

Základy fyziky hvězdných atmosfér

Jiří Kubát

Poslední úprava: 21. prosince 2023

Obsah

1	Úvod	7
I	Interakce hmoty se zářením	9
2	Popis záření	10
2.1	Specifická intenzita	10
2.2	Rozdělovací funkce záření	12
2.3	Střední intenzita	13
2.4	Tok	14
2.5	Tenzor tlaku záření	15
2.6	Momenty specifické intenzity	16
2.7	Některé speciální případy popisu záření	16
2.7.1	Planparalelní atmosféra	17
2.7.2	Sféricky symetrická atmosféra	20
2.7.3	Eddingtonův činitel a Eddingtonovo přiblížení	20
2.7.4	Záření ze vzdálené hvězdy	21
2.8	Elektromagnetický popis záření	23
2.8.1	Šíření rovinné monochromatické vlny, mikroskopická polarizace	24
2.8.2	Statistický popis, makroskopická polarizace	25
3	Přenos záření	28
3.1	Absorpce, emise a rozptyl záření hmotou	28
3.1.1	Absorpční koeficient	29
3.1.2	Emisní koeficient	30
3.2	Rovnice přenosu záření	30
3.2.1	Planparalelní přiblížení v rovinné geometrii	32
3.2.2	Sféricky symetrické přiblížení	33
3.3	Optická hloubka	33
3.4	Vydatnost	34

3.5	Typické okrajové podmínky rovnice přenosu	35
3.6	Momenty rovnice přenosu záření	37
3.6.1	Momentové rovnice pro jednorozměrnou časově nezávislou atmosféru	39
3.7	Rovnice přenosu pro polarizované záření	41
4	Termodynamická rovnováha	43
4.1	Excitační rovnováha	43
4.2	Rovnovážné rozdělení rychlostí částic	45
4.3	Ionizační rovnováha	46
4.3.1	Určení elektronové hustoty	49
4.4	Disociace molekul	51
4.5	Záření v termodynamické rovnováze	51
4.5.1	Rovnovážné rozdělení energie	53
4.5.2	Absorpce a emise v termodynamické rovnováze	53
4.6	Lokální termodynamická rovnováha	54
5	Opacita, emisivita a rozptyl	57
5.1	Obecné absorpční a emisní koeficienty	57
5.1.1	Einsteinovy koeficienty pro vázaně-vázané přechody	58
5.1.2	Milneho vztahy pro kontinuum	61
5.2	Struktura atomů	63
5.2.1	Struktura a přechody vodíku a vodíkpodobných iontů	64
5.2.2	Jemná struktura hladin vodíku	65
5.2.3	Struktura mnohoelektronových atomů	67
5.2.4	<i>LS</i> vazba	68
5.2.5	Termy a hladiny v <i>LS</i> aproximaci	69
5.2.6	Rydbergova korekce	71
5.2.7	Dvojexcitované stavy	72
5.2.8	Složitější struktura atomů	72
5.2.9	Výběrová pravidla	73
5.2.10	Zakázané čáry v přírodě	74
5.2.11	<i>jj</i> vazba	75
5.2.12	Ostatní typy vazeb	77
5.2.13	Vliv izotopů	78
5.2.14	Hladiny v magnetickém poli	78
5.3	Absorpce a emise ve spektrálních čarách	79
5.3.1	Přirozené rozšíření spektrálních čar	80
5.3.2	Dopplerovské (tepelné) rozšíření spektrálních čar	80
5.3.2.1	Turbulentní rozšíření spektrálních čar	83
5.3.3	Srážkové rozšíření spektrálních čar	84

5.4	Ionizace a rekombinace	85
5.4.1	Fotoionizační účinný průřez	87
5.5	Volně-volné přechody	88
5.6	Interakce záření s molekulami	89
5.7	Rozptyl v kontinuu	95
5.7.1	Rozptyl na volných elektronech	95
5.7.2	Rozptyl na elektronech vázaných v atomu	96
5.8	Rozptyl ve spektrálních čarách	97
6	Formální řešení rovnice přenosu záření	99
6.1	Difúzní přiblížení	101
6.2	Schwarzschildova rovnice (Λ operátor)	103
6.3	Numerické řešení rovnice přenosu záření	106
6.3.1	Diskretizace rovnice přenosu záření	107
6.3.1.1	Prostorová diskretizace	107
6.3.1.2	Úhlová diskretizace	108
6.3.1.3	Frekvenční diskretizace	109
6.3.2	Dlouhé a krátké charakteristiky	110
6.3.3	Integrální metody	111
6.3.4	Feautrierova metoda	112
6.3.5	Sféricky symetrická rovnice přenosu záření	113
7	Přenos záření s obecnou vydatností	116
7.1	Vydatnost spektrální čáry	116
7.2	Vydatnost s rozptylem	117
7.2.1	Planparalelní rovnice přenosu záření s koherentním roz- ptylem	120
7.3	Termalizační délka	122
7.4	Přímé metody řešení rovnice přenosu záření s rozptylem	123
7.5	Iterační metody řešení rovnice přenosu záření s rozptylem	124
7.5.1	Λ iterace	124
7.5.2	Metoda proměnných Eddingtonových faktorů	126
8	Srážkové procesy	129
8.1	Srážková excitace a deexcitace	129
8.2	Srážková ionizace a rekombinace	132
8.3	Další srážkové procesy	133
8.4	Augerovy procesy	134

9 Obsazení energetických hladin atomů	136
9.1 Lokální termodynamická rovnováha	136
9.1.1 Podmínky pro lokální termodynamickou rovnováhu a jejich porušení vlivem záření	137
9.2 Rovnice kinetické rovnováhy	140
9.3 Četnost zářivých přechodů	142
9.3.1 Vázaně-vázané přechody	142
9.3.2 Vázaně-volné přechody	144
9.3.3 Celková četnost zářivých přechodů	147
9.4 Četnost srážkových přechodů	147
9.5 Soustava rovnic kinetické rovnováhy	150
9.5.1 Některé speciální případy	151
10 Řešení NLTE problému	159
10.1 Dvuhladinový atom	159
10.1.1 Termalizační hloubka ve spektrálních čarách	160
10.1.2 Rovnice pro dvuhladinový atom	163
10.2 Iterační řešení dvuhladinového atomu	165
10.2.1 Λ iterace	165
10.2.2 Urychlená Λ iterace	166
10.3 Mnohohladinový atom	167
10.3.1 Řešení mnohohladinového atomu metodou úplné linearizace	168
10.3.2 Řešení pomocí urychlené Λ -iterace	170
10.4 Základní NLTE efekty v polonekonečné atmosféře	171
10.4.1 NLTE efekty v čarách	172
10.4.2 NLTE efekty pro kontinua	175
11 Přenos záření v pohybujícím se prostředí	179
11.1 Sobolevova aproximace	180
12 Přenos záření metodou Monte Carlo	185
II Přílohy	187
A Speciální matematické funkce	188
A.1 Exponenciální integrální funkce	188
A.2 Gaussova funkce	189
A.2.1 Některé integrály Gaussovy funkce	189

B	Doplňky k atomární fyzice	190
B.1	Rydbergovy konstanty a jednotky energie	190
B.2	Klasický oscilátor	191
B.3	Fotoionizační příčný průřez	193
B.3.1	Vodíkupodobné ionty	193
B.4	Interakce atomů s vnějším magnetickým polem	193
B.5	Poznámky ke struktuře jednotlivých atomů	195
B.5.1	He II	195
B.5.2	Struktura alkalických atomů	195
B.5.3	Struktura kovů alkalických zemin	196
B.5.4	Struktura prvků s částečně zaplněnými <i>p</i> -slupkami	197
B.5.5	Struktura vzácných plynů	204
B.5.6	Struktura prvků s nezaplňnými <i>d</i> a <i>f</i> slupkami	205
B.6	Poznámky ke struktuře molekul	205
B.6.1	Energetické stavy molekul	206
B.6.2	Přechody v molekulách	209
B.7	Rozptyl ve spektrálních čarách	211
C	Numerické řešení rovnice přenosu záření	216
C.1	Diskretizace Feautrierova řešení rovnice přenosu záření	216
C.1.1	Diferenční rovnice	216
C.1.2	Matice koeficientů diferenční rovnice	218
C.1.3	Eliminační schéma	220
C.1.4	Monochromatická rovnice přenosu záření s rozptylem	220
C.2	Diskretizace momentové rovnice přenosu záření	221
C.2.1	Koeficienty diferenční rovnice	222
D	Abundance chemických prvků a metalicita	223
E	Linearizace	225
F	Ostatní doplňky	226
F.1	Boltzmannova kinetická rovnice	226
III	Cvičení	227
G	Cvičení	228

Předmluva

Tato kniha vznikala a stále ještě vzniká¹ během mého přednášení předmětů F7600 „Fyzika hvězdných atmosfér” a F8601 „Modelování hvězdných atmosfér” v Brně na Ústavu teoretické fyziky a astrofyziky Přírodovědecké fakulty Masarykovy Univerzity. Protože ještě neexistuje její konečná verze, vyskytují se v některých částech textu pouze heslovité poznámky, které budou časem přepracovány do souvislého textu. Rovněž ve velké většině chybějí v knize obrázky. Kniha do značné míry vychází z druhého vydání dnes už klasické učebnice „*Stellar Atmospheres*” Dimitriho Mihalase (1978) a z jejího třetího vydání (Hubeny and Mihalas, 2014), které vyšlo ve spolupráci s Ivanem Hubeným a pod novým názvem „*Theory of Stellar Atmospheres*”. Jsou využity i jiné základní učebnice, například „*Radiative Processes in Astrophysics*” (Rybicki and Lightman, 1979), „*Atomic Physics and Spectroscopy*” (Pradhan and Nahar, 2011), „*Polarization in Spectral Lines*” (Landi Degl’Innocenti and Landolfi, 2004) a i další literatura.

Základním cílem této knihy je poskytnout čtenářům úvod do studia vzájemného působení hmoty a záření a tím i vlivu záření na hmotu ve vesmíru. Kniha je rozdělena do dvou základních částí, první (Interakce hmoty se zářením) se zabývá přímou interakcí hmoty a záření a druhá (Modely hvězdných atmosfér) stavbou hvězdných atmosfér a hvězdných větrů.

V první části je podrobně rozebrán vliv hmoty na záření, který je popsán rovnicí přenosu záření a jejím formálním řešením. Velká pozornost je věnována vlivu záření na mikroskopický stav hmoty a obsazení energetických hladin atomů, které nemusí odpovídat termodynamické rovnováze (tzv. NLTE fyzika). Druhá část se zabývá kromě základních zákonů stavby hvězdných atmosfér zejména vlivem záření na globální vlastnosti hmoty, konkrétně na teplotu (přenos energie) a dynamiku (přenos hybnosti) prostředí. Tato verze knihy obsahuje jen první část.

¹Datum poslední aktualizace celého textu je šedě přetištěno přes jednotlivé stránky.

Kapitola 1

Úvod

Záření je i přes úspěšnou detekci gravitačních vln prakticky jediným prostředkem ke studiu vzdálených astronomických objektů. Proto teorie přenosu záření v astronomii patří mezi její nejdůležitější součásti. Zářetí vycházející z astronomických objektů je těmito objekty formováno a přenáší k nám informaci o těchto objektech. Na své cestě k nám se však mění při průchodu různými prostředími, která mu stojí v cestě, mezihvězdným, mezigalaktickým a nakonec i atmosférou naší Země. Kromě toho záření hmotu, kterou prochází, také ovlivňuje. Jeho absorpcí dochází k excitaci a ionizaci prostředí, jeho energie může způsobit ohřev prostředí a jeho hybnost je schopna urychlit hmotu. Studium všeho tohoto vzájemného působení je komplikováno faktem, že v astronomii a astrofyzice jsme převážně odkázáni na pozorování. Možnost provádět astronomické experimenty je dost omezená. Existuje ale také rozvíjející se experimentální směr zvaný laboratorní astrofyzika. Zářetí je jednou ze základních součástí vesmíru. Proto je pochopení procesů spojených s jeho šířením fundamentální znalostí potřebnou v celé řadě astrofyzikálních oborů.

Astrofyzikální záření zahrnuje záření pro energie prakticky z celého energetického spektra záření (γ , rentgenovské, UV, viditelné, infračervené, radiové). Schopnost rozložit pomocí přístrojů záření podle vlnových délek a zaznamenat lidským okem neviditelnou část energetického spektra záření přináší ohromné množství informace. Této informaci umíme porozumět s využitím znalostí struktury atomů a molekul a mechanismu vzájemného působení hmoty a záření.

Na své cestě záření interaguje s hmotou, je pohlcováno, vyzařováno a rozptylováno. Díky charakteristickým vlastnostem jednotlivých atomů, iontů a molekul zanechávají tyto v záření otisk ve formě absorpčních nebo emisních čar, pásů a ionizačních hran. Studium těchto spektrálních jevů můžeme zjistit řadu jinak skrytých informací o hmotě, která záření vypouští a s níž poté záření také interaguje. Pomáhá nám k tomu rozpracovaná teorie struktury částic a jejich interakce se zářením, která předpovídá řadu detailních vlivů na spektrum. V procesu formování

zářivého spektra hraje významnou úlohu i teorie srážkových procesů.

Astrofyzikální prostředí poskytuje možnost studovat atomy v podmínkách, které na Zemi lze jen těžko vytvořit. Bílí trpaslíci mají extrémně široké spektrální čáry, což je způsobeno Starkovým rozšířením pro velmi vysoké hustoty jejich atmosfér. Velmi řídké prostředí mlhovin a HI oblastí umožňuje vznik silných emisních čar zakázaných atomárních přechodů. Astronomická pozorování dokonce vedla k objevům ve fyzice atomů. V některých případech jsou pozorovány atomární přechody, které sice teorie atomů předpovídá, ale na Zemi jsou jen velmi těžko experimentálně ověřitelné. Historickým příkladem je objev helia, které bylo nejdříve zjištěno ve slunečním spektru a až poté bylo nalezeno i na Zemi. Zajímavou historickou událostí byl objev čar nového vodíku podobného prvku, který byl nazván protovodíkem. Teprve až s rozvojem kvantové teorie atomu se ukázalo, že se jedná o ionizované helium. Také podobná interpretace emisních čar mlhovin jako čar nového prvku s názvem nebulium se nakonec ukázala jako mylná. Tyto čáry se podařilo vysvětlit jako čáry zakázaných přechodů již známých prvků. Některé nejasnosti přetrvávají do současnosti, například není spolehlivě znám původce difúzních mezihvězdných pásů (DIB), i když se rýsuje jistá spojitost s fulereny nebo s polycyklickými aromatickými uhlovodíky.

Klíčem k pochopení spekter přicházejících z vesmíru je přenos záření, který se zabývá vzájemným působením záření a hmoty během jeho cesty k pozorovateli. Matematicky je přenos záření popsán rovnicí přenosu záření, která se při zahrnutí všech závislostí mezi hmotou a zářením stává nelineární integrodiferenciální rovnicí. Není divu, že se astronomové snaží problém přenosu záření co nejvíce zjednodušit a získat tak rychlý nástroj pro předpovědi záření z vesmíru. V některých případech to je možné, ale častěji přílišné zjednodušení zanáší výsledek systematickými nepřesnostmi. Přenos záření ve hvězdných nitrech a v oblastech mezi hvězdnými nitry a povrchem hvězd může být dobře popsán zjednodušenou formou pomocí difúze záření, což je aproximace platná pro velké hustoty hmoty s velmi krátkou střední volnou dráhou fotonů. Naopak v mezihvězdném prostředí a v planetárních mlhovinách se jedná o přenos záření v průhledném (opticky tenkém) prostředí, kdy za jistých podmínek můžeme zanedbat některé interakce mezi hmotou a zářením. V případě prostředí s velkými rychlostními gradienty, což jsou například hvězdné větry nebo výbuchy supernov, můžeme pro řešení rovnice přenosu záření použít Sobolevovou aproximaci. Často používaným předpokladem při řešení rovnice přenosu záření je předpoklad lokální termodynamické rovnováhy (LTE), kdy absorpční a emisní koeficienty nezávisí na poli záření. Tento předpoklad odstraňuje nelinearitu rovnice přenosu záření, v řadě případů ale vede k systematicky chybným výsledkům. Správné, ale výpočetně náročnější je opuštění předpokladu LTE, kdy zahrneme vliv záření na excitační a ionizační rovnováhu a tím i na absorpční a emisní vlastnosti hmoty. Toto přiblížení, které se označuje non-LTE nebo NLTE, je hlavním sdělením této knihy.

Část I

Interakce hmoty se zářením

Kapitola 2

Popis záření

V této kapitole zavedeme základní fyzikální veličiny popisující pole záření, což je fundamentální pojem nejen pro studium hvězdných atmosfér, ale i pro celou astrofyziku.

Světlo je elektromagnetické vlnění. K jeho popisu můžeme použít několik způsobů. V astrofyzice se nejvíce používá fenomenologický makroskopický popis pomocí intenzity záření. Tento popis je přijatelný, pokud charakteristický rozměr systému je mnohem větší než vlnová délka záření (příkladem může sloužit světlo procházející klíčovou dírkou, viz Rybicki and Lightman, 1979, kapitola 1.2). Kinetický popis využívá k popisu rozdělovací funkci fotonů. Popis pomocí vektorů elektrického nebo magnetického pole dovoluje brát v úvahu vlnové vlastnosti světla, což umožňuje studovat polarizované záření a případnou foton-fotonovou interakci. V další části této kapitoly zavedeme základní veličiny makroskopického popisu a uvedeme je do souvislosti s částicovým a elektromagnetickým popisem.

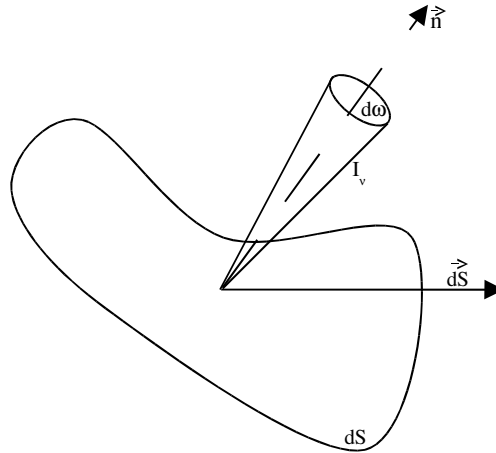
2.1 Specifická intenzita

Vyjádříme množství energie $\delta\mathcal{E}$ přenášené zářením šířícím se ve směru \mathbf{n} o frekvencích z intervalu $\langle\nu; \nu + d\nu\rangle$ skrz orientovaný plošný element $d\mathbf{S}$ do prostorového úhlu $d\varpi$ za čas dt (viz obr. 2.1). Množství energie je dáno vztahem

$$\delta\mathcal{E} = I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) (\mathbf{n} \cdot d\mathbf{S}) d\varpi d\nu dt. \quad (2.1)$$

Veličina $I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)$ je *specifická intenzita záření* o frekvenci ν v místě \mathbf{r} a čase t šířícího se směrem \mathbf{n} do elementu prostorového úhlu $d\varpi$. Její rozměr je $[I] = \text{erg} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{Hz}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. Úhel mezi normálou k elementu plochy $d\mathbf{S}$ a směrem šíření záření \mathbf{n} se obvykle značí θ . Platí $\mathbf{n} \cdot d\mathbf{S} = dS \cos \theta$.

Specifická intenzita nezávisí na vzdálenosti od zdroje záření. Důkaz je patrný z obrázku 2.2. V místě \mathbf{r} je procházející energie dána vztahem (2.1), v místě \mathbf{r}'



Obrázek 2.1: Zavedení specifické intenzity záření $I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)$. Záření se šíří ve směru \mathbf{n} do prostorového úhlu $d\varpi$ skrz elementární orientovanou plošku $d\mathbf{S}$, která svírá se směrem šíření úhel θ .

Zde chybí obrázek

Obrázek 2.2: Ozařování elementů plochy $d\mathbf{S}$ a $d\mathbf{S}'$ pro důkaz neměnnosti specifické intenzity podél paprsku. Obrázek v Hubeny and Mihalas (2014, str. 64).

vztahem $\delta\mathcal{E}' = I'(\mathbf{r}', \mathbf{n}, \nu, t) dS' \cos\theta' d\varpi' d\nu dt$. Vzdálenost mezi \mathbf{r}' a \mathbf{r} je $d = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Místo \mathbf{r}' je vidět z místa \mathbf{r} pod úhlem $d\varpi = (dS'/d^2) \cos\theta'$, podobný vztah platí i pro \mathbf{r} . místo \mathbf{r} je vidět z místa \mathbf{r}' pod úhlem $d\varpi' = (dS/d^2) \cos\theta$. Z podmínky zachování energie $\delta\mathcal{E}' = \delta\mathcal{E}$ dostaneme rovnost $I = I'$.

Specifická intenzita záření (a i její momenty, které budeme zavádět dále v této kapitole) se někdy zavádí jako funkce vlnové délky λ . Z porovnání odpovídající alternativní definice $\delta\mathcal{E} = I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \lambda, t)(\mathbf{n} \cdot d\mathbf{S}) d\varpi d\lambda dt$ s definicí (2.1) dostáváme

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \lambda, t) d\lambda = I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) d\nu. \quad (2.2)$$

Intenzity $I(\nu)$ a $I(\lambda)$ se tedy liší o faktor $d\nu/d\lambda$. Odpovídajícím způsobem se liší i jejich rozměr.

Číselná hustota fotonů

Výrazem $f_N(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) d\varpi d\nu$ vyjádříme počet fotonů v místě \mathbf{r} o frekvenci $(\nu; \nu + d\nu)$ pohybujících se ve směru \mathbf{n} do úhlu $d\varpi$, veličina $f_N(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)$ je **číselná hustota fotonů**. Přes plošku dS za čas dt projde $f_N(c dt)(\mathbf{n} \cdot d\mathbf{S})(d\varpi d\nu)$ fotonů

(pohybují se rychlostí světla c). Prošlou energii dostaneme vynásobením výrazu energií fotonu ($h\nu$),

$$\delta\mathcal{E} = (h\nu)f_{\mathbf{N}}(c dt)(\mathbf{n} \cdot d\mathbf{S})(d\varpi d\nu). \quad (2.3)$$

Odtud porovnáním s (2.1) dostaneme vztah mezi specifickou intenzitou I a číselnou hustotou fotonů $f_{\mathbf{N}}$,

$$ch\nu f_{\mathbf{N}} = I. \quad (2.4)$$

Číselná hustota fotonů $f_{\mathbf{N}}$ je definována v souřadnicovém prostoru.

2.2 Rozdělovací funkce záření

Ve statistické mechanice můžeme zavést rozdělovací funkci fotonů ve fázovém prostoru. Vektorová hybnost jednotlivého fotonu je

$$\mathbf{p} = \frac{h\nu}{c}\mathbf{n}. \quad (2.5)$$

Rozdělovací funkci fotonů ve fázovém prostoru označíme $f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$. Potom

$$f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3r d^3p$$

označuje počet fotonů daného spinu α v elementárním objemu fázového prostoru $d^3p d^3r$ v čase t . Jelikož fotony patří mezi bosony, jejich spin je roven 1 a projekce spinu do směru šíření záření $m_s = -1, 0, 1$. Vzhledem k nulové klidové hmotnosti fotonů nemá hodnota $m_s = 0$ fyzikální smysl, významné jsou jen projekce ve směru a proti směru šíření záření. Tyto dvě projekce odpovídají polarizaci fotonu, hodnota $m_s = -1$ pravotočivé, hodnota $m_s = 1$ levotočivé (viz například Landi Degl'Innocenti and Landolfi, 2004, Appendix A3).

