

ИНТЕНСИВНОСТИ МИЛЛИМЕТРОВЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЛИНИЙ CO, CS и SiO

В. К. Херсонский

Произведен расчет неравновесных населенностей нижних вращательных уровней межзвездных молекул CO, CS и SiO. Детально обсуждаются функциональные зависимости населенностей от плотности и кинетической температуры газа. Вычислены относительные интенсивности линий, соответствующих переходам $I=1 \rightarrow 0$, $2 \rightarrow 1$ и $3 \rightarrow 2$. Обсуждается возможность использования полученных результатов для определения из наблюдательных данных концентрации и температуры газа в плотных молекулярных облаках.

The paper presents the calculations of nonequilibrium populations of CO, CS and SiO interstellar molecules low rotational levels. Functional dependences of the populations on the gas density and kinetic temperature are discussed in detail. Besides the paper gives the calculated values of relative intensities of the lines corresponding to transitions $I=1 \rightarrow 0$, $2 \rightarrow 1$ and $3 \rightarrow 2$. The possibility of employment of the obtained results for determination of density and temperature of the gas in the dense molecular clouds based on observed data is also considered.

В настоящее время интенсивно развиваются методы исследования физических условий в облаках межзвездного газа, основанные на использовании данных, полученных при наблюдениях линий межзвездных молекул. Большая часть обнаруженных молекулярных линий лежит в миллиметровом диапазоне длин волн. Силы миллиметровых линий, как правило, больше, чем сантиметровых, что значительно облегчает обнаружение молекул и детальное исследование их излучения. Следует отметить, что для изучения таких параметров межзвездного газа, как его плотность N , кинетическая температура T_k , а также для построения моделей облаков наиболее удобными являются оптически тонкие линии линейных молекул. Во-первых, их микроволновый вращательный спектр является очень простым и легко анализируется. Во-вторых, при малой оптической толщине в линиях значительно упрощается расчет переноса излучения в межзвездных облаках. Интенсивность молекулярных линий в этом случае оказывается пропорциональной коэффициенту излучения, который в свою очередь определяется вероятностью молекулярного вращательного перехода и населенностью верхнего сигнального уровня. А поскольку условия в межзвездной среде далеки от термодинамически равновесных, то населенности уровней не будут определяться бальцовскими выражениями и должны быть рассчитаны из уравнений баланса.

Цель данной работы состоит в том, чтобы рассчитать неравновесные населенности нижних вращательных уровней таких широко распространенных в межзвездной среде молекул, как CO, CS и SiO, в интервалах кинетической температуры ($T_k \approx 10 \div 100^\circ \text{K}$) и плотности газа ($N \approx 10^2 \div 10^7 \text{ см}^{-3}$), типичных для молекулярных облаков, а затем на основании этих расчетов определить ожидаемые интенсивности миллиметровых оптически тонких линий рассматриваемых молекул (ситуация, когда оптическая толщина в линиях изотопических аналогов CO, CS и SiO меньше единицы, часто реализуется в межзвездной среде, за исключением пере-

ходов $^{12}\text{C } ^{16}\text{O}$, и иногда перехода $I=1 \rightarrow 0$ $^{12}\text{C } ^{32}\text{S}$, которые могут быть оптически толстыми). Расчеты населенностей вращательных уровней рассматриваемых молекул были проведены для некоторых отдельных значений плотности и кинетической температуры газа в работах [1—3]. Однако в этих работах использовались неточные значения вероятностей столкновительных возбуждений молекул, что может привести к значительным ошибкам в расчетах интенсивностей. Некоторые более точные вычисления проведены нами в работах [4, 5] для молекулы CS. Однако систематические расчеты населенностей нижних вращательных уровней и интенсивностей наблюдаемых молекулярных переходов CO, CS и SiO опубликованы не были. Вместе с тем такие расчеты позволяют путем их «сшивания» с наблюдательными данными определить плотность и кинетическую температуру газа, а также содержание на луче зрения наблюдаемых молекул в межзвездных облаках.

Населенности нижних вращательных уровней CO, CS и SiO. Как известно, в стационарном случае населенности вращательных уровней линейных молекул n_I могут быть определены как решения системы линейных алгебраических уравнений типа

$$-n_I \sum_{I'=0}^{\infty} W_{I \rightarrow I'} + \sum_{I'=0}^{\infty} n_{I'} W_{I' \rightarrow I} = 0 \quad (1)$$

и уравнения нормировки

$$\sum_{I=0}^{\infty} n_I = 1,$$

где первый член дает число переходов с уровня I на все другие уровни (уход), тогда как второй представляет собой число переходов со всех уровней на уровень I (приход). В этом уравнении $W_{j \rightarrow k}$ — полная вероятность вращательного перехода, которая определяется суммой столкновительной и радиационной вероятностей и может быть записана в виде

$$W_{I \rightarrow I'} = \begin{cases} C_{I \rightarrow I'} + A_{I \rightarrow I'} + B_{I \rightarrow I'} \langle I_{II'} \rangle, & I > I'; \\ C_{I \rightarrow I'} + B_{I \rightarrow I'} \langle I_{II'} \rangle, & I < I'. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь $C_{I \rightarrow I'}$ — вероятность столкновительного перехода $I \rightarrow I'$, $A_{I \rightarrow I'}$ и $B_{I \rightarrow I'}$ — коэффициенты Эйнштейна для спонтанного и вынужденного излучения, а $\langle I_{II'} \rangle$ — средняя по поляризациям и направлениям плотность излучения на частоте $\nu_{II'}$:

$$\langle I_{II'} \rangle = \frac{8\pi h \nu_{II'}^3}{c^3} \left[\exp\left(\frac{h\nu_{II'}}{kT_R(I, I')}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad (3)$$

где $T_R(I, I')$ — температура поля излучения (радиационная температура) на частоте $\nu_{II'}$. Учитывая связь между коэффициентами Эйнштейна $A_{I \rightarrow I'}$ и $B_{I \rightarrow I'}$, т. е.

$$B_{I+1 \rightarrow I} = \frac{c^3}{8\pi h \nu_{I+1, I}^3} A_{I+1 \rightarrow I}; \quad B_{I \rightarrow I+1} = \frac{2I+3}{2I+1} \frac{c^3}{8\pi h \nu_{I+1, I}^3} A_{I+1 \rightarrow I}, \quad (4)$$

получаем, что

$$W_{I \rightarrow I'} = R_{I \rightarrow I'} + C_{I \rightarrow I'}, \quad (5)$$

и

$$R_{I \rightarrow I'} = \begin{cases} A_{I \rightarrow I'} (1 + \rho_{II'}) & \text{при } I > I'; \\ \frac{2I'+1}{2I+1} A_{I' \rightarrow I} \rho_{II'} & \text{при } I < I'. \end{cases} \quad (6)$$

В этой формуле введено обозначение

$$\varrho_{I'I} = \left[\exp \left(\frac{h\nu_{I'I}}{kT_R(I', I)} \right) - 1 \right]^{-1}. \quad (7)$$

Из системы уравнений баланса для населенностей может быть получена система уравнений для температур возбуждения вращательных уровней $T_{\text{ex}}(I', I)$, которые определяются выражением

$$T_{\text{ex}}(I', I) = \frac{E_{I'} - E_I}{k} \left[\ln \left(\frac{g_I n_I}{g_I n_{I'}} \right) \right]^{-1}, \quad (8)$$

где $g_I = 2I + 1$.

Эту величину легко выразить через температуры возбуждения с уровня $I = 0$ на уровни I и I' :

$$\frac{E_{I'} - E_I}{kT_{\text{ex}}(I', I)} = \frac{E_{I'}}{kT_{\text{ex}}(I', 0)} - \frac{E_I}{kT_{\text{ex}}(I, 0)}. \quad (9)$$

Перепишывая (1) в виде

$$\sum_{I'} W_{I \rightarrow I'} \left(1 - \frac{n_{I'}}{n_I} \cdot \frac{W_{I' \rightarrow I}}{W_{I \rightarrow I'}} \right) = 0 \quad (10)$$

и пользуясь принципом детального равновесия для вероятностей столкновительных и радиационных переходов, т. е.

$$\begin{aligned} R_{I' \rightarrow I} &= \frac{2I + 1}{2I' + 1} R_{I \rightarrow I'} \exp \left[-\frac{E_I - E_{I'}}{kT_R(I', I)} \right]; \\ C_{I' \rightarrow I} &= \frac{2I + 1}{2I' + 1} C_{I \rightarrow I'} \exp \left[-\frac{E_I - E_{I'}}{kT_K} \right], \end{aligned} \quad (11)$$

получаем:

$$\frac{W_{I' \rightarrow I}}{W_{I \rightarrow I'}} = \frac{g_I}{g_{I'}} \cdot \frac{R_{I \rightarrow I'} \exp[-(E_I - E_{I'})/kT_R(I', I)] + C_{I \rightarrow I'} \exp[-(E_I - E_{I'})/kT_K]}{R_{I \rightarrow I'} + C_{I \rightarrow I'}}. \quad (12)$$

Введем эквивалентную температуру перехода

$$\begin{aligned} T_{\circ}(I', I) &= \\ &= \frac{E_{I'} - E_I}{k} \left\{ \ln \left[\frac{R_{I \rightarrow I'} \exp[(E_{I'} - E_I)/kT_R(I', I)] + C_{I \rightarrow I'} \exp[(E_{I'} - E_I)/kT_K]}{R_{I \rightarrow I'} + C_{I \rightarrow I'}} \right] \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (13)$$

причем $T_{\circ}(I', I) = T_K$ при $|I' - I| > 1$. Тогда

$$\frac{n_{I'} \cdot W_{I' \rightarrow I}}{n_I \cdot W_{I \rightarrow I'}} = \frac{n_{I'} g_I}{n_I g_{I'}} \exp \left[\frac{E_{I'} - E_I}{kT_{\circ}(I', I)} \right] = \exp \left[\frac{E_{I'} - E_I}{k} \left(\frac{1}{T_{\circ}(I', I)} - \frac{1}{T_{\text{ex}}(I', I)} \right) \right], \quad (14)$$

и выражение (10) приобретает вид:

$$\sum_{I'} W_{I \rightarrow I'} \left\{ 1 - \exp \left[\frac{E_{I'} - E_I}{k} \left(\frac{1}{T_{\circ}(I', I)} - \frac{1}{T_{\text{ex}}(I', I)} \right) \right] \right\} = 0. \quad (15)$$

Из этой системы уравнений для различных I могут быть рассчитаны непосредственно температуры возбуждения.

Хотя система уравнений баланса формально является бесконечной, при конкретных расчетах населенностей ее обрывают сверху номером I_{max} некоторого уровня, населенность которого ничтожна по сравнению с населенностями нижележащих уровней.

Решения уравнения баланса в общем виде приведены нами в работе [4]. Другое альтернативное выражение для этих решений может быть представлено соотношением

$$\frac{n_I}{n_{I'}} = \frac{\tilde{W}_{I' \rightarrow I}}{\tilde{W}_{I \rightarrow I'}}, \quad (16)$$

где

$$\tilde{W}_{I' \rightarrow I} = W_{I' \rightarrow I} + \frac{\sum_{i=1}^{I_{\max}-1} \sum_{I_1, I_2, \dots, I_i} (W_{I' \rightarrow I_1} W_{I_1 \rightarrow I} / W_{I_i \rightarrow I_1}) \Phi(I_1, I_i) (1 - G_i^i)}{1 - \sum_{i=2}^{I_{\max}-1} (1/i) \sum_{I_1, I_2, \dots, I_i} \Phi(I_1, I_i) + G_2^i}. \quad (17)$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$G_\varphi^i = \sum_{k_1=2, 3, \dots}^{N-i-2-\varphi} \sum_{k_2=0, 2, 3, \dots}^{N-i-2-S_1} \dots \sum_{k_m=0, 2, 3, \dots}^{N-i-2-S_{m-1}} (1 - \delta_{\varphi-2, k_2}) \prod_{\lambda=1}^m \prod_{\mu=1}^m \prod_{\nu=1}^m \frac{1}{k_\lambda + \delta_{k_\lambda 0}} \cdot \frac{2^m}{1 + \delta_{k_\mu k_\nu}} \times$$

$$\times \sum_{I'_1, I'_2, \dots, I'_m} \left\{ \delta_{\varphi 2} + \delta_{\varphi 0} \prod_{\tau=1}^{S_m} \Theta(I'_\tau; (I_i)) \right\} \prod_{r=1}^{S_m} \prod_{t=1}^{S_m} \Theta(I'_r; I'_t) \prod_{\sigma=0}^{m-1} \Phi(I'_{1+S_\sigma}, I'_{S_\sigma+k_{\sigma+1}}); \quad (18)$$

$$\Phi(I_\lambda, I_g) = \frac{W_{I_\lambda \rightarrow I_{\lambda+1}} W_{I_{\lambda+1} \rightarrow I_{\lambda+2}} \dots W_{I_g \rightarrow I_\lambda}}{W_{I_\lambda} W_{I_{\lambda+1}} \dots W_{I_g}} \prod_{\xi=\lambda}^g (1 - \delta_{I_\xi I})(1 - \delta_{I_\xi I'}); \quad (19)$$

$$\Theta((I_i); (I'_k)) = \prod_{\sigma=1}^i \prod_{\tau=1}^k (1 - \delta_{I_\sigma I'_\tau}); S_\lambda = \sum_{\alpha=1}^\lambda k_\alpha; W_I = \sum_{I'} W_{I \rightarrow I'}; N = I_{\max} + 1;$$

$$S_m \leq N - i - 2; m = E[(N - i - 2)/2], k_1 \geq k_2 \geq k_3 \geq \dots \geq k_m.$$

Для определения абсолютных значений населенностей нужно воспользоваться условием нормировки.

