

УДК: 524.5 - 36

НОСИ В МЕЖЗВЕЗДНОЙ СРЕДЕ.

В.К.ХЕРСОНСКИЙ, А.А.ЛИПОВКА

Поступила 5 апреля 1991

Принята к печати 20 мая 1991

В работе рассматриваются спектроскопические характеристики молекулы гипохлорноватистой кислоты в контексте обсуждения возможностей обнаружения этой молекулы в межзвездной среде. Рассчитаны силы линий и вероятности ряда радиативных переходов между нижними вращательными уровнями HOCl . Оценены ожидаемые оптические толщины в межзвездных линиях этой молекулы.

1. Введение. В настоящее время в межзвездной среде обнаружен ряд молекул-галиды металлов, содержащих достаточно редкие элементы Cl и F (NaCl , KCl , AlCl , AlF) [1]. Наблюдение этих молекул является важным методом определения относительного содержания указанных элементов в различных по своим свойствам конденсатах межзвездной среды и, следовательно, методом изучения обмена сравнительно тяжелыми элементами между межзвездной средой и звездами на различных стадиях их эволюции. Упомянутые выше соединения хлора, уже обнаруженные в межзвездной среде, являются солями соляной кислоты. Они наблюдаются в оболочках звезды $\text{IRC}+10216$. Скорее всего [1] они образуются в горячих частях атмосферы при термодинамическом равновесии, а оттуда выбрасываются в холодную оболочку. Таким образом они могут быть использованы для изучения физических условий в протяженной звездной атмосфере (в частности, для изучения скорости потери массы). Относительное содержание молекул критично к температуре, поэтому оно является характеристикой равновесия в атмосфере.

Совсем иные соединения галогенов могут быть обнаружены в сравнительно холодных облаках межзвездного газа. Металлы в таких объектах, по-видимому, заметно истощены на пылинках. Поэтому можно ожидать, что здесь галогены существуют в виде простых химических соединений с водородом, кислородом или другими элементами, не подвергающимися истощению при низких температурах. Простейшим из таких соединений является соляная кислота HCl . Однако вращательная постоянная этой молекулы в основном $x^1\Sigma^-$ электронном состоянии довольно велика: $B=10.44 \text{ см}^{-1} = 313.2 \text{ ГГц}$. Это значит, что даже самый низкочастотный вращательный переход имеет частоту

$\nu \approx 626$ ГГц и длину волны $\lambda \approx 480 \mu\text{m}$, то есть попадает в область спектра, неудобную для наблюдений современными радиотелескопами. Переходы между уровнями сверхтонкой структуры (ядро ^{35}Cl имеет спин $I = 3/2$) одного и того же вращательного состояния разрешены лишь в магнитном дипольном приближении, то есть их интенсивности ничтожно малы. Поэтому при поисках галогенов в межзвездных облаках могут оказаться удобными другие молекулы, содержащие такие широко распространенные элементы, как, например, углерод или кислород. Такие молекулы, являясь более массивными, имеют вращательные спектры, попадающие в сантиметровый или миллиметровый диапазоны, то есть могут наблюдаться с помощью хорошо развитых чувствительных методов современной радиоастрономической спектроскопии. Одной из таких молекул является молекула гипохлорноватистой кислоты, HClO . Микроволновый и миллиметровый спектры этой молекулы были исследованы в работе [2].

Цель данной работы состоит в расчете сил линий и вероятностей вращательных переходов между нижними вращательными уровнями $J \leq 5$ и оценке ожидаемых оптических толщин в линиях этой молекулы при условиях, характерных для облаков межзвездного газа.