Celkovou energii fotonů v elementu fázového prostoru můžeme vyjádřit pomocí rozdělovací funkce fotonů jako (viz také Shu, 1991, str. 5)

$$\delta\mathcal{E} = \sum_{\alpha=1}^2 h\nu f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3r d^3p. \quad (2.6)$$

Paprsek fotonů letících ve směru \mathbf{n} přes elementární plošku $d\mathbf{S}$ rychlostí c zaujímá elementární objem

$$d^3r = (\mathbf{n} \cdot d\mathbf{S})(c dt).$$

S využitím (2.5) vyjádříme ještě objemový element impulsového prostoru

$$d^3p = p^2 dp d\varpi = (h^3\nu^2/c^3) d\varpi d\nu$$

a dosadíme za $d^3p d^3r$ do (2.6),

$$\delta\mathcal{E} = \sum_{\alpha=1}^2 \frac{h^4\nu^3}{c^3} f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) (\mathbf{n} \cdot d\mathbf{S}) d\varpi d\nu(c dt). \quad (2.7)$$

Porovnáním s definicí specifické intenzity (2.1) dostaneme vztah mezi rozdělovací funkcí fotonů f_{α} fotonů a specifickou intenzitou záření I ,

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) = \sum_{\alpha=1}^2 \frac{h^4\nu^3}{c^2} f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (2.8)$$

Hustotu fotonů se spinem α v jednotkovém objemu fázového prostoru n_{α} dostaneme jako součin rozdělovací funkce fotonů ve fázovém prostoru f_{α} a objemu elementární buňky fázového prostoru h^3 (objem nejmenší buňky fázového prostoru vyplývá z relací neurčitosti, $\Delta x \Delta p_x \geq h$),

$$n_{\alpha} \equiv h^3 f_{\alpha} \quad (2.9)$$

Získáme tak vztah mezi koncentrací fotonů ve fázovém prostoru a specifickou intenzitou záření

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) = \sum_{\alpha=1}^2 \frac{h\nu^3}{c^2} n_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \quad (2.10)$$

Rozdělovací funkce záření ve fázovém prostoru $f_{\mathbf{R}}$ bude součtem f_{α} přes všechny spiny,

$$f_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3r d^3p \equiv \sum_{\alpha=1}^2 f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3r d^3p. \quad (2.11)$$

Pro nepolarizované záření je $f_1 = f_2$, proto

$$f_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 2f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (2.12)$$

Rozdělovací funkce záření $f_{\mathbf{R}}$ je relativisticky invariantní veličina (viz například Hubeny and Mihalas, 2014, Appendix B).

2.3 Střední intenzita

Střední intenzitu záření J zavedeme jako průměrnou hodnotu specifické intenzity I přes všechny prostorové úhly

$$J(\mathbf{r}, \nu, t) = \frac{1}{4\pi} \oint I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) d\varpi \quad (2.13)$$

2. POPIS ZÁŘENÍ

Je to skalární veličina a její rozměr je $[J] = \text{erg} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{Hz}^{-1}$.

Číselná hustota fotonů frekvence ν v daném místě \mathbf{f}_N (viz 2.3) vynásobená energií fotonu $h\nu$ a integrovaná přes všechny směry šíření záření vyjadřuje **monochromatickou hustotu zářivé energie**

$$E_R(\mathbf{r}, \nu, t) = h\nu \oint \mathbf{f}_N(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) d\varpi. \quad (2.14)$$

S využitím vztahu (2.4) dostaneme vztah mezi monochromatickou hustotou zářivé energie a střední intenzitou záření,

$$E_R(\mathbf{r}, \nu, t) = \frac{1}{c} \oint I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) d\varpi = \frac{4\pi}{c} J(\mathbf{r}, \nu, t). \quad (2.15)$$

Rozměr monochromatické hustoty zářivé energie je $[E_R] = \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{Hz}^{-1}$. Integrací $E_R(\mathbf{r}, \nu, t)$ přes frekvence dostaneme **celkovou hustotu zářivé energie**

$$\mathcal{E}_R(\mathbf{r}, t) = \frac{4\pi}{c} \int_0^\infty J(\mathbf{r}, \nu, t) d\nu = \frac{4\pi}{c} J(\mathbf{r}, t) \quad (2.16)$$

s rozměrem $[\mathcal{E}_R] = \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3}$.

2.4 Tok

Uvažujme fotony procházející přes plošku $d\mathbf{S}$ v místě \mathbf{r} (viz obrázek 2.1). Bude nás zajímat jejich čistý počet za jednotku času. Čistý počet znamená, že fotony letící proti sobě se odečtou. Necht' $N(\mathbf{r}, \nu, t)$ je zde čistý počet fotonů o frekvenci ν procházející přes plošku $d\mathbf{S}$ v místě \mathbf{r} za jednotku času. Ten můžeme pomocí číselné hustoty fotonů \mathbf{f}_N napsat jako

$$N(\mathbf{r}, \nu, t) = \left(\oint \mathbf{f}_N(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) c \mathbf{n} d\varpi \right) \cdot d\mathbf{S}. \quad (2.17)$$

Každý z fotonů má energii $h\nu$. Veličina $Nh\nu$ pak vyjadřuje čistý tok zářivé energie o frekvenci ν přes plošku $d\mathbf{S}$,

$$N(\mathbf{r}, \nu, t) h\nu = \left(ch\nu \oint \mathbf{f}_N(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) \mathbf{n} d\varpi \right) \cdot d\mathbf{S} = \mathcal{F}(\mathbf{r}, \nu, t) \cdot d\mathbf{S}. \quad (2.18)$$

Veličinu v závorce jsme označili \mathcal{F} a nazveme ji **monochromatickým zářivým tokem**. Je to vektorová veličina. Skalární součin $\mathcal{F} \cdot d\mathbf{S}$ pak vyjadřuje čistý tok energie přes libovolně orientovanou plošku $d\mathbf{S}$. S využitím vztahu (2.4) můžeme monochromatický zářivý tok vyjádřit pomocí specifické intenzity záření I jako

$$\mathcal{F}(\mathbf{r}, \nu, t) = \oint I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) \mathbf{n} d\varpi. \quad (2.19)$$

Rozměr toku je $[\mathcal{F}] = \text{erg} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{Hz}^{-1}$. Integrací přes všechny frekvence získáme **celkový zářivý tok**

$$\mathfrak{F}(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty \mathcal{F}(\mathbf{r}, \nu, t) d\nu. \quad (2.20)$$

s rozměrem $[\mathfrak{F}] = \text{erg} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$.

2.5 Tenzor tlaku záření

Fotony letící ve směru \mathbf{n} mají složky hybnosti $(h\nu/c)n_j$. Tyto fotony procházejí ploškou kolmou k souřadnici i (ve směru n_i). Počet fotonů prošlých touto ploškou za jednotku času vyjádříme pomocí číselné hustoty fotonů jako $f_{\text{N}}(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)cn_i$. Prošlou hybnost dostaneme jako součin uvedených výrazů. Celkový čistý tok složek hybnosti fotonů přes jednotlivé plošky (tenzor napětí záření) dostaneme integrací přes všechny směry,

$$P_{\text{R}ij}(\mathbf{r}, \nu, t) = \oint [f_{\text{N}}(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)cn_i] \left(\frac{h\nu n_j}{c} \right) d\varpi. \quad (2.21)$$

Tato definice odpovídá definici tenzoru napětí v libovolném mechanickém kontinuu. S využitím vztahu (2.4) prepíšeme (2.21) jako

$$P_{\text{R}ij}(\mathbf{r}, \nu, t) = \frac{1}{c} \oint I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)n_i n_j d\varpi, \quad (2.22)$$

případně

$$\mathbf{P}_{\text{R}}(\mathbf{r}, \nu, t) = \frac{1}{c} \oint I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)\mathbf{n}\mathbf{n} d\varpi, \quad (2.23)$$

kde $\mathbf{n}\mathbf{n}$ znamená dyadický součin vektorů¹. Vztahem (2.23) jsme zavedli **tenzor tlaku záření**. Rozměr tenzoru tlaku záření je $[\mathbf{P}_{\text{R}}] = \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{Hz}^{-1}$. Je to symetrický tenzor (protože je dyadický, má 6 nezávislých složek) a platí $P_{\text{R}ij} = P_{\text{R}ji}$.

Protože pro složky jednotkového vektoru \mathbf{n} platí $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1$, stopa tenzoru tlaku záření odpovídá monochromatické zářivé energii (2.15)

$$\text{Tr } \mathbf{P}_{\text{R}} = \sum_i P_{\text{R}ii} = \frac{1}{c} \oint I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) d\varpi = E_{\text{R}}(\mathbf{r}, \nu, t), \quad (2.24)$$

V případě *izotropního záření* je tenzor \mathbf{P}_{R} diagonální s $P_{\text{R}11} = P_{\text{R}22} = P_{\text{R}33}$. Veličinu $\frac{1}{3}\text{Tr } \mathbf{P}_{\text{R}}$ (Tr značí stopu tenzoru) můžeme ztotožnit se skalárním **tlakem**

¹Někdy se také používá názvu vnější nebo tenzorový součin a označení $\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$.

záření, který označíme p_R . Mezi skalárním tlakem záření a zářivou energií platí v izotropním prostředí vztah

$$p_R = \frac{1}{3} E_R. \quad (2.25)$$

Poměr tenzoru tlaku záření (2.23) a hustoty energie záření (2.15)

$$f(\mathbf{r}, \nu, t) = \frac{\mathbf{P}_R(\mathbf{r}, \nu, t)}{E_R(\mathbf{r}, \nu, t)} \quad (2.26)$$

nazveme **Eddingtonovým tenzorem**. Využijeme jej později při řešení momentových rovnic přenosu záření.

2.6 Momenty specifické intenzity

Základní veličinou makroskopického popisu záření je specifická intenzita záření I (viz 2.1). Integrací této veličiny přes všechny směry jsme zavedli střední intenzitu záření J (2.13) úměrnou zářivé energii E_R (2.15), integrací specifické intenzity vynásobené vektorem směru šíření záření \mathbf{n} jsme zavedli tok \mathcal{F} (2.19), integrací specifické intenzity vynásobené vnějším součinem dvou vektorů směru šíření záření $\mathbf{n}\mathbf{n}$ jsme zavedli tenzor tlaku záření \mathbf{P}_R (2.23). Tímto postupem jsme zavedli **momenty specifické intenzity záření**. Střední intenzita je moment nultého řádu (říká se jí i nultý moment), tok je moment prvního řádu (první moment – vektor) a tenzor tlaku záření je moment druhého řádu (druhý moment). Je možné zavést i momenty vyšších řádů, avšak nepoužívají se příliš často.

Pro veličiny energie, toku a tlaku záření vycházející z definice momentů specifické intenzity můžeme souhrnně psát

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \oint I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) d\varpi &= \frac{1}{4\pi} c E_R(\mathbf{r}, \nu, t) \\ \frac{1}{4\pi} \oint I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) \mathbf{n} d\varpi &= \frac{1}{4\pi} \mathcal{F}(\mathbf{r}, \nu, t) \\ \frac{1}{4\pi} \oint I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) \mathbf{n}\mathbf{n} d\varpi &= \frac{1}{4\pi} c \mathbf{P}_R(\mathbf{r}, \nu, t) \end{aligned} \quad (2.27)$$

Momenty specifické intenzity záření jsou jednak propojeny s veličinami popisujícími zářivou energii, tlak a tok zářivé energie, také ovšem vstupují do momentových rovnic přenosu záření, které uvedeme později (v kapitole 3.6).

2.7 Některé speciální případy popisu záření

Pro popis přenosu záření můžeme pochopitelně používat libolné souřadné soustavy. Bývá však výhodné využít takovou soustavu, v níž rovnice nezískají příliš

Zde chybí obrázek

Obrázek 2.3: Schematický nákres planparalelní atmosféry. Obrázek v Kubát (2010, obrázek 1).

složité tvar. Nejčastěji se používá kartézský souřadný systém, častý je i popis ve sférických souřadnicích, případně někdy i v cylindrických souřadnicích.

2.7.1 Planparalelní atmosféra

Planparalelní aproximace znamená, že fyzikální veličiny závisejí pouze na jedné souřadnici kartézského systému. Bývá zvykem za tuto souřadnici zvolit z . Záření se ale uvažuje přicházející z celého prostoru. Směr šíření záření svírá s osou z úhel θ , který může nabývat hodnot v intervalu $\langle 0; \pi \rangle$. Jeho kosinus

$$\mu = \cos \theta \quad (2.28)$$

se často používá k popisu směru šíření záření místo úhlu samotného. Díky symetrii dané závislostí pouze na jedné souřadnici je třeba uvažovat pouze různé směry podle úhlu θ . Záření nezávisí na azimutu ϕ , který se měří v rovině (x, y) a nabývá hodnot v intervalu $\langle 0; 2\pi \rangle$. Závislost specifické intenzity a jejích momentů na poloze se změní následujícím způsobem:

$$\begin{aligned} I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) &\rightarrow I(z, \mu, \nu, t) \\ J(\mathbf{r}, \nu, t) &\rightarrow J(z, \nu, t) \\ \mathcal{F}(\mathbf{r}, \nu, t) &\rightarrow \mathcal{F}(z, \nu, t) \\ P_R(\mathbf{r}, \nu, t) &\rightarrow P_R(z, \nu, t) \end{aligned} \quad (2.29)$$

Napíšeme si postupně vztahy pro výše uvedené momenty specifické intenzity záření v planparalelním jednorozměrném přiblížení. Element prostorového úhlu je dán vztahem

$$d\varpi = \sin \theta \, d\theta \, d\phi = -d\mu \, d\phi. \quad (2.30)$$

Ve vztahu pro střední intenzitu (2.13) nahradíme integrál přes prostorový úhel $\oint d\varpi$ integrály přes jednotlivé úhly, $\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta$, proměnnou θ zaměníme za μ a vztah přepíšeme

$$J(z, \nu, t) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\mu I(z, \mu, \nu, t) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu I(z, \mu, \nu, t). \quad (2.31)$$

2. POPIS ZÁŘENÍ

Pro vyjádření vyšších momentů budeme potřebovat jednotkový vektor ve směru šíření záření $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$, jehož složky jsou

$$\begin{aligned} n_x &= \sqrt{1 - \mu^2} \cos \phi, \\ n_y &= \sqrt{1 - \mu^2} \sin \phi, \\ n_z &= \mu. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Dosažením do rovnice (2.19) dostaneme pro složky vektoru toku v planparalelním přiblížení

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_x &= \mathcal{F}_y = 0, \\ \mathcal{F}_z(z, \nu, t) &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\mu \mu I(z, \mu, \nu, t) = 2\pi \int_{-1}^1 d\mu \mu I(z, \mu, \nu, t). \end{aligned} \quad (2.33)$$

Vidíme, že jediná nenulová složka vektoru toku záření je ve směru osy z . Tato složka vektoru toku vydělená 4π se nazývá **Eddingtonův tok** a označuje se H ,

$$H(z, \nu, t) = \frac{1}{4\pi} \mathcal{F}_z(z, \nu, t) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu \mu I(z, \mu, \nu, t). \quad (2.34)$$

Pro složky tenzoru tlaku záření v planparalelní geometrii z definice (2.23) a s využitím (2.32) vyplývá

$$\begin{aligned} P_{\mathbf{R}}(z, \nu, t) &= \frac{4\pi}{c} \begin{pmatrix} K(z, \nu, t) & 0 & 0 \\ 0 & K(z, \nu, t) & 0 \\ 0 & 0 & K(z, \nu, t) \end{pmatrix} \\ &\quad - \frac{2\pi}{c} \begin{pmatrix} 3K(z, \nu, t) - J(z, \nu, t) & 0 & 0 \\ 0 & 3K(z, \nu, t) - J(z, \nu, t) & 0 \\ 0 & 0 & 3K(z, \nu, t) - J(z, \nu, t) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

kde střední intenzita záření $J(z, \nu, t)$ je dána vztahem (2.31), Veličina $K(z, \nu, t)$ se někdy nazývá **K-integrál** a je dán vztahem

$$K(z, \nu, t) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\mu \mu^2 I(z, \mu, \nu, t) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu \mu^2 I(z, \mu, \nu, t). \quad (2.36)$$

Zavedeme-li (srovnej s 2.24)

$$p_{\mathbf{R}}(z, \nu, t) = \frac{4\pi}{c} K(z, \nu, t), \quad (2.37)$$

můžeme s využitím definice hustoty zářivé energie $E_{\mathbf{R}}$ (2.15) psát

2. POPIS ZÁŘENÍ

$$\begin{aligned} P_{\mathbf{R}}(z, \nu, t) &= \begin{pmatrix} p_{\mathbf{R}}(z, \nu, t) & 0 & 0 \\ 0 & p_{\mathbf{R}}(z, \nu, t) & 0 \\ 0 & 0 & p_{\mathbf{R}}(z, \nu, t) \end{pmatrix} \\ &- \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3p_{\mathbf{R}}(z, \nu, t) - E_{\mathbf{R}}(z, \nu, t) & 0 & 0 \\ 0 & 3p_{\mathbf{R}}(z, \nu, t) - E_{\mathbf{R}}(z, \nu, t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Divergence tenzoru tlaku $P_{\mathbf{R}}$ má jedinou nenulovou složku ve směru osy z ,

$$(\nabla \cdot P_{\mathbf{R}})_z = \frac{dp_{\mathbf{R}}(z, \nu, t)}{dz}. \quad (2.39)$$

Pokud je záření *izotropní*, nezávisí specifická intenzita záření I na směru (tedy na μ) a ze vztahů (2.31) a (2.36) dostaneme

$$K(z, \nu, t) = \frac{J(z, \nu, t)}{3}, \quad (2.40)$$

čímž se tenzor (2.35) zjednoduší na diagonální,

$$\begin{aligned} P_{\mathbf{R}}(z, \nu, t) &= \frac{4\pi}{c} \begin{pmatrix} K(z, \nu, t) & 0 & 0 \\ 0 & K(z, \nu, t) & 0 \\ 0 & 0 & K(z, \nu, t) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{3} \frac{4\pi}{c} \begin{pmatrix} J(z, \nu, t) & 0 & 0 \\ 0 & J(z, \nu, t) & 0 \\ 0 & 0 & J(z, \nu, t) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Tenzor tlaku můžeme v tomto případě nahradit jedinou veličinou, skalárním tlakem záření $p_{\mathbf{R}}(z, \nu, t)$, zavedeném vztahem (2.37).

Opačným extrémem je *maximální anizotropie záření* popsaná vztahem

$$I(z, \mu, \nu, t) = I(z, \nu, t)\delta(\mu - 1), \quad (2.42)$$

což popisuje záření šířící se pouze jedním směrem. Potom jsou si všechny momenty rovny a ze vztahů (2.31) a (2.36) dostaneme

$$J(z, \nu, t) = K(z, \nu, t). \quad (2.43)$$

Tenzor tlaku (2.35) přejde na jednoduchý tvar

$$P_{\mathbf{R}}(z, \nu, t) = \frac{4\pi}{c} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & K(z, \nu, t) \end{pmatrix} = \frac{4\pi}{c} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J(z, \nu, t) \end{pmatrix}. \quad (2.44)$$

Takovéto silně anizotropní záření je například záření od vzdálené hvězdy, kdy tuto hvězdu můžeme považovat za bodový zdroj.

2.7.2 Sféricky symetrická atmosféra

Jako sférických souřadnic se využívá radiální vzdálenosti r , polárního úhlu θ a azimutu ϕ . Sféricky symetrická aproximace využívá k popisu prostorové závislosti fyzikálních veličin souřadnici r , což je vzdálenost od středu symetrie. Na ostatních dvou souřadnicích (θ a ϕ) fyzikální veličiny nezávisí. Ve sférické symetrické atmosféře úhel θ popisuje úhel mezi směrem šíření záření a radiálním směrem. Podobně jako v planparalelní atmosféře se často používá jeho kosinus, $\mu = \cos \theta$.

Vztahy pro střední intenzitu záření J (2.31), tok $\mathcal{F} = (\mathcal{F}_\theta, \mathcal{F}_\phi, \mathcal{F}_r)$ (2.33, složce \mathcal{F}_z odpovídá složka \mathcal{F}_r) a tenzor tlaku záření \mathbf{P}_R (2.35, souřadnici r odpovídá poslední řádek a poslední sloupec) jsou stejné jako v planparalelním případě.

Pro radiální složku divergence libovolného tenzoru \mathbf{T} ve sférických souřadnicích platí (např. Mihalas and Weibel-Mihalas, 1984, rovnice A3.91a)

$$(\nabla \cdot \mathbf{T})_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 T_{rr})}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial (\sin \theta T_{r\theta})}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial T_{r\phi}}{\partial \phi} - \frac{1}{r} (T_{\theta\theta} + T_{\phi\phi})$$

Divergence tenzoru tlaku ve směru r má ve sférické geometrii při sférické symetrii tvar

$$(\nabla \cdot \mathbf{P}_R)_r = \frac{dp_R(r, \nu, t)}{dr} + \frac{3p_R(r, \nu, t) - E_R(r, \nu, t)}{r}. \quad (2.45)$$

Ostatní vztahy uvedené v předcházející kapitole 2.7.1 platí i pro sféricky symetrický případ po záměně $z \rightarrow r$.

2.7.3 Eddingtonův činitel a Eddingtonovo přiblížení

Pro planparalelní i sféricky symetrický případ můžeme místo Eddingtonova tenzoru (2.26) použít skalární veličinu

$$f^K(z, \nu, t) = \frac{K(z, \nu, t)}{J(z, \nu, t)} \quad (2.46)$$

(ve sféricky symetrickém případě použijeme místo z proměnnou r), kterou nazveme **Eddingtonův činitel (faktor)**. Pro izotropní záření je

$$f^K = \frac{1}{3}. \quad (2.47)$$

Často se tato hodnota předpokládá i pro případ, kdy záření izotropní není. Tomuto přiblížení se říká **Eddingtonova aproximace**. Naopak pro extrémně anizotropní záření (2.42) je

$$f^K \rightarrow 1.$$

Zde chybí obrázek

Obrázek 2.4: Záření z hvězdy. Obrázek v Unsöld (1955, str. 2), R v obrázku je R_* v textu, ϑ v obrázku je θ v textu.

Eddingtonův činitel se často používá v iteračních metodách řešení rovnice přenosu záření. Protože se během iteračního procesu mění, označujeme ho často jako **proměnný Eddingtonův činitel**. S praktickým použitím proměnného Eddingtonova činitele se setkáme později (v kapitole 7.5.2).

2.7.4 Záření ze vzdálené hvězdy

Spočtíme nyní celkovou intenzitu záření vycházející ze sféricky symetrické hvězdy směrem ke vzdálenému pozorovateli. Přidržíme se postupu uvedeného v knize Unsöld (1955, str. 2). Vzdálený pozorovatel vidí kulovou hvězdu o poloměru R_* jako kruhový disk. Záření vychází z hvězdy směrem k pozorovateli pod úhly θ závisujícími na vzdálenosti od středu disku. Z obrázku 2.4 vyplývá, že vzdálenost r od středu pozorovaného disku můžeme svázat s hvězdným poloměrem vztahem

$$r = R_* \sin \theta. \quad (2.48)$$

Element plochy pozorovaného hvězdného disku můžeme dosazením za r z (2.48) vyjádřit jako

$$dS = r dr d\phi = R_*^2 \sin \theta \cos \theta d\theta d\phi, \quad (2.49)$$

kde $\phi \in \langle 0; 2\pi \rangle$ a $\theta \in \langle 0; \pi/2 \rangle$. Z bodu na povrchu hvězdy o souřadnicích $[r, \phi]$, který můžeme s využitím (2.48) reprezentovat souřadnicemi $[\theta, \phi]$, odchází záření o specifické intenzitě $I(R_*, \nu, \theta, \phi)$. Integrací této specifické intenzity přes celý pozorovaný disk s využitím (2.49) dostaneme

$$\begin{aligned} \pi R_*^2 \bar{I}(R_*, \nu) &= \iint_S I(R_*, \nu, \theta, \phi) dS \\ &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} I(R_*, \nu, \theta, \phi) R_*^2 \sin \theta \cos \theta d\theta d\phi, \end{aligned} \quad (2.50)$$

kde jsme zavedli střední specifickou intenzitu $\bar{I}(R_*, \nu)$, která popisuje střední záření přicházejícího z hvězdného disku k pozorovateli.

Pomocí definičního vztahu (2.19) vyjádříme tok na povrchu hvězdy za předpokladu, že osa z je orientována směrem k pozorovateli, dosadíme za element

2. POPIS ZÁŘENÍ

prostorového úhlu z (2.30) a za n_z z (2.32),

$$\mathcal{F}_z(R_*, \nu) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi I(R_*, \mathbf{n}, \nu) \sin \theta \cos \theta \, d\theta \, d\phi.$$

Tento výraz vyjadřuje velikost toku v libovolném bodu na povrchu hvězdy, vektor toku je vždy orientován směrem ven z hvězdy (složky \mathcal{F}_x a \mathcal{F}_y vektoru toku jsou nulové).