Из суммы по I_1, I_2, \dots, I_i в (17) исключены все члены, которые соответствуют хотя бы паре равных индексов суммирования. Функции $\tilde{W}_{I \rightarrow I'}$ получаются из (17) путем замены $I \rightleftharpoons I'$. Из формул (17)–(19), в частности, следует, что при $I_{\max} = 1$ (двухуровневая система) $\tilde{W}_{I' \rightarrow I} = W_{I' \rightarrow I}$, при $I_{\max} = 2$ (трехуровневая система)

$$\tilde{W}_{I' \rightarrow I} = W_{I' \rightarrow I} + (W_{I' \rightarrow I_1} W_{I_1 \rightarrow I} / W_{I_1}), \quad I_1 \neq I, I',$$

при $I_{\max} = 3$ (четырёхуровневая система)

$$\tilde{W}_{I' \rightarrow I} = W_{I' \rightarrow I} + \sum_{I_1} W_{I' \rightarrow I_1} W_{I_1 \rightarrow I} \left[(W_{I_1} - \sum_{I_2} W_{I_1 \rightarrow I_2} W_{I_2 \rightarrow I_1} / W_{I_2}) + \right.$$

$$\left. + \sum_{I_1, I_2} W_{I_1} W_{I_2} W_{I' \rightarrow I_1} W_{I_1 \rightarrow I_2} W_{I_2 \rightarrow I} / (W_{I_1} W_{I_2} - W_{I_1 \rightarrow I_2} W_{I_2 \rightarrow I_1})^2, \quad I_1, I_2 \neq I, I', I_1 \neq I_2, \right.$$

и т. д.

Из уравнений баланса могут быть легко получены асимптотические решения при малых концентрациях газа, когда $N \rightarrow 0$, так что

$$C_{I' \rightarrow I} / R_{I' \rightarrow I} \ll 1. \quad (20)$$

Для этого перепишем уравнение (1) в форме

$$W_I = \sum_{I'} W_{I' \rightarrow I} n_{I'} / n_I, \quad (21)$$

или

$$\frac{n_{I+1}}{n_I} + \frac{n_{I-1}}{n_I} \cdot \frac{R_{I-1 \rightarrow I}}{R_{I+1 \rightarrow I}} = \frac{W_I}{R_{I+1 \rightarrow I}} - \sum_{I'} \frac{n_{I'}}{n_I} \cdot \frac{C_{I' \rightarrow I}}{R_{I+1 \rightarrow I}}. \quad (22)$$

Если теперь под знаком суммы воспользоваться малостью члена $C_{I' \rightarrow I} / R_{I+1 \rightarrow I}$ и в качестве первого приближения для $n_{I'} / n_I$ подставить величину

$$\frac{n_{I'}^0}{n_I^0} = \frac{2I' + 1}{2I + 1} \exp\left(\frac{-E_{I'} + E_I}{kT_R}\right), \quad (23)$$

то, раскрывая W_I , можно получить рекуррентное соотношение

$$\begin{aligned} \frac{n_{I+1}}{n_I} = & \frac{2I + 3}{2I + 1} \exp\left(-\frac{h\nu_{I+1, I}}{kT_R}\right) \left\{ 1 + \frac{R_{I \rightarrow I-1}}{R_{I \rightarrow I+1}} \left[1 - \frac{n_{I-1}}{n_I} \frac{2I + 1}{2I - 1} \exp\left(-\frac{h\nu_{I, I-1}}{kT_R}\right) \right] + \right. \\ & \left. + \sum_{I'} \frac{C_{I \rightarrow I'}}{R_{I \rightarrow I+1}} \left[1 - \exp\left(\frac{E_{I'} - E_I}{k} \left(\frac{1}{T_K} - \frac{1}{T_R}\right)\right) \right] \right\}. \quad (24) \end{aligned}$$

При $I = 0$ отсюда получаем

$$\frac{n_1}{n_0} \approx 3 \exp\left(-\frac{h\nu_{10}}{kT_R}\right) \left\{ 1 + \sum_{I'} \frac{C_{0 \rightarrow I'}}{R_{0 \rightarrow 1}} \left[1 - \exp\left(\frac{E_{I'} - E_0}{k} \left(\frac{1}{T_K} - \frac{1}{T_R}\right)\right) \right] \right\}. \quad (25)$$

Подставляя полученное выражение во второе слагаемое в фигурных скобках (24), при $I = 1$ получаем:

$$\begin{aligned} \frac{n_2}{n_1} = & \frac{5}{3} \exp\left(-\frac{h\nu_{21}}{kT_R}\right) \left\{ 1 + \frac{R_{1 \rightarrow 0}}{R_{1 \rightarrow 2}} \sum_{I'} \frac{C_{0 \rightarrow I'}}{R_{0 \rightarrow 1}} \left[1 - \exp\left(\frac{E_{I'} - E_0}{k} \left(\frac{1}{T_K} - \frac{1}{T_R}\right)\right) \right] + \right. \\ & \left. + \sum_{I'} \frac{C_{1 \rightarrow I'}}{R_{1 \rightarrow 2}} \left[1 - \exp\left(\frac{E_{I'} - E_1}{k} \left(\frac{1}{T_K} - \frac{1}{T_R}\right)\right) \right] \right\}. \quad (26) \end{aligned}$$

Продолжая этот процесс последовательно для всех I , можно получить все асимптотические решения для отношений населенностей соседних уровней при малых концентрациях газа.

Аналогичные соотношения можно получить для температур возбуждения. В частности, имеет место рекуррентное соотношение

$$\begin{aligned} T_{\text{ex}}(I + 1, I) = \\ = T_R \left\{ 1 - \frac{kT_R}{h\nu_{I+1, I}} \ln \left[1 + \frac{R_{I \rightarrow I-1}}{R_{I \rightarrow I+1}} \left[1 - \exp\left[\frac{h\nu_{I, I-1}}{k} \left(\frac{1}{T_{\text{ex}}(I, I-1)} - \frac{1}{T_R}\right)\right] + \zeta_I \right] \right] \right\}^{-1}, \quad (27) \end{aligned}$$

где

$$\zeta_I = \sum_{I'} \frac{C_{I \rightarrow I'}}{R_{I \rightarrow I+1}} \left[1 - \exp\left(\frac{E_{I'} - E_I}{k} \left(\frac{1}{T_K} - \frac{1}{T_R}\right)\right) \right]. \quad (28)$$

Отсюда получаем:

$$T_{\text{ex}}(1, 0) \approx \frac{T_R}{1 - \frac{kT_R}{h\nu_{10}} \ln(1 + \zeta_0)} \approx T_R \left(1 + \frac{kT_R}{h\nu_{10}} \zeta_0 \right) \quad (29)$$

и т. д.

Ниже расчет населенностей вращательных уровней CO, CS и SiO проведен для случая малой оптической толщины, когда собственное молекулярное излучение не влияет существенно на радиационную температуру, а внешняя подсветка от мощных ИК и радиоисточников в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах отсутствуют. В таких облаках межзвездного газа поле излучения определяется реликтовым фоном, а радиационные температуры во всех линиях одинаковы и равны $T_R = 2.7^\circ \text{K}$.

Для описания столкновительных вероятностей вращательных переходов использовалось выражение [6], представляющее собой аппроксимацию численных данных для CO, рассчитанных методом сильной связи [7],

$$C_{I \rightarrow I'} = N a_{\Delta I} \frac{2I' + 1}{2I + 1} \left(1 + \frac{E_I - E_{I'}}{kT_k} \right) \exp \left[-b_{\Delta I} \left(\frac{E_I - E_{I'}}{kT_k} \right)^{1/2} \right], \quad (30)$$

где $I' < I$, а величины $a_{\Delta I}$ и $b_{\Delta I}$ даны в таблицах работы [6] для различных ΔI . Вероятность $C_{I \rightarrow I'}$ при $I < I'$ может быть получена применением принципа детального равновесия (11) к формуле (30).

Хотя эта формула получена, строго говоря, только для столкновений CO и H_2 (отметим попутно, что в рассматриваемых облаках весь водород находится в молекулярной форме), в пределах погрешности $\leq 10\%$ она может быть также использована и для описания возбуждений при столкно-

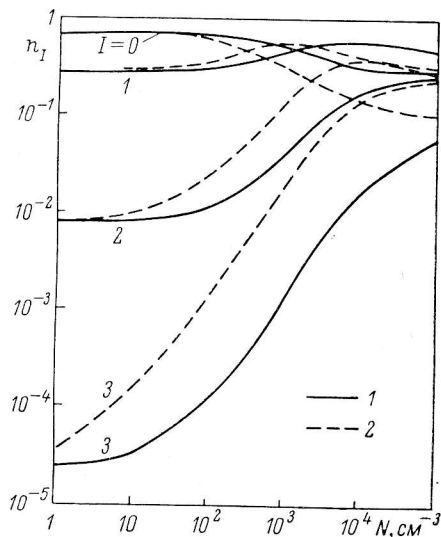


Рис. 1. Населенности вращательных уровней молекулы CO как функции концентрации газа при $T_k=10$ (1) и 30° K (2).

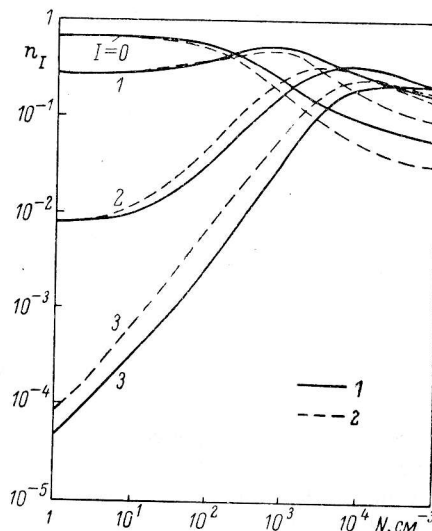


Рис. 2. Населенности вращательных уровней молекулы CO как функции концентрации газа при $T_k=50$ (1) и 100° K (2).

вениях CS и SiO с H_2 , поскольку молекулы CS и SiO являются химическими аналогами CO со сходным строением электронных оболочек.

Радиационные вероятности вращательных переходов были рассчитаны нами в работах [8—10].

При численном исследовании уравнений баланса оказалось, что с погрешностью, не превышающей 3%, для отношений населенностей соседних уровней I_{\max} может быть выбрана равной 10 для CO и CS и 12 для SiO.

На рис. 1—4 приведена часть результатов по расчетам населенностей как функций концентрации газа N при некоторых значениях кинетической температуры. Из этих графиков видно следующее. При малых концентрациях газа роль столкновений незначительна и заселение уровней контролируется в основном радиационными процессами. В этом случае, как следует из формул (24)—(26), отношения населенностей будут соответствовать бoльцмановским величинам при $T_{ex}=T_R=2.7^\circ$ K (левые границы графиков). При повышении концентрации газа роль столкновительных возбуждений возрастает, что приводит к перекачке населенностей с нижних уровней на верхние. Наконец, при очень больших концентрациях устанавливается термодинамическое равновесие при температуре $T=T_k$ (правые границы графиков), так что

$$n_I \approx n_I^* = (2I + 1) \exp(-E_I/kT_K)/z;$$

$$z = \sum_{I=0}^{\infty} (2I + 1) \exp(-E_I/kT_K). \quad (31)$$

Увеличение кинетической температуры приводит к некоторому увеличению вероятностей $C_{I \rightarrow I'}$, что, как видно из графиков, также способствует возрастанию населенностей верхних уровней в том диапазоне значений концентрации, где конкуренция радиационных и столкновительных возбуждений существенна.