2. *Силы линий и вероятности вращательных переходов HClO .* Молекула HClO относится к типу слегка асимметричных ротаторов. Ее спектроскопические характеристики были определены в [1] путем сшивания наблюдаемых спектров с теоретическими выражениями для частот переходов. Эти характеристики перечислены в табл.1 для двух изотопических модификаций $\text{H}^{16}\text{O}^{35}\text{Cl}$ и $\text{H}^{16}\text{O}^{37}\text{Cl}$. Они включают в себя вращательные постоянные A , B , C , постоянные центробежного растяжения различных порядков D_J , D_{Jk} , D_k , d_1 , d_2 , H_J , H_{Jk} , H_{kJ} , H_k , L_k и постоянные, определяющие сверхтонкие расщепления, χ_{aa} , χ_{bb} , χ_{cc} , c_{bb} . В эту таблицу включены также значения проекций электрического дипольного момента молекулы на главные оси инерции a , b , c : μ_a и μ_b ($\mu_c = 0$). Параметр асимметрии молекулы $\epsilon = (b - c)(a - c) = 6.53 \cdot 10^{-4}$. Таким образом, молекула HOC близка к вытянутому симметричному ротатору. Каждое вращательное квантовое состояние этой молекулы характеризуется тремя квантовыми числами: вращательным моментом J , проекцией моментов на ось предельно вытянутого симметричного ротатора k_{-1} (проекция момента на ось инерции a) и проекцией момента на ось предельно сплюснутого симметричного ротатора k_1 (проекция момента на ось инерции c). Четность вращательного состояния определяется проекцией k_1 ; $\pi = (-1)^{k_1}$.

При учете сверхтонких расщеплений состояния молекулы характеризуются величиной полного углового момента F . Эта величина определяется в соответствии с правилами сложения моментов в квантовой механике и может принимать полуцелые значения $F = |J - I|$, $|J - I| + 1, \dots, |J + I|$, где $I = 3/2$ — спин ядра ^{35}Cl или ^{37}Cl .

Вероятность электрического дипольного вращательного перехода между состояниями $(J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F)$ можно представить в виде

$$A(J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F) = \frac{64 \pi^4}{3 h c^3} \nu^3 (J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F) \frac{S(J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F)}{2 F' + 1}, \quad (1)$$

где ν - частота перехода, а $S(J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F)$ - сила линии вращательного перехода с учетом сверхтонкой структуры.

$$S(J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F) = (2 F' + 1) (2 F + 1) \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} I & J & F \\ 1 & F' & J' \end{matrix} \right\}^2 S(J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F). \quad (2)$$

Здесь $\left\{ \begin{matrix} I & J & F \\ 1 & F' & J' \end{matrix} \right\} - 6j$ - символ (свойства $6j$ -символов обсуждаются в [3]), $S(J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F)$ - сила линии вращательного перехода без учета сверхтонкой структуры или при $\mu=0$. Если нас интересуют чисто вращательные переходы, то сила линии определяется как

$$\sum_{F F'} S(J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F) = \\ = S(J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F), \quad (3)$$

а вероятность перехода

$$A(J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F) = \sum_{F F'} A(J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F) = \\ = \frac{64 \pi^4}{3 h c^3} \nu^3 (J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F) \times \\ \times \frac{S(J' K'_{-1} K'_1 F' \rightarrow J K_{-1} K_1 F)}{(2 J' + 1)}. \quad (4)$$

При этом учтено, что для перехода между различными вращательными состояниями частота перехода определяется главным образом энергиями вращательных уровней и слабо зависит от сверхтонких расщеплений (см. соотношение соответствующих констант в табл. 1).

Таблица 1

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДЛЯ ДВУХ
ИЗОТОПИЧЕСКИХ МОДИФИКАЦИЙ МОЛЕКУЛЫ
ГИПОХЛОРНОВАТИСТОЙ КИСЛОТЫ *

	$\text{H } ^{16}\text{O } ^{35}\text{Cl}$	$\text{H } ^{16}\text{O } ^{37}\text{Cl}$
A	$0.613483882 \cdot 10^6$	$0.613461473 \cdot 10^6$
B	$0.151167899 \cdot 10^5$	$0.148504414 \cdot 10^5$
C	$0.147257769 \cdot 10^5$	$0.144728950 \cdot 10^5$
D _J	$0.268885 \cdot 10^2$	$0.259726 \cdot 10^2$
D _{JK}	$0.125142 \cdot 10^4$	$0.121581 \cdot 10^4$
D _K	$0.1301989 \cdot 10^6$	$0.1302897 \cdot 10^6$
d ₁	-0.63516	-0.59999
d ₂	$-0.5612 \cdot 10^{-1}$	$-0.4749 \cdot 10^{-1}$
H _J	$-0.236 \cdot 10^{-4}$	$-0.185 \cdot 10^{-4}$
H _{JK}	$-0.416 \cdot 10^{-2}$	$-0.9 \cdot 10^{-3}$
H _{KJ}	0.761	0.660
H _K	$0.1249 \cdot 10^3$	$0.1284 \cdot 10^3$
L _K	0.169	0.193
X _{aa}	$-0.121958 \cdot 10^3$	$-0.96233 \cdot 10^2$
X _{bb}	$0.59519 \cdot 10^2$	$0.47002 \cdot 10^2$
X _{cc}	$0.62439 \cdot 10^2$	$0.49231 \cdot 10^2$
c _{bb}	$-0.19 \cdot 10^{-1}$	$-0.15 \cdot 10^{-1}$
μ _a	0.3627	
μ _b	$0.1471 \cdot 10^1$	

