятность излучения фотона, выражение (31) необходимо проинтегрировать по всем направлениям и просуммировать по двум возможным поляризациям:

$$W_{N'\Lambda'v' \rightarrow N\Lambda v}^{\rho} = \sum_{\rho=1, 2} \int_{4\pi} \left(\frac{d}{d\Omega} W_{N'\Lambda'v' \rightarrow N\Lambda v}^{\rho} \right) d\Omega. \quad (33)$$

Обе эти операции легко выполнимы. Для этого введем обозначение

$$F_{\rho, \Lambda' - \Lambda}(\vartheta) = \frac{5}{8\pi} \sum_{\mu, \mu'} g_{\rho\mu} g_{\rho\mu'}^* d_{\Lambda' - \Lambda, \mu}^2(\vartheta) d_{\Lambda' - \Lambda, \mu'}^2(\vartheta). \quad (34)$$

Если учесть, что $C_{1\mu, 10}^{2\mu} = 1/\sqrt{2}$ при $\mu = \pm 1$, видно, что (33) совпадает с двукратной суммой в (31) с точностью до нормировочного множителя $5/(8\pi)$. Используя свойства полноты и ортогональности матриц $g_{\rho\mu}$, а также правила интегрирования D -функций Вигнера, легко показать, что

$$\sum_{\rho=1, 2} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} F_{\rho, \Lambda' - \Lambda}(\vartheta) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = 1. \quad (35)$$

Следовательно, для дифференциальной и полной вероятностей излучения можно написать следующие окончательные выражения:

$$dW_{N'\Lambda'v' \rightarrow N\Lambda v}^{\rho} = W_{N'\Lambda'v' \rightarrow N\Lambda v} F_{\rho, \Lambda' - \Lambda}(\vartheta) d\Omega; \quad (36)$$

$$W_{N'\Lambda'v' \rightarrow N\Lambda v} = \frac{\omega^5}{15\hbar c^5} |Q_{N'\Lambda'v', N\Lambda v}^{(\Lambda - \Lambda')}|^2, \quad (37)$$

где под ω понимается частота перехода, т. е. $\omega \equiv \omega_{N'\Lambda'v', N\Lambda v}$. Для вычисления вероятностей переходов по формулам (36) и (37) необходимо знать численные значения матричного элемента (30). Вычислению этой величины будет посвящен следующий параграф. Поляризационные характеристики излучения и его угловое распределение, которые определяются функцией $F_{\rho, \Lambda' - \Lambda}(\vartheta)$, будут обсуждаться в § 3.

2. Полные вероятности колебательно-вращательных переходов. Обратимся к вычислению матричных элементов (30). После интегрирования по углу Φ и учета симметрии подынтегрального выражения по координате z матричный элемент (30) может быть представлен в виде

$$Q_{N'\Lambda'v', N\Lambda v}^{(M)} = 2 \int_0^\infty \int_0^\infty \chi_{N'\Lambda'}(\rho) w_{v'}(z) S_M(R, \theta) \chi_{N\Lambda}(\rho) w_v(z) \rho d\rho dz, \quad (38)$$

где

$$S_M(R, \theta) = \sum_{\xi=-2}^2 d_{M\xi}^2(\theta) Q_{2-\xi}^*(R, \theta). \quad (39)$$

В работе [9] мы рассчитали декартовы компоненты тензора квадрупольного момента иона H_2^+ в сильном магнитном поле, как функции межъядерного расстояния R и угла θ между направлениями оси молекулы и магнитного поля. Поэтому для дальнейших расчетов матричных элементов (38) удобно преобразовать (39) от циклических компонент тензора Q к декартовым компонентам. Связь этих компонент в принятой здесь системе обозначений приведена в работе [9]. В результате такого преобразования и с учетом явного вида D -функций, входящих в (39), получаем

$$S_M(R, \theta) = \frac{1}{\sqrt{6}} (Q_{xx} - Q_{yy}) P_{2M} - (Q_{xx} + Q_{yy}) P_{0M} - i \sqrt{\frac{2}{3}} Q_{yz} P_{1M}, \quad (40)$$

где

$$\begin{aligned} Q_{ik} &= Q_{ik}(R, \theta) \quad (i, k = x, y, z); \\ P_{2M}(\theta) &\equiv d_{M2}^2(\theta) + d_{M-2}^2(\theta) = \frac{1}{4} |M| (|M| - 1) (1 + \cos^2 \theta) + \\ &+ \frac{1}{2} (|M| - 1) (|M| - 2) \sqrt{\frac{2}{3}} \sin^2 \theta; \\ P_{1M}(\theta) &\equiv d_{M1}^2(\theta) + d_{M-1}^2(\theta) = \frac{1}{2} M (1 - |M|) \sin \theta; \\ P_{0M}(\theta) &\equiv d_{M0}^2(\theta) = \frac{1}{4} |M| (|M| - 1) \sqrt{\frac{3}{2}} \sin^2 \theta + \\ &+ \frac{1}{4} (|M| - 1) (|M| - 2) (3 \cos^2 \theta - 1). \end{aligned} \quad (41)$$

В этих формулах присутствуют лишь члены с $M = 0, \pm 2$, поскольку, согласно правилам отбора (32), переходы с $M = \pm 1$ запрещены и соответствующие матричные элементы равны нулю. С учетом (40) и (41) матричный элемент может быть представлен в виде

$$Q_{N'\Lambda'v', N\Lambda v}^{(M)} = \frac{1 + (-1)^M}{2} [A_{N'\Lambda'v', N\Lambda v}^{(M)} - i B_{N'\Lambda'v', N\Lambda v}^{(M)}] \delta_{M, \Lambda' - \Lambda}. \quad (42)$$

Здесь

$$\begin{aligned} A_{N'\Lambda'v', N\Lambda v}^{(M)} &= \int_0^\infty \int_0^\infty \chi_{N'\Lambda'}(\rho) w_{v'}(z) \left\{ \frac{1}{\sqrt{6}} P_{2M}(\theta) (Q_{xx} - Q_{yy}) - P_{0M} (Q_{xx} + Q_{yy}) \right\} \times \\ &\times \chi_{N\Lambda}(\rho) w_v(z) \rho d\rho dz; \end{aligned} \quad (43)$$

$$B_{N'\Lambda'v', N\Lambda v}^{(M)} = 2 \sqrt{\frac{2}{3}} \int_0^\infty \int_0^\infty \chi_{N'\Lambda'}(\rho) w_{v'}(z) P_{1M}(\theta) Q_{yz} \chi_{N\Lambda}(\rho) w_v(z) \rho d\rho dz. \quad (44)$$