Для молекулы CO выход на термодинамическое равновесие осуществляется при значительно меньших плотностях газа, чем для CS и SiO, что является следствием относительной малости радиационных вероятностей.

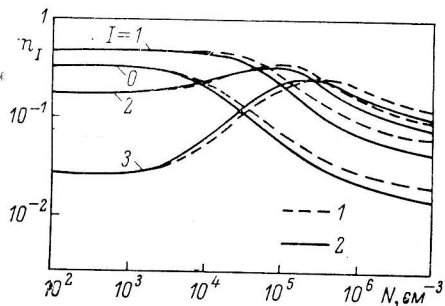


Рис. 3. Зависимость населенностей вращательных уровней CS от концентрации газа.

1 — $T_K=60$; 2 — 100°K .

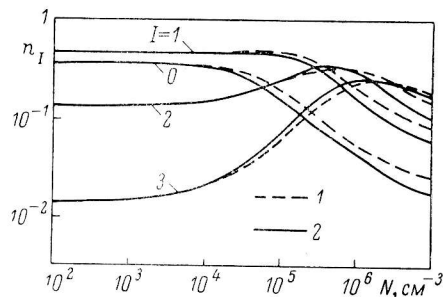


Рис. 4. Зависимость населенностей вращательных уровней SiO от концентрации газа.

1 — $T_K=60$; 2 — 100°K .

Отметим также, что, как показано на графиках, в пределах малых концентраций газа у молекулы CO максимально заселен уровень $I=0$, тогда как у CS и SiO уровень $I=1$. Причиной тому является различие вращательных постоянных B_e рассматриваемых молекул. $B_e=2.78^\circ \text{K}$ максимальна для CO и минимальна ($B_e=1.15^\circ \text{K}$) для SiO. Соответственно и максимум радиационной населенности инвертируется от уровня $I=0$ для CO к уровню $I=1$ для CS и SiO.

Отклонение населенностей уровней от термодинамически равновесных величин принято характеризовать функциями b_I , определяемыми выражениями

$$n_I = b_I n_I^*. \quad (32)$$

Графики b_I представлены на рис. 5—8 для $I=0,1,2,3$. Рассчитанные кривые для всех молекул обладают рядом общих особенностей.

Во-первых, при малых концентрациях величины b_I для нижних из рассматриваемых уровней больше единицы, тогда как для верхних меньше единицы почти во всем интервале температур. То есть нижние уровни перенаселены, тогда как верхние недонаселены. Это объясняется тем, что при малых плотностях газа роль столкновений невелика и верхние уровни быстро деактивируются радиационными переходами на нижние уровни, что приводит к перенаселению последних.

Во-вторых, при больших концентрациях газа все семейство кривых для данной концентрации в целом приближается к ординате $b_I=1$, это происходит потому, что при повышении концентрации населенности стремятся к термодинамически равновесным, а функции b_I — к единице.

Наконец, в-третьих, при достаточно больших концентрациях и температурах, как можно видеть из графиков, внутри семейства b_I , соответству-

ющие верхним уровням, могут быть больше тех же величин для нижних уровней. Такая ситуация осуществляется, например, для SiO при $N = 10^5 \div 10^6 \text{ см}^{-3}$ (рис. 8) в широком интервале температур. С другой стороны, из выражения для отношений населенностей

$$\frac{n_I}{n_{I-1}} = \frac{b_I}{b_{I-1}} \cdot \frac{n_I^*}{n_{I-1}^*} = \frac{b_I}{b_{I-1}} \cdot \frac{2I+1}{2I-1} \exp\left(-\frac{h\nu_{I, I-1}}{kT_K}\right)$$

видно, что при $b_I > b_{I-1}$ может оказаться:

$$\frac{n_I}{n_{I-1}} \cdot \frac{2I-1}{2I+1} > 1. \quad (33)$$

Но это означает перезаселение верхнего уровня I относительно уровня $I-1$, т. е. инверсию населенностей. Температура возбуждения для этой пары уровней должна быть отрицательна.

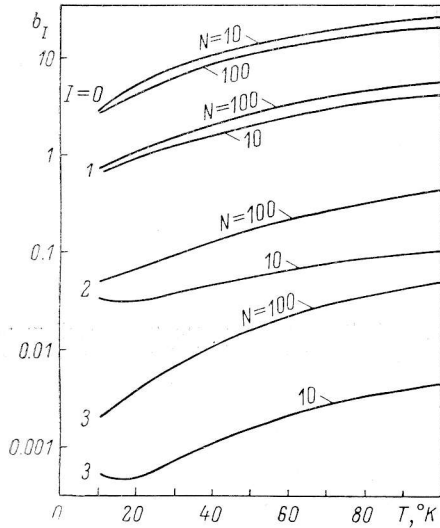


Рис. 5. Функциональные зависимости b_I для CO от кинетической температуры газа при $N=10$ и 100 .

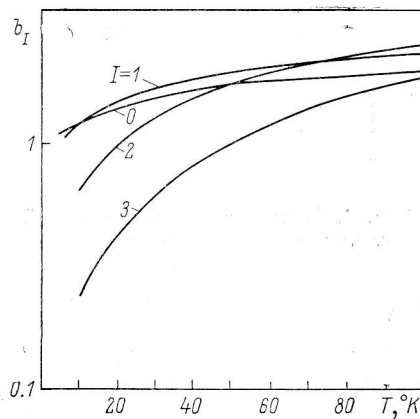


Рис. 6. Функциональные зависимости b_I от T_K для CO при $N=10^4$.

Более детальное обсуждение эффекта инверсии проведено нами в работе [11], где, в частности, определены условия его возникновения.

В заключение раздела отметим, что полные данные по расчетам населенностей уровней $I=0, 1, 2, 3$ молекул CO, CS и SiO удобно представить в виде линий равной величины на диаграмме $N-T_K$. Такое построение осуществлено на рис. 9—20, которые также отражают все особенности в поведении населенностей как функций концентрации и кинетической температуры газа, отмеченные выше.

Расчет интенсивностей оптически тонких линий. Полученные выше данные о населенностях нижних вращательных уровней молекул CO, CS и SiO позволяют рассчитать интенсивности оптически тонких линий этих молекул, соответствующих переходам $I=1 \rightarrow 0, 2 \rightarrow 1$ и $3 \rightarrow 2$. При этом будем рассматривать относительную интенсивность в центре линии, определяемую соотношением

$$\xi_{I'I} = (I_{I'I} - I_{I'I}^*) / I_{I'I}^*, \quad (34)$$

где $I_{I'I}^*$ — интенсивность подсветки, равная в рассматриваемом случае интенсивности чернотельного реликтового излучения

$$I_{I'I}^* = \frac{2h\nu_{I'I}^3}{c^2} \left[\exp\left(\frac{h\nu_{I'I}}{kT_\Phi}\right) - 1 \right]^{-1}; \quad (35)$$

$I_{I'I}$ — интенсивность излучения в центре молекулярной линии, соответствующей переходу $I' \rightarrow I$. Она может быть определена из уравнения переноса излучения:

$$I_{I'I} = I_{I'I}^* \exp \left\{ - \int_0^l k_{I'I'} N_m dz \right\} + \int_0^l \varepsilon_{I'I} N_m \exp \left\{ - \int_z^l k_{I'I'} N_m dz' \right\} dz. \quad (36)$$

В этом выражении N_m — концентрация излучающих молекул; $k_{I'I'}$ и $\varepsilon_{I'I}$ — коэффициенты поглощения и излучения соответственно. Интегрирование ведется вдоль луча зрения, пересекающего облако длины l . Величины $\varepsilon_{I'I}$ и $k_{I'I'}$ определяются формулами

$$\varepsilon_{I'I} = \frac{A_{I' \rightarrow I} n_I n_{I'} h \nu_{I'I}}{4\pi^3 \Delta \nu_D}; \quad (37)$$

$$k_{I'I'} = \frac{h \nu_{I'I}}{c \sqrt{\pi} \Delta \nu_D} n_I \left(1 - \frac{n_{I'} g_I}{n_I g_{I'}} \right) B_{I \rightarrow I'}, \quad (38)$$

в которых $\Delta \nu_D$ — доплеровская полуширина спектральной линии.

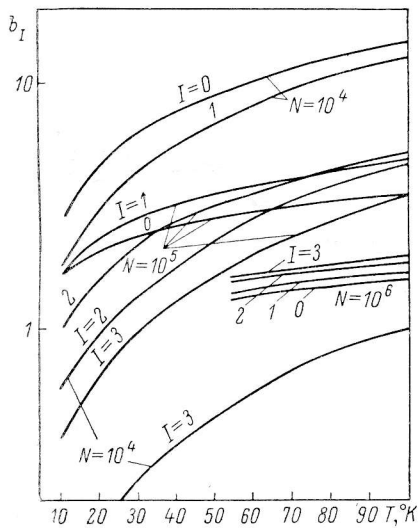


Рис. 7. Зависимость b_I от T_K для нижних вращательных уровней CS.

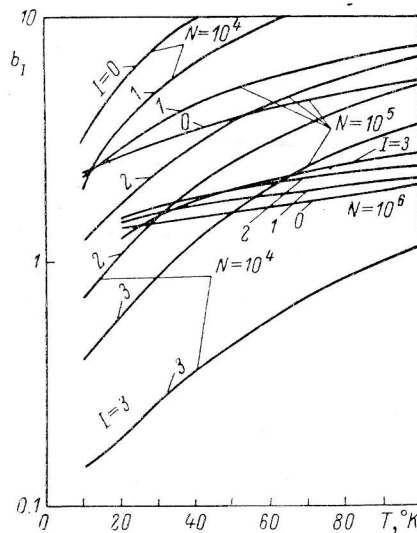


Рис. 8. Зависимость b_I от T_K для нижних вращательных уровней SiO.

Так как рассматриваемые молекулы являются достаточно тяжелыми, их тепловая скорость при $T_K \leq 400^\circ \text{K}$ оказывается гораздо меньше турбулентной, которая и определяет главным образом доплеровскую полуширину линий. Оптическая толщина в линии равна

$$\tau_{I'I'} = \int_0^l k_{I'I'} N_m dz. \quad (39)$$

При $\tau_{I'I'} \ll 1$ относительная интенсивность в линии может быть записана в виде

$$\xi_{I'I} \approx -\tau_{I'I'} + \frac{1}{I_{I'I}^*} \int_0^l \varepsilon_{I'I} N_m dz = \int_0^l \varepsilon_{I'I} \left(\frac{1}{I_{I'I}^*} - \frac{k_{I'I'}}{\varepsilon_{I'I}} \right) N_m dz. \quad (40)$$

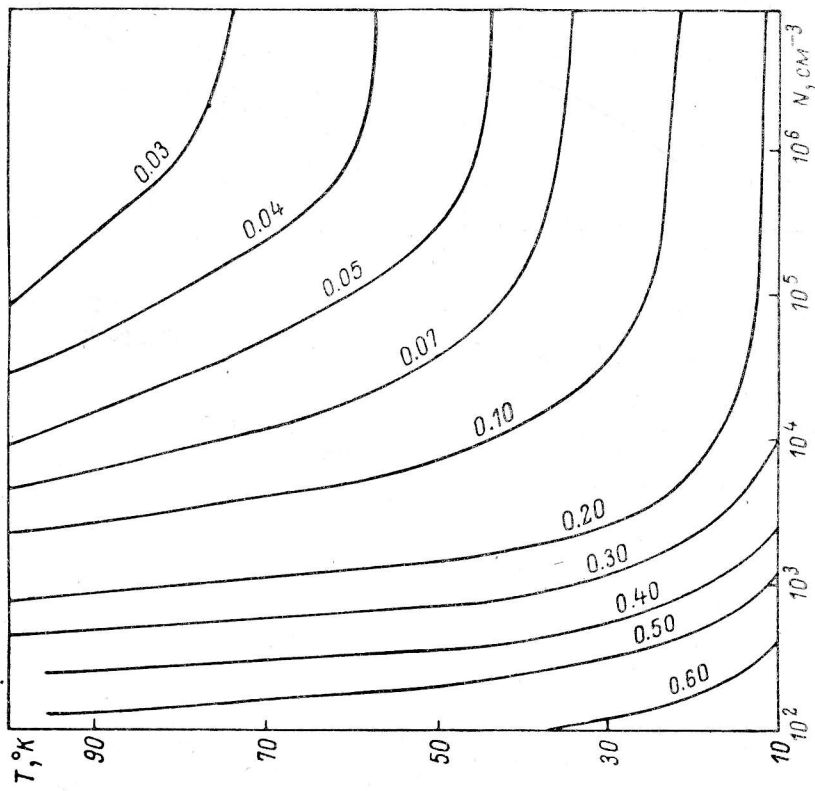


Рис. 9. Диаграмма для n_0 молекулы CO.