Pokud se omezíme jen na záření, které z hvězdy odchází, budeme přes úhel θ integrovat jen v intervalu $\langle 0; \frac{\pi}{2} \rangle$.

$$\mathcal{F}_z^+(R_*, \nu) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} I(R_*, \mathbf{n}, \nu) \sin \theta \cos \theta \, d\theta \, d\phi. \quad (2.51)$$

Vzhledem ke sférické symetrii hvězdy bude takový integrál stejný, jako integrál vystupující intenzity odcházející z hvězdy jedním směrem (k vzdálenému pozorovateli) z viditelného povrchu hvězdy. Každému směru \mathbf{n} můžeme přiřadit místo na zdánlivém hvězdném disku, kde bude záření opouštět atmosféru pod stejným úhlem jako je úhel, který svírá směr \mathbf{n} s radiálním směrem. S využitím tohoto přiřazení můžeme integrál (2.51) zapsat jako

$$\mathcal{F}_z^+(R_*, \nu) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} I(R_*, \theta, \phi, \nu) \sin \theta \cos \theta \, d\theta \, d\phi.$$

Tento výraz je formálně stejný jako výraz pro $\bar{I}(R_*, \nu)$ vyplývající z (2.50). Střední specifická intenzita záření vystupujícího z hvězdy je tedy vyjádřena formálně stejným výrazem jako velikost vektoru toku záření, bereme-li v úvahu pouze záření odcházející z hvězdy.

Za předpokladu, že na hvězdu nedopadá žádné záření z mezihvězdného prostoru, můžeme výše uvedené tvrzení zjednodušit na často používanou větu, že z hvězd pozorujeme tok. Záření přicházející ze vzdálené hvězdy (z bodového zdroje záření) lze pak vyjádřit veličinou²

$$\frac{\mathcal{F}(R_*, \nu)}{\pi} = \bar{I}(R_*, \nu). \quad (2.52)$$

Pokud hvězdu vidíme jako bodový zdroj záření (což je případ vzdálených objektů), pozorované záření je popsáno radiální složkou toku na povrchu hvězdy vyděleného π .

²Veličina $F = \mathcal{F}/\pi$ se někdy nazývá astrofyzikální tok a bývá používána místo \mathcal{F} .

2.8 Elektromagnetický popis záření

V elektromagnetickém popisu záření se využívá vektor intenzity elektrického pole \mathbf{E} . Z Maxwellových rovnic elektromagnetického pole lze odvodit vlnovou rovnici pro \mathbf{E} (viz Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 3.27),

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{E} = 0. \quad (2.53)$$

Stejnou rovnici můžeme napsat i pro vektor intenzity magnetického pole \mathbf{H} , ale pro elektromagnetický popis záření se většinou používá \mathbf{E} . Vektory \mathbf{E} a \mathbf{H} jsou navzájem kolmé a oba jsou kolmé i ke směru šíření záření \mathbf{n} . Řešení rovnice (2.53) ve tvaru monochromatické rovinné vlny šířící se v místě \mathbf{r} rychlostí c můžeme napsat jako

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad (2.54)$$

kde \mathbf{E}_0 je amplituda vektoru elektrického pole, $\mathbf{k} = (2\pi/\lambda) \mathbf{n}$ je vlnový vektor a $\omega = 2\pi\nu$ je kruhová frekvence.

Vztah k makroskopickému popisu Pro časovou střední hodnotu hustoty energie elektromagnetického pole $\langle E_{\text{EM}} \rangle$ monochromatické vlny platí (viz Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 3.40)

$$\langle E_{\text{EM}} \rangle = \frac{1}{4\pi} \langle E_0^2 \cos^2(\omega t) \rangle = \frac{E_0^2}{8\pi}, \quad (2.55)$$

kde $E_0 = |\mathbf{E}_0|$. Rovinná monochromatická vlna se šíří pouze ve směru \mathbf{n} , její specifickou intenzitu můžeme zapsat jako

$$I(\nu) = I(\nu_0) \delta(\nu - \nu_0) \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}_0). \quad (2.56)$$

Dosazením do (2.15) dostaneme monochromatickou zářivou energii této rovinné vlny

$$E_R(\nu_0) = \frac{I(\nu_0)}{c}. \quad (2.57)$$

Z rovnosti energií (2.55) a (2.57) plyne vztah mezi specifickou intenzitou záření a amplitudou intenzity elektromagnetického pole

$$I = \frac{c}{8\pi} E_0^2. \quad (2.58)$$

Tento vztah dává do souvislosti popis záření pomocí elektromagnetického pole s makroskopickým popisem.

2.8.1 Šíření rovinné monochromatické vlny, mikroskopická polarizace

Zvolíme-li směr šíření ve směru osy z , budou složky vektoru $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$ a řešení můžeme zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned} E_x(z, t) &= E_1 \cos(kz - \omega t + \phi_1) \\ E_y(z, t) &= E_2 \cos(kz - \omega t + \phi_2) \end{aligned} \quad (2.59)$$

kde E_1 a E_2 tvoří složky vektoru \mathbf{E}_0 , $\mathbf{E}_0 = (E_1, E_2, 0)$. Zafixujeme-li rovinu kmitů elektrického vektoru (například $z = 0$), rovnice (2.59) přejde na tvar

$$\begin{aligned} E_x(t) &= E_1 \cos(\omega t - \phi_1) \\ E_y(t) &= E_2 \cos(\omega t - \phi_2) \end{aligned} \quad (2.60)$$

Při pohybu elektromagnetické vlny se v takto zavedené rovině (x, y) vektor \mathbf{E} otáčí a jeho konec opisuje elipsu, kterou bývá zvykem nazývat **polarizační elipsou**.

Zavedeme veličiny kombinující amplitudu a fázi složek elektrického vektoru (podrobnější diskusi lze nalézt například v Landi Degl'Innocenti, 2014, kapitola 2.5)

$$\begin{aligned} P_I &= E_1^2 + E_2^2, \\ P_Q &= E_1^2 - E_2^2, \\ P_U &= 2E_1E_2 \cos(\phi_1 - \phi_2), \\ P_V &= 2E_1E_2 \sin(\phi_1 - \phi_2), \end{aligned} \quad (2.61)$$

s jejichž pomocí můžeme popsat vlastnosti polarizační elipsy. Veličiny (2.61) nejsou nezávislé, platí mezi nimi vztah

$$P_I^2 = P_Q^2 + P_V^2 + P_U^2. \quad (2.62)$$

Pomocí veličin (2.61) můžeme také popsat **mikroskopickou polarizaci** záření. Pro $P_Q = P_U = 0$ (P_I a P_V jsou nenulové) je $E_1 = E_2$ a $\phi_1 - \phi_2 = \pm\pi/2$, záření je **kruhově polarizováno**, \mathbf{E} opisuje kružnici, která se pro $P_V = P_I$ otáčí doprava a pro $P_V = -P_I$ doleva. V případě $P_V = 0$ (a nenulových P_I, P_Q, P_U) je buď jedna z E_1 a E_2 nulová nebo $\phi_1 - \phi_2 = n\pi$ ($n = -1, 0, 1$), záření je **lineárně polarizováno**, \mathbf{E} kmitá podél čáry, jejíž sklon α vzhledem k ose x je určen hodnotami P_Q a P_U ($P_U/P_Q = \tan 2\alpha$). Pokud nejsou splněny uvedené speciální podmínky, jedná se o obecný případ, kdy \mathbf{E} opisuje elipsu a hovoříme o **eliptické polarizaci** záření.

Alternativně můžeme rovnice (2.60) přepsat v komplexním formalismu

$$\begin{aligned} E_x(t) &= \operatorname{Re} (E_1 e^{i(\phi_1 - \omega t)}) = \operatorname{Re} (\mathcal{E}_1 e^{-i\omega t}) \\ E_y(t) &= \operatorname{Re} (E_2 e^{i(\phi_2 - \omega t)}) = \operatorname{Re} (\mathcal{E}_2 e^{-i\omega t}) \end{aligned} \quad (2.63)$$

kde

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_1 &= E_1 e^{i\phi_1}, \\ \mathcal{E}_2 &= E_2 e^{i\phi_2}. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Pak veličiny (2.61) můžeme vyjádřit jako

$$\begin{aligned} P_I &= \mathcal{E}_1^* \mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2^* \mathcal{E}_2 \\ P_Q &= \mathcal{E}_1^* \mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2^* \mathcal{E}_2 \\ P_U &= \mathcal{E}_1^* \mathcal{E}_2 + \mathcal{E}_2^* \mathcal{E}_1 \\ P_V &= i (\mathcal{E}_1^* \mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_2^* \mathcal{E}_1) \end{aligned} \quad (2.65)$$

2.8.2 Statistický popis, makroskopická polarizace

Rovinná monochromatická vlna je abstraktní pojem. Realističtější popis dostaneme, budeme-li záření považovat za statistickou superpozici vlnových balíčků, z nichž každý je časově a prostorově omezený. Tím dostaneme kvazimonochromatickou vlnu. Pokud navíc nebudou mít jednotlivé balíčky stejné polarizační vlastnosti, bude se i polarizační elipsa měnit statisticky s časem. Definici veličin (2.61) zobecníme pomocí středních hodnot (*makroskopická polarizace*)

$$\begin{aligned} P_I &= \langle E_1^2 + E_2^2 \rangle = \langle \mathcal{E}_1^* \mathcal{E}_1 \rangle + \langle \mathcal{E}_2^* \mathcal{E}_2 \rangle \\ P_Q &= \langle E_1^2 - E_2^2 \rangle = \langle \mathcal{E}_1^* \mathcal{E}_1 \rangle - \langle \mathcal{E}_2^* \mathcal{E}_2 \rangle \\ P_U &= \langle 2E_1 E_2 \cos(\phi_1 - \phi_2) \rangle = \langle \mathcal{E}_1^* \mathcal{E}_2 \rangle + \langle \mathcal{E}_2^* \mathcal{E}_1 \rangle \\ P_V &= \langle 2E_1 E_2 \sin(\phi_1 - \phi_2) \rangle = i (\langle \mathcal{E}_1^* \mathcal{E}_2 \rangle - \langle \mathcal{E}_2^* \mathcal{E}_1 \rangle) \end{aligned} \quad (2.66)$$

Odvození těchto vztahů za použití Fourierovy transformace lze nalézt v knize Landi Degl'Innocenti (2014, kapitola 2.6).

Lze ukázat (Landi Degl'Innocenti and Landolfi, 2004, kapitola 1.4), že na rozdíl od vztahu (2.62) platícího pro mikroskopickou polarizaci platí pro makroskopickou polarizaci nerovnost

$$P_I^2 \geq P_Q^2 + P_V^2 + P_U^2. \quad (2.67)$$

Speciální případ (možný na rozdíl od mikroskopické polarizace)

$$P_Q = P_U = P_V = 0$$

Zde chybí obrázek

Obrázek 2.5: Schematická reprezentace Stokesových parametrů Q, U, V . Obrázek v (Landi Degl'Innocenti and Landolfi, 2004, obr. 1.8).

znamená, že obě složky vektoru \mathbf{E} mají stejnou střední hodnotu amplitudy (z $P_Q = 0$) a náhodný fázový posun (z $P_U = P_V = 0$). Jinými slovy jsou kmity vektoru \mathbf{E} podél os x a y stejné a nekorelované. Takové záření nazýváme **nepolarizovaným**.

Veličina

$$p = \frac{\sqrt{P_Q^2 + P_U^2 + P_V^2}}{P_I} \quad (2.68)$$

se nazývá **stupeň polarizace**. Pro nepolarizované záření je $p = 0$. Pokud ve vztahu (2.67) platí rovnost, je $p = 1$ a záření je **úplně polarizované**. Pro $0 < p < 1$ je záření **částečně polarizované**. S využitím (2.58) zavedeme veličiny popisující **makroskopickou polarizaci** záření

$$\begin{aligned} I &\equiv kP_I \\ Q &\equiv kP_Q \\ U &\equiv kP_U \\ V &\equiv kP_V \end{aligned} \quad (2.69)$$

kde $k = c/(8\pi)$. Veličiny I, Q, U, V jsou **Stokesovy parametry**, které používáme k makroskopickému popisu polarizovaného záření. Veličiny pro popis polarizovaného záření zavedl Stokes (1852), avšak označil je A, B, C, D . Značení I, Q, U, V bylo zavedeno později, používá ho Chandrasekhar (1947, 1950) i Walker (1954). Používala se i jiná značení, například P, Q, R, S (Walker, 1904) nebo I, M, C, S (Perrin, 1942).

Veličina I ve vztahu (2.69) je specifická intenzita záření, která byla zavedena v kapitole 2.1. Zavedeme **ideální polarizační filtry** vybírající pouze lineárně polarizované záření nebo kruhově polarizované záření (pravotočivé nebo levotočivé). Použijeme označení I_{0° pro záření lineárně polarizované ve směru osy y , I_{90° ve směru osy x , I_{45° a I_{135° pro záření lineárně polarizované v navzájem kolmých diagonálních směrech mezi osami x a y , I_{\odot} pro kladně kruhově polarizované záření a I_{\ominus} pro záporně kruhově polarizované záření. Pak můžeme veličiny I, Q, U, V ze vztahu (2.69) interpretovat s jejich pomocí (viz obrázek 2.5),

$$\begin{aligned} I &= I_{0^\circ} + I_{90^\circ} = I_{45^\circ} + I_{135^\circ} = I_{\odot} + I_{\ominus} \\ Q &= I_{0^\circ} - I_{90^\circ} \\ U &= I_{45^\circ} - I_{135^\circ} \\ V &= I_{\odot} - I_{\ominus}. \end{aligned} \quad (2.70)$$

2. POPIS ZÁŘENÍ

Veličina I udává součet intenzit v navzájem kolmých směrech lineární polarizace nebo součet intenzit opačných kruhových polarizací, měří nepolarizované záření. Veličina Q udává rozdíl intenzit ve směrech x a y , měří lineární polarizaci. Veličina U udává rozdíl intenzit v diagonálních směrech, rovněž měří lineární polarizaci. Veličina V udává rozdíl intenzit získaných ideálními kruhově polarizačními filtry, měří tedy kruhovou polarizaci.

Kapitola 3

Přenos záření

V kapitole 2.1 jsme zmínili neměnnost specifické intenzity podél směru šíření záření. Přenos záření ve vakuu znamená tedy zachování záření, žádné fotony nevznikají ani nemizí. Jiná situace nastane, pokud záření cestou potká hmotu. Při vzájemném působení hmoty a záření dochází k přeměně zářivé energie na vnitřní nebo kinetickou energii a naopak, k přeměně vnitřní a kinetické energie na zářivou energii. V této kapitole rozebereme základní typy interakcí a zformulujeme rovnici přenosu záření.

3.1 Absorpce, emise a rozptyl záření hmotou

Interakci záření s hmotou můžeme popsat pomocí srážek fotonů s atomy nebo molekulami. Během těchto interakcí může dojít k absorpci fotonu, emisi fotonu nebo k jeho rozptylu. Kvantově mechanický popis těchto tří základních procesů se poněkud liší od toho, co pod těmito procesy rozumíme v astrofyzice (viz Mihalas, 1978, section 2.1). Pro zjednodušení vysvětlíme rozdíly na interakci fotonů s atomy.

Ve fyzice chápeme absorpci fotonu atomem jako kvantově mechanický proces prvního řádu, který způsobí jeden ze tří atomárních přechodů: (i) přeskok elektronu na vyšší energetickou hladinu atomu, (ii) oddělení elektronu od atomu do kontinua, kde má elektron konečnou kinetickou energii, (iii) zvýšení kinetické energie volného elektronu pohybujícího se v poli atomu. Podobně emise fotonu atomem je kvantově mechanický proces prvního řádu, který je způsoben jedním ze tří atomárních přechodů: (i) spontánním přechodem elektronu do stavu atomu s nižší energií, (ii) rekombinací elektronu z kontinua do vázaného stavu, (iii) převodem části kinetické energie volného elektronu v poli atomu do záření. Rozptyl fotonu je potom kvantově mechanický proces vyššího řádu s definovaným centrem rozptylu.

Zde chybí obrázek

Obrázek 3.1: Ilustrace absorpce, emise a rozptylu ve spektrálních čarách

V astrofyzice se používá pojem *pravé absorpce* (*true absorption*) fotonu, který znamená přeměnu jeho energie na tepelnou energii. Toto nastává, když (i) foton ionizuje atom, (ii) foton je absorbován elektronem pohybujícím se v poli atomu (volně-volná absorpce), (iii) atom je excitován fotonem a tato absorpce fotonu je následována srážkou s jinou částicí, během níž dojde k deexcitaci (foton je srážkově zničen – termalizován). Tento proces pravé absorpce se liší od jiného procesu, kdy je atom místo srážkové deexcitace deexcitován zářivě. Tomuto procesu se pak říká *rozptyl záření v čáře* (*line scattering*), i když to není rozptyl v kvantově mechanickém smyslu. Podobným rozptylovým procesem (absorpce záření následovaná emisí) je rozptyl na vázaných elektronech (Rayleighův nebo Ramanův). Dalším rozptylovým procesem je například rozptyl na volných elektronech (Thomsonův nebo Comptonův). Tento rozptyl je rozptylem i v kvantověmechanickém smyslu.

K absorpčním procesům existují opačné procesy, kdy se foton uvolňuje (emisní procesy), (i) foton vzniká při rekombinaci elektronu, (ii) foton je vyzářen elektronem pohybujícím se v poli atomu (volně-volná emise známá též jako brzdné záření), (iii) foton je vyzářen po srážkové excitaci (na úkor termální energie prostředí – tepelná emise).

Při tomto (astrofyzikálním) popisu, kdy formálně slučujeme různé formy excitace a deexcitace, vzniká řada nejasně klasifikovatelných procesů, například v mnohohladinovém atomu, kdy je absorpce fotonu následována kombinací několika emisních procesů, z nichž některé mohou být srážkové a jiné zářivé. Tyto procesy je pak vhodnější popisovat pomocí soustavy rovnic kinetické (statistické) rovnováhy, které jsou popsány v kapitole 9 (podkapitola 9.2 a následující).

Kromě uvedených procesů může docházet i k jiným procesům, při nichž je vyzářováno nebo pohlcováno záření, například urychlování nabitých částic v coulombickém poli jiné nabitě částice (nejen elektronu), záření pohybujících se nabitých částic buď nerelativisticky (cyklotronové záření) nebo relativisticky (synchrotronové) záření (více viz Rybicki and Lightman, 1979).

V popisu přenosu záření pomocí jeho intenzity, který jsme zavedli v kapitole 2, popisujeme interakci záření s hmotou pomocí makroskopických veličin.

3.1.1 Absorpční koeficient

Pro popis procesů, kdy je během interakce záření s hmotou záření pohlceno, zavedeme *makroskopický absorpční koeficient* $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)$. Pro tuto veličinu se

3. PŘENOS ZÁŘENÍ

někdy (často) používají i jiné názvy, jako například extinkční koeficient, extinkce nebo *opacita*. Záření o intenzitě $I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)$ ve frekvenčním intervalu $\langle \nu; \nu + d\nu \rangle$ se šíří podél paprsku ve směru \mathbf{n} do prostorového úhlu $d\varpi$. Dopadá kolmo na plošku dS objemového elementu délky ds . Při průchodu tímto elementem je za čas dt pohlcena energie δE , která je daná vztahem

$$\delta E = \chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) dS ds d\varpi d\nu dt. \quad (3.1)$$

V tomto koeficientu jsou formálně zahrnuty všechny možné absorpční i rozptylové procesy. Podrobněji se jimi budeme zabývat v kapitole 5. Rozměr absorpčního koeficientu $[\chi] = \text{cm}^{-1}$. Převrácená hodnota absorpčního koeficientu ($1/\chi$) je *střední volná dráha fotonu*. Ve statickém prostředí můžeme často považovat absorpční koeficient za izotropní.

Často se používá i *hmotnostní absorpční koeficient* (*mass absorption coefficient*), který zde označíme \varkappa ,

$$\varkappa(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) = \frac{\chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)}{\rho(\mathbf{r})}, \quad (3.2)$$

což je v podstatě účinný průřez na jednotku hmotnosti. Jeho rozměr je $[\varkappa] = \text{cm}^2 \text{g}^{-1}$. Často se mu říká opacita, což je vzhledem k definici opacity (3.1) matoucí i vzhledem k tomu, že značení není vždy jednotné (používají se symboly χ , κ , \varkappa i k). Jeho výhodou je fakt, že nezávisí na hustotě prostředí. Proto i v prostředí, kde se hustota mění řádově (například hvězdná atmosféra), se $\varkappa(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)$ jako funkce \mathbf{r} mění jen málo.

3.1.2 Emisní koeficient

Pro popis emise zavedeme *makroskopický emisní koeficient* $\eta(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)$. Pro tuto veličinu se také používá název *emisivita*. Z objemového elementu ohraničeného ploškou dS a délkou ds vychází během doby dt záření ve frekvenčním intervalu $\langle \nu; \nu + d\nu \rangle$, které se šíří podél paprsku ve směru \mathbf{n} do prostorového úhlu $d\varpi$. Vyzářená energie je dána vztahem

$$\delta E = \eta(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) dS ds d\varpi d\nu dt \quad (3.3)$$

V tomto koeficientu jsou formálně zahrnuty všechny možné emisní procesy, jak termální, tak i rozptylové. Podrobněji se jimi budeme zabývat v kapitole 5. Rozměr emisního koeficientu je $[\eta] = \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{Hz}^{-1}$.

3.2 Rovnice přenosu záření

Rovnici přenosu záření lze bez nadsázky považovat za jednu z nejdůležitějších astronomických rovnic. Odvodíme ji na základě úvah o energetické rovnováze v ob-

Zde chybí obrázek

Obrázek 3.2: Odvození rovnice přenosu záření. Obrázek v (Mihalas, 1978, obr. 2-1, str. 31).

jemovém elementu $ds dS$. Necht' na plošku dS dopadá za čas dt kolmo zářivá energie z frekvenčního intervalu $\langle \nu; \nu + d\nu \rangle$ ve směru \mathbf{n} z prostorového úhlu $d\varpi$ (viz obrázek 3.2). Tato energie je dána vztahem (2.1), $\delta\mathcal{E} = I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) dS d\varpi d\nu dt$. Po průchodu elementární vzdáleností ds se tato energie změní na $\delta\mathcal{E}' = I(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t + \Delta t) dS d\varpi d\nu dt$. Na elementární vzdálenosti ds je absorbována energie daná vztahem (3.1), $\delta\mathcal{E}_a = \chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) dS ds d\varpi d\nu dt$ a emitována energie daná vztahem (3.3), $\delta\mathcal{E}_e = \eta(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) dS ds d\varpi d\nu dt$. Pro tyto energie platí

$$\delta\mathcal{E}' - \delta\mathcal{E} = -\delta\mathcal{E}_a + \delta\mathcal{E}_e. \quad (3.4)$$

Po dosazení do tohoto vztahu dostaneme

$$\begin{aligned} & [I(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t + \Delta t) - I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)] dS d\varpi d\nu dt = \\ & = [\eta(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) - \chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)] ds dS d\varpi d\nu dt. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Rovnice (3.5) vyjadřuje, že rozdíl mezi množstvím energie v místě $\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}$ a čase $t + \Delta t$ a v místě \mathbf{r} a čase t (levá strana) je stejný jako množství energie absorbované a emitované hmotou mezi místy \mathbf{r} a $\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}$.

Označme $\Delta t = \Delta s/c$, kde Δs je vzdálenost, kterou urazí paprsek za čas Δt z místa \mathbf{r} , kde byl v čase t . Pro intenzitu záření v místě $\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}$ a čase $t + \Delta t$ můžeme pomocí derivace ve směru a po záměně $\Delta s \rightarrow ds$ psát

$$I(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t + \Delta t) = I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) + \left[\frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{\partial I}{\partial s} \right] ds. \quad (3.6)$$

Dosazením z (3.6) do (3.5) dostaneme

$$\left[\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial s} \right] I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) = \eta(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) - \chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t), \quad (3.7)$$

což můžeme vyjádřit pomocí směru paprsku \mathbf{n} a operátoru ∇ jako

$$\left[\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{n} \cdot \nabla) \right] I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) = \eta(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) - \chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t). \quad (3.8)$$

Často se používá rovnice přenosu záření pro časově nezávislý problém

$$\mathbf{n} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu) = \eta(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu) - \chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu) I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu), \quad (3.9)$$

případně pomocí derivace ve směru

$$\frac{dI(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu)}{ds} = \eta(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu) - \chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu)I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu). \quad (3.10)$$

I když rovnice přenosu záření obsahuje explicitně pouze časové a prostorové derivace, je to ve své podstatě integrodiferenciální rovnice, protože opacita χ a emisivita η obecně závisejí na střední intenzitě záření, jak uvidíme v kapitole 9.2.