Для дальнейших вычислений интегралов (43) и (44) необходимо выразить функции $P_{\lambda M}(\theta)$ и Q_{ik} в цилиндрических координатах. Для функции $P_{\lambda M}(\theta)$ это легко сделать, так как значения угла θ , при которых H_2^+ остается в связан-

ном состоянии, не превышают $20-25^\circ$ в области величины магнитного поля, обсуждаемой в данной работе, т. е. $B=10^{12}-10^{13}$ Гс. Поэтому функции $\sin \theta = \rho/\sqrt{\rho^2+z^2}$ и $\cos \theta = z/\sqrt{\rho^2+z^2}$, а следовательно, и $P_{\lambda M}$ могут быть разложены в ряды по степеням ρ/z . При $\theta \leq 20^\circ$ величина $(\rho/z)^4 < 0.01$. Поэтому в пределах погрешности расчетов, принятой в данной работе (5-10%), члены типа $(\rho/z)^4$ во всех разложениях могут быть опущены. В результате получаем

$$P_{\lambda M}(\theta) = \zeta_{\lambda M} f_{\lambda|M|}. \quad (45)$$

$\zeta_{\lambda M}$ и $f_{\lambda|M|}$ определяются следующим образом:

$$\zeta_{\lambda M} = \begin{array}{c|ccc} & \lambda & \begin{array}{c} -2 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{array} & \begin{array}{c} 0 \\ 2 \end{array} \\ \hline & \begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ 2 \end{array} & \begin{array}{ccc} \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}} \\ 1 & 0 & -1 \\ \frac{1}{2} & \sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{1}{2} \end{array} \end{array} \quad (46)$$

$$f_{\lambda|M|} = \sum_{i=0}^4 \delta_{\lambda|M|i} \left(\frac{\rho}{z}\right)^i, \quad (47)$$

Коэффициенты $\delta_{\lambda|M|i}$ приведены в табл. 1. В функции $f_{\lambda|M|}$ удобно произвести замену переменных (27), т. е.

$$f_{\lambda|M|} = \sum_{i=0}^4 \delta_{\lambda|M|i} \left(\frac{\sqrt{2} \alpha_p a_B}{z_B^{1/4}}\right)^i \left(\frac{x}{\xi}\right)^{i/2} \left(\frac{\sqrt{\xi}}{\operatorname{arth} \sqrt{\xi}}\right)^i, \quad (48)$$

ТАБЛИЦА 1

Коэффициенты $\delta_{\lambda|M|i}$ в формуле (47)

λ	M	$i=0$	$i=1$	$i=2$	$i=3$	$i=4$
0	0	2	0	-3	0	0
0	2	0	1	0	-1	0
1	0	0	0	0	0	0
1	2	0	1	0	-1/2	0
2	0	0	0	1	0	-1
2	2	2	0	-1	0	0

с последующим разложением функции $(\sqrt{\xi}/\operatorname{arth} \sqrt{\xi})^i$ в ряд по степеням ξ , в котором мы отбросим члены порядка ξ^5 и более высокие степени. Таким образом,

$$\left(\frac{\sqrt{\xi}}{\operatorname{arth} \sqrt{\xi}}\right)^i = 1 + C_{i1}\xi + C_{i2}\xi^2 + C_{i3}\xi^3 + C_{i4}\xi^4, \quad (49)$$

где

$$C_{i1} = -\frac{i}{3};$$

$$C_{i2} = \frac{i(i+1)}{18} - \frac{i}{5};$$

$$C_{i3} = -\frac{i(i+1)(i+2)}{162} + \frac{i(i+1)}{15} - \frac{i}{7}; \quad (50)$$

$$C_{i4} = \frac{i(i+1)(i+2)(i+3)}{1944} - \frac{i(i+1)(i+2)}{90} + \frac{71i(i+1)}{1050} - \frac{i}{9}.$$

Разложение (49) обеспечивает хорошую точность вычислений в той области изменения переменных ρ и z , которая дает максимальный вклад в интегралы (43) и (44).

Компоненты квадрупольного момента $Q_{ik}(R, \theta)$, рассчитанные в работе [9], были аппроксимированы полиномами двух переменных x и ξ . Введем обозначения:

$$\begin{aligned} Q_{xx} + Q_{yy} - 2F_0(z) &= F_1(x, \xi), \\ Q_{xx} - Q_{yy} &= F_2(x, \xi), \\ Q_{yz} &= F_3(x, \xi), \end{aligned} \quad (51)$$

где

$$F_0(z) \equiv Q_{xx}(R, 0) = Q_{yy}(R, 0). \quad (52)$$

Тогда аппроксимирующие полиномы, применяющиеся в последующих расчетах, могут быть представлены в виде

$$F_l(x, \xi) = \sum_{k=1}^4 \sum_{j=1}^7 r_{kj}^{(l)} \left(\frac{2}{\sqrt{\alpha_B}} \right)^j x^j \xi^{k-1}, \quad l = 1, 2, 3. \quad (53)$$

ТАБЛИЦА 2
Коэффициенты $r_{kj}^{(l)}$ в формуле (53) для $B = 10^{12}$ Гс

l	k	$j=1$	$j=2$	$j=3$	$j=4$	$j=5$	$j=6$	$j=7$
1	1	2.6011	-0.3960	0.3667	-0.1247	0.01293	0	0
	2	-22.412	14.948	-8.6250	2.4791	-0.2501	0	0
	3	55.523	-42.008	22.573	-6.4266	0.6582	0	0
	4	-41.400	28.917	-14.167	4.0833	-0.4333	0	0
2	1	2.8166	-0.6273	0.3617	-0.1135	0.01243	0	0
	2	-20.210	8.2402	-3.2283	0.8205	-0.8193	0	0
	3	47.712	-19.240	5.9600	-1.5419	0.1695	0	0
	4	-33.536	6.470	1.3333	-0.2560	-0.0119	0	0
3	1	10.622	-8.3284	4.4617	-1.1202	0.1046	0	0
	2	-51.414	61.047	-43.786	17.689	-3.9687	0.4520	-0.01971
	3	107.98	-152.45	117.69	-51.398	12.737	-1.6681	0.08964
	4	-75.667	123.30	-103.82	49.142	-13.235	1.8957	-0.1122