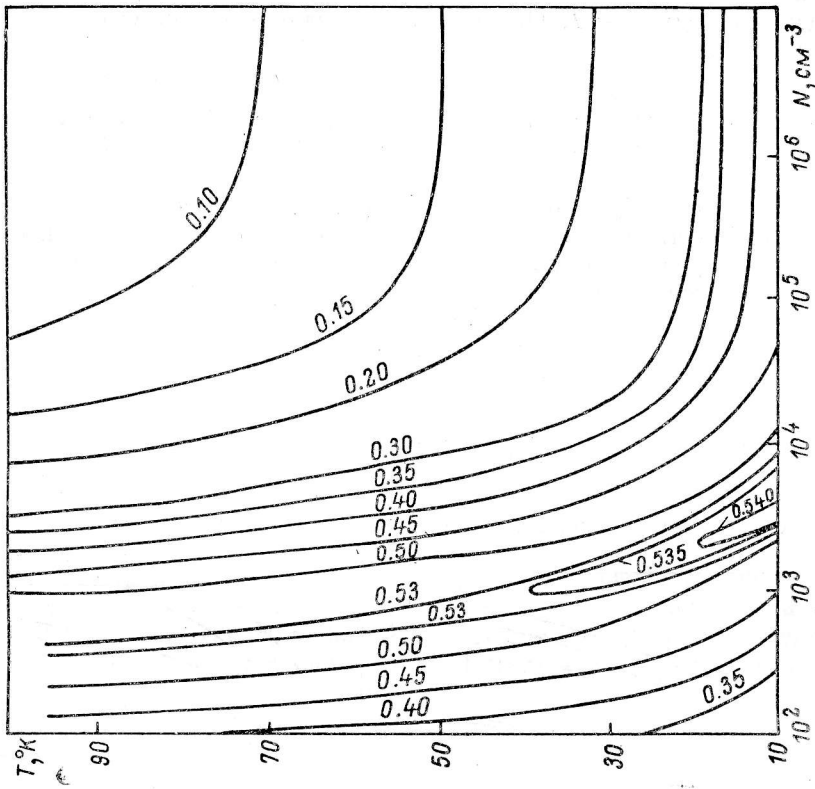


Рис. 10. Диаграмма для n_1 молекулы CO.

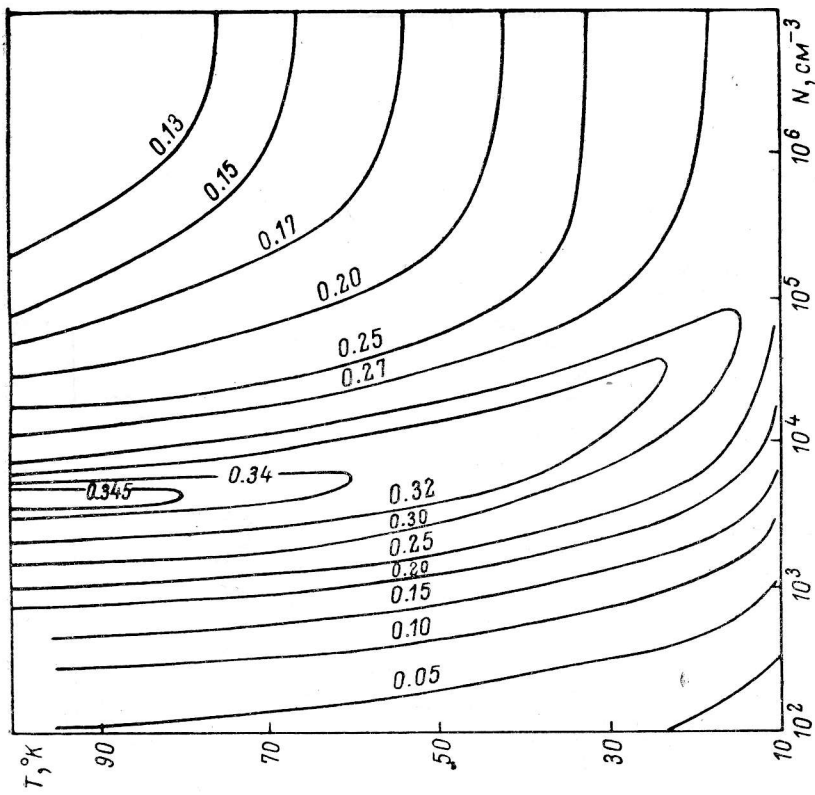


Рис. 11. Диаграмма для ν_2 молекулы CO_2 .

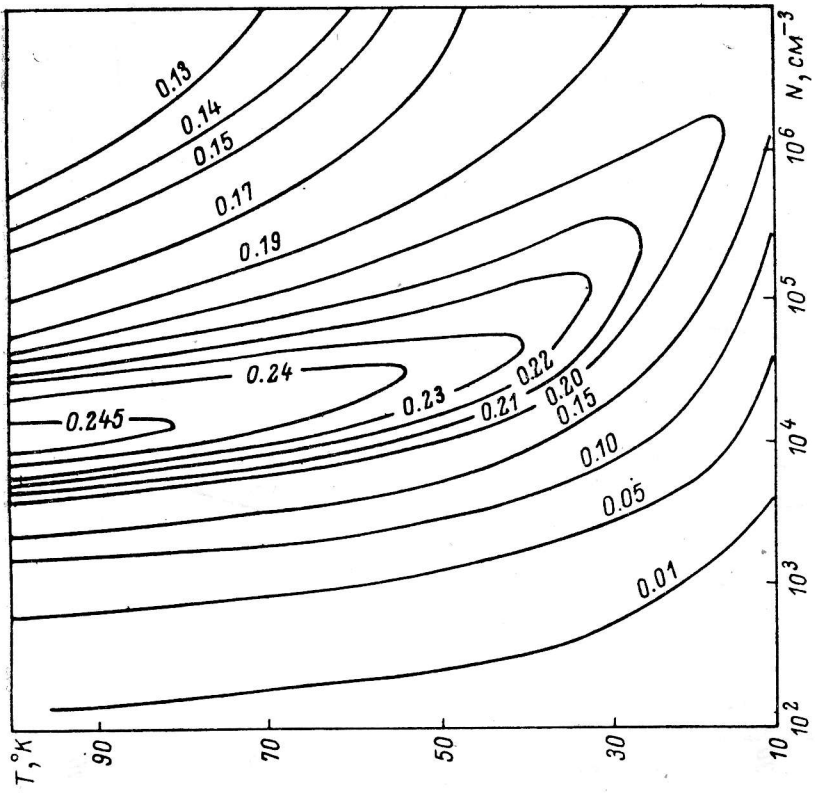


Рис. 12. Диаграмма ν_3 для молекулы CO .

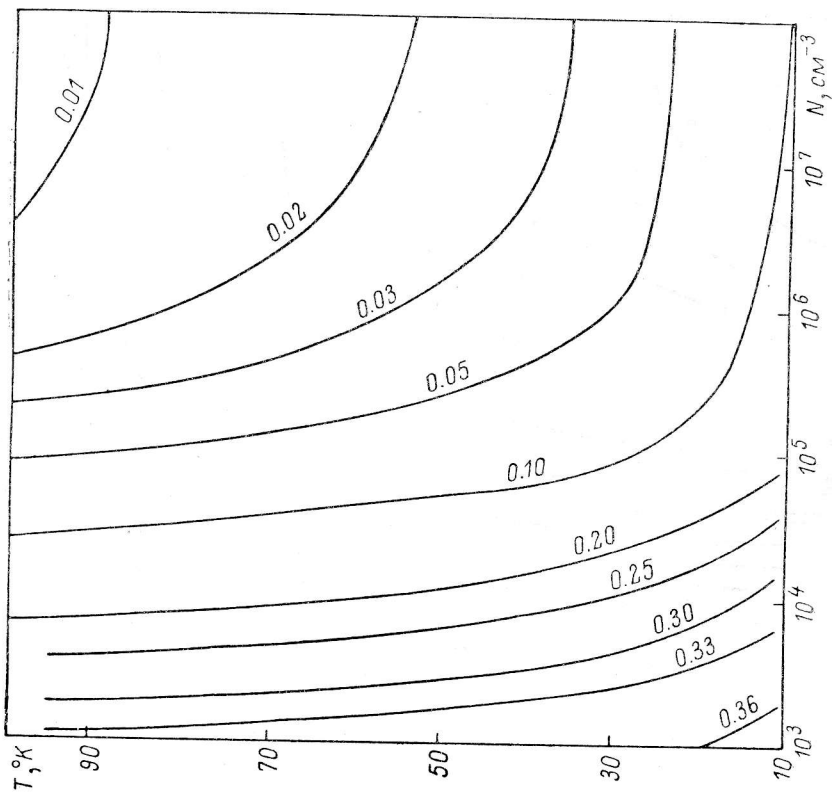


Рис. 13. Диаграмма для n_0 молекулы CS.

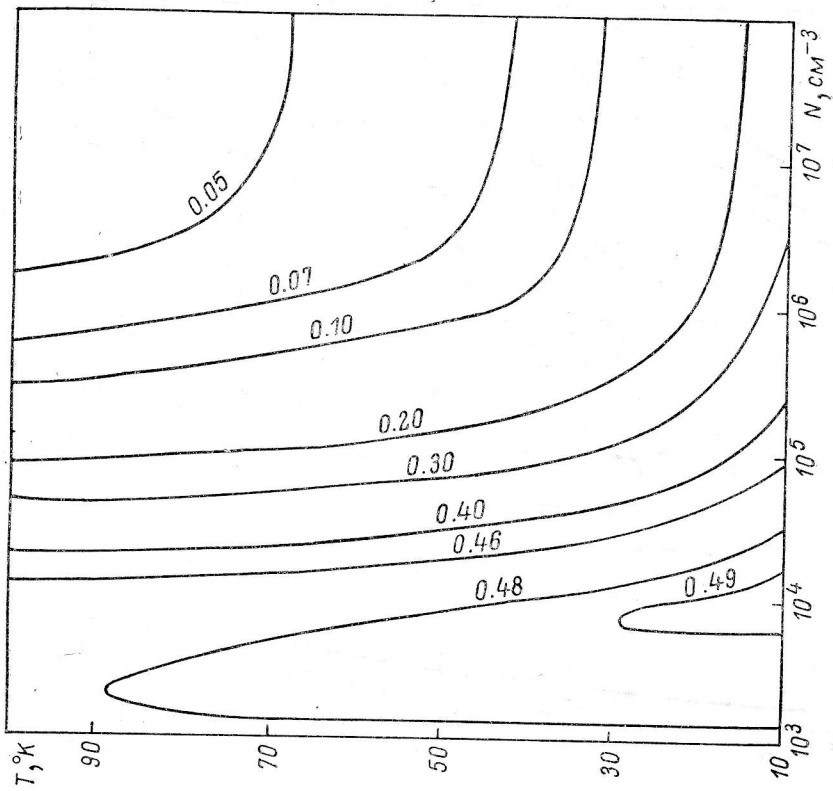


Рис. 14. Диаграмма для n_d молекулы CS.