Rovnice přenosu záření jako Boltzmannova rovnice Napíšeme Boltzmannovu kinetickou rovnici (F.1) pro fotony. Pro fotonový plyn bez obecně relativistických efektů je vnější síla $\mathbf{f}^{\text{ext}} = 0$, foton se v inerciálním systému pohybuje po přímce s rychlostí $\mathbf{v}_p = c\mathbf{n}$, přičemž frekvence zůstává konstantní. Distribuční funkce fotonů f_{R} je se specifickou intenzitou svázána vztahem $f_{\text{R}} = c^2/(h^4\nu^3)I$, číselná hustota fotonů vztahem (2.4), $f_{\text{N}} = I/(c h \nu)$. Dosadíme do (F.1) $f = f_{\text{R}}$. Srážkový člen bude vyjadřovat rozdíl počtu absorbovaných a emitovaných fotonů, dostaneme ho jako rozdíl emitované a absorbované energie poděleného energií fotonu $h\nu$. Dostáváme (Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 11.27)

$$\frac{1}{c h \nu} \left[\frac{\partial I}{\partial t} + c(\mathbf{n} \cdot \nabla) I \right] = \frac{\eta - \chi I}{h \nu} \quad (3.11)$$

Rovnice přenosu záření je Boltzmannova rovnice relativistického plynu neinteragujícího s vnějšími silami, ale silně interagujícího s hmotou.

3.2.1 Planparalelní přiblížení v rovinné geometrii

V případě jednorozměrné planparalelní atmosféry zavedené v kapitole 2.7.1 jsou derivace všech veličin podle souřadnic x a y nulové,

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} = 0 \quad (3.12)$$

a pro složku jednotkového vektoru ve směru osy z platí

$$n_z = \frac{dz}{ds} = \cos \theta = \mu. \quad (3.13)$$

Z rovnice (3.8) tak dostaneme

$$\left[\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \mu \frac{\partial}{\partial z} \right] I(z, \mu, \nu, t) = \eta(z, \mu, \nu, t) - \chi(z, \mu, \nu, t)I(z, \mu, \nu, t), \quad (3.14)$$

pro případ časově nezávislé ($\partial/\partial t = 0$) atmosféry se rovnice zjednoduší na

$$\mu \frac{dI(z, \mu, \nu)}{dz} = \eta(z, \mu, \nu) - \chi(z, \mu, \nu)I(z, \mu, \nu). \quad (3.15)$$

zde chybí obrázek

Obrázek 3.3: Geometrické vztahy mezi souřadnicemi v lokální sférické geometrii (obrázek viz Mihalas, 1978, Fig.2-2).

3.2.2 Sféricky symetrické přiblížení

V daném bodě sféricky symetrické atmosféry označuje θ úhel mezi radiálním směrem a směrem šíření záření \mathbf{n} . Lokální azimut označíme ϕ . Vzhledem ke sférické symetrii platí

$$\frac{\partial}{\partial \phi} = 0. \quad (3.16)$$

Z obrázku 3.3 vidíme, že pro element délky platí $d\mathbf{s} = dr\mathbf{r}_0 + r d\theta\boldsymbol{\theta}_0$, přičemž $dr = \cos\theta ds$, $r d\theta = -\sin\theta ds$ (při posunu směrem od středu symetrie pro $\forall ds$ platí $d\theta < 0$), \mathbf{r}_0 a $\boldsymbol{\theta}_0$ jsou jednotkové vektory v odpovídajících směrech. Derivace ve směru ds přejde na tvar

$$\frac{\partial}{\partial s} \rightarrow \frac{dr}{ds} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{d\theta}{ds} \frac{\partial}{\partial \theta} = \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} = \mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial}{\partial \mu}. \quad (3.17)$$

Z rovnice (3.7) dostaneme

$$\left[\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \mu \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} \right] I(r, \mu, \nu, t) = \eta(r, \mu, \nu, t) - \chi(r, \mu, \nu, t) I(r, \mu, \nu, t), \quad (3.18)$$

pro časově nezávislý případ ($\partial/\partial t = 0$) je

$$\mu \frac{\partial I(r, \mu, \nu)}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial I(r, \mu, \nu)}{\partial \mu} = \eta(r, \mu, \nu) - \chi(r, \mu, \nu) I(r, \mu, \nu). \quad (3.19)$$

3.3 Optická hloubka

Veličinu τ_s popisující průhlednost hmoty pro záření o frekvenci ν v místě \mathbf{r} zavedeme diferenciálním vztahem

$$d\tau_s(\mathbf{r}, \nu) \equiv \chi(\mathbf{r}, \nu) ds, \quad (3.20)$$

a nazveme ji **optická hloubka** podél paprsku s . V této definici je ds elementární geometrická vzdálenost. Integrací této rovnice získáme optickou vzdálenost z místa s_1 do místa s_2 ,

$$\tau_s(\mathbf{r}, \nu) = \int_{s_1}^{s_2} \chi(\mathbf{r}, \nu) ds, \quad (3.21)$$

kteřá je různá pro různá místa s_1 a s_2 , tím i pro různé paprsky, podél nichž se šíří světlo. Protože převrácená hodnota opacity ($1/\chi$) odpovídá střední volné dráze fotonu, udává optická hloubka (3.23) počet volných drah fotonu mezi místy s_1 a s_2 . Jinými slovy optická hloubka měří vzdálenost mezi dvěma místy v jednotkách střední volné dráhy fotonu. Prostředí, jehož optická hloubka je velká, $\tau(\nu) \gg 1$, je prakticky neprůhledné, říkáme mu *opticky tlusté*. Naopak pokud platí, že $\tau(\nu) \ll 1$, je takové prostředí průhledné a běžně se nazývá *opticky tenké*. Jak je patrné ze vztahu (3.21), optická hloubka závisí na frekvenci. Pro každou frekvenci může být optická vzdálenost mezi dvěma body různá. Prostředí opticky tenké na jedné frekvenci může být na jiné frekvenci opticky tlusté. To může platit i pro různé frekvence jedné spektrální čáry.

Pro případ rovinné geometrie můžeme zavést směrově nezávislou veličinu

$$d\tau(z, \nu) \equiv -\chi(z, \nu) dz. \quad (3.22)$$

kde záporné znaménko je důsledkem konvence, že v planparalelní hvězdné atmosféře optická hloubka klesá s rostoucím z . Tento vztah definuje škálu optických hloubek $\tau(z, \nu)$. Integrací této rovnice podél paprsku dostaneme

$$\tau(z, \nu) = \int_z^{z_{\max}} \chi(z', \nu) dz'. \quad (3.23)$$

Pro paprsky svírající s osou z nenulový úhel θ ($\mu = \cos \theta$) je optická hloubka podél paprsku dána vztahem

$$\tau_s(z, \nu, \mu) = \frac{\tau(z, \nu)}{\mu}. \quad (3.24)$$

Optická hloubka v planparalelním prostředí roste se sklonem paprsku.

3.4 Vydatnost

Vydatnost (zdrojová funkce, funkce zdroje) je definována jako poměr emisivity a opacity,

$$S(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu) = \frac{\eta(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu)}{\chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu)}. \quad (3.25)$$

Rovnici přenosu nezávislou na čase (3.9) můžeme pomocí vydatnosti (3.25) a optické hloubky (3.20) přepsat jako

$$\frac{dI(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu)}{d\tau_s(\mathbf{r}, \nu)} = I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu) - S(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu) \quad (3.26)$$

Planparalelní rovnici přenosu (3.15) můžeme zapsat pomocí optické hloubky $\tau_\nu \equiv \tau(\nu)$ (rovnice 3.22) a vydatnosti (3.25) jako

$$\mu \frac{dI(\tau, \nu, \mu)}{d\tau(\nu)} = I(\tau, \nu, \mu) - S(\tau, \nu, \mu). \quad (3.27)$$

kde intenzita $I(\tau, \nu, \mu)$ a vydatnost $S(\tau, \nu, \mu)$ jsou nyní funkcí optické hloubky $\tau(\nu)$. Rovnici (3.27) můžeme alternativně zapsat způsobem běžným v astrofyzikálním přenosu záření

$$\mu \frac{dI_{\nu\mu}}{d\tau_\nu} = I_{\nu\mu} - S_{\nu\mu}, \quad (3.28)$$

kde jsme použili označení závislosti veličin na proměnných pomocí indexu místo závorek. Toto označení budeme v následujícím textu používat často.

Ukážeme si fyzikální význam vydatnosti S (viz Hubeny, 1997). Z definice emisivity (3.3) získáme její integraci přes všechny úhly a vydělením energií fotonu $h\nu$ počet emitovaných fotonů δN_ν^{em} .

$$\delta N_\nu^{\text{em}} = \eta_\nu \frac{4\pi}{h\nu} dS ds d\nu dt. \quad (3.29)$$

S využitím $\eta_\nu ds = (\eta_\nu/\chi_\nu) \chi_\nu ds = S_\nu d\tau_\nu$ vztah přepíšeme

$$\delta N_\nu^{\text{em}} = (S_\nu(\tau_\nu) d\tau_\nu) \left(\frac{4\pi}{h\nu} d\nu dt dS \right) \quad (3.30)$$

Z (3.30) dostáváme, že vydatnost je úměrná počtu fotonů emitovaných na jednotkovou optickou hloubku. Podobně z definice absorpčního koeficientu (3.1) je počet absorbovaných fotonů $\delta N_\nu^{\text{abs}}$

$$\delta N_\nu^{\text{abs}} = (J_\nu(\tau_\nu) d\tau_\nu) \left(\frac{4\pi}{h\nu} d\nu dt dS \right), \quad (3.31)$$

tedy počet fotonů absorbovaných jednotkovou optickou hloubkou je úměrný střední intenzitě záření.

3.5 Typické okrajové podmínky rovnice přenosu

Řešení rovnice přenosu záření (3.10) pro zadanou frekvenci ν a směr šíření záření n vyžaduje jednu okrajovou podmínku specifikující záření na počátku jeho šíření. K úplnému řešení problému přenosu záření v typickém astrofyzikálním prostředí (například hvězdné atmosféře nebo oblasti s mezihvězdným plynem) ve

všech směrech potřebujeme okrajových podmínek podstatně více, v podstatě tolik, kolik rovnic přenosu záření potřebujeme vyřešit. Situaci komplikuje provázanost fyzikálních procesů při přenosu záření. Pro řadu astronomických problémů potřebujeme v daném místě najednou znát záření ze všech směrů, ať už pro započtení rozptylu (kapitoly 5.7, 5.8) nebo například pro řešení rovnic kinetické rovnováhy (kapitola 9.2). Situace se naopak zjednoduší, pokud můžeme vyjádřit dopadající intenzitu záření pomocí nějaké závislosti, například pomocí Planckovy funkce. Další významné zjednodušení přinášejí různé symetrie při řešení, jako je například jednorozměrný problém, rovinný i sféricky symetrický.

Ukážeme si několik typických typů okrajových podmínek pro jednorozměrný případ. Zobecnění pro více rozměrů je pak přímočaré. Konkrétní okrajové podmínky je třeba vždy volit s ohledem na konkrétní problém, který řešíme. Zde uvedeme jen několik jednoduchých typických příkladů.

Konečná vrstva, sférická slupka Přiblížení konečné vrstvy (planparalelní atmosféra) můžeme použít například ke studiu slunečních protuberancí nebo planetárních mlhovin, sférická slupka (část sféricky symetrické atmosféry) zase může dobře vystihnout okolohvězdnou obálku.

Budeme používat označení horní a spodní okrajová podmínka, i když pro některé specifické případy (například sluneční protuberance) nelze rozumně stanovit, kde je „nahore“ a kde je „dole“. Za horní okrajovou podmínku budeme považovat okrajovou podmínku pro větší hodnotu souřadnice z . V případě konečné vrstvy nebo sférické slupky můžeme horní okrajovou podmínku pro záření o frekvenci ν ve směru μ zapsat v místě s optickou hloubkou τ_{\min} jako

$$I(\tau_\nu = \tau_{\min}, \mu, \nu) = I^-(\mu, \nu) \quad (-1 \leq \mu \leq 0), \quad (3.32a)$$

kde I^- označuje specifickou intenzitu záření dopadající na horní okraj atmosféry, čemuž odpovídají i záporné směrové kosiny paprsků. Spodní okrajovou podmínku v místě s optickou hloubkou τ_{\max} zapíšeme jako

$$I(\tau_\nu = \tau_{\max}, \mu, \nu) = I^+(\mu, \nu) \quad (0 \leq \mu \leq 1), \quad (3.32b)$$

kde I^+ označuje specifickou intenzitu záření dopadající na spodní okraj atmosféry.

Symetrická vrstva Speciálním případem konečné vrstvy je symetrická vrstva, kterou lze použít pro popis například akrečního disku nebo i sluneční protuberance v případě, že je ozařována na obou okrajích stejně a pokud můžeme předpokládat, že její fyzikální vlastnosti jsou symetrické podle roviny ve středu mezi

oběma okraji. Za horní okrajovou podmínku můžeme použít vztah (3.32a), druhou okrajovou podmínku v místě τ_{\max} zvolíme ve středu symetrické vrstvy a bude vyjadřovat fakt, že záření z obou protichůdných směrů je stejné,

$$I(\tau_\nu = \tau_{\max}(\nu), \mu, \nu) = I(\tau_\nu = \tau_{\max}(\nu), -\mu, \nu). \quad (3.33)$$

Polonekonečné prostředí (*semi-infinite medium*) Zvláštní případem konečné vrstvy je vrstva, kde je spodní okrajová podmínka formulována pro optickou hloubku $\tau \gg 1$. Tímto modelem bývají popisovány hvězdné atmosféry. V případě osamocené hvězdy na ni nedopadá žádné záření, případně můžeme dopadající záření zanedbat. V tom případě můžeme horní okrajovou podmínku vyjádřit vztahem (3.32a) s $I^- = 0$,

$$I(\tau_\nu = \tau_{\min}, \mu, \nu) = 0 \quad (-1 \leq \mu \leq 0) \quad (3.34a)$$

Na spodním okraji pro velké optické hloubky můžeme použít například vyjádření dopadající intenzity pomocí rozvoje vydatnosti,

$$I(\tau_\nu = \tau_{\max}(\nu), \mu, \nu) = I^+(\mu, \nu) = S(\mu, \nu) + \frac{dS(\mu, \nu)}{d\tau_\nu} \quad (0 \leq \mu \leq 1) \quad (3.34b)$$

kteří vyplývá z difúzního přiblížení (kapitola 6.1). Alternativně můžeme spodní okrajovou podmínku nahradit analytickým výrazem (viz Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 11.84) vyjadřujícím omezenost specifické intenzity,

$$\lim_{\tau_\nu \rightarrow \infty} I(\tau_\nu, \mu, \nu) e^{-\tau_\nu/\mu} = 0, \quad (3.34c)$$

který je vhodný pro analytické výpočty.

3.6 Momenty rovnice přenosu záření

Momentové rovnice přenosu záření dostaneme vynásobením rovnice přenosu pro specifickou intenzitu (3.8) mocninami vektoru směru šíření záření \mathbf{n} a následnou integrací přes všechny směry (podobně jako v kapitole 2.6). Použití momentů v rovnici přenosu záření odstraní explicitní úhlovou závislost této rovnice.

Integrací rovnice (3.8) přes ϖ (všechny směry) dostaneme s využitím definic (2.13) a (2.19) **momentovou rovnici přenosu záření nultého řádu**

$$\frac{4\pi}{c} \frac{\partial J_\nu}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{F}_\nu = \oint [\eta_\nu(\mathbf{n}) - \chi_\nu(\mathbf{n}) I_\nu(\mathbf{n})] d\varpi.$$

3. PŘENOS ZÁŘENÍ

Pro zjednodušení zápisu neuvádíme explicitně závislost na \mathbf{r} a t . S využitím definice (2.15) dostaneme **rovnici pro monochromatickou zářivou energii**

$$\frac{\partial E_{R\nu}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{F}_\nu = \oint [\eta_\nu(\mathbf{n}) - \chi_\nu(\mathbf{n})I_\nu(\mathbf{n})] d\varpi. \quad (3.35a)$$

Vynásobením rovnice (3.8) \mathbf{n}/c a poté její integrací přes ϖ dostaneme **momentovou rovnici přenosu záření prvního řádu**, což je v podstatě **rovnice monochromatické hybnosti záření**,

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathcal{F}_\nu}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{P}_{R\nu} = \frac{1}{c} \oint \mathbf{n} [\eta_\nu(\mathbf{n}) - \chi_\nu(\mathbf{n})I_\nu(\mathbf{n})] d\varpi. \quad (3.35b)$$

V momentových rovnicích přenosu záření, podobně jako v hydrodynamických momentových rovnicích, vystupují najednou momenty různých řádů. Rovnice nultého řádu svazuje momenty nultého a prvního řádu, rovnice prvního řádu svazuje momenty prvního a druhého řádu. Pokud budeme chtít řešit problém přenosu záření pomocí momentů, budeme mít vždy o jednu neznámou více než rovnic. Proto je nutné systém momentových rovnic doplnit nějakou další rovnicí svazující použité momenty. Při řešení problému přenosu záření pomocí momentových rovnic nultého a prvního řádu se používá vztah (2.26), kterým jsme zavedli Eddingtonův tenzor, za předpokladu, že hodnotu Eddingtonova tenzoru známe.

Integrací rovnice (3.35a) přes všechny frekvence dostaneme rovnici pro **celkovou zářivou energii**, kterou označíme cG^0 (stejně jako Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 11.49),

$$\frac{\partial \mathcal{E}_R}{\partial t} + \nabla \cdot \mathfrak{F} = \int_0^\infty d\nu \oint [\eta_\nu(\mathbf{n}) - \chi_\nu(\mathbf{n})I_\nu(\mathbf{n})] d\varpi \equiv -cG^0, \quad (3.36a)$$

kde cG^0 označuje celkovou míru přenosu energie mezi hmotou a zářením (*net rate of radiative energy deposition*). Podobně integrací rovnice (3.35b) přes frekvence dostaneme **rovnici celkové hybnosti záření**

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathfrak{F}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{P}_R = \frac{1}{c} \int_0^\infty d\nu \oint \mathbf{n} [\eta_\nu(\mathbf{n}) - \chi_\nu(\mathbf{n})I_\nu(\mathbf{n})] d\varpi \equiv -\mathbf{G}. \quad (3.36b)$$

Veličina \mathbf{G} v rovnici (3.36b) je **hustota čisté zářivé síly**. Obě veličiny, cG^0 a \mathbf{G} , se využívají v zářivé hydrodynamice.

Často se využívají zjednodušené tvary momentových rovnic pro různé speciální případy. Ve statickém prostředí je opacita $\chi_\nu(\mathbf{n})$ izotropní. Pokud budeme navíc předpokládat, že všechny rozptylové procesy jsou izotropní, bude i emisivita $\eta_\nu(\mathbf{n})$ izotropní. V tomto případě můžeme rovnice (3.35) zjednodušit

$$\frac{\partial E_{R\nu}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{F}_\nu = 4\pi (\eta_\nu - \chi_\nu J_\nu), \quad (3.37a)$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathcal{F}_\nu}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{P}_{R\nu} = -\frac{1}{c} \chi_\nu \mathcal{F}_\nu. \quad (3.37b)$$

Integrací rovnic (3.37) přes frekvence od 0 do ∞ dostaneme analogii vztahů (3.36) pro izotropní opacitu a emisivitu,

$$\frac{\partial \mathcal{E}_R}{\partial t} + \nabla \cdot \mathfrak{F} = 4\pi \int_0^\infty (\eta_\nu - \chi_\nu J_\nu) d\nu, \quad (3.38a)$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathfrak{F}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{P}_R = -\frac{1}{c} \int_0^\infty \chi_\nu \mathcal{F}_\nu d\nu. \quad (3.38b)$$

V časově nezávislém prostředí platí vztahy (3.37) a (3.38) bez časových derivací.

3.6.1 Momentové rovnice pro jednorozměrnou časově nezávislou atmosféru

Dalšího zjednodušení můžeme dosáhnout pro případ prostředí, jehož vlastnosti závisejí jen na jedné prostorové souřadnici. Nadále předpokládáme statické časově nezávislé prostředí.

Planparalelní atmosféra V případě planparalelního časově nezávislého prostředí (kapitola 2.7.1) přejdou rovnice (3.37) na tvar (podle 2.33 je divergence toku $(\nabla \cdot \mathcal{F})_z = d\mathcal{F}_z/dz = 4\pi dH/dz$, divergence tenzoru tlaku je vyjádřena vztahem 2.39)

$$\frac{dH_\nu(z)}{dz} = \eta_\nu(z) - \chi_\nu(z)J_\nu(z) \quad (3.39a)$$

$$\frac{dK_\nu(z)}{dz} = -\chi_\nu(z)H_\nu(z) \quad (3.39b)$$

kde jsme využili definice (2.34) a rovnice (2.37). K uzavření systému momentových rovnic použijeme rovnici definující Eddingtonův faktor (2.46), ale bez časové závislosti,

$$f_\nu^K(z) = \frac{K_\nu(z)}{J_\nu(z)}. \quad (3.40)$$

Pomocí tohoto vztahu můžeme rovnice (3.39a) a (3.39b) sloučit do jedné rovnice druhého řádu

$$\frac{d^2 (f_\nu^K(z)J_\nu(z))}{d\tau_\nu^2(z)} = J_\nu(z) - S_\nu(z). \quad (3.41)$$

Rovnici doplníme o vhodné okrajové podmínky pro J_ν na obou okrajích analogicky postupu v kapitole 3.5.

3. PŘENOS ZÁŘENÍ

Sféricky symetrická atmosféra V případě sféricky symetrické atmosféry (kapitola 2.7.2) dostaneme (divergence toku je $(\nabla \cdot \mathcal{F})_r = (1/r^2) d(r^2 \mathcal{F})/dr$, divergence tenzoru tlaku je vyjádřena vztahem 2.45)

$$\frac{1}{r^2} \frac{d[r^2 H_\nu(r)]}{dr} = \eta_\nu(r) - \chi_\nu(r) J_\nu(r) \quad (3.42a)$$

$$\frac{dK_\nu(r)}{dr} + \frac{3K_\nu(r) - J_\nu(r)}{r} = -\chi_\nu(r) H_\nu(r). \quad (3.42b)$$

Soustavu momentových rovnic uzavřeme podobně jako v planparalelním případě. Zavedeme-li kromě Eddingtonova faktoru $f_\nu^K(r)$ ještě i **funkci sférickosti** $q_\nu(r)$ vztahem (viz Auer, 1971)

$$\frac{dq_\nu(r)}{dr} \frac{1}{q_\nu(r)} = \frac{3 - [f_\nu^K(r)]^{-1}}{r} \quad (3.43)$$

můžeme rovnici (3.42b) přepsat jako

$$\frac{1}{q_\nu(r)} \frac{d[q_\nu(r) K_\nu(r)]}{dr} = -\chi_\nu(r) H_\nu(r) \quad (3.44)$$

Odtud po zavedení proměnné X_ν vztahem

$$dX_\nu(r) = -\frac{q_\nu(r) \chi_\nu(r)}{r^2} dr \quad (3.45)$$

dostaneme

$$\frac{d[q_\nu(r) f_\nu^K(r) J_\nu(r)]}{dX_\nu(r)} = r^2 H_\nu(r). \quad (3.46a)$$

Derivaci podle r nahradíme derivací podle X_ν i v rovnici (3.42a),

$$\frac{d(r^2 H_\nu(r))}{dX_\nu(r)} = \frac{r^4}{q_\nu(r)} [J_\nu(r) - S_\nu(r)]. \quad (3.46b)$$

Rovnice (3.46) zkombinujeme a tím můžeme soustavu rovnic (3.42) přepsat jako jednu rovnici druhého řádu (viz Auer, 1971)

$$\frac{d^2 [f_\nu^K q_\nu(r) J_\nu(r)]}{dX_\nu^2(r)} = \frac{r^4}{q_\nu(r)} [J_\nu(r) - S_\nu(r)]. \quad (3.47)$$

Rovnici doplníme podobně jako v planparalelním případě o vhodné okrajové podmínky pro J_ν na obou okrajích.