ТАБЛИЦА 3
Коэффициенты $r_{kj}^{(l)}$ в формуле (51) для $B = 5 \cdot 10^{12}$ Гс

l	k	$j=1$	$j=2$	$j=3$	$j=4$	$j=5$	$j=6$	$j=7$
1	1	1.6625	0.6940	-0.5967	0.1653	-0.01507	0	0
	2	-4.2235	-31.644	43.160	-25.219	7.7543	-1.2278	0.0789
	3	-14.558	17.229	-228.41	133.16	-40.302	6.1947	-0.3828
	4	32.768	-220.40	283.92	-162.77	48.321	-7.2741	0.4403
2	1	1.5388	-1.1224	0.7087	-0.1921	0.01892	0	0
	2	-17.540	16.607	-9.3627	2.3928	-0.2254	0	0
	3	70.924	-90.395	64.801	-25.332	5.3897	-0.5704	-0.0223
	4	-90.851	140.54	-118.50	56.892	-15.641	2.2923	-0.1388
3	1	3.9351	-2.7930	1.4483	-0.3406	0.03014	0	0
	2	-18.649	15.612	-8.2117	1.9774	-0.1786	0	0
	3	37.200	-37.791	23.494	-6.6270	0.4102	0.1563	-0.0225
	4	-27.124	36.994	-32.263	15.454	-4.0961	0.5675	-0.0323

ТАБЛИЦА 4
Коэффициенты $r_{kj}^{(l)}$ в формуле (53) для $B = 10^{13}$ Гс

l	k	$j=1$	$j=2$	$j=3$	$j=4$	$j=5$	$j=6$	$j=7$
1	1	2.0999	-0.3107	0.1650	-0.0486	0.0044	0	0
	2	-15.366	5.8707	-2.3317	0.6171	-0.0604	0	0
	3	45.627	-31.002	14.958	-3.9155	0.3824	0	0
	4	-53.051	67.034	-52.017	22.898	-5.4994	0.6686	-0.0317
2	1	2.4150	-2.1117	1.0800	-0.2433	0.0200	0	0
	2	-25.669	26.615	-14.982	3.7470	-0.3413	0	0
	3	67.569	-67.215	37.475	-9.4869	0.8769	0	0
	4	-37.633	18.683	-7.7000	1.8167	-0.1667	0	0
3	1	2.7217	-1.5777	0.7483	-0.1666	0.0142	0	0
	2	-17.848	12.876	-5.9467	1.3067	-0.1082	0	0
	3	47.425	-48.684	33.871	-14.216	3.5408	-0.4843	0.0279
	4	-40.335	59.508	-39.410	18.647	-5.1169	0.7524	-0.0457

Коэффициенты $r_{kj}^{(l)}$ представлены в табл. 2—4 для трех значений магнитного поля $B = 10^{12}, 5 \cdot 10^{12}, 10^{13}$ Гс. Величина F_0 с достаточной точностью может быть представлена полиномом

$$F_0(z) = \sum_{\sigma=1}^3 b_{\sigma} (z - z_{\sigma})^{\sigma-1} \quad (54)$$

или, после разложения по степеням ξ ,

$$F_0(\xi) = \sum_{\sigma=0}^{11} B_{\sigma} \xi^{(\sigma-1)/2}, \quad (55)$$

где

$$\begin{aligned} B_1 &= b_1 - b_2 z_{\sigma} + b_3 z_{\sigma}^2; \\ B_2 &= (b_2 - 2b_3 z_{\sigma})/\alpha_p; \\ B_3 &= b_3/\alpha_p^2. \end{aligned} \quad (56)$$

Остальные коэффициенты B_i выражаются через B_2 или B_3 :

$$\begin{aligned} B_4 &= 0.3333 B_2; \quad B_5 = 0.6667 B_3; \quad B_6 = 0.2000 B_2; \quad B_7 = 0.5111 B_3; \quad B_8 = 0.1429 B_2; \\ B_9 &= 0.4190 B_3; \quad B_{10} = 0.1111 B_2; \quad B_{11} = 0.3575 B_3. \end{aligned}$$

На рис. 2 и 3 показаны рассчитанные в работе [9] компоненты тензора квадрупольного момента Q_{xx}, Q_{yy}, Q_{yz} и их аппроксимации для величины магнитного поля $B = 10^{12}$ Гс. Видно, что используемая аппроксимация достаточно хорошо описывает величины Q_{xx}, Q_{yy}, Q_{yz} в области минимума потенциальной ямы (для $B = 10^{12}$ Гс $z_{\sigma} = 0.172 \text{ \AA}$), т. е. в области, которая дает основной вклад в интегралы (43) и (44). С учетом (45)—(56) эти интегралы могут быть вычислены в аналитическом виде. Приведем сразу конечный результат:

$$\begin{aligned} \left. \begin{aligned} A_{N'\Lambda'v', N\Delta v}^{(M)} \\ B_{N'\Lambda'v', N\Delta v}^{(M)} \end{aligned} \right\} &= R_{N'\Lambda'v', N\Delta v} \sum_{i=0}^4 \left(\frac{\sqrt{2} \alpha_p \alpha_B}{\alpha_B^{1/2}} \right)^i \Gamma\left(\frac{L+L'+i}{2} + 1\right) \frac{\Gamma\left(\gamma - \frac{i}{2}\right) \Gamma(a-v-v')}{\Gamma(\gamma) \Gamma\left(a-v-v' - \frac{i}{2}\right)} \times \\ &\times \sum_{k=0}^i C_{ik} \frac{\left(\gamma - \frac{i}{2}\right)_k}{\left(a-v-v' - \frac{i}{2}\right)_k} \begin{cases} \mathcal{A}_{N'\Lambda'v', N\Delta v}^{(M)}(L, L', a, \gamma, i, k); \\ \mathcal{B}_{N'\Lambda'v', N\Delta v}^{(M)}(L, L', a, \gamma, i, k), \end{cases} \quad (57) \end{aligned}$$