* Данные взяты из работы [2]

Методами квантовой механики можно показать, что сила линии чисто вращательного перехода может быть представлена в виде [4]

$$S(J' K' -1 K' \rightarrow J K -1 K) = (1 - \pi \pi') (2J + 1) (2J' + 1) \times \\ \times \left[\frac{1}{2} \mu_a^2 F_0^2 (J' K' -1 K' \rightarrow J K -1 K) + \right.$$

$$+ \mu \frac{1}{2} F_1^2 (J' K'_{-1} K'_1 \rightarrow J K_{-1} K_1)]. \quad (5)$$

Величины $F_\lambda (J' K'_{-1} K'_1 \rightarrow J K_{-1} K_1)$ в этой формуле выражаются следующими суммами:

$$F_\lambda (J' K'_{-1} K'_1 \rightarrow J K_{-1} K_1) = \sum_{k=-\min(J, J')}^{\min(J, J')} g_{k-1, k_1}^{J' K'_{-1} K'_1} (K) g_{k-1, k_1}^{J K_{-1} K_1} (K + \lambda) \times \\ \times \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ K & \lambda & -K - \lambda \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Здесь $\begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ K & \lambda & -K - \lambda \end{pmatrix}$ - 3j-символ Вигнера (свойства этих символов обсуждаются в [3]), $g_{k-1, k_1}^{J' K'_{-1} K'_1} (K)$ - коэффициенты разложения волновой функции асимметричного ротатора по волновым функциям симметричного ротатора. Вычисление этих коэффициентов в общем случае требует использования громоздких численных методов диагонализации гамильтониана асимметричного ротатора. Однако в рассматриваемом случае слегка асимметричного ротатора коэффициенты $g_{k-1, k_1}^{J' K'_{-1} K'_1} (K)$ можно рассчитать путем их разложения по малому параметру ϵ . С учетом членов второго порядка малости это разложение имеет вид

$$g_{k-1, k_1}^{J' K'_{-1} K'_1} (K) = \sqrt{\frac{1 + \pi_y \delta_{k_0}}{2}} \{ \delta_{KK_{-1}} [1 - \epsilon^2 P(JK_{-1} K_1)] - \\ - \epsilon (1 - \delta_{KK_{-1}}) [Q_K(JK_{-1} K_1 + \epsilon R_K(JK_{-1} K_1))] \}, \quad (7)$$

где

$$P(JK_{-1} K_1) = \frac{1}{2} \left[\left[\frac{F_{K_{-1} K_{-1}-2}^{JK_1}}{4(K_{-1}-1)} \right]^2 + \left[\frac{F_{K_{-1}+2 K_{-1}}^{JK_1}}{4(K_{-1}-1)} \right]^2 \right], \quad (8)$$

$$Q_K(JK_{-1} K_1) = \left[\frac{F_{K_{-1} K_{-1}-2}^{JK_1}}{(K_{-1}^2 - K^2)} \right]^2, \quad (9)$$

$$R_K(JK_{-1} K_1) = \frac{F_{K_{-1} K_{-1}-2}^{JK_1} F_{K_{-1} K_{-1}-2}^{JK_1}}{(K_{-1}^2 - K^2)^2} - (1 - \delta_{K_{-1} 1}) \times$$

$$\times \frac{F_{K-1}^{JK} F_{K-1}^{JK} F_{K-1}^{JK}}{4(K-1)(K^2-K^2)} + \frac{F_{K-1+2}^{JK} F_{K-1}^{JK} F_{K-1+2}^{JK}}{4(K-1)(K^2-K^2)}, \quad (10)$$