3. PŘENOS ZÁŘENÍ

Alternativně můžeme funkci sféřičnosti zavést vztahem (podle Hummer and Rybicki, 1971)

$$\frac{dq_\nu(r)}{dr} \frac{1}{q_\nu(r)} = \frac{1 - [f_\nu^K(r)]^{-1}}{r} \quad (3.48)$$

Momentová rovnice druhého řádu pro střední intenzitu dostane s takto definovanou proměnnou tvar

$$\frac{d^2 [r^2 f_\nu^K q_\nu(r) J_\nu(r)]}{dX_\nu^2(r)} = \frac{r^2}{q_\nu(r)} [J_\nu(r) - S_\nu(r)], \quad (3.49)$$

kde proměnná X_ν má trochu jinou definici, $dX_\nu = -q_\nu \chi_\nu dr$.

Uzavření momentových rovnic v jednorozměrném případě

Uzavření systému momentových rovnic dosáhneme pomocí Eddingtonova faktoru (3.40), ve sféricky symetrické případě navíc s pomocí funkce sféřičnosti (3.43), která je však na Eddingtonově faktoru závislá. Je-li $f_\nu^K(r)$ dané, je systém rovnic uzavřen a lze jej snadno vyřešit. Jednoduchou uzavírací aproximací je Eddingtonova aproximace (kapitola 2.7.3), kdy pokládáme $f_\nu^K(r) = 1/3$. Přesnějších výsledků však dosáhneme iterativním určením Eddingtonova faktoru $f_\nu^K(r)$, kterým se budeme zabývat v kapitole 7.5.2.

3.7 Rovnice přenosu pro polarizované záření

rovnice pro Stokesovy parametry, η z kvantovky

$$\frac{d}{ds} \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \chi_I & \chi_Q & \chi_U & \chi_V \\ \chi_Q & \chi_I & \rho_V & -\rho_U \\ \chi_U & -\rho_V & \chi_I & \rho_Q \\ \chi_V & \rho_U & -\rho_Q & \chi_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \eta_I \\ \eta_Q \\ \eta_U \\ \eta_V \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

χ_I – běžný absorpční koeficient

χ_Q, χ_U, χ_V – absorpční koeficienty polarizačních stavů (obecně vzájemně různé)

ρ_Q, ρ_U, ρ_V – mění fáze polarizačních stavů

formálně

3. PŘENOS ZÁŘENÍ

$$\frac{d\mathbf{I}}{ds} = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{I} + \boldsymbol{\eta} \quad (3.51)$$

propagační matice $\mathbf{K} = \mathbf{K}^{(A)} - \mathbf{K}^{(S)}$ (část je symetrická a část antisymetrická)

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \chi_I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \chi_I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \chi_I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \chi_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix} \\ - \begin{pmatrix} 0 & \chi_Q & \chi_U & \chi_V \\ \chi_Q & 0 & 0 & 0 \\ \chi_U & 0 & 0 & 0 \\ \chi_V & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_V & -\rho_U \\ 0 & -\rho_V & 0 & \rho_Q \\ 0 & \rho_U & -\rho_Q & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \eta_I \\ \eta_Q \\ \eta_U \\ \eta_V \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.52)$$

na pravé straně rovnice (3.52) zleva:

absorpční matice absorpce (zeslabení) záření – zobecnění absorpčního koeficientu pro polarizované záření

dichroická matice diferenciální absorpce různých polarizačních stavů; absorpční vlastnosti závisejí na směru elektrického pole (polarizaci) (χ_Q, χ_U, χ_V)

disperzní matice rozfázování složek vektoru elektrického pole anomální disperze (ρ_Q, ρ_U, ρ_V)
příklad: ρ_V způsobuje rotaci směru lineární polarizace

Kapitola 4

Termodynamická rovnováha

V této kapitole shrneme základní výsledky statistické mechaniky klasických (rozlišitelných) částic, které budeme v dalších částech potřebovat (Boltzmannova statistika). Z Boltzmannova zákona $S = k \ln W$ svazujícího entropii ideálního plynu S s termodynamickou pravděpodobností makrostavu W (která je úměrná počtu mikrostavů) dostaneme (viz například Kvasnica 1983, kapitola III.2 nebo Hubeny and Mihalas 2014, Section 4.2) pro rovnovážné rozdělení stavů $\tilde{w}_i^* = n_i^*/\mathcal{N}$ (kde \tilde{w}_i^* je pravděpodobnost nalezení částice ve stavu i , n_i^* je počet částic ve stavu i a \mathcal{N} je celkový počet částic) vztah¹

$$\tilde{w}_i^* = \frac{n_i^*}{\mathcal{N}} = \frac{g_i}{U} \exp(-\beta\epsilon_i), \quad (4.1)$$

kde $U = \sum_i g_i \exp(-\beta\epsilon_i)$ je kanonická partiční funkce, g_i je statistická váha stavu i , β je termodynamický parametr, který je roven $1/(kT)$, T je teplota a ϵ_i je energie stavu i . Tomuto rozdělení se říká Gibbsovo nebo také Boltzmannovo rozdělení.

4.1 Excitační rovnováha

Rovnovážné rozdělení vnitřních stupňů volnosti dostaneme z Gibbsova rozdělení. Pro systémy v rovnováze platí rozdělovací funkce, kterou zde budeme nazývat Boltzmannovou. Pomocí rovnice (4.1) můžeme vyjádřit rozdělení excitačních stavů i pro daný libovolný iont j ,

$$\frac{n_{ij}^*}{N_j^*} = \frac{g_{ij}}{U_j(T)} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_{ij}}{kT}\right). \quad (4.2)$$

¹Hvězdičkou v horním indexu (n_i^*) budeme označovat rovnovážné hodnoty obsazení stavů (koncentrací).

4. TERMODYNAMICKÁ ROVNOVÁHA

Zde \mathcal{E}_{ij} je excitační energie stavu i iontu j , g_{ij} je statistická váha tohoto stavu, n_{ij}^* je jeho rovnovážná koncentrace, N_j^* označuje rovnovážnou koncentraci iontů j a

$$U_j(T) = \sum_i g_{ij} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_{ij}}{kT}\right) \quad (4.3)$$

je partiční funkce iontu j . Pro poměr n_i^* (rovnovážná koncentrace stavu i) k n_0^* (rovnovážná koncentrace základního stavu) můžeme při vynechání indexu iontu j psát

$$\frac{n_i^*}{n_0^*} = \frac{g_i}{g_0} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_i}{kT}\right), \quad (4.4)$$

kde g_0 a g_i jsou odpovídající statistické váhy a \mathcal{E}_i je excitační energie stavu i . Vztah (4.4) můžeme snadno zobecnit pro poměr obsazení libovolných stavů l a m ,

$$\frac{n_m^*}{n_l^*} = \frac{g_m}{g_l} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_l}{kT}\right) = \frac{g_m}{g_l} \exp\left(-\frac{h\nu_{lm}}{kT}\right), \quad (4.5)$$

kde ν_{lm} je frekvence přechodu mezi stavy l a m . Rovnice (4.4) nebo (4.5) nazýváme **Boltzmannovou excitační rovnicí**, případně **Boltzmannovým rozdělením excitačních stavů**.

Definice partiční funkce (4.3) je přímočará, součet se provádí přes všechny energetické stavy atomu či iontu. Součet ve vztahu (4.3) diverguje, ale to platí pouze pro izolovaný atom nebo iont (ve vakuu). V reálném prostředí je atom či iont obklopen jinými částicemi, které svým působením způsobují snížení ionizační energie. Tím se stane, že ne všechny vázané stavy existují. Pro snížení ionizační energie iontu j můžeme přibližně psát (viz Mihalas, 1978, rovnice 9-106)

$$\Delta\mathcal{E}_{Ij} = \frac{Z_j e^2}{D} \quad (4.6)$$

kde (Z_j je náboj iontu j) a

$$D = \sqrt{\frac{\frac{kT}{4\pi e^2}}{n_e + \sum_j Z_j^2 n_j}} \quad (4.7)$$

je Debyeova délka (viz Mihalas 1978, rovnice 9-99; Hubeny and Mihalas 2014, rovnice 8.79)². Vztah (4.6) znamená, že ionizační energie se sníží u všech částic daného druhu stejně. Fyzikálně přesnější je statistické zahrnutí snížení ionizační energie pomocí pravděpodobností obsazení energetických hladin w_{ij} (Däppen et al., 1987; Hummer and Mihalas, 1988), neboť lze těžko předpokládat, že

²Ve fyzice plazmatu se Debyeova délka často značí λ_D . Toto označení si ponecháme pro Dopplerovskou pološířku spektrálních čar (5.51) vyjádřenou ve vlnových délkách.

vliv okolních částic bude na každou částici zcela identický. Partiční funkci pak vyjádříme ve tvaru

$$U_j(T) = \sum_i w_{ij} g_{ij} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_{ij}}{kT}\right) \quad (4.8)$$

Pravděpodobnosti obsazení energetických stavů w_{ij} nabývají hodnot z intervalu $\langle 0, 1 \rangle$.

4.2 Rovnovážné rozdělení rychlostí částic

Rychlosti pohybu všech částic mají v rovnovážném stavu hodnoty odpovídající Maxwellovu rozdělení. Uvedeme si jeho odvození využívající Gibbsovo rozdělení (4.1). Objemový element fázového prostoru částic můžeme vyjádřit jako

$$dp_x dp_y dp_z dV = m^3 dv_x dv_y dv_z dV = 4\pi m^3 v^2 dv dV, \quad (4.9)$$

kde m je hmotnost uvažovaných částic. Počet stavů v elementu fázového prostoru (statistickou váhu) dostaneme podělením objemového elementu (4.9) objemem elementární buňky fázového prostoru (h^3)

$$g_{\text{trans}} = \frac{4\pi m^3 v^2 dv dV}{h^3} \quad (4.10)$$

Do rovnice (4.1) dosadíme za energii kinetickou energii částic $\frac{1}{2}mv^2$ a statistickou váhu z rovnice (4.10). Pro pravděpodobnost $d\tilde{w}_6$ nalezení částice v objemovém elementu (4.9) dostaneme

$$d\tilde{w}_6 = \frac{d^6 n^*(\mathbf{x}, v)}{N} = \frac{4\pi m^3}{h^3} \frac{1}{U_{\text{trans}}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) v^2 dv dV \quad (4.11)$$

Partiční funkce translačních pohybů U_{trans} je (McQuarrie, 1976, rovnice 5-5 nebo 5-8)

$$U_{\text{trans}} = \left(\frac{2\pi m kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} V \quad (4.12)$$

Integrací (4.11) přes prostor (dV) a dosazením za U_{trans} z (4.12) dostaneme pravděpodobnost $dw(v)$, že rychlost částice leží v intervalu $(v, v + dv)$,

$$dw(v) = \frac{d^3 n^*(v)}{N} = f(v) dv = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) 4\pi v^2 dv, \quad (4.13)$$

což je **Maxwellovo rozdělení rychlostí**. Nejpravděpodobnější rychlost částice je

$$v_{\text{th}} = \sqrt{\frac{2kT}{m}} \quad (4.14)$$

kteřá se často nazývá termální nebo **tepelná rychlost** daného druhu částic. Kromě toho můžeme zavést **střední kvadratickou rychlost** $\sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{(3kT)/m}$ (v termodynamické rovnováze mají všechny částice stejnou kinetickou energii $\frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle = \frac{3}{2}kT$) a pro střední kvadratickou rychlost ve směru pohledu (line-of-sight) můžeme psát $\sqrt{\langle v_x^2 \rangle} = \sqrt{(kT)/m}$.

Částice s translační i vnitřní energií. Pohybující se atomy nebo ionty jsou příkladem takových částic. Jejich partiční funkce musí zohledňovat obě energetická rozdělení,

$$U(T) = \sum_i \sum_t g_i g_t \exp\left(-\frac{\epsilon_i + \epsilon_t}{kT}\right). \quad (4.15)$$

V případě řídkých plynů jsou jednotlivé partiční funkce nezávislé a můžeme vztah zjednodušit. Partiční funkci můžeme rozdělit na součin jednotlivých partičních funkcí,

$$U(T) = \sum_i g_i \exp\left(-\frac{\epsilon_i}{kT}\right) \sum_t g_t \exp\left(-\frac{\epsilon_t}{kT}\right) = U_{\text{trans}} U_{\text{exc}} \quad (4.16)$$

Tuto příjemnou vlastnost použijeme v dalším odvozování.

4.3 Ionizační rovnováha

Vztah pro ionizační rovnováhu dostaneme stejně jako Mihalas (1978, kapitola 5-1) aplikací Boltzmannovy excitační rovnice na proces ionizace ze základního stavu neutrálního atomu $n_{0,0}$ do základního stavu iontu $n_{0,1}$. Symbolem $n_{0,1}(v)$ označíme počet iontů v základním stavu, kolem kterých je volný elektron s rychlostí v intervalu $(v, v + dv)$. Statistická váha základní hladiny neutrálního atomu je $g_{0,0}$, statistická váha stavu „volný elektron + iont v základním stavu“ v souladu s (4.16) je $g(v) = g_{0,1} g_{\text{electron}}$, kde $g_{0,1}$ je statistická váha základní hladiny iontu a g_{electron} je statistická váha volného elektronu. Použitím (4.5) na výše uvedené stavy dostaneme

$$\frac{n_{0,1}^*(v)}{n_{0,0}^*} = \frac{g(v)}{g_{0,0}} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_{I0} + \frac{1}{2}m_e v^2}{kT}\right)$$

4. TERMODYNAMICKÁ ROVNOVÁHA

$$= \frac{g_{0,1}g_{\text{electron}}}{g_{0,0}} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_{I_0} + \frac{1}{2}m_e v^2}{kT}\right) \quad (4.17)$$

kde \mathcal{E}_{I_0} označuje energii potřebnou pro ionizaci ze základního stavu neutrálního atomu a $\frac{1}{2}m_e v^2$ je kinetická energie elektronu uvolněného ionizací. Z kvantové statistiky dostáváme pro statistickou váhu volného elektronu ($dx dy dz dp_x dp_y dp_z$ je element fázového prostoru, h^3 je elementární objem fázového prostoru a číslo 2 započítává dvě možné orientace spinu elektronu)

$$g_{\text{electron}} = 2 \frac{dx dy dz dp_x dp_y dp_z}{h^3} = 2 \frac{n_e^{-1} (4\pi m_e^3 v^2 dv)}{h^3}, \quad (4.18)$$

kde jsme využili $dp_x dp_y dp_z = 4\pi p^2 dp = 4\pi m_e^3 v^2 dv$ a platnosti $dx dy dz = n_e^{-1}$, pokud vybereme objemový element tak, aby obsahoval právě jeden volný elektron. Tento vztah dosadíme do (4.17),

$$\frac{n_{0,1}^*(v)}{n_{0,0}^*} = \frac{8\pi m_e^3 g_{0,1}}{h^3 g_{0,0} n_e} \frac{1}{n_e} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_{I_0} + \frac{1}{2}m_e v^2}{kT}\right) v^2 dv. \quad (4.19)$$

Integrací přes rychlosti elektronů v (s využitím Maxwellova rozdělení) dostaneme

$$\frac{n_{0,1}^*}{n_{0,0}^*} = \frac{8\pi m_e^3 g_{0,1}}{h^3 g_{0,0} n_e} \frac{1}{n_e} \left(\frac{2kT}{m_e}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_{I_0}}{kT}\right) \int_0^\infty \exp(-x^2) x^2 dx.$$

Poslední integrál je roven (s využitím A.7) $\sqrt{\pi}/4$, po úpravě dostaneme

$$\frac{n_{0,1}^*}{n_{0,0}^*} = \frac{2g_{0,1}}{g_{0,0}} \frac{1}{n_e} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_{I_0}}{kT}\right), \quad (4.20)$$

což je **Sahova ionizační formule** pro ionizaci ze základní hladiny atomu³. Vidíme, že ionizační rovnováha v termodynamické rovnováze je funkcí teploty T a elektronové hustoty n_e . Tento vztah můžeme snadno zobecnit na ionizační rovnováhu mezi základními stavy j -tého a $j+1$. ionizačního stupně (j je obecně celočíselné),

$$\frac{n_{0,j+1}^*}{n_{0,j}^*} = \frac{2g_{0,j+1}}{g_{0,j}} \frac{1}{n_e} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_{I_j}}{kT}\right), \quad (4.21)$$

kde \mathcal{E}_{I_j} je ionizační energie potřebná pro ionizaci ze základního stavu j -tého iontu. Kombinací této rovnice a Boltzmannovy rovnice (4.4) můžeme napsat vztah

³Vztah svazující ionizační stupně různých iontů zformulovali John Eggert (1919) a Megh Nad Saha (1920), ale v jiném tvaru, než je uveden zde.

$$n_{ij}^* = n_{0,j+1}^* n_e \frac{g_{ij}}{g_{0,j+1}} \underbrace{\frac{1}{2} \left(\frac{h^2}{2\pi m_e k} \right)^{\frac{3}{2}}}_{C_I = 2.07 \cdot 10^{-16}} T^{-\frac{3}{2}} \exp \frac{\mathcal{E}_{Ij} - \mathcal{E}_{ij}}{kT} \quad (4.22)$$

který vyjadřuje obsazení energetické hladiny i iontu j v závislosti na obsazení základní hladiny nejbližšího vyššího iontu (iontu $j + 1$). Pravou stranu rovnice (4.22) můžeme přepsat

$$n_{ij}^* = n_{0,j+1}^* n_e \Phi_{ij}(T), \quad (4.23)$$

kde jsme zavedli veličinu

$$\Phi_{ij}(T) = \frac{g_{ij}}{g_{0,j+1}} C_I T^{-\frac{3}{2}} \exp \left(\frac{\mathcal{E}_{Ij} - \mathcal{E}_{ij}}{kT} \right), \quad (4.24)$$

které říkáme **Sahův-Boltzmannův faktor**. Sečteme-li v rovnici (4.22) všechny stavy nižšího stupně ionizace a použijeme-li rovnici (4.2) pro $n_{0,j+1}^*/N_{j+1}^*$, můžeme pro poměr koncentrací dvou po sobě následujících iontů

$$\frac{N_j^*}{N_{j+1}^*} = n_e \frac{U_j(T)}{U_{j+1}(T)} C_I T^{-\frac{3}{2}} \exp \left(\frac{\mathcal{E}_{Ij}}{kT} \right) = n_e \tilde{\Phi}_j(T), \quad (4.25)$$

kde

$$\tilde{\Phi}_j(T) = \frac{U_j(T)}{U_{j+1}(T)} C_I T^{-\frac{3}{2}} \exp \left(\frac{\mathcal{E}_{Ij}}{kT} \right) \quad (4.26)$$

je Sahův-Boltzmannův faktor pro ionty. Můžeme definovat **ionizační podíl** iontu j atomu k k celkovému zastoupení atomu k jako

$$f_{jk}(n_e, T) = \frac{N_{jk}}{N_k}. \quad (4.27)$$

Pro atom k vyjádříme poměr koncentrace iontu j ke koncentraci nejvyššího iontu J (nejvyšší iont je iont bez vázaných elektronů) pomocí součinů poměrů koncentrací po sobě následujících iontů jako

$$\frac{N_{jk}}{N_{Jk}} = \left(\frac{N_{J-1,k}}{N_{Jk}} \right) \times \dots \times \left(\frac{N_{jk}}{N_{j+1,k}} \right) = \prod_{l=j}^{J-1} \frac{N_{lk}}{N_{l+1,k}}. \quad (4.28)$$

V případě rovnovážného rozdělení ionizací můžeme tento vztah zapsat pomocí rovnice (4.25),

$$\frac{N_{jk}^*}{N_{Jk}^*} = \prod_{l=j}^{J-1} \left[n_e \tilde{\Phi}_l(T) \right]. \quad (4.29)$$

Rovnovážný ionizační podíl iontu j je potom

$$f_{jk}^*(n_e, T) = \frac{N_{jk}^*}{N_k} = \frac{\left(\frac{N_{jk}^*}{N_{Jk}^*}\right)}{\sum_{m=0}^J \left(\frac{N_{mk}^*}{N_{Jk}^*}\right)} = \frac{\prod_{l=j}^{J-1} [n_e \tilde{\Phi}_l(T)]}{\sum_{m=0}^J \prod_{l=m}^{J-1} [n_e \tilde{\Phi}_l(T)]} \quad (4.30)$$

Pokud známe elektronovou hustotu n_e a teplotu T , je určení ionizační rovnováhy všech iontů v termodynamické rovnováze pomocí vztahu (4.30) přímočaré.

4.3.1 Určení elektronové hustoty

Označíme N koncentraci všech částic a \tilde{N}_N celkovou koncentraci atomů a iontů všech typů. Pro koncentraci všech částic platí

$$N = \tilde{N}_N + n_e. \quad (4.31)$$

Zavedeme relativní abundanci $\tilde{\alpha}_k$ prvku k vzhledem k celkovému počtu atomů a iontů⁴ vztahem $N_k = \tilde{\alpha}_k \tilde{N}_N$ (platí, že součet relativních abundancí přes všechny prvky $\sum_{k=1}^K \tilde{\alpha}_k = 1$, K je celkový počet prvků). Pro koncentraci atomů k můžeme psát

$$N_k = \tilde{\alpha}_k (N - n_e), \quad (4.32)$$

přičemž platí zachování počtu částic

$$\sum_{k=1}^K N_k = \tilde{N}_N. \quad (4.33)$$

Současně platí i podmínka elektrické neutrality. Za předpokladu, že se hmota skládá z neutrálních částic, elektronů a z kladně nabitých iontů (záporné ionty v tuto chvíli neuvažujeme, jejich zahrnutí však není obtížné), můžeme s využitím (4.27) psát (sčítáme koncentrace N_{jk} přes všechny kladně nabitě ionty ($j \geq 1$) všech prvků, prvků je celkem K , každý prvek k má J_k kladně nabitých iontů)

$$\begin{aligned} n_e &= \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{J_k} j N_{jk} = \sum_{k=1}^K N_k \sum_{j=1}^{J_k} j f_{jk}(n_e, T) = \tilde{N}_N \sum_{k=1}^K \tilde{\alpha}_k \sum_{j=1}^{J_k} j f_{jk}(n_e, T) \\ &= (N - n_e) \sum_{k=1}^K \tilde{\alpha}_k \sum_{j=1}^{J_k} j f_{jk}(n_e, T) \quad (4.34) \end{aligned}$$

⁴Abundance se často vyjadřuje i vzhledem k vodíku (viz Příloha D).

Pokud jsou elektronová hustota n_e a teplota T známy, celkovou hustotu N a ionizační podíly f_{jk} spočteme snadno. Pokud však budeme řešit úlohu určení elektronové hustoty n_e pro zadanou teplotu T a celkovou koncentraci N , musíme řešit nelineární rovnici.

Numerické řešení takovéto rovnice snadno získáme metodou linearizace (Newtonovou-Raphsonovou metodou). Označíme

$$\tilde{F}(n_e) = \sum_{k=1}^K \tilde{\alpha}_k \sum_{j=1}^{J_k} j f_{jk}(n_e, T) \quad (4.35)$$

a rovnici (4.34) přepíšeme

$$n_e = (N - n_e) \tilde{F}(n_e), \quad (4.36a)$$

případně jako

$$N - n_e \left[1 + \frac{1}{\tilde{F}(n_e)} \right] = 0. \quad (4.36b)$$

Tuto rovnici budeme řešit linearizací. Předpokládejme, že máme nějaký odhad $n_e^{(\text{old})}$ řešení této rovnice, který je však nepřesný. Řešením bude hodnota opravená o nějaký člen δn_e . Nahradíme $n_e \rightarrow n_e^{(\text{old})} + \delta n_e$

$$N - (n_e^{(\text{old})} + \delta n_e) \left[1 + \frac{1}{\tilde{F}(n_e^{(\text{old})} + \delta n_e)} \right] = 0 \quad (4.37)$$

Zlomek na pravé straně rozvineme do prvního řádu,

$$\frac{1}{\tilde{F}(n_e^{(\text{old})} + \delta n_e)} = \frac{1}{\tilde{F}(n_e^{(\text{old})})} - \frac{1}{\tilde{F}^2} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial n_e} \delta n_e,$$

dosadíme do (4.37), zanedbáme členy s $(\delta n_e)^2$, vyjádříme

$$\delta n_e = \frac{N - n_e^{(\text{old})} \left(1 + \frac{1}{\tilde{F}} \right)}{1 + \frac{1}{\tilde{F}} - \frac{n_e^{(\text{old})}}{\tilde{F}^2} \frac{\partial \tilde{F}}{\partial n_e}}. \quad (4.38)$$

a spočteme novou hodnotu elektronové hustoty $n_e^{(\text{new})} = n_e^{(\text{old})} + \delta n_e$. Pokud δn_e není “dostatečně malé”, řešíme znovu rovnici (4.37) s $n_e^{(\text{old})} = n_e^{(\text{new})}$. Iterační proces končíme, když je δn_e “dostatečně malé”. Otázkou samozřejmě zůstává, kolik je “dostatečně malé”. V praxi bývají hodnoty řádu 10^{-3} uspokojivé, pro vyšší přesnost výpočtu je ale vhodnější volit řádově menší hodnoty (například 10^{-7}).