где $L \equiv |\Lambda|$, $L' \equiv |\Lambda'|$ и

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{N'\Lambda'v', N\Delta v}^{(M)}(L, L', a, \gamma, i, k) &= \sum_{s=1}^4 \frac{\left(\gamma + k - \frac{i}{2}\right)_{s-1}}{\left(a-v-v' - \frac{i}{2} + k\right)_{s-1}} \sum_{j=1}^7 \left(\frac{L+L'+i}{2} + 1\right)_j \times \\ &\times \left(\zeta_{2M} \delta_{2|M|} r_{s'j}^{(2)} \frac{1}{\sqrt{6}} - \zeta_{0M} \delta_{0|M|} r_{s'j}^{(1)} \right) \left(\frac{2}{\sqrt{\alpha_B}} \right)^j U_{N'\Lambda', N\Delta}(i, j) V_{v'v}(a, \gamma, k, s, i) - \\ &- 2 \sum_{s=1}^{11} \frac{\Gamma\left(\gamma + k + \frac{s-1-i}{2}\right) \Gamma\left(a-v-v'+k - \frac{i}{2}\right)}{\Gamma\left(\gamma + k - \frac{i}{2}\right) \Gamma\left(a-v-v'+k + \frac{s-1-i}{2}\right)} \times \\ &\times B_{s0M} \delta_{0|M|} U_{N'\Lambda', N\Delta}(i, 0) V_{v'v}\left(a, \gamma, k, \frac{s+1}{2}, i\right), \quad (58) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{N'\Lambda'v', N\Delta v}^{(M)}(L, L', a, \gamma, i, k) &= \sum_{s=1}^4 \frac{\left(\gamma + k - \frac{i}{2}\right)_{s-1}}{\left(a-v-v' - \frac{i}{2} + k\right)_{s-1}} \times \\ &\times \sum_{j=1}^7 \left(\frac{L+L'+i}{2} + 1\right)_j \sqrt{\frac{2}{3}} \zeta_{1M} \delta_{1|M|} \left(\frac{2}{\sqrt{\alpha_B}} \right)^j r_{s'j}^{(3)} U_{N'\Lambda', N\Delta}(i, j) V_{v'v}(a, \gamma, k, s, i). \quad (59) \end{aligned}$$

В этих формулах $(x)q \equiv \Gamma(x+q)/\Gamma(x)$ — символ Похгаммера;

$$R_{N'\Delta'v', N\Delta v} = \frac{1}{L!L'!} \left[\frac{(L'+N')!(L+N)!}{N'!N!v'!v!} \right]^{1/2} \times \\ \times \left[\frac{(a-\gamma-2v)(a-\gamma-2v')}{(a-\gamma-v)(a-\gamma-v')} \frac{(\gamma)_v(\gamma')_{v'}(a-v-v')_v(a-v-v')_{v'}}{(a-\gamma-v'-v)_v(a-\gamma-v'-v)_{v'}} \right]^{1/2}; \quad (60)$$

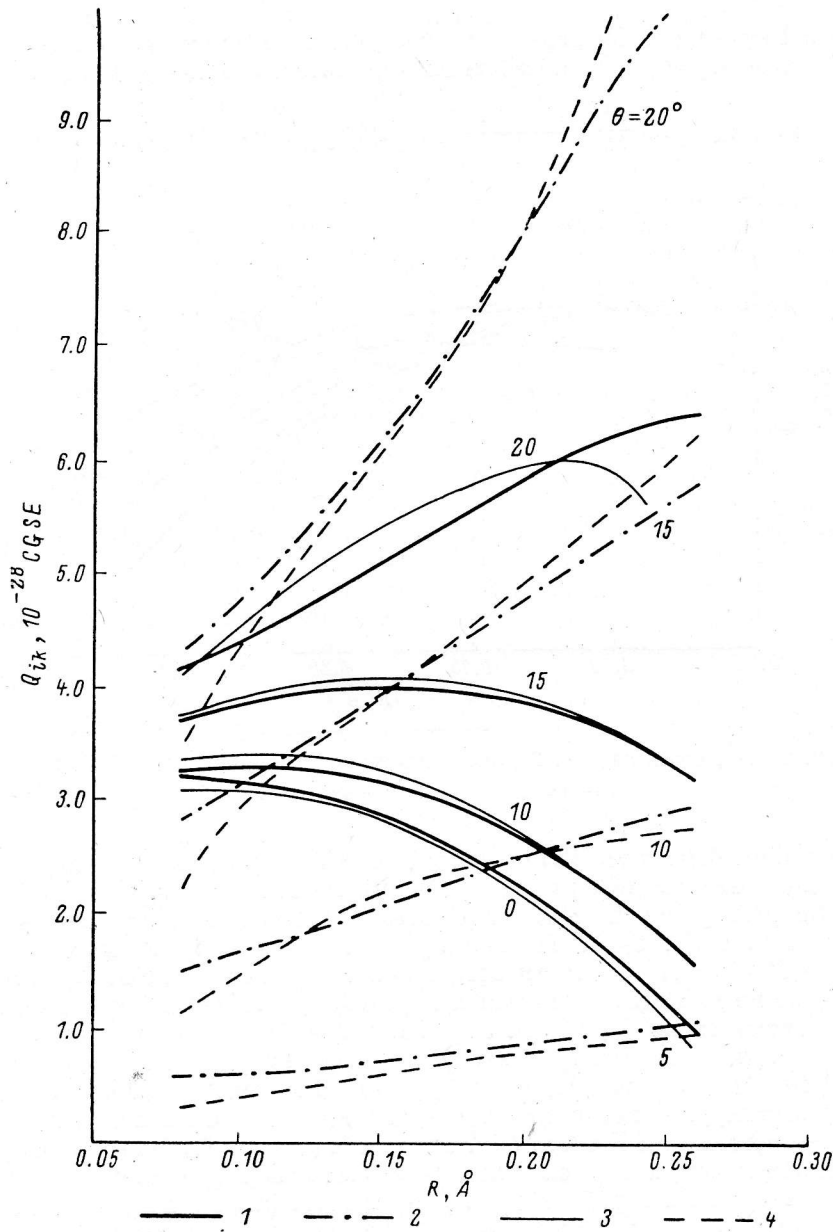


Рис. 2. Зависимости компонент тензора квадрупольного момента иона H_2^+ от межъядерного расстояния при различных значениях угла θ .