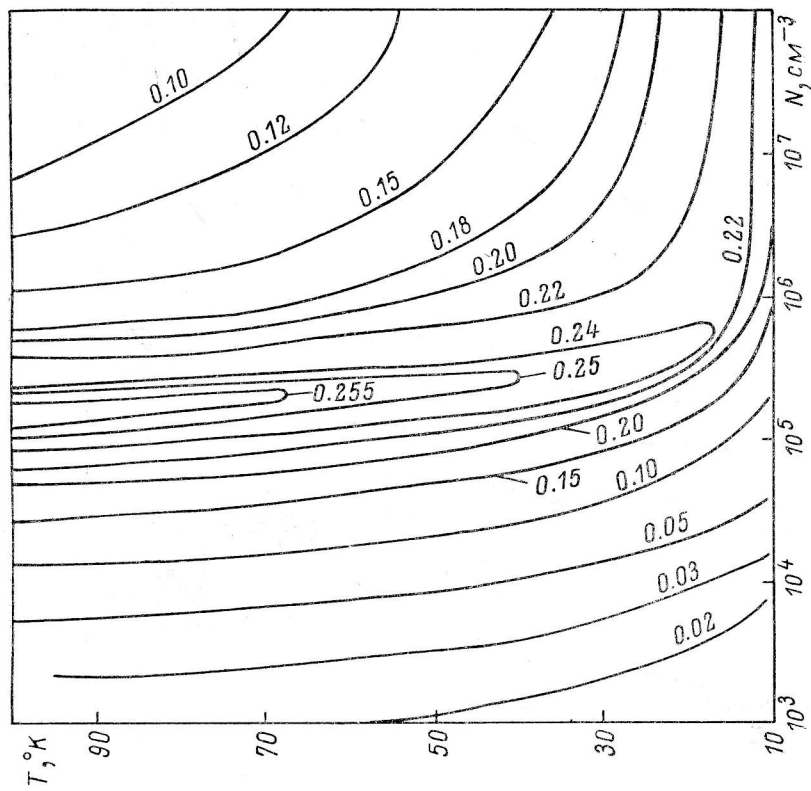


Рис. 16. Диаграмма для n_3 молекулы CS.

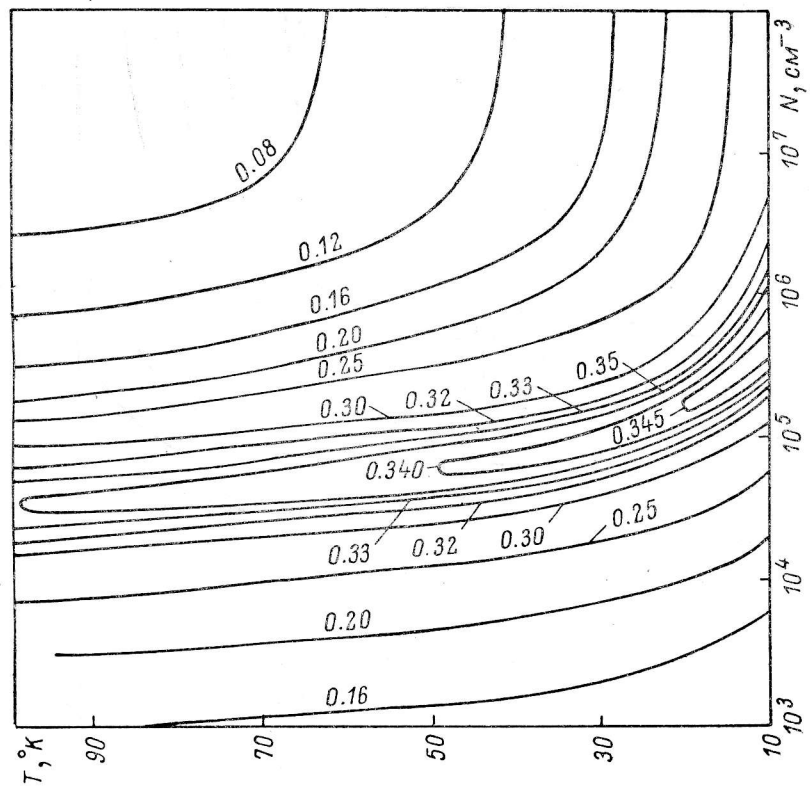


Рис. 15. Диаграмма для n_2 молекулы CS.

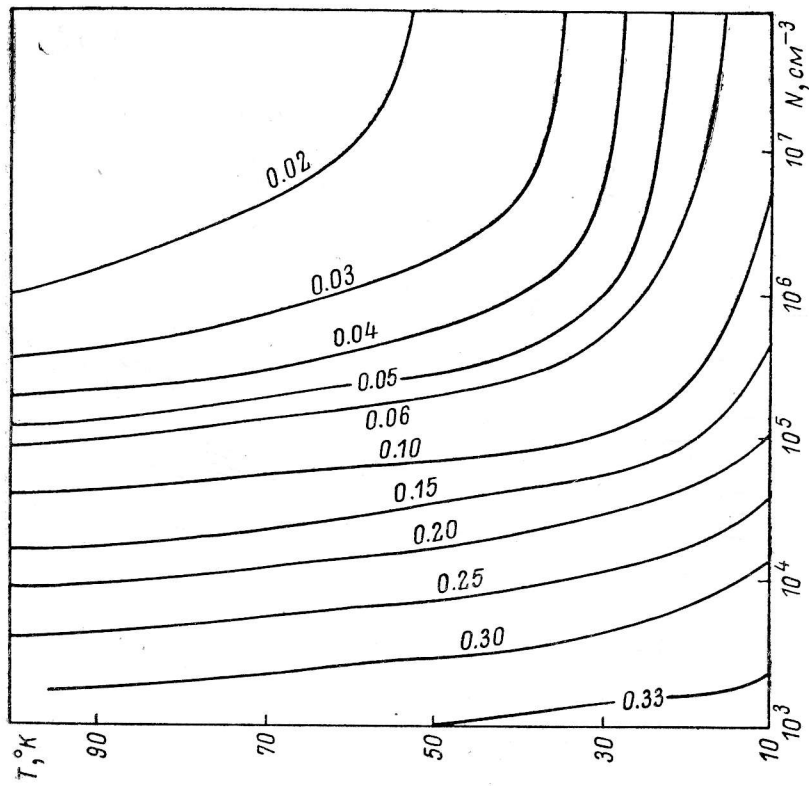


Рис. 17. Диаграмма для n_0 молекулы SiO_2 .

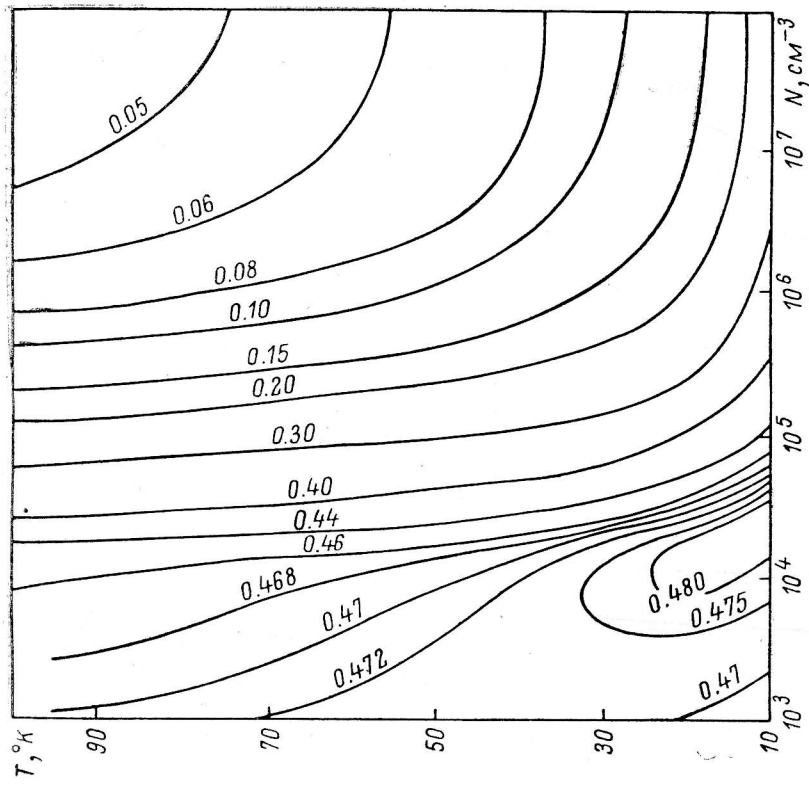


Рис. 18. Диаграмма для n_1 молекулы SiO_2 .

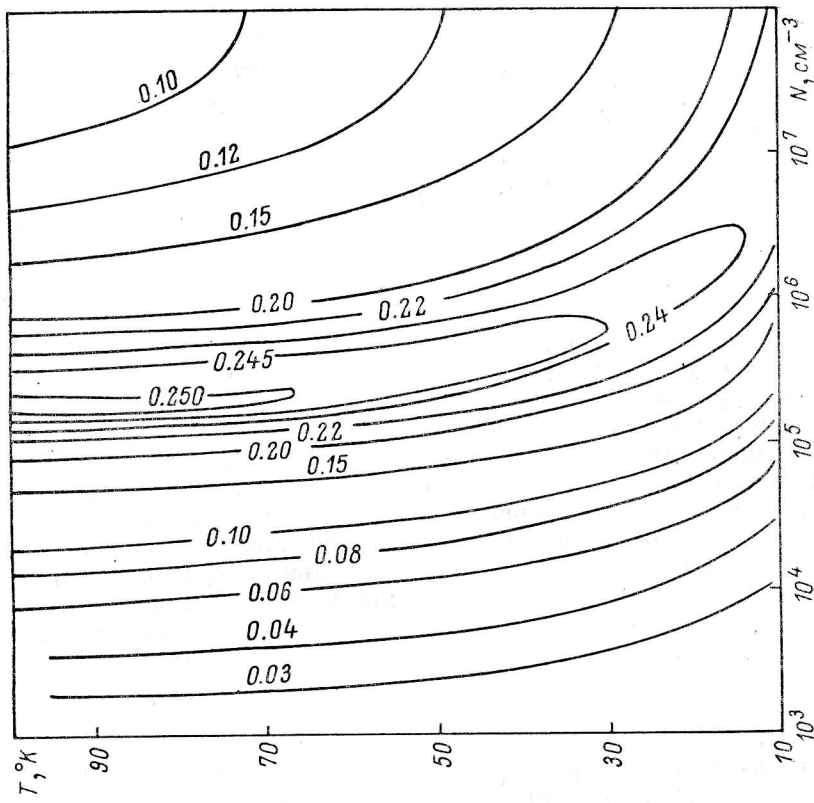


Рис. 20. Диаграмма для n_3 молекулы SiO_2 .

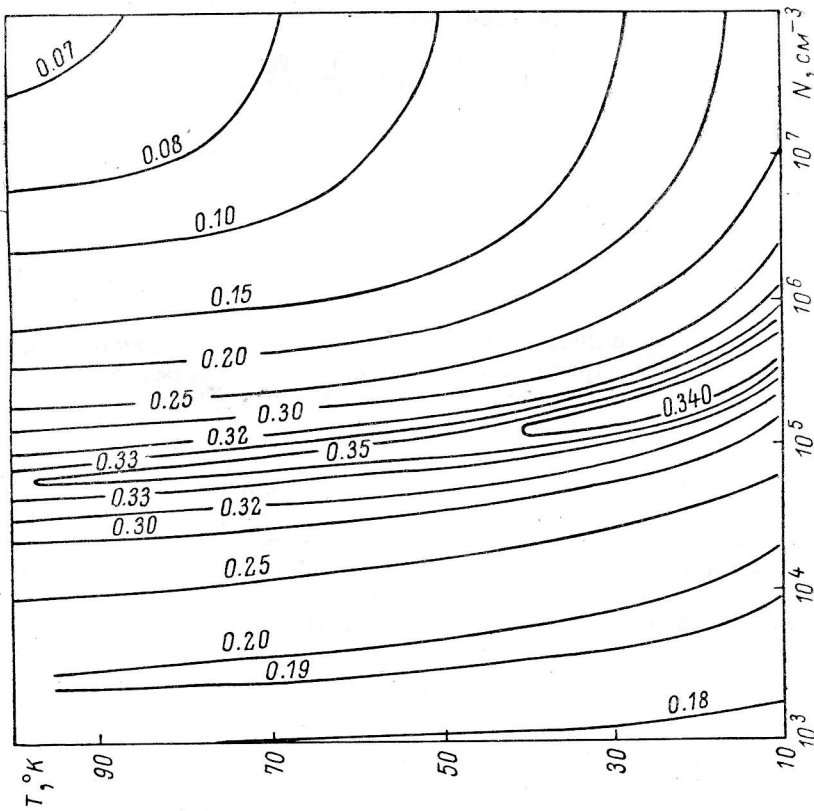


Рис. 19. Диаграмма для n_2 молекулы SiO_2 .