4.4 Disociace molekul

V termodynamické rovnováze můžeme použít Boltzmannovu excitační rovnici i na chemické reakce. Pro jednoduchost budeme uvažovat obecnou dvouatomovou molekulu AB s disociační energií D_0 , která se bude disociovat na jednotlivé atomy A a B . Na disociaci molekul lze použít postup užitý při odvození Sahovy ionizační rovnice (viz také Schadee, 1964; Tatum, 1966). Analogicky rovnici (4.17) můžeme psát (\tilde{N}_X^* , $X = A, B, AB$ značí počet částic A, B, AB v nějakém objemu V , podobně U_X jsou odpovídající celkové partiční funkce)

$$\frac{\tilde{N}_A^* \tilde{N}_B^*}{\tilde{N}_{AB}^*} = \frac{U_A U_B}{U_{AB}} \exp\left(-\frac{D_0}{kT}\right). \quad (4.39)$$

Celkové partiční funkce lze podle rovnice (4.16) rozdělit na translační a vnitřní část (například $U_{AB} = (U_{AB})_{\text{trans}}(U_{AB})_{\text{int}}$), translační část je dána vztahem (4.12), vnitřní část popisuje excitaci, rotaci a vibraci molekul. Po dosazení za translační partiční funkce dostaneme disociační rovnici

$$\frac{N_A^* N_B^*}{N_{AB}^*} = \left(\frac{2\pi m_{\text{red}} kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{U_A U_B}{U_{AB}}\right)_{\text{int}} \exp\left(-\frac{D_0}{kT}\right), \quad (4.40)$$

kde N_A^* , N_B^* a N_{AB}^* jsou koncentrace částic, $m_{\text{red}} = m_A m_B / (m_A + m_B)$ je redukovaná hmotnost a indexem int označujeme vnitřní partiční funkce. Vnitřní partiční funkci molekul lze přibližně rozdělit

$$(U_{AB})_{\text{int}} = (U_{AB})_{\text{exc}}(U_{AB})_{\text{rot}}(U_{AB})_{\text{vib}} \quad (4.41)$$

kde $(U_{AB})_{\text{exc}}$ značí excitační (elektronickou) partiční funkci, $(U_{AB})_{\text{rot}}$ je rotační partiční funkce a $(U_{AB})_{\text{vib}}$ je- vibrační partiční funkce.

4.5 Záření v termodynamické rovnováze

Pro specifickou intenzitu můžeme s využitím vztahu mezi specifickou intenzitou záření a koncentrací fotonů ve fázovém prostoru (2.10) a rovnosti rozdělovacích funkcí fotonů pro nepolarizované záření (2.12) psát

$$I(\nu) = \frac{h^4 \nu^3}{c^2} f_{\text{R}} = \frac{2h^4 \nu^3}{c^2} f_{\alpha} = \frac{2h\nu^3}{c^2} n_{\alpha}. \quad (4.42)$$

Jelikož fotony patří mezi bosony, pro rovnovážnou hodnotu číselné hustoty n_{α} použijeme ze statistické fyziky vztah Boseho-Einsteinova rozdělení (viz například Kvasnica 1983, kapitola VIII.1)

$$n_{\alpha} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{kT}\right) - 1}. \quad (4.43)$$

4. TERMODYNAMICKÁ ROVNOVÁHA

Pro specifický případ fotonů platí, že energie $\varepsilon = h\nu$, chemický potenciál $\mu = 0$ a s využitím vztahu (4.42) dostaneme pro rovnovážné rozdělení fotonů při teplotě T vztah

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1}, \quad (4.44)$$

což je **Planckova funkce**⁵. Uvedeme i její limitní případy.

Pro vysoké energie záření ($h\nu/(kT) \gg 1$) můžeme psát zjednodušený vztah

$$B_\nu(T) \approx \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right), \quad (4.45)$$

který se nazývá **Wienův rozdělovací zákon** nebo také **Wienova limita**⁶. Naopak pro nízké energie záření ($h\nu/(kT) \ll 1$) můžeme psát vztah

$$B_\nu(T) \approx \frac{2\nu^2 kT}{c^2}, \quad (4.46)$$

který se nazývá **Rayleighův-Jeansův zákon**⁷.

Integrací Planckovy funkce (4.44) přes frekvence dostaneme (viz také Unsöld, 1955, rovnice 7.33)

$$B(T) = \int_0^\infty B_\nu(T) d\nu = \frac{2h}{c^2} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\sigma_R}{\pi} T^4, \quad (4.47)$$

kde jsme využili vztahu

$$\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \zeta(4)\Gamma(4) = \frac{\pi^4}{15} \quad (4.48)$$

(zde ζ je Riemannova funkce zeta a Γ je gamma funkce) a kde

$$\sigma_R = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^3} = 5.67 \cdot 10^{-5} \text{ erg cm}^{-1} \text{ s}^{-2} \text{ K}^{-4} \quad (4.49)$$

⁵Tvar funkce (4.44) přednesl Max Planck 19. října 1900 na zasedání Německé fyzikální společnosti (Planck, 1900a) jako vylepšení Wienova zákona (4.45), v další přednášce 14. prosince 1900 (Planck, 1900b) zavedl i konstantu úměrnosti energie a frekvence záření (h). Souhrn těchto výsledků je v často citované práci Planck (1901).

⁶Wien (1896) jej formuloval jako závislost na vlnové délce ($\sim \lambda^{-5}$), ale bez Planckovy konstanty h , která v té době ještě nebyla zavedena.

⁷Rayleigh (1900) zformuloval závislost $B_\lambda \sim \lambda^{-4}$, výsledky pozdější diskuse mezi Rayleighem a Jeansem v časopise Nature shrnul Jeans (1905). Historii odvození Rayleighova-Jeansova zákona, Jeansovu roli a jeho vztah k Planckovu zákonu podrobněji rozebrali McCaughan (1980) a Gorham (1991).

se dnes nazývá *Stefanova-Boltzmannova konstanta*.

Pro vlnovou délku, na které se nachází maximum Planckovy funkce, platí *Wienův posunovací zákon*

$$\lambda_{\max} = \frac{b}{T}, \quad (4.50)$$

který odvodil Wien (1893) pomocí termodynamických argumentů. Lze jej také odvodit z derivace Planckovy funkce podle vlnové délky a následného vyřešení transcendentní rovnice. Konstanta $b = 0.2898 \text{ cm} \cdot \text{K}$ (Wienova posunovací konstanta) je dána vztahem $b = hc / (xk)$, kde $x \approx 4.965$ je řešením rovnice $xe^x / (e^x - 1) = 5$.

4.5.1 Rovnovážné rozdělení energie

Rovnovážnou hodnotu monochromatické hustoty zářivé energie $E_{\text{R}}^*(\nu)$ dostaneme dosazením Planckovy funkce (4.44) za střední intenzitu záření do (2.15),

$$E_{\text{R}}^*(\nu) = \frac{4\pi}{c} B_{\nu}(T). \quad (4.51)$$

Rovnovážnou hodnotu celkové hustoty zářivé energie E_{R}^* dostaneme integrací rovnice (4.51) přes frekvence. Podobným postupem, který jsme použili při odvození rovnice (4.47), dostaneme

$$E_{\text{R}}^* = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^{\infty} \frac{\nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} d\nu = \frac{8\pi^5 k^4}{15c^3 h^3} T^4 = \frac{4\sigma_{\text{R}}}{c} T^4 = a_{\text{R}} T^4, \quad (4.52)$$

což je *Stefanův zákon*⁸, který vyjadřuje, že hustota energie záření černého tělesa je úměrná čtvrté mocnině teploty. Konstanta úměrnosti $a_{\text{R}} = 4\pi\sigma_{\text{R}}/c$ se nazývá *zářivá konstanta* (*radiation constant*), někdy také *Stefanova konstanta*, $a_{\text{R}} = 7.56 \cdot 10^{-15} \text{ erg cm}^{-3} \text{ K}^{-4}$.

4.5.2 Absorpce a emise v termodynamické rovnováze

Z termodynamiky víme, že pro systém v tepelné rovnováze je záření izotropní, intenzita záření je závislá jen na frekvenci a teplotě a systém je v ustáleném stavu. To znamená, že množství pohlcené energie a množství vyzářené energie musí být

⁸Stefanův zákon byl nejdříve odvozen na základě empirických dat (Stefan, 1879), poté Boltzmann (1884) přidal jeho teoretické vysvětlení na základě termodynamických úvah (Planckův zákon 4.44 nebyl v té době ještě znám). Termodynamické odvození Stefanova zákona je uvedeno i v knize Chandrasekhar (1958, kapitola II.11.).

stejně. Tuto vlastnost vyjadřuje **Kirchhoffův zákon**⁹ (viz např. Unsöld 1955, str. 5, Hubeny and Mihalas 2014, kapitola 4.3),

$$\eta(\nu) = \kappa(\nu)J^*(\nu), \quad (4.53)$$

kde $J^*(\nu)$ je rovnovážná hodnota střední intenzity záření. Tato rovnice udává vztah mezi opacitou a emisivitou v případě *termodynamické rovnováhy*. Rovnovážnou hodnotu střední intenzity záření popisuje Planckova funkce $B(\nu)$ (4.44).

4.6 Lokální termodynamická rovnováha

V termodynamické rovnováze jsou všechny procesy v rovnováze se svými inverzními procesy (například excitace je v rovnováze s deexcitací). Této důležité vlastnosti se říká *detailní rovnováha*.

V termodynamické rovnováze mají jednotlivá rozdělení fyzikálních veličin rovnovážná rozdělení. Pole záření má Planckovo rozdělení, které jsme shrnuli v kapitole 4.5. Rovnovážné rozdělení excitačních stavů je popsáno Boltzmannovým rozdělením uvedeným v kapitole 4.1. Rovnovážné rozdělení ionizačních stavů je dáno Sahovým rozdělením popsaným v kapitole 4.3. Rychlosti částic mají Maxwellovo rozdělení popsané v kapitole 4.2. Ve všech rovnovážných rozděleních vystupuje stejná termodynamická teplota.

Z pozorování je patrné, že záření, které dopadá na Zemi z hvězd, rovnovážné rozdělení nemá. Už samotný fakt, že vidíme hvězdy, znamená, že hvězdné záření není izotropní a tudíž ani rovnovážné. Silnější argument získáme pohledem na hvězdné spektrum. Ve spektru můžeme vidět ostré ionizační hrany a úzké spektrální čáry, ani rozdělení energie ve spektru neodpovídá rovnovážnému (Planckovu) rozdělení. Je tedy třeba najít nějaký vhodný jednoduchý model, který by byl schopen popsat pozorované rozdělení hvězdného záření.

Tomuto modelu se říká *lokální termodynamická rovnováha* (*local thermodynamic equilibrium*, zkráceně **LTE**). Předpokládejme, že rovnovážná rozdělení kromě rozdělení záření platí pro každý bod prostředí, ale dovolme, aby se jednotlivá místa od sebe lišila. Pro každé místo popsané polohovým vektorem \mathbf{r} budeme mít obecně jiné hodnoty termodynamické teploty $T(\mathbf{r})$ a koncentrace elektronů $n_e(\mathbf{r})$. Teplota $T(\mathbf{r})$ bude parametrem jednotlivých rozdělení, Maxwellovského pro rychlosti (rovnice 4.13), Sahova pro ionizační rovnováhu (4.21) a Boltzmannova pro rovnováhu excitačních stavů (4.5). Lokálně také bude platit rovnováha mezi pohlceným a vyzářeným zářením, kterou známe pod názvem Kirchhoffův

⁹Kirchhoffův zákon formuloval nejen Gustav Kirchhoff (1860b,a), ale ve stejné době také Balfour Stewart (1858, 1859, 1860).

zákon (4.53). Tento zákon říká, že poměr emisivity k opacitě je v termodynamické rovnováze roven Planckově funkci. Poměr emisivity a opacity je ale vydatnost (3.25), v aproximaci lokální termodynamické rovnováhy ji položíme rovnu Planckově funkci. Nerovnovážné pole záření pak určíme řešením rovnice přenosu záření (s je vzdálenost měřená podél směru šíření záření \mathbf{n})

$$\frac{dI(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu)}{d\tau_s(\mathbf{r}, \nu)} = I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu) - B(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu). \quad (4.54)$$

Řešením této rovnice přenosu záření s vydatností $S_\nu = B_\nu$ dostaneme specifickou intenzitu záření pro prostředí v lokální termodynamické rovnováze. Tomuto rozdělení záření říkáme **tepelné záření** (*thermal radiation*), které se liší od záření černého tělesa ($I_\nu = B_\nu$).

Mikroskopické procesy V termodynamické rovnováze platí detailní rovnováha zmíněná na začátku kapitoly 4.6. V lokální termodynamické rovnováze bude detailní rovnováha platit lokálně. Podívejme se nyní podrobněji na rovnováhu mikroskopických procesů, které jsou zodpovědné za zachování rovnovážných rozdělení.

Při **pružných srážkách** se zachovává celková kinetická energie srážejících se částic. Zjednodušeně řečeno, pružné srážky mezi částicemi přerozdělují hybnosti mezi částicemi. Podrobný rozbor problematiky lze nalézt například v Spitzer (1956, Chapter 5). Pružné srážky vedou k rovnovážnému rozdělení rychlostí srážejících se částic.

Při **nepružných srážkách** se přeměňuje kinetická energie srážejících se částic na jejich vnitřní energii a také naopak. Příkladem nepružných srážek jsou srážkové excitace a ionizace (a jejich inverzní procesy srážkové deexcitace a rekombinace). Tyto srážky narušují rovnovážné rozdělení rychlostí srážejících se částic. Naopak pokud je rozdělení rychlostí rovnovážné, nepružnými srážkami se ustavuje excitační a ionizační rovnováha.

Při **zářivých procesech** (interakci hmoty se zářením) se přeměňuje zářivá energie na vnitřní nebo kinetickou energii částic. Mezi tyto procesy řadíme zářivou excitaci a deexcitaci, fotoionizaci a fotorekombinaci. Pokud není pole záření rovnovážné, zářivé procesy *nejsou* v detailní rovnováze. V tom případě narušují ionizační a excitační rovnováhu. Zvláštní místo mezi zářivými procesy má fotorekombinace. K tomu, aby k procesu došlo, je třeba, aby se k iontu přiblížil elektron, takže se prakticky jedná i o srážkový proces, který ustavuje ionizační rovnováhu.

Podmínky pro LTE a jejich porušení Aby bylo rozdělení rychlostí rovnovážné, je třeba aby ustavující interakce (pružné srážky) byly častější než narušující interakce (nepružné srážky). Označíme-li čas mezi pružnými srážkami t_{elastic}

4. TERMODYNAMICKÁ ROVNOVÁHA

a čas mezi nepružnými srážkami $t_{\text{nonelastic}}$, pro zachování rovnovážného rozdělení je třeba, aby platilo

$$t_{\text{elastic}} \ll t_{\text{nonelastic}}$$

K pružným srážkám musí docházet podstatně častěji než ke srážkám nepružným. Pokud je to splněno (což například v prostředí hvězdných atmosfér je), tak nepružné srážky mají tendenci ustavovat rovnovážné rozdělení excitačních a ionizačních stavů. Kromě toho pro rovnovážné rozdělení rychlostí jsou i nepružné srážky v detailní rovnováze.

Nerovnovážné rozdělení záření, které může vzniknout řešením rovnice (4.54), naopak způsobuje, že zářivé přechody už nemusejí být v detailní rovnováze. Označíme $t_{\text{radiative}}$ čas mezi interakcemi záření s hmotou, pro splnění podmínek LTE musí platit

$$t_{\text{nonelastic}} \ll t_{\text{radiative}}$$

pro každý proces. Všechny procesy musejí být v detailní rovnováze. Nerovnovážné rozdělení záření však porušuje podmínku detailní rovnováhy pro zářivé přechody. Pro zachování LTE je tedy nutné, aby zářivé přechody byly méně četné než přechody srážkové. Pokud by však záření mělo rovnovážné rozdělení, splnění podmínky detailní rovnováhy zářivých přechodů by nezničilo.

Užití LTE Přiblížení lokální termodynamické rovnováhy v rovnici přenosu záření (rovnici 4.54) použil již Milne (1921). S pomocí tohoto přiblížení se podařilo sestavit poměrně zdařilé modely hvězdných atmosfér a předpovědět hvězdná spektra, pro řešení rovnice přenosu záření stačí znát opacitu, emisivita je dána pomocí Planckovy funkce. Problematika LTE modelování hvězdných atmosfér je pěkně shrnuta v knize Unsöld (1955).

Jak jsme již uvedli, přiblížení LTE systematicky zanedbává vliv záření na obsazení energetických hladin, čímž je vnitřně nekonzistentní. Pokud je ve skutečnosti vliv záření na ionizační a excitační rovnováhu nezanedbatelný, LTE přiblížení selhává a vede k chybným výsledkům. Více se k této problematice vrátíme v kapitole 9.1.

Kapitola 5

Opacita, emisivita a rozptyl

Opacita (3.1), emisivita (3.3) a také rozptylový koeficient závisejí na hustotě absorbujících částic a na jejich vlastnostech. V kapitole 4 jsme si odvodili vztahy pro koncentraci iontů a jednotlivých hladin za předpokladu termodynamické rovnováhy, obecnější závislosti uvedeme v kapitole 9. V této kapitole se budeme zabývat vlastnostmi různých absorbujících částic, uvedeme základní informace pro popis různých interakcí se zářením, které vyplývají ze znalostí struktury atomů a molekul. Energetická struktura částic vyplývá z kvantové teorie. Interakce záření s částicemi způsobuje přeskoky mezi vázanými nebo volnými energetickými hladinami částice (atomu, iontu, molekuly). Podle typu přeskočů dělíme přechody na *vázaně-vázané* (*bound-bound transitions*), *vázaně-volné* (*bound-free*), *volně-vázané* (*free-bound*), *volně-volné* (*free-free*) a rozptylové procesy.

V následujících podkapitolách zavedeme nejprve obecné koeficienty pro absorpci a emisi a odvodíme vztahy, které mezi nimi platí. Dále se budeme zabývat interakcí atomů a jejich iontů se zářením. Probereme základní jejich strukturu (kapitola 5.2), podrobnosti absorpce a emise ve spektrálních čarách (kapitola 5.3), fotoionizaci a fotorekombinaci (kapitola 5.4) a volně-volné přechody (kapitola 5.5). Následovat bude interakce záření s molekulami (kapitola 5.6), rozptyl záření na elektronech (kapitola 5.7) a ve spektrálních čarách (kapitola 5.8).

5.1 Obecné absorpční a emisní koeficienty

Nejprve se budeme zabývat přechody mezi obecnými stavy částic bez bližší specifikace, o kterou částici se jedná. Zavedeme základní koeficienty pro popis procesů absorpce a emise záření, odvodíme vztahy mezi koeficienty procesů absorpce a emise záření pro excitační a deexcitační procesy (vázaně-vázané přechody, kapitola 5.1.1) a pro ionizační a rekombinační procesy (vázaně-volné přechody a volně-vázané přechody, kapitola 5.1.2). Vztahy odvodíme za předpokladu detailní

rovnováhy (viz kapitola 4.6).

5.1.1 Einsteinovy koeficienty pro vázaně-vázané přechody

Koeficienty A pro vyzařování (*Ausstrahlung*) a B pro ozařování (*Einstrahlung*) molekul navrhl Einstein (1916a,b) a poukázal na jejich souvislost s Planckovou funkcí při využití Boltzmannova rozdělovacího zákona excitačních stavů. Zde se přidržíme výkladu z knihy Hubeny and Mihalas (2014), který odpovídá úvahám v práci Einstein (1916b).

Pro atom v termodynamické rovnováze s polem záření budeme uvažovat přechody mezi vázanými stavy atomu (hladinami) l a u , přičemž hladina l má nižší energii než hladina u . Einsteinovy koeficienty jsou používány pro popis zářivých přechodů mezi vázanými hladinami. Koeficient B_{lu} označuje absorpci (přechod $l \rightarrow u$), pro opačný přechod ($u \rightarrow l$) označují koeficient A_{ul} spontánní emise a koeficient B_{ul} stimulovanou emisi. Pomocí Einsteinova koeficientu pro absorpci můžeme četnost (počet za jednotku času) absorpcí fotonů ze svazku záření o frekvenci z intervalu $(\nu, \nu + d\nu)$ putujícího ve směru \mathbf{n} do jednotkového prostorového úhlu $d\varpi/(4\pi)$ zapsat jako

$$r_{lu}(\mathbf{n}, \nu) d\nu \frac{d\varpi}{4\pi} \equiv n_l B_{lu} I(\mathbf{n}, \nu) d\nu \frac{d\varpi}{4\pi}, \quad (5.1)$$

kde n_l je koncentrace částic ve stavu l . Četnost stimulované emise do svazku záření lze vyjádřit analogicky vztahem

$$r_{ul}^{\text{stim}}(\mathbf{n}, \nu) d\nu \frac{d\varpi}{4\pi} \equiv n_u B_{ul} I(\mathbf{n}, \nu) d\nu \frac{d\varpi}{4\pi}, \quad (5.2)$$

kde n_u je koncentrace částic ve stavu u . Četnost spontánní emise do svazku záření je

$$r_{ul}^{\text{spont}}(\mathbf{n}, \nu) d\nu \frac{d\varpi}{4\pi} \equiv n_u A_{ul} d\nu \frac{d\varpi}{4\pi}. \quad (5.3)$$

V rovnici (5.3) nevystupuje intenzita záření, protože spontánní emise na poli záření nezávisí.

Vztah mezi Einsteinovými koeficienty A_{ul} , B_{ul} a B_{lu} určíme pro případ termodynamické rovnováhy. V termodynamické rovnováze musí být procesy přechodu mezi stavy l a u v detailní rovnováze (kapitola 4.6). Z rovnic (5.1), (5.2) a (5.3) dostaneme pro počet přechodů $l \rightarrow u$ (levá strana) a $u \rightarrow l$ (pravá strana)

$$r_{lu}(\mathbf{n}, \nu) = r_{ul}^{\text{spont}}(\mathbf{n}, \nu) + r_{ul}^{\text{stim}}(\mathbf{n}, \nu) \quad (5.4)$$

Předpokládejme nyní termodynamickou rovnováhu. V ní je $I_\nu = B_\nu$. Rovnice (5.4) tak přejde na tvar

$$n_l^* B_{lu} B_\nu = n_u^* B_{ul} B_\nu + n_u^* A_{ul}. \quad (5.5)$$

Odtud vyjádříme Planckovu funkci B_ν ,

$$B_\nu = \frac{n_u^* A_{ul}}{n_l^* B_{lu} - n_u^* B_{ul}}. \quad (5.6)$$

S využitím Boltzmannovy excitační rovnice (4.5) dostaneme

$$B_\nu = \frac{A_{ul}}{B_{ul}} \frac{1}{\frac{g_l B_{lu}}{g_u B_{ul}} \exp\left(\frac{h\nu_{lu}}{kT}\right) - 1}. \quad (5.7)$$

Porovnáním s výrazem pro Planckovu funkci (4.44) dostaneme pro **vztahy mezi Einsteinovými koeficienty**

$$A_{ul} = \frac{2h\nu^3}{c^2} B_{ul} \quad (5.8a)$$

$$g_l B_{lu} = g_u B_{ul}. \quad (5.8b)$$

Ačkoli byly vztahy odvozeny pro případ termodynamické rovnováhy, ve výsledku se jedná o vlastnosti atomů nezávislé na poli záření, proto vztahy (5.8) platí obecně.