а величины F_{KK}^{JK} отличны от нуля лишь при $\Delta K = K' - K = 0, \pm 2$ и в этом случае определяются выражениями

$$F_{KK}^{JK} = \frac{1}{2(1 + \pi_v \delta_{ko})} \left\{ K^2 - J(J+1) \left[1 - \pi_v \left(\frac{\delta_{K1}}{2} - \delta_{ko} \right) \right] \right\}, \quad (11)$$

$$F_{K+2,K}^{JK} = F_{K,K+2}^{JK} = \frac{1}{4} \sqrt{1 + \pi_v \delta_{ko}} \times \\ \times \sqrt{(J+K+2)(J+K+1)(J-K)(J-K-1)}. \quad (12)$$

Величина π_v , входящая в формулы (7), (11) и (12), есть $(-1)^{K_1+J}$.

Приведенные формулы позволяют рассчитать силы линий всех разрешенных правилами отбора. Эти правила вытекают из свойств 3j-символов и величин F_{KK}^{JK} , входящих в формулы (6) и (8)-(10). Согласно правилам отбора электрический дипольный переход происходит между уровнями противоположной четности $\pi \pi' = -1$ (или $K_1' - K_1$ - нечетное); при этом угловой момент J может изменяться не более чем на единицу. То есть $J' - J = 0, \pm 1$. Правила отбора по проекции момента K_{-1} являются несколько более сложными. Если в (7) использовать нулевое приближение по ϵ , то переходы возможны лишь с выполнением правила $K_{-1}' - K_{-1} = \lambda$. Физически это означает, что переходы с $K_{-1}' = K_{-1} \pm \lambda$ являются наиболее сильными. Они при $\lambda=0$ точно соответствуют вращательным переходам симметричного ротатора. Если учесть в (7) члены первого порядка малости по ϵ , то оказываются возможными переходы с $\Delta K_{-1} = K_{-1}' - K_{-1} = \pm \lambda \pm 2$. Однако они более слабые; величина $F_{\lambda}(J' K_{-1}' K_1' \rightarrow J K_{-1} K_1)$ в этом случае пропорциональна ϵ , а сила линии перехода пропорциональна ϵ^2 . Наконец, если учесть в (7) члены порядка ϵ^2 , окажутся возможными еще более слабые переходы, подчиняющиеся правилу отбора $K_{-1}' - K_{-1} = \pm \lambda \pm 4$.

Силы линии чисто вращательных переходов без учета сверхтонких расщеплений, рассчитанные по формулам, приведенным выше, представлены в табл.2. В эту таблицу включены все переходы между уровнями с $J, J' \leq 5$ и для компактности записи квантовые числа $K_{-1}; K_1$ заменены на $\tau = K_{-1} - K_1$. Обратный переход можно сделать воспользовавшись выраже-