Сравнение зависимостей, рассчитанных в работе [9] (1 — Q_{xx} , 2 — Q_{yz}) и их аппроксимаций, полученных в данной работе (3 — Q_{xx} , 4 — Q_{yz}).

$$U_{N'\Delta', N\Delta}(i, j) = \sum_{n'=0}^{N'} \sum_{n=0}^N (-1)^{n+n'} \frac{N'!N!L'!L!}{(N'-n')!n'!(L'+n')!(N-n)!n!(L+n)!} \times \\ \times \left(\frac{L+L'+i}{2} + j + 1 \right)_{n+n'}; \quad (61)$$

$$V_{v'v}(a, \gamma, k, s, i) = \sum_{m'=0}^{v'} \sum_{m=0}^v \frac{v'! v! (a-v')_{m'} (a-v)_m}{(v'-m')! m'! (v-m)! m! (\gamma)_{m'} (\gamma)_m} \times \\ \times \frac{\left(\gamma + k + s - 1 - \frac{i}{2}\right)_{m+m'}}{\left(a + k + s - 1 - v - v' - \frac{i}{2}\right)_{m+m'}}. \quad (62)$$

Такое представление интегралов в виде конечных сумм позволяет легко рассчитать полные вероятности колебательно-вращательных переходов:

$$W_{N'\Lambda'v' \rightarrow N\Delta v} = \frac{\omega^5}{15\hbar c^5} \frac{1 + (-1)^{\Lambda-\Lambda'}}{2} \left\{ (A_{N'\Lambda'v', N\Delta v}^{(\Lambda-\Lambda')})^2 + (B_{N'\Lambda'v', N\Delta v}^{(\Lambda-\Lambda')})^2 \right\}. \quad (63)$$

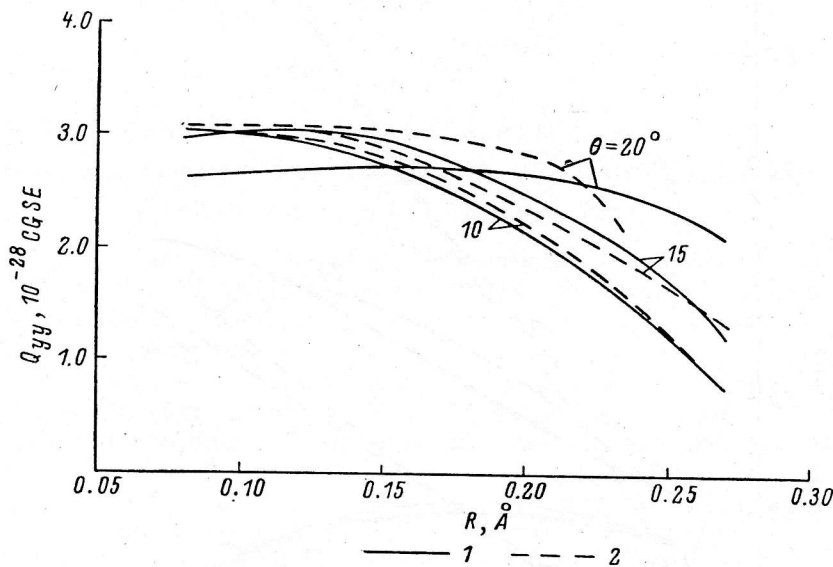


Рис. 3. То же, что и на рис. 2, для компоненты квадрупольного момента Q_{yy} .
1 — работа [9]; 2 — аппроксимация.

Эти величины были рассчитаны нами для всех возможных переходов между уровнями дискретного спектра для значений магнитного поля $B=10^{12}$, $5 \cdot 10^{12}$ и 10^{13} Гс. Энергии уровней взяты из работы [10]. Результаты расчетов частично представлены в табл. 5—7. Поскольку количество разрешенных переходов велико (для $B=10^{12}$ Гс оно достигает нескольких сотен), в табл. 5 и 6 мы приводим данные не для всех возможных переходов, а лишь для некоторых, связывающих низколежащие уровни. Лишь при $B=10^{13}$ Гс, когда число уровней невелико, даны вероятности практически всех разрешенных переходов (табл. 7). Отметим, что мы не рассматриваем уровни, непосредственно прилегающие к уровню континуума, поскольку точность определения их положения хуже, чем для всех остальных. В табл. 5—7 мы также указываем длины волн рассматриваемых переходов, которые легко вычислить, используя данные об энергиях уровней, приведенных в работе [10]. Длины волн различных переходов попадают в широкую область спектра — от оптического до рентгеновского диапазона. Некоторые из переходов, приведенных в таблицах, имеют длины волн, лежащие в ИК-области спектра. Следует отметить, что точность этих значений невелика, поскольку они обязаны случайному совпадению положений уровней энергии. Для более точного определения этих длин волн требуется выполнить более точные расчеты положений энергетических уровней, чем те, которые были выполнены в работе [10].

Как видно из таблиц, с увеличением магнитного поля длина волны любого из переходов смещается в более коротковолновую область спектра, а вероятность перехода возрастает.

ТАБЛИЦА 5

Длины волн и вероятности колебательно-вращательных переходов в H_2^+ при $B = 10^{12}$ Гс