Střední doba života hladiny

Ukážeme si ještě další význam Einsteinova koeficientu A_{ul} (viz například Pradhan and Nahar, 2011, cvičení 4.2). Rovnice (5.4) vyjadřuje rovnovážný stav. Pokud rovnováha není, vztahem

$$\frac{dn_l}{dt} = -\frac{dn_u}{dt} = A_{ul}n_u + B_{ul}I_\nu n_u - B_{lu}I_\nu n_l$$

vyjádříme časovou změnu koncentrací hladin n_u a n_l . V prostředí bez záření platí pro změnu koncentrace horní hladiny

$$-\frac{dn_u}{dt} = A_{ul}n_u,$$

odkud

$$n_u(t) = n_{0u} e^{-A_{ul}t}, \quad (5.9)$$

kde n_{0u} je počáteční hodnota koncentrace horní hladiny. Z toho vyplývá, že A_{ul}^{-1} má význam střední doby života (*lifetime*) hladiny u . Rozměr Einsteinova koeficientu $[A] = s^{-1}$.

Účinný průřez absorpce a síla oscilátoru

Energii pohlcenou při absorpci záření v přechodu $l \rightarrow u$ můžeme zapsat pomocí četnosti ze vztahu (5.1) vynásobením energií daného přechodu $h\nu_{lu}$.

$$\delta\mathcal{E} = n_l B_{lu} h\nu_{lu} I(\mathbf{n}, \nu_{lu}) \frac{d\varpi}{4\pi} = n_l \left(B_{lu} \frac{h\nu_{lu}}{4\pi} \right) I(\mathbf{n}, \nu_{lu}) d\varpi. \quad (5.10)$$

Veličina

$$\alpha_{lu} = B_{lu} \frac{h\nu_{lu}}{4\pi} \quad (5.11)$$

vyjadřuje **celkový účinný průřez** α_{lu} **přechodu mezi hladinami** l a u . Rozměr Einsteinova koeficientu $[B] = \text{cm}^2 \text{erg}^{-1} \text{s}^{-1}$.

Další důležitou veličinu zavedeme pomocí analogie s klasickým harmonickým oscilátorem. Uvažujeme-li, že oscilátor v elektromagnetickém poli má hmotnost m_e , můžeme v této aproximaci pro celkový účinný průřez σ_{cl} dipólového přechodu mezi dvěma blíže nespecifikovanými hladinami psát (viz Příloha B.2)

$$\sigma_{cl} = \frac{\pi e^2}{m_e c}. \quad (5.12)$$

Zavedeme často používanou bezrozměrnou veličinu f_{lu} zvanou **síla oscilátoru**, která vyjádří celkový účinný průřez (5.11) v jednotkách účinného průřezu klasického harmonického oscilátoru vztahem

$$\alpha_{lu} = f_{lu} \sigma_{cl} = f_{lu} \frac{\pi e^2}{m_e c} = \frac{h\nu_{lu}}{4\pi} B_{lu}. \quad (5.13)$$

Pro označení účinného průřezu se někdy místo α_{lu} používá σ_{lu} .

Tabelované údaje pro vázaně-vázané přechody

Pro většinu přechodů uvedených v různých přehledech a databázích¹ se pro vyjádření účinného průřezu interakce se zářením nejčastěji používá buď Einsteinův koeficient A_{ul} nebo síla oscilátoru f_{lu} . Často také můžeme nalézt hodnotu logaritmu síly oscilátoru vynásobené statistickou vahou dolní hladiny přechodu, $\log(g_l f_{lu})$.

¹Například databáze NIST (https://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html), existují ale i další.

5.1.2 Milneho vztahy pro kontinuum

Nechť $p_\nu d\nu$ je pravděpodobnost fotoionizace fotonem z intervalu $(\nu, \nu + d\nu)$. Označíme (jako Milne, 1924) $F(\nu)$ pravděpodobnost spontánního zachycení elektronu a $G(\nu)$ pravděpodobnost vynuceného zachycení elektronu. Dále označíme n_0 číselnou hustotu atomů v základním stavu, n_1 číselnou hustotu iontů v základním stavu a $n_e(\nu) d\nu$ číselnou hustotu elektronů s rychlostmi v intervalu $(\nu, \nu + d\nu)$. Rozměr n_0 , n_1 i $n_e(\nu) d\nu$ je cm^{-3} .

Četnost (počet za jednotku času) fotoionizací můžeme vyjádřit (index bf označuje *bound-free* přechod, tj. z vázaného stavu do volného)

$$r_{\text{bf}}(\mathbf{n}, \nu) = n_0 p_\nu I(\mathbf{n}, \nu) d\nu. \quad (5.14)$$

Četnost rekombinací $r_{\text{fb}}(\mathbf{n}, \nu)$ je dána součtem stimulovaných rekombinací $r_{\text{fb}}^{\text{stim}}(\mathbf{n}, \nu)$ a spontánních rekombinací $r_{\text{fb}}^{\text{spont}}(\mathbf{n}, \nu)$,

$$r_{\text{fb}}(\mathbf{n}, \nu) = r_{\text{fb}}^{\text{spont}}(\mathbf{n}, \nu) + r_{\text{fb}}^{\text{stim}}(\mathbf{n}, \nu). \quad (5.15)$$

Počet elektronů letících kolem iontu je úměrný νdt , četnost zachycení je tedy úměrná rychlosti elektronů ν , vztahy pro četnosti spontánních a stimulovaných rekombinací budou

$$r_{\text{fb}}^{\text{spont}}(\mathbf{n}, \nu) = n_1 n_e(\nu) F(\nu) \nu d\nu, \quad (5.16a)$$

$$r_{\text{fb}}^{\text{stim}}(\mathbf{n}, \nu) = n_1 n_e(\nu) G(\nu) I(\mathbf{n}, \nu) \nu d\nu. \quad (5.16b)$$

V termodynamické rovnováze platí $I_\nu = B_\nu$, $n_0 = n_0^*$, $n_1 = n_1^*$ a detailní rovnováha $r_{\text{bf}}(\mathbf{n}, \nu) = r_{\text{fb}}(\mathbf{n}, \nu)$. Při fotoionizaci se část energie fotonu použije na ionizaci a část na kinetickou energii vyraženého elektronu, $h\nu = \mathcal{E}_I + m_e v^2/2$. Diferenciací dostaneme $h d\nu = m_e v dv$. Potom z rovnic (5.15) a (5.16) získáme vztah

$$n_0^* p_\nu B_\nu = n_1^* n_e^*(\nu) [F(\nu) + G(\nu) B_\nu] \frac{h}{m_e}. \quad (5.17)$$

Odtud dostaneme *Milneho vztahy mezi koeficienty vázaně-volných přechodů*,

$$F(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} G(\nu), \quad (5.18a)$$

$$G(\nu) = \frac{m_e}{h} \left[\frac{n_0^*}{n_1^* n_e^*(\nu)} \right] p_\nu \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right). \quad (5.18b)$$

S využitím vztahu $n_e(\nu) = n_e f(\nu)$, kde $f(\nu)$ je dáno vztahem pro Maxwellovo rozdělení (4.13), a s pomocí Sahovy ionizační formule můžeme odvodit vztahy

$$F(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} G(\nu), \quad (5.19a)$$

$$p_\nu = \frac{8\pi m_e^2 v^2}{h^2} \frac{g_1}{g_0} G(v). \quad (5.19b)$$

Vztahy (5.18) jsou analogií vztahů mezi Einsteinovými koeficienty (5.8) a podobně závisejí pouze na struktuře atomu. Platí tedy i bez předpokladu termodynamické rovnováhy.

Makroskopický koeficient spontánní rekombinace

Pomocí vztahů (5.18) můžeme odvodit *vztah pro makroskopický koeficient spontánní emise při rekombinaci*. Emitovaná energie je dána četností (5.16a) vynásobenou energií fotonu $h\nu$,

$$\begin{aligned} \eta_{\text{fb}}^{\text{S}} d\nu &= [n_1 n_e(v) F(v) v dv] h\nu \\ &= n_1 n_e(v) \underbrace{\left(\frac{n_0}{n_1 n_e(v)} \right)^*}_{\tilde{n}_0^*} \left(\frac{m_e}{h} \right) \left(\frac{h}{m_e} \right) \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} \right) e^{-\frac{h\nu}{kT}} \underbrace{p_\nu h\nu}_{\alpha_{\text{bf}}(\nu)} d\nu \\ &= \tilde{n}_0^* \alpha_{\text{bf}}(\nu) \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} \right) \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) d\nu \\ &= \tilde{n}_0^* \alpha_{\text{bf}}(\nu) \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) \right] B_\nu(T) d\nu \end{aligned} \quad (5.20)$$

kde jsme zavedli fotoionizační účinný průřez $\alpha_{\text{bf}} = h\nu p_\nu$ a pomocí

$$\tilde{n}_0^* \equiv n_1 n_e(v) \left(\frac{n_0}{n_1 n_e(v)} \right)^* \quad (5.21)$$

jsme označili LTE obsazení hladiny 0 spočítané z aktuálních (obecně nerovnovážných) hodnot koncentrace elektronů $n_e(v)$ a obsazení n_1 . Pro maxwellovské rozdělení rychlostí elektronů je $n_e(v) = n_e^*(v)$ a rovnice (5.21) se zjednoduší

$$\tilde{n}_0^* = n_1 \left(\frac{n_0}{n_1} \right)^*. \quad (5.22)$$

Obsazení n_1 rovnovážné být nemusí. Vztah (5.22) je ekvivalentní vztahu (4.22).

Makroskopický koeficient ionizace

Makroskopický koeficient opacity pro ionizaci ze základní hladiny (značené indexem 0) s odečtením stimulované emise získáme pomocí četností (5.14) a (5.16b) po vynásobení energií $h\nu$,

$$\kappa_{\text{bf}} I(\mathbf{n}, \nu) d\nu = n_0 p_\nu I(\mathbf{n}, \nu) d\nu h\nu - n_1 n_e(v) G(v) I(\mathbf{n}, \nu) v dv \quad (5.23)$$

Podobným postupem jako při odvozování rovnice (5.20) dostaneme s využitím vztahů (5.18b) a (5.21)

$$\kappa_{\text{bf}}(\nu) \equiv \left[n_0 - \tilde{n}_0^* \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) \right] \alpha_{\text{bf}}(\nu), \quad (5.24)$$

kde $\alpha_{\text{bf}}(\nu)$ je účinný průřez daného přechodu a \tilde{n}_0^* je rovnovážné obsazení hladiny 0 dané vztahem (5.21). V případě termodynamické rovnováhy (TE) se vztah zjednoduší ($n_0 = n_0^* = \tilde{n}_0^*$)

$$\kappa_{\nu}^* = n_0^* \alpha_{\text{bf}}(\nu) \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) \right]. \quad (5.25)$$

Tabelované údaje pro vázaně-volné přechody

Fotoionizační účinný průřez $\alpha_{\text{bf}}(\nu)$ není jen jedno číslo, ale závisí na frekvenci. Proto ho databáze atomárních dat² uvádějí ve formě funkční závislosti. Funkční závislost je poměrně složitá, většinou bývá k dispozici ve formě tabulky.

5.2 Struktura atomů

Pro každý čárový přechod, který chceme zahrnout do výpočtu opacity, potřebujeme znát jeho základní vlastnosti, což je účinný průřez včetně jeho frekvenční závislosti (profilu), jeho spodní a horní hladinu a jejich energie. Tím známe i frekvenci daného přechodu. Určení těchto základních parametrů je úkolem atomární fyziky.

V analytickém tvaru je možné jen pro nejjednodušší ionty, neutrální vodík (H I) a vodíkpodobné ionty (He II, Li III, Be IV, atd.). Stacionární stavy těchto atomů získáme řešením Schrödingerovy rovnice pro vodíkpodobné ionty

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi - \frac{Ze^2}{r} \psi = E\psi \quad (5.26)$$

V této rovnici je μ redukovaná hmota elektronu, $1/\mu = 1/m_e + 1/m_{\text{atom}}$, která je různá pro každý atom i izotop. Hladiny (stavy) atomu vodíku nebo vodíkpodobného iontu s atomovým číslem Z jsou popsány kvantovými čísly.

řešení ve sférických souřadnicích ve tvaru

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

²Například TOPbase (<https://cdsweb.u-strasbg.fr/topbase/xsections.html>).

hlavní kvantové číslo $n = 1, 2, 3, \dots$, **slupky** zvané K, L, M, \dots

vedlejší (orbitální) kvantové číslo $l = 0, 1, 2, 3, \dots$; (odpovídá značení $s, p, d, f, g, h, i, k, \dots$ – dále podle abecedy, pouze j je vynecháno)

s – “sharp”, p – “principal”, d – “diffuse”, f – “fundamental”
(původní označení sérií spekter sodíku - Příloha B.5.2)

nabývá hodnot v intervalu $\langle 0; n - 1 \rangle$

orbitální impulsmoment nabývá hodnot $\sqrt{l(l+1)}\hbar$

magnetické kvantové číslo z -složka orbitálního impulsmomentu m_l může nabývat celkem $2l + 1$ celočíselných hodnot v intervalu $\langle -l; l \rangle$

spin má hodnotu $s = \frac{1}{2}$,

spinový impulsmoment má hodnotu $\sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{3}{2}\hbar$

z -složka spinu m_s může nabývat hodnot $-\frac{1}{2}$ a $+\frac{1}{2}$

pro dané n je celkem $2n^2$ kombinací l a m_l a m_s

stav elektronu v atomu je popsán čtveřicí kvantových čísel (n, l, m_l, m_s)

5.2.1 Struktura a přechody vodíku a vodíkpodobných iontů

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.1: Struktura vodíkového atomu.

Energie vázaného stavu vodíku nebo vodíkpodobného iontu závisí na atomovém čísle Z , na jejím hlavním kvantovém čísle n a také na hmotnosti jádra atomu vztahem (B.6)

$$E_n = -\frac{Z^2 \bar{\mathcal{R}}_Z}{n^2}, \quad (5.27)$$

kde $\bar{\mathcal{R}}_Z$ je Rydbergova konstanta daného atomu (viz Příloha B.1 a rovnice B.5). Závislost energií hladin na n^{-2} způsobuje vzájemný častý překryv hladin vodíkpodobných iontů. Spektrální série vodíku (Lymanova, Balmerova, atd.) se vždy překrývají s čarami vodíkpodobných iontů, nicméně díky závislosti energie hladin na hmotnosti atomového jádra (jiné $\bar{\mathcal{R}}_Z$) jsou jejich vlnové délky vždy trochu vzájemně posunuty. Statistická váha n -té hladiny je dána vztahem

$$g_n = 2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2. \quad (5.28)$$

Sílu oscilátoru pro přechod mezi hladinami s hlavními kvantovými čísly n a n' lze vyjádřit pomocí

$$g_n f_{nn'} = \frac{32}{3\pi\sqrt{3}} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)^{-3} \frac{1}{n^3 n'^3} g(n, n') \quad (5.29)$$

kde $g(n, n')$ je Gauntův faktor, veličina řádu 1. Výsledky prvních výpočtů atomárních dat pro vodík zveřejnili Menzel and Pekeris (1935).

5.2.2 Jemná struktura hladin vodíku

Vztah (5.27) udává jednu hodnotu energie pro celou slupku s kvantovým číslem n . Z relativistické rovnice však vyplývá, že pro různá orbitální kvantová čísla l dostáváme různé hodnoty energie. Stavů charakterizovanému kvantovými čísly n a l říkáme *term*. Změna energie oproti vztahu (5.27) je dána rovnicí

$$\Delta E_{nl} = \frac{E_n (Z\alpha)^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right) = \frac{Z^4 \alpha^2 \bar{R}_Z}{n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right) \quad (5.30)$$

kde $\alpha = e^2/(\hbar c) = 1/137.036$ je bezrozměrná *konstanta jemné struktury*. Změna energie daná rovnicí (5.30) je vždy záporná, proto stavy s nejmenším l mají pro dané n nejnižší energii.

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.2: Jemná struktura vodíkového atomu. Obrázek v (Sobelman, 1992, Fig. 1.3).

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.3: Jemná struktura vodíkového atomu.

Další změny stavů dostaneme, když kromě orbitálního kvantového čísla l vezmeme v úvahu ještě spin elektronu s . Stavů popsanému kvantovými čísly n , l a s říkáme *hladina*. Každé hladině charakterizované těmito kvantovými čísly můžeme přiřadit kvantové číslo celkového impulsmomentu j , které získáme vektorovým složením l a s ,

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}.$$

Kvantové číslo j je proto z intervalu $\langle |l - s|, l + s \rangle$, přičemž v případě vodíku $s = \frac{1}{2}$ (má jeden elektron). Pro orbitální kvantové číslo $l = 0$ dostáváme jen jednu

hodnotu $j = \frac{1}{2}$. Pro $l = 1$ dostáváme dvě hodnoty $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$, pro $l = 2$ dostáváme dvě hodnoty $j = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$, pro vyšší hodnoty l je postup analogický. Hladina tak může být ekvivalentně popsána také kvantovými čísly n, l a j .

Započtení spinu způsobí další posun energie stavů,

$$\Delta E_{so} = \alpha^2 \bar{\mathcal{R}}_Z \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \right] \frac{Z^4}{n^3}. \quad (5.31)$$

Celkový posun energií vyplývající z rovnic (5.30) a (5.31) je

$$\begin{aligned} \Delta E_{nlj} &= \Delta E_{nl} + \Delta E_{so} \\ &= \frac{E_n (Z\alpha)^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j+\frac{1}{2}} \right) = \frac{Z^4 \alpha^2 \bar{\mathcal{R}}_Z}{n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j+\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (5.32)$$

Zajímavé je, že výsledný vztah pro energie nezávisí na kvantovém čísle l . Pro dané hlavní kvantové číslo n jsou energie stavů s různým l a stejným j stejné. Ve skutečnosti energie pro různá l stejně nejsou, jak vyplývá z přesnějších vztahů kvantové elektrodynamiky (viz Sobelman, 1992, kapitola 10.3.5). Experimentálně tento rozdíl energií pro hladiny vodíku $2s_{\frac{1}{2}}$ a $2p_{\frac{1}{2}}$ pozorovali Lamb and Retherford (1947), říká se mu Lambův posuv.

Výběrová pravidla pro dipólové přechody

výběrová pravidla: přechod mezi stavy nlm_l a $n'l'm'_l$ dovolen pro

$$\begin{aligned} \Delta n &\text{ jakékoli} \\ \Delta l &= l' - l = \pm 1 \\ \Delta s &= 0 \end{aligned} \quad \text{pro vodík splněno vždy, má jen 1 elektron} \quad (5.33a)$$

jinak vyjádřeno

$$\Delta j = 0, \pm 1 \quad \text{kromě} \quad j = 0 \leftrightarrow j' = 0 \quad (5.33b)$$

pro přechody mezi podhladinami

$$\Delta m_l = m'_l - m_l = 0, \pm 1 \quad \text{pro přechody mezi složkami hladin} \quad (5.33c)$$

dvoufotonový proces –

- přechod $1s_{\frac{1}{2}} \leftrightarrow 2s_{\frac{1}{2}}$ – není dovolen podle výběrových pravidel

- možný jako dvoufotonový (Dopita and Sutherland, 2005, kapitola 6.4)³ absorpce nebo emise dvou fotonů s $\nu_1 + \nu_2 = \nu_{L\alpha}$
- pravděpodobnost vyzáření fotonu maximální uprostřed (pro $\nu = \nu_{L\alpha}/2$, což odpovídá 1550Å) maximum emisivity není ve středu (protože je váhovaná frekvencí), ale na 2403Å
- integrací přes frekvence dostaneme Einsteinův koeficient $A_{2s1s} = 8.2249s^{-1}$ možný i zakázaný magnetický dipólový přechod, pro něj je $A_{2s1s} = 2.495 \cdot 10^{-6}$, méně pravděpodobný
- dvoufotonový přechod významný v mezihvězdném prostředí (poprvé použili Spitzer and Greenstein, 1951)

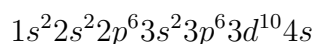
Hyperjemná struktura hladin vodíku

- vzniká interakcí se spinem jádra atomu
- základní hladina vodíku $1s_{\frac{1}{2}}$
 - kvantové číslo hladiny $j = l + s = \frac{1}{2}$
 - spin atomového jádra $i = \frac{1}{2}$
 - $f = j + i$, 2 hladiny, $f = 0, f = 1$
 - u vodíku přechod mezi hladinami na vlnové délce 21.106 cm (1420.40575MHz)
 - doba života excitovaného stavu $\sim 10^7$ let ($A = 2.87 \cdot 10^{-15}s^{-1}$, Dopita and Sutherland, 2005)

5.2.3 Struktura mnohoelektronových atomů

analytické řešení víceelektronového systému není možné, třeba řešit numericky
základní předpoklad – aproximace centrálního pole (viz například Sobelman, 1992, kapitola 2)

elektronová konfigurace příklad: elektronová konfigurace základního stavu mědi
Cu



každý elektron má orbitální (l) a spinový (s) impulsmoment,
ty spolu interagují

³Teorii dvoufotonových procesů rozvinuli Breit and Teller (1940).

existuje několik způsobů, jak vektory l a s jednotlivých elektronů sečíst a získat tak celkový impulsmoment

LS vazba silnější vazba mezi všemi l elektronů; mezi všemi s elektronů
nejdříve sečteme všechna l do L , všechna s do S , pak zkombinujeme do J

jj vazba silnější vazba mezi l a $s \forall$ elektron, zkombinujeme do j , pak sečteme všechna j do J

něco mezi intermediate coupling

Grotrianovy diagramy – schémata energetických hladin atomů (Grotrian, 1928)

5.2.4 LS vazba

(Russellova-Saundersova)

- pro lehké prvky $Z \lesssim 18$
- v případě, že jsou všechny orbitální impulsmomenty silně navzájem vázány, tvoří potom celkový orbitální impulsmoment atomu

$$L = \sum l \quad (5.34)$$

velikost $|L| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$; $L = 0, 1, 2, 3, \dots$

- také všechny spinové momenty jsou spolu silně svázány, celkový spin atomu je

$$S = \sum s \quad (5.35)$$

- velikost $|S| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$;
- pro sudý počet elektronů v obalu – $S = 0, 1, 2, 3, \dots$
- pro lichý počet elektronů v obalu – $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$

- celkový elektronový impulsmoment atomu vznikne slabou vazbou orbitálního a spinového

$$J = L + S \quad (5.36)$$

- velikost $|J| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$;
- $J \in \langle |L - S|; |L + S| \rangle$,
- celkem $2 \min(L, S) + 1$ nezáporných čísel (multiplicita),
- pro sudý počet elektronů v obalu – celá čísla,
- pro lichý počet elektronů v obalu – poločíslna ($\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$)
- z složka J je $M\hbar$; $M \in \langle -J; J \rangle$, celkem $2J + 1$ čísel

5.2.5 Termy a hladiny v LS aproximaci

pravidla značení – zavedli Russell and Saunders (1925), použil a upravil Hund (1927), konečnou podobu včetně označení parity zformulovali Russell et al. (1929)

term podle hodnot L se term značí (J vynecháno, aby se nepletlo s $J = L + S$)

L	0	1	2	3	4	5	6	7	...
označení	S	P	D	F	G	H	I	K	...

hladina množina stavů se stejným L, S, J se nazývá hladina

parita vyplývá ze symetrie vlnové funkce

$$\pi = (-1)^{\sum_i l_i} \quad (5.37)$$

$\pi = +1 \Rightarrow$ sudá (*even*) parita, $\pi = -1 \Rightarrow$ lichá (*odd*) parita

pravidlo: je-li součet všech l v hladině sudý, je parita sudá

zápis hladiny

- zapíšeme písmeno odpovídající hodnotě L
- hodnota $2S + 1$ se napíše do levého horního indexu
- hodnota J se napíše do pravého dolního indexu
- lichá parita se zapíše do pravého horního indexu jako o , sudá se nezapíše nikam
- výsledek $^{2S+1}L_J$ nebo $^{2S+1}L_J^o$

zápis termu

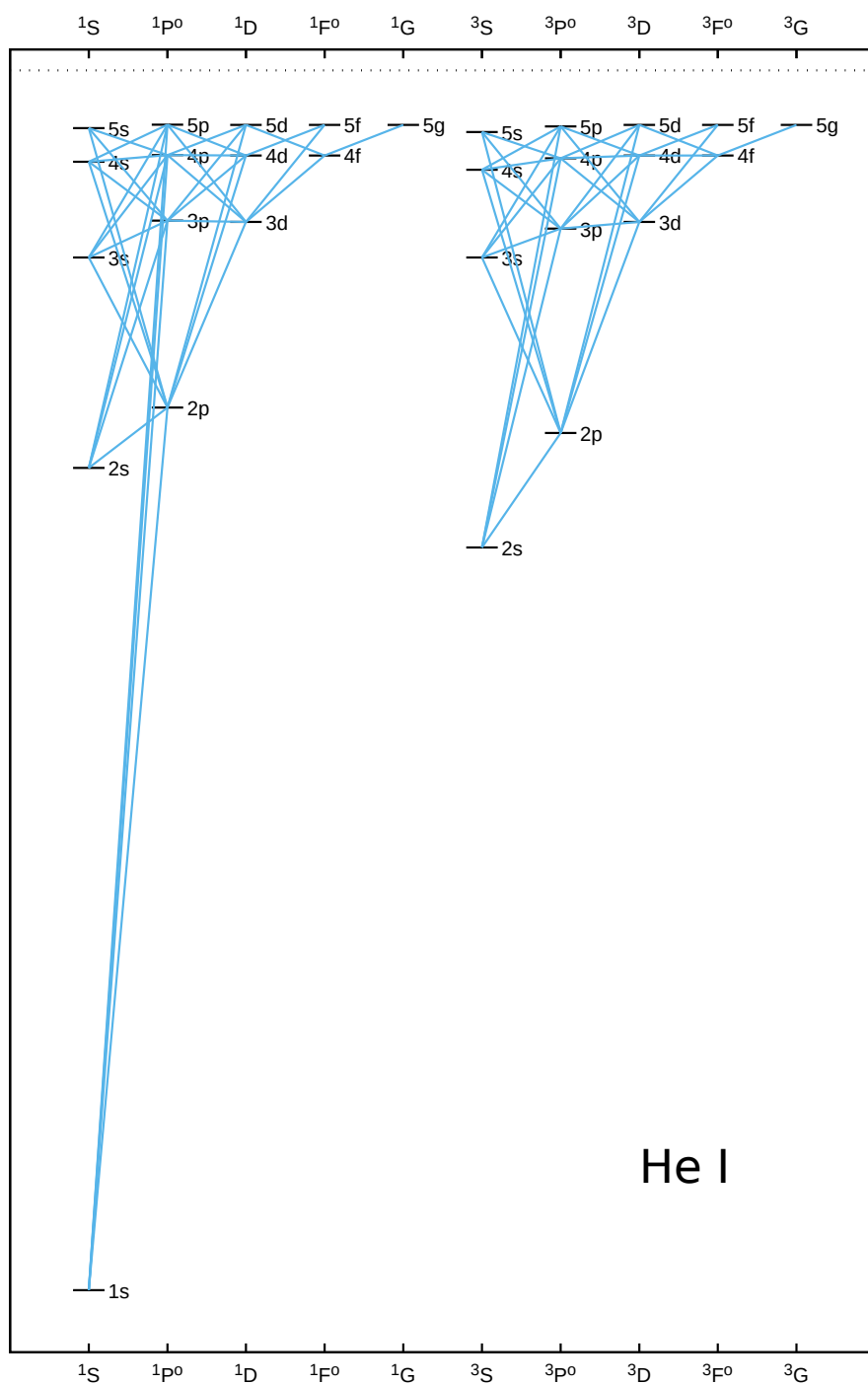
- jako zápis hladiny s vynecháním J
- výsledek ^{2S+1}L nebo $^{2S+1}L^o$

statistická váha hladiny

$$g = 2J + 1 = (2L + 1)(2S + 1)$$

stav (podhladina) – každá hladina má $2J + 1$ stavů o stejné energii, v magnetickém poli se rozštěpí na stavy s různou energií

5. OPACITA, EMISIVITA A ROZPTYL



Obrázek 5.4: Schematický Grotrianův diagram termů He I. Termy s $n \geq 6$ nejsou zobrazeny.