Таблица 2

РАССЧИТАННЫЕ СИЛЫ ЛИНИЙ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ
ПЕРЕХОДОВ МОЛЕКУЛЫ НОСЛ

$J' \quad \tau'$ $k \quad - \quad l$	$J \quad \tau$ l	S_{Σ} (деб ²)	$J' \quad \tau'$ $k \quad - \quad l$	$J \quad \tau$ l	S_{Σ} (деб ²)	$J' \quad \tau'$ $k \quad - \quad l$	$J \quad \tau$ l	S_{Σ} (деб ²)
1 -1	0 0	0.132	3 1	3 0	0.307	5 -5	4 -3	4.328
1 0	0 0	2.164	3 2	3 0	1.893	5 -4	4 -4	6.492
1 1	1 0	0.197	3 3	3 2	0.691	5 -4	4 -3	0.631
1 1	1 1	3.246	3 3	3 1	1.893	5 -4	4 0	1.298
2 -2	1 0	1.082	4 -4	3 -3	3.246	5 -3	4 -2	0.631
2 -2	1 -1	0.263	4 -4	3 -2	3.246	5 -3	4 -1	1.298
2 -1	1 -1	3.246	4 -3	3 -3	5.410	5 -2	4 -2	4.544
2 -1	1 0	0.197	4 -3	3 -2	0.493	5 -2	4 -1	0.553
2 0	1 1	0.197	4 -3	3 1	0.811	5 -2	4 2	0.649
2 1	1 1	3.246	4 -2	3 -1	0.493	5 -1	4 -3	4.544
2 2	1 0	3.246	4 -2	3 0	0.811	5 -1	4 0	0.553
2 0	2 -2	5.410	4 -1	3 0	0.395	5 -1	4 1	0.649
2 0	2 -1	0.110	4 -1	3 -1	4.057	5 0	4 0	6.059
2 1	2 -1	1.803	4 -1	3 3	0.270	5 0	4 1	0.421
2 2	2 1	0.439	4 0	3 -2	4.057	5 0	4 4	0.216
2 2	2 0	1.803	4 0	3 1	0.395	5 1	4 -1	6.059
3 -3	2 -2	0.395	4 0	3 2	0.270	5 1	4 2	0.421
3 -3	2 -1	2.164	4 1	3 1	5.680	5 1	4 3	0.216
3 -2	2 2	4.328	4 1	3 2	0.230	5 2	4 2	7.790
3 -2	2 1	0.351	4 2	3 0	5.680	5 2	4 3	0.237
3 -2	2 2	0.361	4 2	3 3	0.230	5 3	4 1	7.790
3 -1	2 1	0.361	4 -2	4 -3	0.059	5 3	4 4	0.237
3 -1	2 0	0.351	4 -2	4 -4	9.737	5 4	4 4	9.737
3 0	2 1	0.219	4 -1	4 -3	4.382	5 5	4 3	9.737
3 0	2 0	3.606	4 0	4 -1	0.237	5 -3	5 -4	0.048
3 1	2 2	0.219	4 0	4 -2	4.382	5 -3	5 -5	11.901
3 1	2 -1	3.606	4 1	4 -1	3.408	5 -2	5 -4	5.554
3 2	2 2	5.410	4 2	4 1	0.533	5 -1	5 -2	0.193
3 3	2 1	5.410	4 2	4 0	3.408	5 -1	5 -3	5.554
3 -1	3 -3	7.573	4 3	4 1	1.947	5 0	5 -2	4.760
3 -1	3 -2	0.077	4 4	4 3	0.947	5 1	5 0	0.434
3 0	3 -2	3.156	4 4	4 2	1.947	5 1	5 -1	4.760
3 1	3 -1	3.156	5 -5	4 -4	0.658	5 2	5 0	

НИЯМИ

$$K_{-1} = E \left[\frac{\tau + J + 1}{2} \right], \quad K_1 = K_{-1} - \tau, \quad (13)$$

где $E []$ - целая часть от выражения, стоящего в скобках.

Таблица 3

РАССЧИТАННЫЕ ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ
ВРАЩАТЕЛЬНЫМИ УРОВНЯМИ С УЧЕТОМ СВЕРХТОНКИХ
РАСЩЕПЛЕНИЙ, А ТАКЖЕ ОЦЕНЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ
ОЖИДАЕМОЙ ОПТИЧЕСКОЙ ТОЛЩИНЫ ДЛЯ РЯДА ЛИНИЙ
МОЛЕКУЛЫ $\text{N}^{16}\text{O}^{35}\text{Cl}$.