Используя теперь соотношения (35), (37), (38), а также (4) и (8), получаем

$$\begin{aligned} \xi_{I'I} &\approx \frac{1}{8\pi^{3/2}} \frac{A_{I' \rightarrow I}}{\Delta\nu_D} \lambda_{I'I}^2 \int_0^I n_{I'} \left\{ \exp\left(\frac{h\nu_{I'I}}{kT_\Phi}\right) - \exp\left(\frac{h\nu_{I'I}}{kT_{\text{ex}}(I', I)}\right) \right\} N_{\text{м}} dz = \\ &= \frac{1}{8\pi^{3/2}} \frac{A_{I' \rightarrow I}}{\Delta\nu_D} \lambda_{I'I}^2 \int_0^I n_{I'} \left\{ \exp\left(\frac{h\nu_{I'I}}{kT_\Phi}\right) - \frac{(2I' + 1) n_I}{(2I + 1) n_{I'}} \right\} N_{\text{м}} dz. \end{aligned} \quad (41)$$

Из (41) видно, что, во-первых, подынтегральная функция знакопостоянна. Во-вторых, в подынтегральной функции зависимость от z входит в $N_{\text{м}}$ и bn_I и $n_{I'}$, которые определяются концентрацией и кинетической температурой газа, зависящими от z . Причем как $N_{\text{м}}$, так и населенности под интегралом входят линейно.

Следует, однако, отметить, что населенности уровней как функции N и $T_{\text{к}}$ меняются медленнее, чем сами эти аргументы. Чтобы убедиться в этом, достаточно обратиться к рис. 1—4, на которых видно, что при изменении N на три порядка (в наиболее интересной области концентраций $N > 10^2 \text{ см}^{-3}$) населенности нижних вращательных уровней меняются на порядок или полтора порядка. Зависимость n_I от $T_{\text{к}}$ также не очень сильная. Исключение составляют, может быть, только населенности уровней $I=2$ и 3 молекулы CO при низких температурах ($T_{\text{к}} < 40^\circ \text{ K}$), зависимость которых от концентрации и кинетической температуры газа более резкая.

Это значит, что при некоторых условиях наиболее значительным изменением в подынтегральной функции будет подвержен множитель $N_{\text{м}}$, тогда как множитель $an_{I'} - bn_I$, где $a = \exp(h\nu_{I'I}/kT_\Phi)$ и $b = (2I' + 1)/(2I + 1)$, будет изменяться относительно слабо. Рассмотрим эти условия. При этом будем исходить из неравенства

$$\left| \frac{1}{an_{I'} - bn_I} \frac{d}{dz} (an_{I'} - bn_I) \right| \ll \left| \frac{1}{N_{\text{м}}} \frac{dN_{\text{м}}}{dz} \right|, \quad (42)$$

которое формулирует высказанное выше предположение. Учитывая, что $n_I \equiv n_I(N(z), T_{\text{к}}(z))$, получаем:

$$\begin{aligned} &|1/(an_{I'} - bn_I) [(an_{I'} \partial n_{I'}/\partial N - bn_I \partial n_I/\partial N) dN/dz] + \\ &+ (an_{I'} \partial n_{I'}/\partial T_{\text{к}} - bn_I \partial n_I/\partial T_{\text{к}}) dT_{\text{к}}/dz| \ll |(1/N_{\text{м}}) dN_{\text{м}}/dz|. \end{aligned} \quad (43)$$

Если dT/dz невелико, в левой части неравенства основной вклад будет давать первый член в квадратных скобках. Как уже отмечалось выше, значения населенностей изменяются с концентрацией медленнее, чем сама концентрация. Следовательно, если в центральных областях плотных молекулярных облаков, т. е. в областях, которые главным образом ответственны за излучение в оптически тонких линиях, градиенты концентрации dN/dz невелики, неравенство (43) может быть выполнено. С другой стороны, это означает, что множитель $an_{I'} - bn_I$ приближенно может быть вынесен из-под знака интеграла. Этому же способствует то обстоятельство, что члены $n_{I'}$ и n_I входят в разности, а из графиков для населенностей (рис. 1—4) видно, что области возрастания и убывания n_I и $n_{I'}$ в значительной мере перекрываются.

Таким образом, если неравенство (43) выполняется, то

$$\xi_{I'I} = \frac{1}{8\pi^{3/2}} \frac{A_{I' \rightarrow I}}{\Delta\nu_D} \lambda_{I'I}^2 n_{I'} \left\{ \exp\left(\frac{h\nu_{I'I}}{kT_\Phi}\right) - \frac{2I' + 1}{2I + 1} \frac{n_I}{n_{I'}} \right\} N_{\text{м}}, \quad (44)$$

где лучевая плотность N_L определяется интегралом

$$N_L = \int_0^l N_{\mathbf{x}} dz. \quad (45)$$

Относительная интенсивность линии зависит от трех переменных — N , T_{κ} и N_L . Составим отношение величин $\xi_{I'I}$ или $\xi_{I+1,I}$ (поскольку, согласно правилам отбора, $\Delta I = \pm 1$) для двух линий — $I+1 \rightarrow I$ и $I'+1 \rightarrow I'$:

$$\eta_{II'} = \xi_{I+1,I} / \xi_{I'+1,I'} = f_{II'}(N, T_{\kappa}). \quad (46)$$

Поскольку лучевая плотность в этом отношении сокращается, то функция $f_{II'}(N, T_{\kappa})$ зависит только от двух переменных и может быть представлена в виде

$$f_{II'}(N, T_{\kappa}) = \frac{I+1}{I'+1} \exp\left\{\frac{E_{I'} - E_I}{kT_{\Phi}}\right\} \times \\ \times \frac{\exp\left\{\frac{E_{I+1}}{k} \left(\frac{1}{T_{\Phi}} - \frac{1}{T_{\text{ex}}(I+1, 0)}\right)\right\} - \exp\left\{\frac{E_I}{k} \left(\frac{1}{T_{\Phi}} - \frac{1}{T_{\text{ex}}(I, 0)}\right)\right\}}{\exp\left\{\frac{E_{I'+1}}{k} \left(\frac{1}{T_{\Phi}} - \frac{1}{T_{\text{ex}}(I'+1, 0)}\right)\right\} - \exp\left\{\frac{E_{I'}}{k} \left(\frac{1}{T_{\Phi}} - \frac{1}{T_{\text{ex}}(I', 0)}\right)\right\}}. \quad (47)$$

В этой формуле зависимость от N и T_{κ} заключена в температурах возбуждения.

Как было показано выше, при $N \rightarrow 0$ температура возбуждения стремится к T_{Φ} и может быть представлена соотношением

$$T_{\text{ex}}(I, 0) \approx T_{\Phi} (1 + \delta_I), \quad \delta_I \ll 1. \quad (48)$$

В этом случае из (47) получаем

$$f_{II'}(N, T_{\kappa}) \approx \frac{I+1}{I'+1} \cdot \frac{E_{I+1}\delta_{I+1} - E_I\delta_I}{E_{I'+1}\delta_{I'+1} - E_{I'}\delta_{I'}} \exp\left(\frac{E_{I'} - E_I}{kT_{\Phi}}\right). \quad (49)$$

Причем, так как δ_I приблизительно линейна по N , то функция $f_{II'}(N, T_{\kappa})$ слабо зависит от N .

В другом предельном случае, при $N \rightarrow \infty$, температуры возбуждения близки к кинетической температуре газа и могут быть представлены в виде

$$T_{\text{ex}}(I, 0) \approx T_{\kappa} (1 + \gamma_I), \quad \gamma_I \ll 1. \quad (50)$$

Тогда получаем:

$$f_{II'}(N, T_{\kappa}) \approx \frac{I'}{\gamma_{I'}} \cdot \frac{\gamma_I}{I} \cdot \frac{\frac{I+2}{I} \frac{\gamma_{I+1}}{\gamma_I} \exp\left[\frac{h\nu_{I+1,I}}{k} \left(\frac{1}{T_{\Phi}} - \frac{1}{T_{\kappa}}\right)\right] - 1}{\frac{I'+2}{I'} \frac{\gamma_{I'+1}}{\gamma_{I'}} \exp\left[\frac{h\nu_{I'+1,I'}}{k} \left(\frac{1}{T_{\Phi}} - \frac{1}{T_{\kappa}}\right)\right] - 1}. \quad (51)$$

Важность введения функции $f_{II'}(N, T_{\kappa})$ состоит в том, что, с одной стороны, она может быть рассчитана в широком интервале N и T_{κ} , а с другой — определяется наблюдательными данными по относительным интенсивностям двух линий. Знание из наблюдений относительных интенсивностей по трем линиям позволяет получить три различных функции — $f_{I_1I_2}$, $f_{I_1I_3}$ и $f_{I_2I_3}$. При этом две любые из них могут быть использованы для определения двух переменных N и T_{κ} . Для этого необходимо решить алгебраическую систему двух трансцендентных уравнений типа

$$\eta_{I_1I_2} = f_{I_1I_2}(N, T_{\kappa}); \\ \eta_{I_2I_3} = f_{I_2I_3}(N, T_{\kappa}), \quad (52)$$

где левые части определяются из наблюдений.

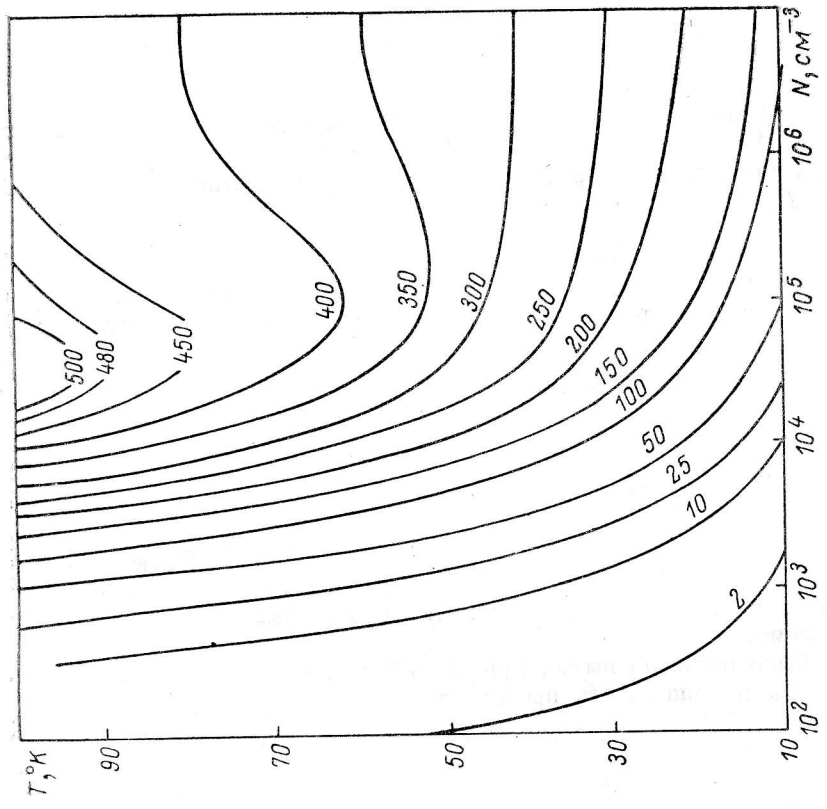


Рис. 22. Рассчитанные отношения интенсивностей γ_{20} для CO.