$N'\Delta V' - N\Delta V$ $i-f$	$\lambda_{i-f}, \text{Å}$	$W_{i-f}, \text{с}^{-1}$	$N'\Delta V' - N\Delta V$ $i-f$	$\lambda_{i-f}, \text{Å}$	$W_{i-f}, \text{с}^{-1}$
0-2 0 0 0 0	341.8	0.166 (+1)	0-1 1 0 1 0	1092.3	0.711 (-3)
0-2 0 0 0 1	403.2	0.518 (-1)	0-1 1 0 1 1	1966.5	0.460 (-3)
0-2 0 0 0 2	480.6	0.296 (-2)	0-1 1 0 1 2	9120.0	0.276 (-7)
0-2 0 1 0 0	2260.9	0.715 (-3)	0 0 1 0 0 0	2241.6	0.762 (-3)
0-2 0 1 0 1	4892.8	0.895 (-6)	0 0 2 0 0 0	1182.9	0.326 (-4)
0-2 1 0-2 0	3301.3	0.105 (-3)	0 0 2 0 0 1	2504.7	0.110 (-2)
0-2 1 0 0 0	309.7	0.194 (0)	0 1 1 0 1 0	2456.9	0.483 (-3)
0-2 1 0 0 1	359.3	0.113 (+1)	0 1 2 0-1 0	3362.9	0.352 (-6)
0-2 1 0 0 2	419.5	0.617 (-1)	0 1 2 0 1 0	1240.9	0.553 (-4)
0-2 1 1 0 0	1341.9	0.577 (-3)	0 1 2 0 1 1	2507.2	0.109 (-2)
0-2 1 1 0 1	1971.2	0.123 (-2)	0 2 0 0 0 0	523.8	0.197 (0)
0-2 1 1 0 2	8992.5	0.683 (-7)	0 2 0 0 0 1	683.5	0.370 (-2)
0-1 0 0 1 0	1966.5	0.527 (-3)	0 2 0 0 0 2	940.1	0.103 (-3)
0-1 0 0 1 1	9852.6	0.119 (-7)	0 2 1 0 0 0	452.1	0.293 (-1)
0-1 1 0-1 0	2456.9	0.483 (-3)	0 2 1 0 0 1	566.3	0.116 (0)
0 2 1 0 0 2	731.7	0.415 (-2)	1 0 0 0 0 0	402.6	0.302 (0)
0 2 2 0 0 0	383.2	0.916 (-2)	1 0 0 0 0 0	490.8	0.285 (-5)
0 2 2 0 0 1	462.3	0.413 (-1)	1 0 0 0 0 2	610.3	0.195 (-3)
0 2 2 0 0 2	566.9	0.102 (0)	1 0 0 0 2 0	1740.0	0.265 (-2)
0 2 2 0 2 0	1428.2	0.695 (-4)	1 0 0 0 2 1	3679.1	0.372 (-5)
0 2 2 0 2 1	2517.1	0.103 (-2)	1 0 1 0 0 0	367.4	0.121 (-4)
0 2 2 1 0 0	7969.8	0.977 (-8)	1 0 1 0 0 1	439.4	0.151 (0)
0 3 0 0 1 0	495.9	0.958 (0)	1 0 1 0 0 2	532.9	0.875 (-5)
0 3 0 0 1 1	621.2	0.195 (-1)	1 0 1 0 2 0	1230.6	0.890 (-3)
0 3 0 0 1 2	825.9	0.604 (-3)	1 0 1 0 2 1	1961.9	0.126 (-2)
0 3 1 0 1 0	459.8	0.878 (-1)	1 0 1 0 2 2	8893.7	0.722 (-7)
0 3 1 0 1 1	565.7	0.431 (0)	1 0 1 1 0 0	4203.2	0.299 (-4)
0 3 1 0 1 2	730.4	0.138 (-1)	1 0 2 0-2 0	5216.2	0.813 (-7)

ТАБЛИЦА 6

Длины волн и вероятности колебательно-вращательных переходов в H_2^+ при $B = 5 \cdot 10^{12}$ Гс

$N'\Delta V' - N\Delta V$ $i-f$	$\lambda_{i-f}, \text{Å}$	$W_{i-f}, \text{с}^{-1}$	$N'\Delta V' - N\Delta V$ $i-f$	$\lambda_{i-f}, \text{Å}$	$W_{i-f}, \text{с}^{-1}$
0-1 0 0 1 0	393.3	0.319 (0)	0 1 3 0 1 2	1262.8	0.137 (-1)
0-1 0 0 1 1	543.8	0.185 (-1)	0 1 4 0-1 0	1866.6	0.171 (-6)
0-1 1 0 1 0	308.1	0.316 (0)	0 1 4 0 1 0	324.8	0.944 (-2)
0-1 1 0 1 1	393.3	0.239 (0)	0 1 4 0 1 1	421.1	0.204 (-1)
0 0 1 0 0 0	1217.5	0.349 (-2)	0 1 4 0 1 2	646.4	0.116 (-2)
0 0 2 0 0 0	605.9	0.658 (-6)	0 1 4 0 1 3	1324.2	0.171 (-1)
0 0 2 0 0 1	1206.4	0.857 (-2)	0 2 0 0 0 0	184.0	0.710 (1)
0 0 3 0 0 0	409.5	0.652 (-3)	0 2 0 0 0 1	216.8	0.916 (0)
0 0 3 0 0 1	617.0	0.747 (-4)	0 2 0 0 0 2	264.3	0.278 (-1)
0 0 3 0 0 2	1267.7	0.119 (-1)	0 2 0 0 0 3	334.3	0.162 (-2)
0 1 1 0 1 0	1421.2	0.154 (-2)	0 2 1 0 0 0	167.4	0.333 (1)
0 1 2 0 1 0	653.1	0.145 (-2)	0 2 1 0 0 1	194.1	0.409 (1)
0 1 2 0 1 1	1208.3	0.920 (-2)	0 2 1 0 0 2	231.3	0.122 (1)
0 1 3 0 1 0	430.5	0.682 (-2)	0 2 1 0 0 3	283.1	0.458 (-1)
0 1 3 0 1 1	617.5	0.253 (-2)	0 2 1 0 2 0	1850.9	0.403 (-4)

3. Поляризация и угловое распределение излучения. Поляризация и угловое распределение фотонов полностью определяются функцией (34). Ниже мы рассмотрим частные случаи этой формулы.

А. Циркулярная поляризация: $e_{k1} = e'_{+1}$ ($g_{11} = 1, g_{1-1} = 0$). В этом случае

$$F_{1, \Delta' - \Delta}(\vartheta) = \frac{5}{8\pi} [d_{\Delta' - \Delta, 1}^2(\vartheta)]^2 \quad (64)$$

ТАБЛИЦА 7

Длины волн и вероятности колебательно-вращательных переходов в H_2^+ при $B = 10^{13}$ Гс

$N'\Lambda'V' - N\Lambda V$ $i-f$	$\lambda_{i-f}, \text{Å}$	W_{i-f}, e^{-1}
0 0 1 0 0 0	489.1	0.195 (0)
0 0 2 0 0 0	307.8	0.602 (-2)
0 0 2 0 0 1	830.1	0.302 (-1)
0 0 3 0 0 0	228.3	0.567 (-3)
0 0 3 0 0 1	428.0	0.392 (-2)
0 0 3 0 0 2	883.6	0.370 (-1)
0 0 4 0 0 0	183.2	0.659 (-2)
0 0 4 0 0 1	293.0	0.562 (-5)
0 0 4 0 0 2	452.7	0.606 (-2)
0 0 4 0 0 3	928.5	0.437 (-1)
0 0 5 0 0 0	154.3	0.110 (-1)
0 0 5 0 0 1	225.4	0.478 (-2)
0 0 5 0 0 2	309.5	0.306 (-3)
0 0 5 0 0 3	476.2	0.771 (-2)
0 0 5 0 0 4	977.8	0.486 (-1)
0 0 6 0 0 0	134.3	0.121 (-1)
0 0 6 0 0 1	185.0	0.131 (-1)
0 0 6 0 0 2	238.1	0.369 (-2)
0 0 6 0 0 3	325.9	0.135 (-2)
0 0 6 0 0 4	502.2	0.883 (-2)
0 0 6 0 0 5	1032.6	0.518 (-1)
0 1 1 0 1 0	358.8	0.134 (1)