J'	τ'	J	τ	F'	F	ν (МГц)	$A(S^{-1})$	τ
3	-2	2	-1	3/2	3/2	88949 .30	1 .14D - 07	1 .9D - 04
				5/2	3/2	88926 .11	3 .05D - 07	5 .2D - 04
				7/2	5/2	88926 .42	3 .51D - 07	9 .1D - 04
				7/2	7/2	88910 .77	5 .85D - 08	2 .0D - 04
				9/2	7/2	88934 .06	4 .05D - 07	1 .4D - 03
3	-1	2	0	7/2	7/2	90084 .31	6 .08D - 08	2 .0D - 04
				5/2	3/2	90099 .15	3 .17D - 07	5 .2D - 04
				7/2	5/2	90099 .27	3 .65D - 07	9 .1D - 04
				3/2	1/2	90106 .81	2 .98D - 07	2 .4D - 04
				9/2	7/2	90106 .93	4 .21D - 07	1 .4D - 03
				5/2	5/2	90109 .83	1 .03D - 07	2 .6D - 04
4	-3	3	-2	9/2	9/2	118546 .63	8 .81D - 08	1 .5D - 04
				7/2	5/2	118568 .25	9 .14D - 07	9 .6D - 04
				9/2	7/2	118569 .90	9 .73D - 07	1 .3D - 03
				5/2	3/2	118571 .13	9 .10D - 07	6 .4D - 04
				11/2	9/2	118572 .99	1 .05D - 06	1 .8D - 03
				7/2	7/2	118579 .03	1 .44D - 07	2 .0D - 04
				5/2	5/2	118594 .45	1 .46D - 07	1 .5D - 04

В табл. 3 приведены результаты расчетов вероятностей переходов между вращательными уровнями с учетом сверхтонких расщеплений. В таблицу включены лишь те переходы, для которых в работе [2] определены точные значения частот и рассмотрены уровни, энергии которых не превышают 100К.

Аналогичные данные приведены в табл. 4 для $\text{H}^{16}\text{O}^{37}\text{Cl}$. Вероятности и силы линий одинаковых переходов в обеих изотопических модификациях мало отличаются; существенные различия имеются лишь в частотах. Спектр, измеренный в работе [7], простирается вплоть до 330 ГГц, и все переходы не могут быть обсуждены здесь в силу ограниченного объема статьи. Однако приведенные формулы позволяют рассчитать силы линий и вероятности вращательных переходов для всех измеренных линий с достаточно хорошей точностью.

Таблица 4

РАССЧИТАННЫЕ ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ
ВРАЩАТЕЛЬНЫМИ УРОВНЯМИ С УЧЕТОМ СВЕРХТОНКИХ
РАСЩЕПЛЕНИЙ, А ТАКЖЕ ОЦЕНЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ
ОЖИДАЕМОЙ ОПТИЧЕСКОЙ ТОЛЩИНЫ ДЛЯ РЯДА ЛИНИЙ
МОЛЕКУЛЫ $\text{H}^{16}\text{O}^{37}\text{Cl}$.

J'	τ'	J	τ	F'	F	ν (МГц)	$A(S^{-1})$	τ
4	-3	3	-2	7/2	5/2	116519.47	8.67D - 07	3.1D - 04
				9/2	7/2	116520.75	9.23D - 07	4.4D - 04
				5/2	3/2	116521.88	8.63D - 07	2.0D - 04
				11/2	9/2	116523.17	9.97D - 07	6.0D - 04
				5/2	5/2	116540.13	1.38D - 07	4.9D - 05
4	-4	3	-3	5/2	3/2	117282.79	9.40D - 07	9.3D - 04
				7/2	5/2		9.44D - 07	1.4D - 03
				9/2	7/2	117285.63	1.00D - 06	2.0D - 03
				11/2	9/2		1.08D - 06	2.7D - 03
4	-2	3	-1	7/2	5/2	118029.50	9.02D - 07	2.9D - 04
				9/2	7/2	118030.60	9.60D - 07	4.2D - 04
				5/2	3/2	118031.74	8.98D - 07	1.9D - 04
				11/2	9/2	118033.02	1.03D - 06	5.7D - 04
				7/2	7/2	118037.64	1.42D - 07	6.2D - 05
				5/2	5/2	118049.49	1.44D - 07	4.7D - 05

3. Оценки ожидаемых оптических толщин межзвездных молекул. Рассчитанные значения сил линий и вероятностей вращательных переходов позволяют оценить ожидаемые значения оптических толщин в линиях межзвездной молекулы НОСИ. Это можно сделать с помощью формулы

$$\tau(JK_{-1}K_1F \rightarrow J'K'_{-1}K'_1F') = \frac{8\pi^{5/2}}{3h\nu_T} S(J'K'_{-1}K'_1F' \rightarrow JK_{-1}K_1F) \times \\ \times \frac{n_{JK_{-1}K_1F}}{2F'+1} \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu(J'K'_{-1}K'_1F' \rightarrow JK_{-1}K_1F)}{kT_K}\right) \right] N_L. \quad (14)$$