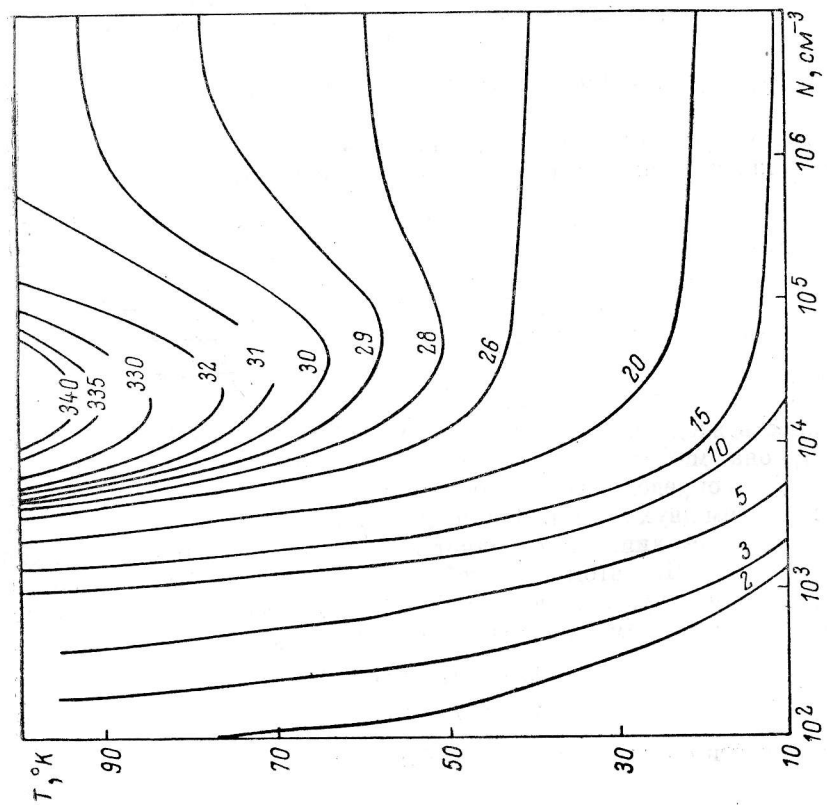


Рис. 21. Рассчитанные отношения интенсивностей γ_{10} для CO.

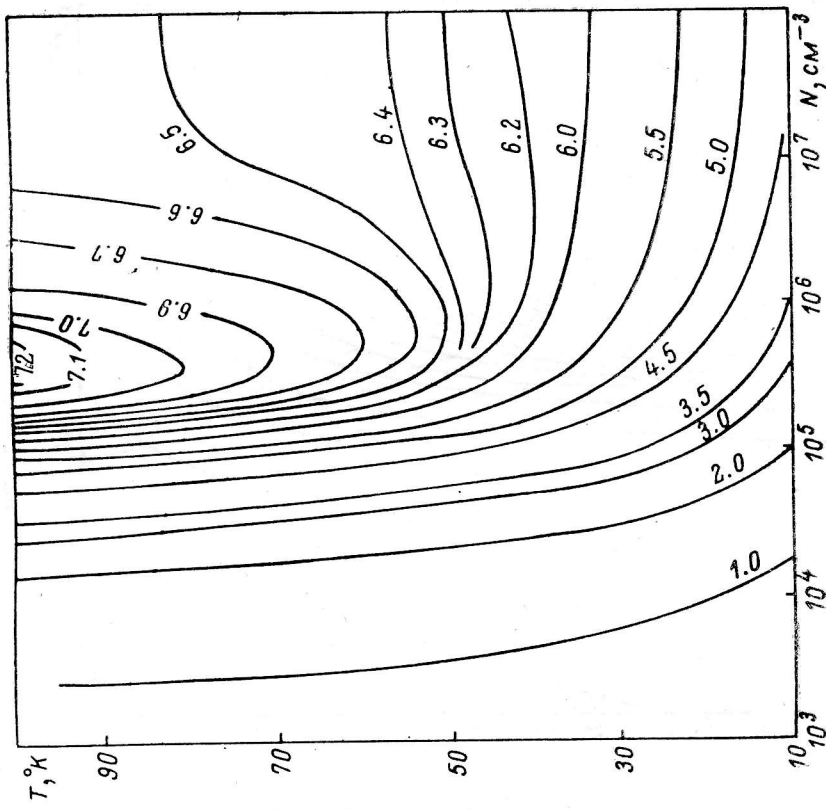


Рис. 24. Рассчитанные отношения интенсивностей γ_{10} для CS.

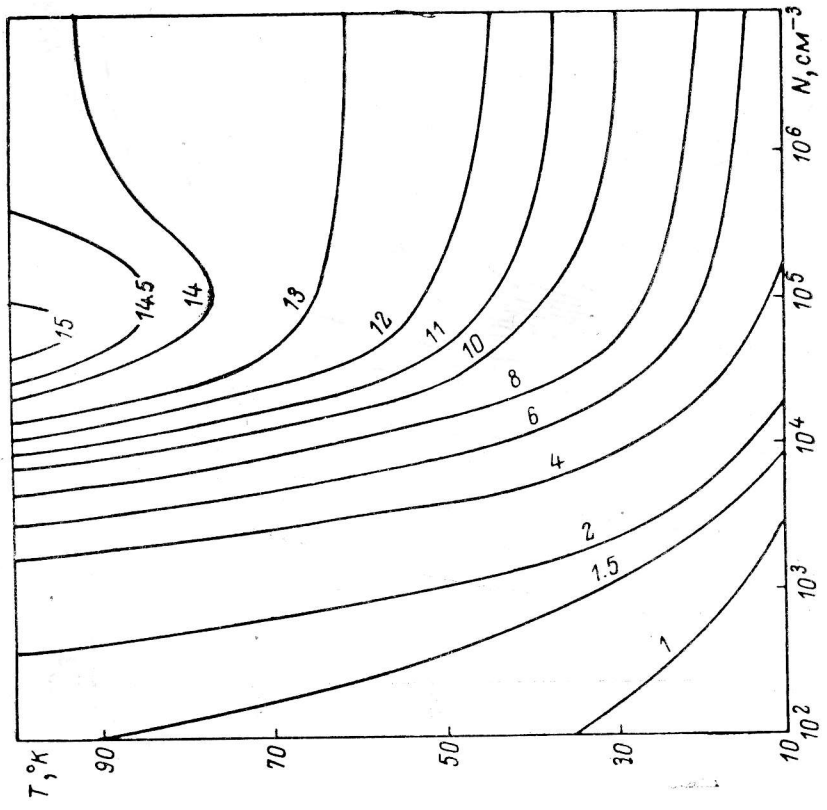


Рис. 23. Рассчитанные отношения интенсивностей γ_{21} для CO.

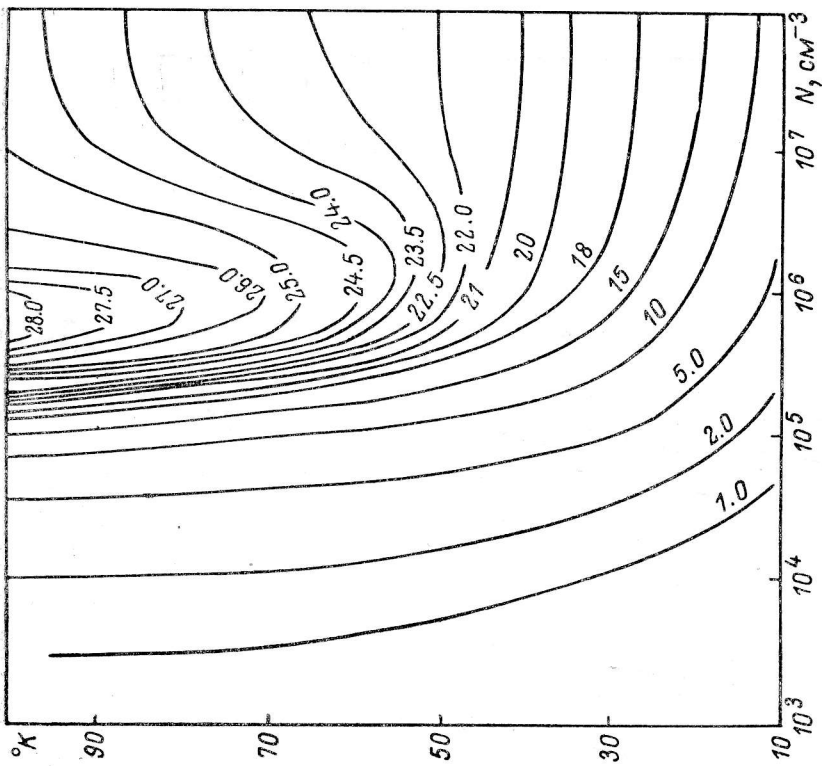


Рис. 25. Рассчитанные отношения интенсивностей η_{30} для CS.

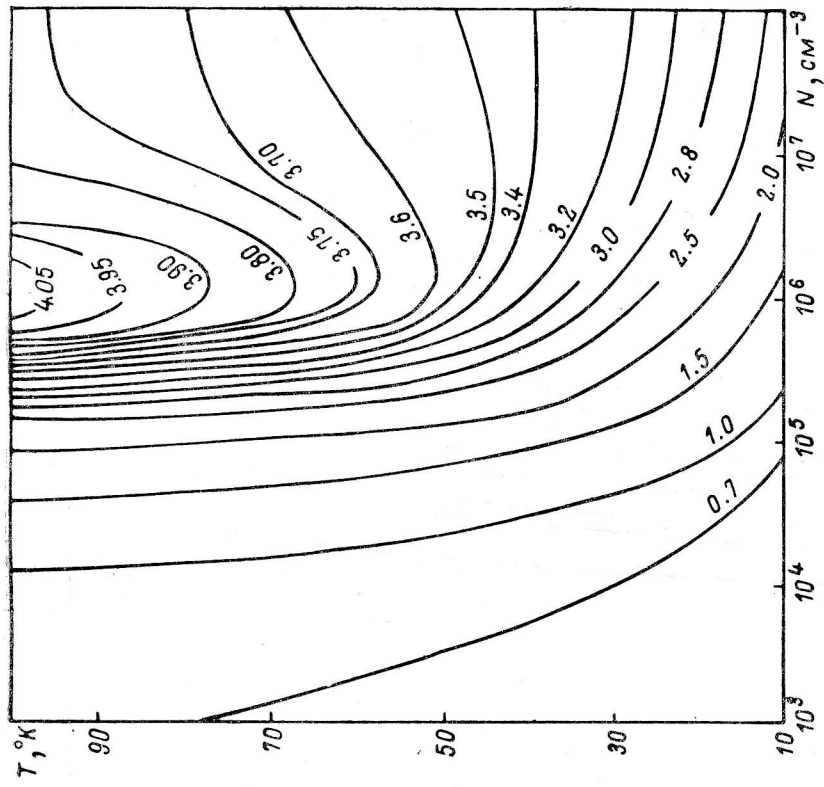


Рис. 26. Рассчитанные отношения интенсивностей η_{21} для CS.

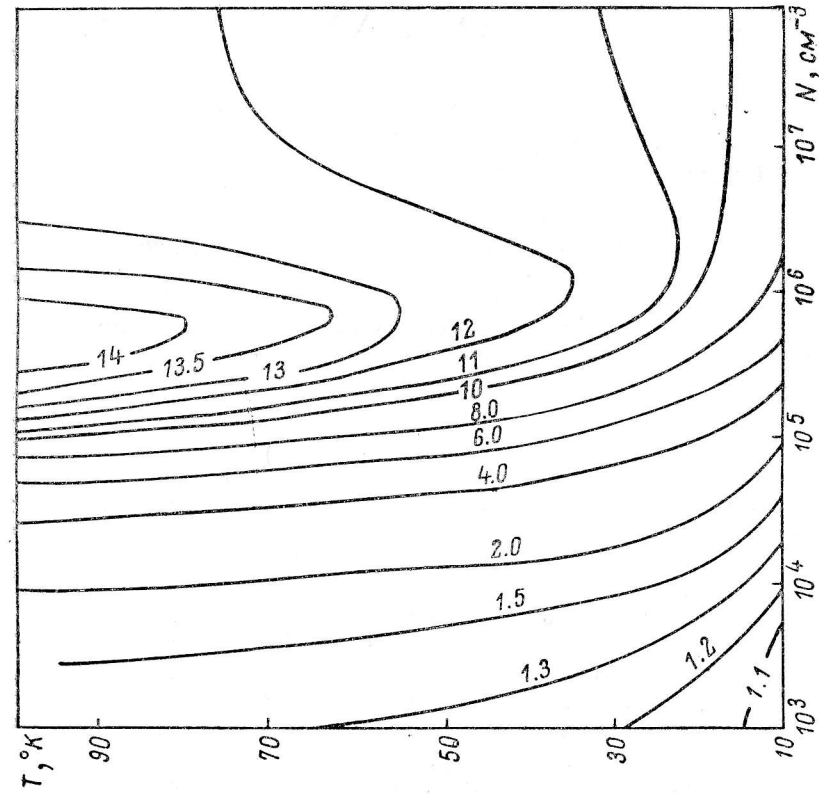


Рис. 27. Рассчитанные отношения интенсивностей η_{20} для SiO .