или

$$F_{1, \Lambda' - \Lambda}(\vartheta) = \begin{cases} \frac{5}{32\pi} \sin^2 \vartheta (1 \pm \cos \vartheta)^2 & \text{при } \Lambda' = \Lambda \pm 2; \\ \frac{15}{16\pi} \sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta & \text{при } \Lambda' = \Lambda. \end{cases} \quad (64a)$$

Угловое распределение излучения для этого случая показано на рис. 4.

В. Циркулярная поляризация: $e_{k2} = e'_{-1}$ ($g_{21} = 0$, $g_{2-1} = 1$).

$$F_{2, \Lambda' - \Lambda}(\nu) = \frac{5}{8\pi} [d_{\Lambda' - \Lambda, -1}^2(\vartheta)]^2 \quad (65)$$

или

$$F_{2, \Lambda' - \Lambda}(\vartheta) = \begin{cases} \frac{5}{32\pi} \sin^2 \vartheta (1 \mp \cos \vartheta)^2 & \text{при } \Lambda' = \Lambda \pm 2; \\ \frac{15}{16\pi} \sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta & \text{при } \Lambda' = \Lambda. \end{cases} \quad (65a)$$

Из сравнения формул (64a) и (65a) видно, что угловое распределение излучения в случаях А и В, как и следовало ожидать, подобно, за исключением того, что для переходов с $\Lambda' = \Lambda \pm 2$ направление максимумов излучения, соответствующее углам $\vartheta_m = \frac{\pi}{2} \mp \frac{\pi}{6}$, меняется от случая А к случаю В на $\vartheta_m = \frac{\pi}{2} \pm \frac{\pi}{6}$.

С. Линейная поляризация в плоскости, содержащей векторы B и k :

$$e_{k1} = e_{\vartheta} (g_{11} = -1/\sqrt{2}, g_{1-1} = 1/\sqrt{2}). \quad F_{1, \Lambda' - \Lambda}(\vartheta) = \frac{5}{16\pi} (d_{\Lambda' - \Lambda, 1}^2(\vartheta) - d_{\Lambda' - \Lambda, -1}^2(\vartheta))^2 \quad (66)$$

или

$$F_{1, \Lambda' - \Lambda}(\vartheta) = \begin{cases} \frac{5}{16\pi} \sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta & \text{при } \Lambda' = \Lambda \pm 2; \\ \frac{15}{8\pi} \sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta & \text{при } \Lambda' = \Lambda. \end{cases} \quad (66a)$$

В этом случае угловое распределение излучения при любых $\Lambda' - \Lambda$ то же, что и в случаях А или В при $\Lambda' = \Lambda$. Различие проявляется лишь в численных множителях, определяющих нормировку функций $F_{\rho, \Lambda' - \Lambda}$.