Здесь принято, что состояние среды близко к термодинамически равновесному с температурой, равной кинетической температуре газа. N_L - число молекул НОСІ на луче зрения, ν_T - тепловая скорость, $n_{JK_{-1}K_1F}$ - населенность нижнего уровня;

$$n_{JK_{-1}K_1F} = \frac{2F+1}{Q(T_K)} \exp\left[-\frac{E_{JK_{-1}K_1F}}{kT_K}\right], \quad (15)$$

где $Q(T_K)$ - статистическая сумма по вращательным состояниям молекул с учетом сверхтонких расщеплений

$$Q(T_K) = \sum_{JK_{-1}K_1F} (2F+1) \exp\left[-\frac{E_{JK_{-1}K_1F}}{kT_K}\right] \approx \\ \approx (2I+1) \sqrt{\frac{\pi}{ABC} \left(\frac{kT}{h}\right)^3}. \quad (16)$$

В формуле (16) учтено, что сверхтонкие расщепления малы по сравнению с чисто вращательными энергиями и ими при вычислении статистических сумм можно пренебречь. То же можно сделать при вычислении населенностей и частоты в (14). Таким образом, зависимость оптической толщины от квантовых чисел F , F' определяется лишь сомножителем вида $(2F+1)^2 \left\{ \frac{I J F}{1 F' J'} \right\}^2$. Формулы (14)-(16) позволяют рассчитать ожидаемые значения оптической толщины, если задать тепловую скорость молекул, ν_T , кинетическую температуру T_K и содержание молекул НОСІ на луче зрения. Примем, что $\nu_T = 0.5 \text{ км/с}$, $T_K = 20 \text{ К}$, $N_L = 2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Последняя величина выбрана с учетом космической распространенности атомов ^{35}Cl и предположения о том, что относительные содержания молекул НОСІ и НСО такие же, как и отношения космических распространенностей хлора и углерода (содержание молекул НСО на луче зрения в межзвездном газе $\sim 10^{13} \text{ см}^{-3}$).

Оцененные значения ожидаемой оптической толщины для ряда линий $\text{H}^{16}\text{O}^{35}\text{Cl}$ приведены в табл.3. Эти оценки показывают, что оптическая тол-

щина в лініях обговорюваної молекули може досягати значень $\sim 10^{-3}$, що представляє достатньо велику величину. При температурі облака ~ 20 К можна очікувати, що яркісна температура в лініях буде досягати 0.020 К. Якщо для пошукових спостережень використовувати сучасний радіотелескоп з не дуже вузькими каналами спектра (~ 0.5 МГц), то необхідні часи накоплення сигналу можуть становити декілька десятків хвилин, що цілком прийнятно для радіотелескопів типу 30-метрового дзеркала IRAM в Іспанії. Постановка відповідних спостережень може принести важливу інформацію об обміні елементами групи галогенів між зірками і міжзвездною середою, а також про хімічні процеси в міжзвездній середі, вовлекаючих галогени, як в разі виявлення, так і в разі негативних результатів пошуку обговорюваних молекул.

Спеціальна астрофізична обсерваторія АН СРСР

HOCl IN THE INTERSTELLAR MEDIUM

V.K.KHERSONSKII, A.A.LIPOVKA

The spectroscopic characteristics of the HOCl molecule are considered. The possibilities of the detection of this molecule in the interstellar medium are also discussed. The line strengths and probabilities for great number of the transitions between low rotational levels of HOCl are calculated. The expected optical depths of the interstellar lines of this molecule are estimated.

Література

1. J.Cernicharo, M.Quellin, *Astrophys.J.*, 183, 110, 1987.
2. H.E.Gillis Singbell, W.D.Anderson, D.R.Willington, M.C.L.Gerry, E.A.Cohen, H.M.Pickett, F.J.Lovas, R.D.Suenram, *J.Mol.Spectrosc.*, 103, 466, 1984.
3. Д.А.Варшавич, А.Н.Москалев, В.К.Херсонский, Квантовая теория углового момента, Наука, М., 1975.
4. В.К.Херсонский, Препр. САО АН СССР, N40L, 1986.