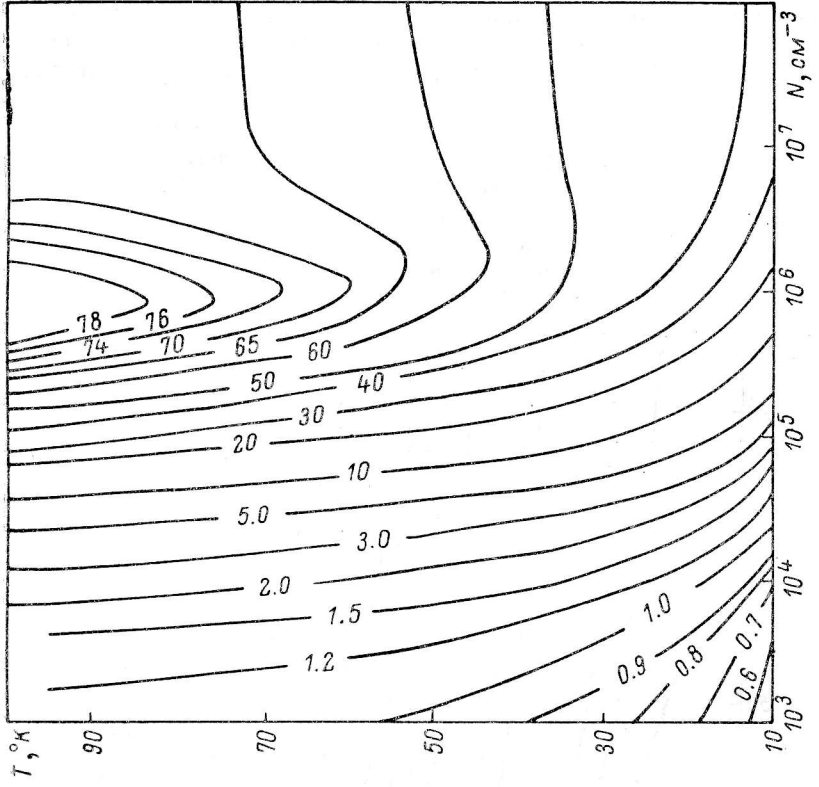


Рис. 28. Рассчитанные отношения интенсивностей η_{20} для SiO .

Этот метод детально обсуждался нами в работе [5]. В частности, там было отмечено, что наиболее удобным методом решения этой системы является графический. Для этого функции f_{II} рассчитываются как поверхности в координатах N , T_k , f_{II} .

Такие поверхности представлены для всех трех молекул на рис. 21—29.

Для определения N и T_k необходимо наложить графики, соответствующие $\eta_{I_1 I_2}$ и $\eta_{I_2 I_3}$ (или любой другой паре величин) и найти точку пересечения линий, соответствующих значениям $\eta_{I_1 I_2}$ и $\eta_{I_2 I_3}$, определенным из наблюдений. Ордината и абсцисса этой точки дадут значения кинетической температуры и плотности газа.

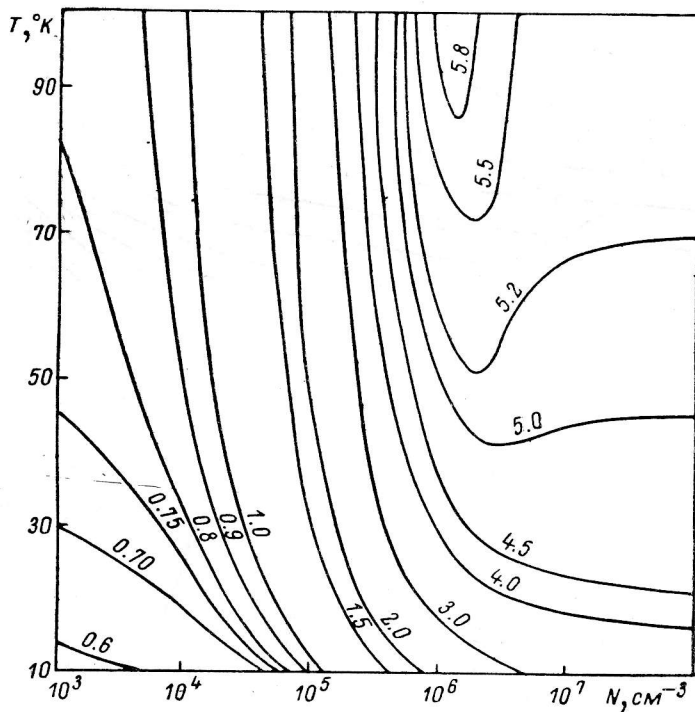


Рис. 29. Рассчитанные отношения интенсивностей η_{21} для SiO.

Если N и T_k определены, то, используя эти величины и одно из наблюдаемых значений ξ_{II} , можно найти лучевую плотность излучающих молекул, так как, согласно (44),

$$N_L = \xi_{II} / \psi, \quad (53)$$

где ψ — множитель, определяемый формулой (44) и зависящий от населенностей. В свою очередь при известных T_k и N населенности легко определяются из рис. 9—20.

Таким образом, расчеты населенностей молекулярных уровней и отношений интенсивностей в совокупности с наблюдательными данными по интенсивностям трех молекулярных линий позволяют определить три важных параметра облаков межзвездного газа, а именно концентрацию и кинетическую температуру газа, а также лучевую плотность наблюдаемых молекул. Если имеются карты пространственного распределения интенсивностей во всех трех линиях, это позволяет построить карты распределения величин N , T_k и N_L . Такая процедура была проделана нами для облаков Орион А и М17. Причем использовались наблюдательные данные, полученные в работе [12] для линий моле-

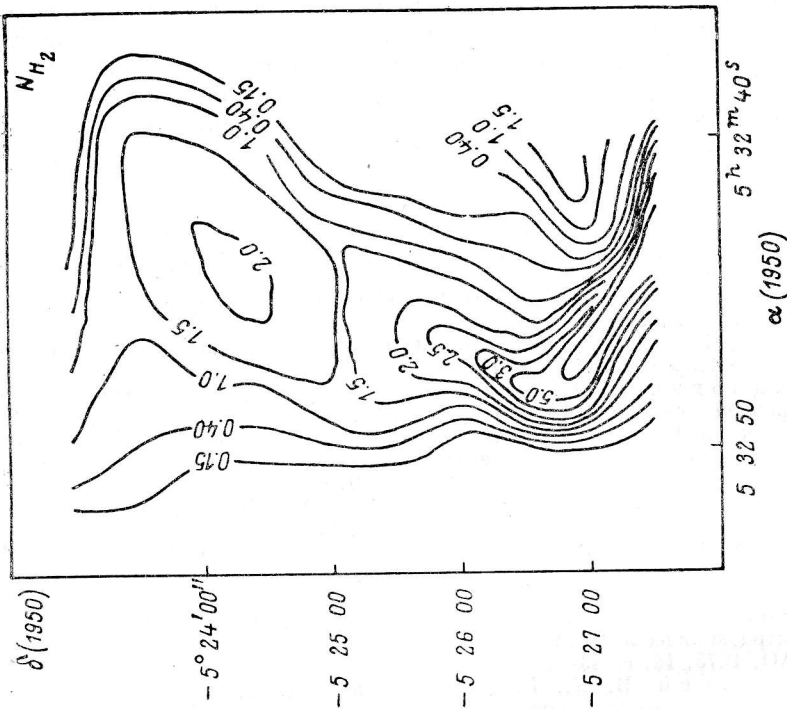


Рис. 31. Распределение лучевой плотности молекулы CS (в 10^{13} см^{-2}).

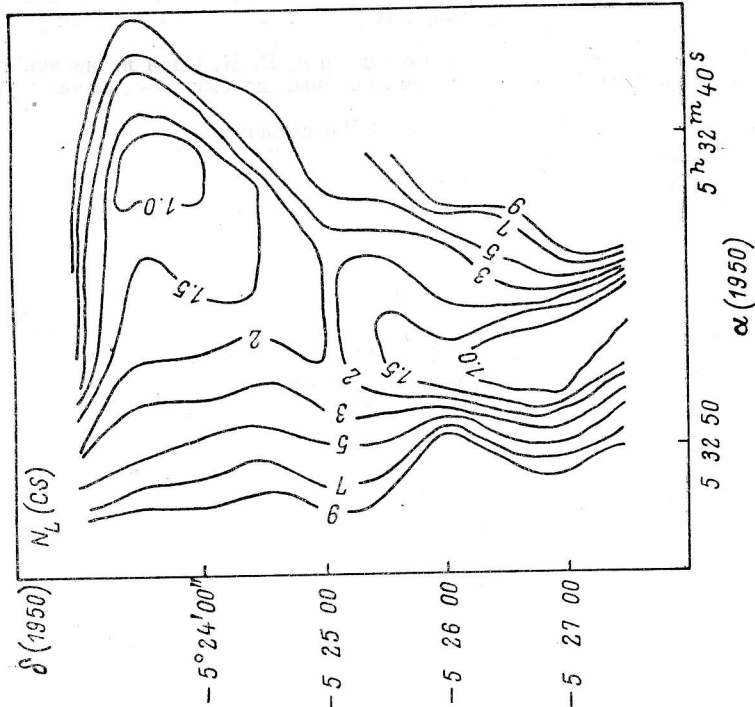


Рис. 30. Распределение концентрации газа в OгI A (в 10^4 см^{-3}).

кулы CS. Приведем здесь для иллюстрации, без какого-либо детального обсуждения, карты распределения концентрации газа и плотности на луче зрения молекул CS в облаке Орион А (рис. 30 и 31).

В заключение следует сказать, что, как упоминалось выше, этот метод применим лишь в тех случаях, когда градиенты плотности газа в центральных частях молекулярных облаков невелики. Однако даже в тех случаях, когда неравенство (43) выполняется не строго, в рамках данной процедуры может быть получена важная исходная информация, необходимая для построения более корректной модели облака.

Список литературы

1. Goldreich P., Kwan J. Molecular clouds. — *Astrophys. J.*, 1974, 189, p. 441—454.
2. Gerola H., Sofia S. The structure of the Orion A molecular cloud. — *Astrophys. J.*, 1975, 196, p. 473—478.
3. Goldsmith P. Collisional excitation of carbon monoxide in interstellar clouds. — *Astrophys. J.*, 1972, 176, p. 597—610.
4. Варшалович Д. А., Херсонский В. К. Населенности вращательных уровней молекул в межзвездной среде. — *Астрон. журн.*, 1979 (печати).
5. Еверская И. Л., Херсонский В. К., Варшалович Д. А. Оценки кинетической температуры и концентрации межзвездного газа по наблюдениям молекулярных линий. — *Астрон. журн.*, 1979 (в печати).
6. De Jong T., Shu S., Dalgarno A. Carbon monoxide in collapsing interstellar clouds. — *Astrophys. J.*, 1975, 199, p. 69.
7. Green S., Taddaeus P. Rotational excitation of CO by collisions with He, H, H₂, under conditions in interstellar clouds. — *Astrophys. J.*, 1976, 205, p. 766—785.
8. Херсонский В. К., Варшалович Д. А. Межзвездные молекулы. I. Спектроскопические характеристики ¹²C¹⁶O, ¹²C¹⁸O, ¹²C¹⁷O, ¹³C¹⁶O. — *Сообщения САО*, 1975, 14, с. 43—58.
9. Херсонский В. К., Варшалович Д. А. Межзвездные молекулы. II. Спектроскопические характеристики ¹²C³²S, ¹²C³³S, ¹²C³⁴S, ¹³C³²S. — *Сообщения САО*, 1975, 14, с. 59—77.
10. Херсонский В. К., Варшалович Д. А. Межзвездные молекулы. III. Спектроскопические характеристики ²⁸Si¹⁶O, ²⁹Si¹⁶O, ³⁰Si¹⁶O. — *Сообщения САО*, 1975, 14, с. 78—96.
11. Варшалович Д. А., Херсонский В. К. Один из механизмов создания инверсной населенности уровней линейных молекул. — *Астрон. журн.*, 1978, 55, с. 328—333.
12. Liszt H. S., Linke R. A. Interstellar carbon monosulfide. — *Astrophys. J.*, 1975, 196, p. 709.