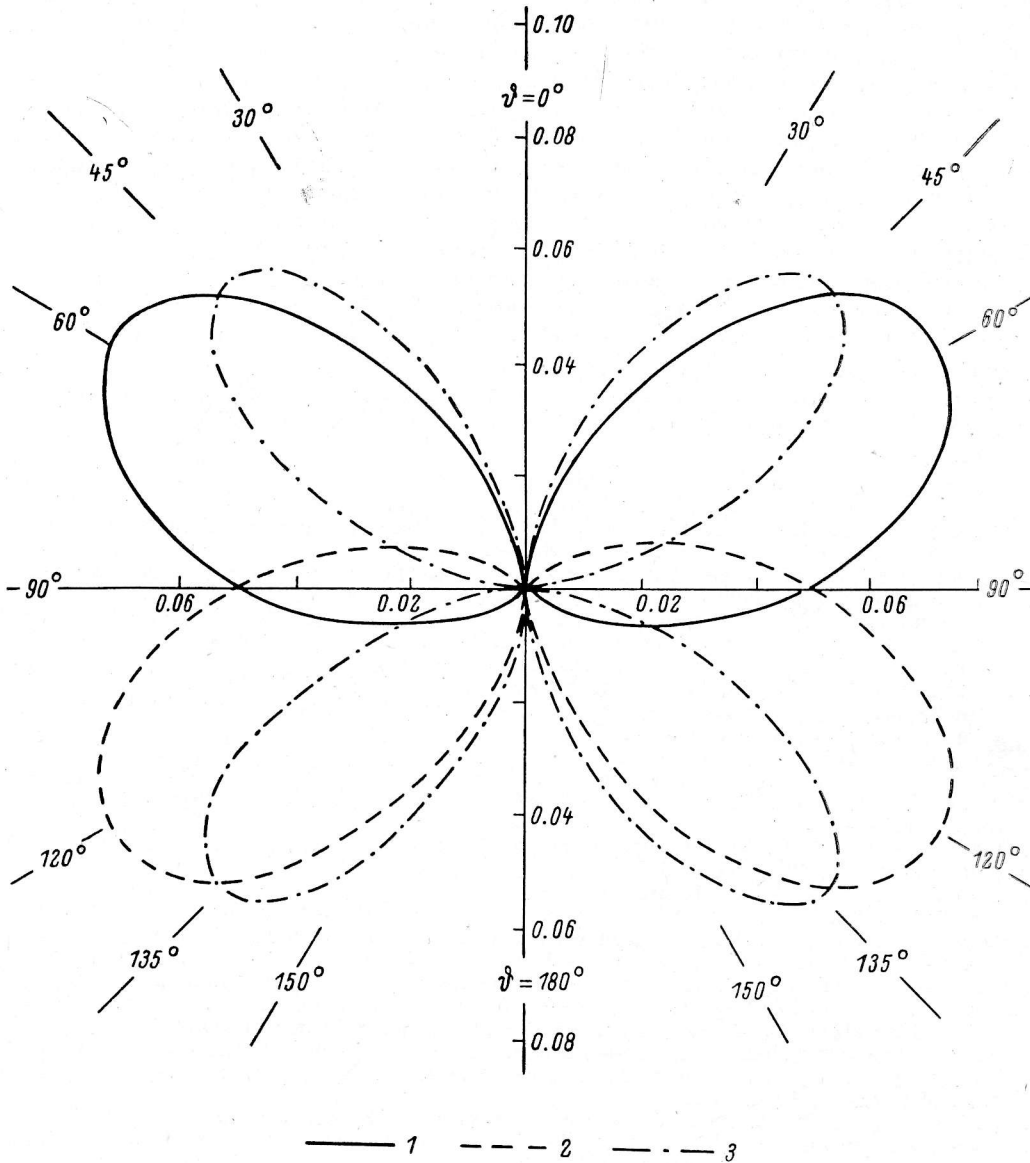


Рис. 4. Угловое распределение излучения циркулярно поляризованного фотона.

Случай А. $e_{k1} = e'_{+1}$ ($g_{11} = 1, g_{1-1} = 0$); 1 - $\Lambda' = \Lambda + 2$; 2 - $\Lambda' = \Lambda - 2$; 3 - $\Lambda' = \Lambda$.

Д. Линейная поляризация в плоскости, перпендикулярной к той, которая содержит векторы B и k : $e_{k_2} = e_{\varphi}$ ($g_{21} = i/\sqrt{2}, g_{2-1} = i/\sqrt{2}$).

$$F_{2, \Lambda' - \Lambda}(\vartheta) = \frac{5}{16\pi} (d_{\Lambda' - \Lambda, 1}^2(\vartheta) + d_{\Lambda' - \Lambda, -1}^2(\vartheta))^2 \quad (67)$$

или

$$F_{2, \Lambda' - \Lambda}(\vartheta) = \begin{cases} \frac{5}{16\pi} \sin^2 \vartheta & \text{при } \Lambda' = \Lambda \pm 2; \\ 0 & \text{при } \Lambda' = \Lambda. \end{cases} \quad (67a)$$

Из последней формулы видно, что излучение фотона при переходе, в котором Λ не изменяется, не может быть поляризовано по e_{φ} . Излучение с $\Lambda' = \Lambda \pm 2$

при такой поляризации оказывается сконцентрированным в направлениях, перпендикулярных к магнитному полю.

В заключение параграфа отметим, что поскольку переходы с $\Delta L = \pm 1$ запрещены в рассматриваемом приближении, из свойств d -функции Вигнера [14] следует, что при любой поляризации угловое распределение излучения имеет минимум вдоль направления магнитного поля.

Заключение. На основе рассчитанных ранее данных о тензоре квадрупольного момента и энергиях уровней молекулярного иона H_2^+ , помещенного в сильное магнитное поле, в данной работе определяются вероятности колебательно-вращательных переходов в основном электронном состоянии рассматриваемого иона. Вероятности рассчитаны при трех значениях магнитного поля $B = 10^{12}$, $5 \cdot 10^{12}$ и 10^{13} Гс. Определены правила отбора по проекции момента количества движения молекулярного иона на направление магнитного поля. Обсуждены поляризационные характеристики и угловое распределение излучения. Полученные результаты могут быть использованы при оценках возможностей наблюдений линий молекулярного иона H_2^+ из области сильного магнитного поля вблизи поверхности нейтронной звезды.

Автор считает своим приятным долгом поблагодарить Д. Г. Яковлева, Д. А. Варшаловича и Г. Г. Павлова за полезную дискуссию обсуждаемых вопросов.

Литература

1. W a d e h r a J. M. Scaling laws for hydrogen-like atoms in magnetic field of arbitrary strength. — *Astrophys. J.*, 1983, **271**, p. 879—887.
2. W u n n e r G., R u d e r H., H e r o l d H. Energy levels and oscillator strengths for the two-body problem in magnetic fields. — *Astrophys. J.*, 1981, **247**, p. 374—381.
3. W u n n e r G., R ö s n e r W., R u d e r H., H e r o l d H. Energy values and sum rules for hydrogen atom in magnetic fields of arbitrary strength using numerical wave functions: comparison with variational results. — *Astrophys. J.*, 1982, **262**, p. 407—411.
4. S c h m i t t W., H e r o l d H., R u d e r H., W u n n e r G. The photoionization of the hydrogen atom in strong magnetic field. — *Astron. Astrophys.*, 1981, **94**, p. 194—198.
5. O z a k i J., T o m i s h i m a Y. Energies of the H_2^+ ion in strong magnetic fields. — *Phys. Lett.*, 1981, **82A**, p. 449—452.
6. The H_2^+ molecule in strong magnetic fields, studied by methods of linear combinations of orbitals / C. P. De Melo, T. K. Das, R. C. Ferreira et al. — *Phys. Rev.*, 1978, **A18**, p. 12—14.
7. Х е р с о н с к и й В. К. Ион молекулы водорода в сильном магнитном поле. — *Оптика и спектроскопия*, 1983, **55**, с. 825—832.
8. K h e r s o n s k i i V. K. Hydrogen molecular ion in the magnetic field of a neutron star. I. Two-dimensional potential surface. — *Astrophys. Sp. Sci.*, 1984, **98**, p. 255—268.
9. K h e r s o n s k i i V. K. Hydrogen molecular ion in the magnetic field of a neutron star. II. Quadrupole moment tensor. — *Astrophys. Sp. Sci.* 1984, **103**, p. 357—370.
10. K h e r s o n s k i i V. K. Hydrogen molecular ion in the magnetic field of a neutron star. III. Rovibrational spectrum. — *Astrophys. Sp. Sci.*, 1985, **117**, p. 47—64.
11. Х е р с о н с к и й В. К. Частоты и вероятности колебательных переходов H_2^+ в магнитном поле нейтронной звезды. — *Астрон. журн.*, 1983, **60**, с. 105—109.
12. Л а н д а у Л. Д., Л и ф ш и ц Е. М. Теоретическая физика. Т. III: Квантовая механика. М.: Наука, 1974. 752 с.
13. С о б е л ь м а н И. И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977. 320 с.
14. В а р ш а л о в и ч Д. А., М о с к а л е в А. Н., Х е р с о н с к и й В. К. Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975. 440 с.

Поступила в редакцию 25.10.85