Tabulka 5.1: Hladiny neutrálního helia He I.

konfigurace	singlety		triplety		
	term	hladina	term	hladiny	
$1s^2$	1S	1S_0			
$1s2s$	1S	1S_0	3S	3S_1	
$1s2p$	$^1P^o$	$^1P_1^o$	$^3P^o$	$^3P_0^o$	$^3P_1^o$ $^3P_2^o$
$1s3s$	1S	1S_0	3S	3S_1	
$1s3p$	$^1P^o$	$^1P_1^o$	$^3P^o$	$^3P_0^o$	$^3P_1^o$ $^3P_2^o$
$1s3d$	1D	1D_2	3D	3D_1	3D_2 3D_3
$1s4s$	1S	1S_0	3S	3S_1	
$1s4p$	$^1P^o$	$^1P_1^o$	$^3P^o$	$^3P_0^o$	$^3P_1^o$ $^3P_2^o$
$1s4d$	1D	1D_2	3D	3D_1	3D_2 3D_3
$1s4f$	$^1F^o$	$^1F_4^o$	$^3F^o$	$^3F_2^o$	$^3F_3^o$ $^3F_4^o$

Příklad - neutrální helium (He I)

- nejjednodušší atom s více elektrony – dva elektrony
- základní hladina $1s^2 \ ^1S_0$ (oba elektrony mají stejné l a $n \rightarrow$ **ekvivalentní elektrony**)
- excitované stavy – elektrony mají různá n – **neekvivalentní elektrony** (tabulka 5.1 a obrázek 5.4)

další příklad C I (Příloha B.5.4)

5.2.6 Rydbergova korekce

například Pradhan and Nahar (2011, kapitola 2.9), Sobelman (1992, kapitola 3.2.1)

- modifikovaný vztah (5.27) pro energie hladin těžších prvků (například Tenyson, 2005, rovnice 6.1, ale v ní je použita konstanta \mathcal{R}_∞)⁴

$$E_{nl} = -\bar{\mathcal{R}}_Z \frac{Z_{\text{eff}}^2}{(n - \mu_{nl})^2} \quad (5.38)$$

Z_{eff} – efektivní náboj,

například pro sodík 1 (náboj ostatních elektronů se vyruší s nábojem jádra), pro jiné prvky může být jiný, záleží na struktuře atomu

⁴Tento vztah poprvé formuloval Rydberg (1890), v té době ještě bez kvantové mechaniky.

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.5: Zjednodušený diagram dvouexcitovaných hladin Ca I. Obrázek v Tennyson (2005, obr. 7.9).

μ_{nl} – **kvantový defekt** (*quantum defect*), pro každé l jiné číslo, snižuje se pro rostoucí l
 příklad: sodík Na I – pro podslupku f a vyšší je $\mu_{nl} = 0$, \Rightarrow vztah jako pro vodík

- vztah (5.38) velmi dobře použitelný například pro spektra alkalických prvků (sodík, ...), kapitola B.5.2

5.2.7 Dvojexcitované stavy

- mohou být excitovány dva i více elektronů
- u všech atomů a iontů, které mají více elektronů v obalu než jeden
- příklad Ca I – obrázek 5.5
 - základní hladina $4s^2 \ ^1S_0$
 - normální systém konfigurací $4sns$, $4snp$, $4snd$, atd. vytváří singletní a tripletní termy (obrázek B.2)
 - z hladin excitovaných termů $4s3d \ ^1D$ a $4s3d \ ^3D$ může být snadno excitován nejen $3d$ elektron, ale i $4s$ elektron, vzniknou stavy $3d \ (^2D)ns' \ ^1D$, $3d \ (^2D)ns' \ ^3D$, $3d \ (^2D)np' \ ^1P^o$, $3d \ (^2D)np' \ ^3P^o$, atd. (obrázek B.3)
 některé z nich mají vyšší energii než je ionizační energie z hladiny $4s^2$ (ze základní hladiny)
 tyto stavy se ionizují do hladiny Ca II $3d \ ^2D$ (viz obr. B.4)
 systém stavů s jedním excitovaným elektronem značíme $4s \ (^2S)nl \ ^1,3L$
- z dvou- a víceexcitovaných stavů s energií vyšší než nejnižší ionizační energie může dojít k autoionizaci

5.2.8 Složitější struktura atomů

rod (parentage), rodič, prarodič

příklad: VI, 6D termy, $L = 2, S = 5/2$, multiplicita=5, hodnoty $J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}$, základní konfigurace V I: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$, zkráceně $3d^3 4s^2$; konfigurace $3d^4 ({}^5D) 4s, 3d^3 4s ({}^5F) 4p, 3d^4 ({}^5D) 4p, 3d^3 4s ({}^5P) 4p$

další příklad P IV $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s ({}^2S)$ a $1s^2 2s^2 2p^6 3p ({}^2P^o)$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s ({}^2S) 3s ({}^1S)$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s ({}^2S) 3p ({}^3P^o)$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s ({}^2S) 3p ({}^1P^o)$

$1s^2 2s^2 2p^6 3p ({}^2P^o) 3p ({}^1D)$

$1s^2 2s^2 2p^6 3p ({}^2P^o) 3p ({}^3P)$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s ({}^2S) 3d ({}^3D)$

$1s^2 2s^2 2p^6 3p ({}^2P^o) 3p ({}^1S)$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s ({}^2S) 3d ({}^1D)$

polyad termy mající stejné rodiče

atomy s částečně zaplněnými *d*- a *f*-slupkami (Příloha B.5.6)

velké množství hladin, speciální značení (*a, b, c, x, z, ...*) jako zkratka dlouhých konfigurací

značení viz také Moore (1952).

5.2.9 Výběrová pravidla

(zeemanovská) složka (čáry) je přechod mezi stavy

čára je přechod mezi hladinami, skládá se ze složek

multiplet je přechod mezi termy, skládá se z čar

výběrová pravidla (viz Tatum, 2020, kapitola 7.24) (viz také Martin and Wiese, 2006, Table 10.4)

většina spektrálních čar – elektrické dipólové záření

některé čáry nejsou dovolené pro dipólové záření (E1) \Rightarrow jsou zakázané, ale mohou být dovolené pro elektrické kvadrupólové záření (E2) nebo pro záření magnetického dipólu (M1)

některé přechody jsou zakázané jen díky LS-vazbě a začínají být dovolené při odchylkách of LS vazby

elektrické dipólové přechody (E1) – podmínky:

1. $\Delta J = 0, \pm 1$ ($J = 0 \rightarrow J = 0$ je zakázaný)
2. pro Zeemanovské složky $\Delta M = 0 \pm 1$ (kromě $0 \leftrightarrow 0$ pro $\Delta J = 0$)
3. změna parity
4. pro slabou kongurační interakci:
přeskok jednoho elektronu: $\Delta l = \pm 1$, Δn libovolné
5. jen pro LS coupling
 $\Delta S = 0$
 $\Delta L = 0, \pm 1$ kromě $0 \leftrightarrow 0$

magnetické dipólové přechody (M1) – přechody mezi termy stejné konfigurace

1. $\Delta J = 0 \pm 1$, ($J = 0 \rightarrow J = 0$ je zakázaný)
2. pro Zeemanovské složky $\Delta M = 0 \pm 1$ (kromě $0 \leftrightarrow 0$ pro $\Delta J = 0$)
3. není změna parity
4. není změna elektronové konfigurace ($\Delta l = 0$, $\Delta n = 0$)
5. navíc pro pro LS-vazbu:
 - $\Delta S = 0$
 - $\Delta L = 0$
 - $\Delta J = \pm 1$ (Martin and Wiese, 2006, Table 10.4)

elektrické kvadrupólové přechody (E2) – přechody mezi termy stejné konfigurace nebo mezi konfiguracemi, kde je $\Delta l = \pm 2$, \Rightarrow beze změny parity

1. $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$, ale $0 \leftrightarrow 0$, $\frac{1}{2} \leftrightarrow \frac{1}{2}$, $0 \leftrightarrow 1$ jsou zakázané
2. pro Zeemanovské složky $\Delta M = 0, \pm 1, 2$
3. není změna parity
4. navíc pro pro LS-vazbu:
 - $\Delta S = 0$
 - $\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$, ale $0 \leftrightarrow 0$, $0 \leftrightarrow 1$ jsou zakázané

5.2.10 Zakázané čáry v přírodě

mají mnohem nižší pravděpodobnost přechodu \Rightarrow mají větší délku života (až sekundy i minuty);

nutná metastabilní hladina

objeví se všude tam, kde je méně srážek mezi atomy a elektrony (důležité jsou nepružné srážky) – je nutné nechat metastabilní hladiny žít

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.6: Zakázané přechody O I.

- planetární mlhoviny – čáry [O II], [O III], [N I], [N II], [N III]

[O III] 5007 (M1: $^3P_2 - ^1D_2$)

známé čáry: [O III] 4959 (M1: $^3P_1 - ^1D_2$)

[O III] 4363 (E2: $^1P_2 - ^1S_0$)

struktura O III stejná jako C I (obrázek B.7) – stejný počet elektronů

„nebulium” – než se to pochopilo

- sluneční koróna

čára 5303 Å [Fe XIV] ($^2P_{\frac{1}{2}}^o - ^2P_{\frac{3}{2}}^o$)

„coronium”

- polární záře

zelená čára [O I] 5577 (E2: $^1S_0 - ^1D_2$)

červené čáry [O I] 6300 (M1: $^1D_2 - ^3P_2$)

[O I] 6363 (M1: $^1D_2 - ^3P_1$)

diagramy O I: obrázky 5.6 a B.8

- 21cm čára vodíku

hyperjemná struktura – složení impulsmomentu elektronového obalu a jádra, vzniknou 2 stavy

5.2.11 jj vazba

viz Pradhan and Nahar (2011, kapitola 2.7), Sobelman (1992, kapitola 2.3.2)

- vazba mezi elektronem a jádrem silnější -> porušení LS vazby
- elektrostatická interakce mezi elektrony slabší než spin-orbitální interakce
- nutnost uvažovat impulsmoment jednotlivých elektronů

$$\mathbf{j}_i = \mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i$$

$$\mathbf{J} = \sum_i \mathbf{j}_i$$

celkem $2J + 1$ stavů

- značení jednotlivých elektronů $s_{\frac{1}{2}}, p_{\frac{1}{2}}, p_{\frac{3}{2}}, d_{\frac{3}{2}}, d_{\frac{5}{2}}, f_{\frac{5}{2}}, f_{\frac{7}{2}}, \dots$
- značení: pro 2 p -elektrony $(j_1, j_2)_J$: $(1/2, 3/2)_1, (1/2, 3/2)_2$
- příklad: p a d elektrony, $j_1 = 1 \pm \frac{1}{2}, j_2 = 2 \pm \frac{1}{2}$
 $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})_{2,1}, (\frac{1}{2}, \frac{5}{2})_{3,2}, (\frac{3}{2}, \frac{3}{2})_{3,2,1,0}, (\frac{3}{2}, \frac{5}{2})_{4,3,2,1}$
- to jsou neekvivalentní elektrony, pro jj vazbu zajímavější, protože elektrostatická interakce mezi ekvivalentními elektrony je vždy silná
- pro ekvivalentní elektrony je vždy nutné vzít v úvahu Pauliho princip

porovnání LS a jj vazby pro O III 2p3d level (viz Sobelman, 1992, kapitoly 4.7.1 a 4.7.2)

Příklad: O III konfigurace $1s^2 2s^2 2p 3d$

LS vazba

- 2p: $l_1 = 1, s_1 = \frac{1}{2}$
- 3d: $l_2 = 2, s_2 = \frac{1}{2}$
- $L = l_1 + l_2 \Rightarrow L = 1, 2, 3$
- $S = s_1 + s_2 \Rightarrow S = 0, 1$
- $J = L + S$

L	S	J	
1	0	1	$^1P_1^o$
1	0	0,1,2	$^3P_0^o, ^3P_1^o, ^3P_2^o$
2	0	2	$^1D_2^o$
2	1	1, 2, 3	$^3D_1^o, ^3D_2^o, ^3D_3^o$
3	0	3	$^1F_3^o$
2	1	2, 3, 4	$^3F_2^o, ^3F_3^o, ^3F_4^o$

jj vazba

- $l_1 = 1, s_1 = \frac{1}{2}, j_1 = l_1 + s_1 \Rightarrow j_1 = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$
- $l_2 = 2, s_2 = \frac{1}{2}, j_2 = l_2 + s_2 \Rightarrow j_2 = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$
- $J = j_1 + j_2$

j_1	j_2	J
$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	1,2
$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	0,1,2,3
$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{2}$	2,3
$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	1,2,3,4

Příklad: O III konfigurace $1s^2 2s^2 2p^2$ nebo $1s^2 2s^2 2p 3p$
(viz Sobelman, 1992, kapitola 4.10)

- 2p nebo 3p: $l_2 = 1$ $s_1 = \frac{1}{2}$, pokud $n = 2$ pro oba: ekvivalentní elektrony
- $L = l_1 + l_2 \Rightarrow L = 0, 1, 2$
 $S = s_1 + s_2 \Rightarrow S = 0, 1$
 $J = L + S$

L	S	J	hladiny	
0	0	0	1S_0	
0	1	0,1	3S_0 3S_1	ne pro ekvivalentní elektrony
1	0	1	$^1P_1^o$	ne pro ekvivalentní elektrony
1	1	0, 1, 2	$^3P_0^o$ $^3P_1^o$ $^3P_2^o$	
2	0	2	$^1D_2^o$	
2	1	1, 2, 3	$^3D_1^o$ $^3D_2^o$ $^3D_3^o$	ne pro ekvivalentní elektrony

5.2.12 Ostatní typy vazeb

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.7: Přechod mezi LS a jj vazbou pro konfiguraci p^2 . Obrázek v Sobelman (1992, obr. 5.1, str. 151).

intermediate coupling – přehled různých značení hladin – Martin and Wiese (2006)
přechod mezi LS a jj vazbou (obrázek 5.7)

LSJ coupling, (Pradhan and Nahar, 2011, kapitola 2.7), ale existuje více označení nejdříve sečteme všechna l a s pro všechny elektrony kromě valenčního do J_1 , $J_1 = \sum_i l_i + \sum_i s_i$, pak přidáme valenční elektron: $K = J_1 + l$, $J = K + s$

- jl** (Sobelman, 1992, kapitola 5.7.3), J_1l or J_1L_2 (Martin and Wiese, 2006) – optický elektron "daleko" od elektronů jádra
 jl vazba u vzácných plynů (Příloha B.5.5) (Sobelman, 1992, kapitola 5.7.3)
- Jj** (Sobelman, 1992) J_1j nebo J_1J_2 (Martin and Wiese, 2006)
- LS_1 (Martin and Wiese, 2006)

5.2.13 Vliv izotopů

- hmotový efekt
 ilustrační příklad – vodík → deuterium
 změní se redukovaná hmota atomu

$$\mu = \frac{m_{\text{at}}m_e}{m_{\text{at}} + m_e}$$

v rovnici (5.27) se změní \bar{R}_Z (viz rovnice B.5)
 posunou se energetické hladiny
 posunou se i spektrální čáry
 pro těžší prvky podobně, posun menší

- objemový efekt – těžší atomy jsou „větší“
 změnu energie hladiny lze odvodit za předpokladu konečného rozměru jádra (Landi Degl'Innocenti, 2014, kapitola 9.8)
 (nepoužije se standardní předpoklad jádra jako bodu)
 také vede k posunu spektrálních čar

5.2.14 Hladiny v magnetickém poli

Zeemanův efekt štěpení hladin ve *slabém* magnetickém poli

$E_{\alpha JM}$ (α zahrnuje všechna explicitně neuvedená kvantová čísla) – energie rozštěpených hladin

$$E_{\alpha JM} = E_{\alpha J} + \mu_0 g B M \quad (5.39)$$

$E_{\alpha J}$ – energie nerozštěpené hladiny

M – magnetické kvantové číslo, $M = -J, \dots, J$

B – indukce magnetického pole

μ_0 – Bohrov magneton,

$$\mu_0 = \frac{eh}{4\pi m_e c} \quad (5.40)$$

g – Landého faktor, pro LS vazbu viz (B.16)

- rozštěpením hladin vzniká rozštěpení spektrálních čar
- zpětně lze z poloh čar a s pomocí vztahu (5.39) určit magnetické pole, které způsobuje štěpení

Paschenův-Backův efekt pokud neplatí slabost magnetického pole

- magnetická interakce dominantní – úplný Paschenův-Backův efekt (spin-orbitální interakce je perturbací magnetické interakce)
- magnetická interakce srovnatelná se spin-orbitální interakcí (ostatní případy, které nejsou Zeemanův nebo úplný Paschenův-Backův efekt) – neúplný Paschenův-Backův efekt

trochu více Příloha B.4

5.3 Absorpce a emise ve spektrálních čarách

V této kapitole si ukážeme, jak jsou absorpční i emisní účinné průřezy spektrální čáry (5.13) frekvenčně závislé. Jejich závislost na frekvenci můžeme formálně vyjádřit jako

$$\alpha_{lu}(\nu) = \alpha_{lu} \phi_{lu}(\nu)$$

kde $\phi_{lu}(\nu)$ je **profil** spektrální čáry. V dalším textu nebudeme psát u ϕ indexy hladin l a u . Pro celkový účinný průřez čáry musí platit

$$\int_0^\infty \alpha_{lu}(\nu) d\nu = \alpha_{lu},$$

profil spektrální čáry je proto normalizovaný,

$$\int_0^\infty \phi(\nu) d\nu = 1$$

a jeho rozměr $[\phi] = \text{s}$. Pro frekvenčně závislý účinný průřez absorpce nebo emise ve spektrální čáře můžeme psát

$$\alpha_{lu}(\nu) = \frac{h\nu}{4\pi} B_{lu} \phi(\nu) = \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{lu} \phi(\nu), \quad (5.41)$$

kde jsme využili vztah (5.13).

5.3.1 Přírozené rozšíření spektrálních čar

Přírozené rozšíření spektrálních čar vyplývá z principu neurčitosti. Budeme uvažovat přechod mezi hladinami u (horní hladina) a l (spodní hladina) ve dvouhladinovém atomu. Střední doba života Δt_u atomu ve stavu u je dána vztahem (5.9) jako převrácená hodnota Einsteinova koeficientu, $\Delta t_u = A_{ul}^{-1}$. Z principu neurčitosti dostáváme rozšíření energií ΔE_u horní hladiny, $\Delta E_u \Delta t_u = \Delta E_u A_{ul}^{-1} \simeq h$, což způsobuje rozšíření frekvencí přechodu $u \rightarrow l$, $\Delta \nu_{ul} = \Delta E_u / h \simeq A_{ul}$.

Spontánně emitující systém lze považovat za rozpadající se systém (*decaying*) a lze jej popsat stejně jako tlumený systém (*damped*). Vztahy pro jeho kmity a účinný průřez uvádí Příloha B.2. Konstantu útlumu γ (B.8) nahradíme konstantou útlumu Γ , která přímo souvisí se střední dobou života hladin l a u . Pro celkový účinný průřez přechodu $u \rightarrow l$ můžeme použít vztah (B.10), z něhož pro závislost účinného průřezu na frekvenci vyplývá **Lorentzův profil**

$$\phi(\nu) = \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\Gamma_{lu}}{4\pi}}{(\nu - \nu_{lu})^2 + \left(\frac{\Gamma_{lu}}{4\pi}\right)^2}, \quad (5.42)$$

kde **konstanta útlumu** (l a u jsou indexy spodní a horní hladiny přechodu)

$$\Gamma_{lu} = \Gamma_u + \Gamma_l, \quad \Gamma_l = \sum_{i < l} A_{li}, \quad \Gamma_u = \sum_{i < u} A_{ui}. \quad (5.43)$$

kde A_{ji} ($j = l$ nebo u) je Einsteinův koeficient spontánní emise při přechodu z hladiny j do hladiny i (viz kapitola 5.1.1). Pro každou hladinu j je Γ_j dáno jako součet všech koeficientů spontánní emise pro všechny přechody z dané hladiny. Tento standardní vztah platí přesně pro atom, který není vystaven žádnému záření. Pokud na atom dopadá záření o střední intenzitě $J(\nu_{ji})$, je nutné započítat i další procesy, které způsobují přechod z hladiny j do nižších (stimulovaná emise) a vyšších (absorpce) hladin. Výpočet konstanty útlumu Γ_j se pak změní,

$$\Gamma_j = \sum_{i < j} [A_{ji} + B_{ji}J(\nu_{ij})] + \sum_{i > j} B_{ji}J(\nu_{ji}). \quad (5.44)$$

Členy s Einsteinovými koeficienty B mohou být významné pro silné přechody do hladiny nebo z hladiny j pro $h\nu \ll kT$ (v dlouhovlnné oblasti spektra).

5.3.2 Dopplerovské (tepelné) rozšíření spektrálních čar

Dopplerovské rozšíření je důsledkem tepelného pohybu atomů a iontů. Profil spektrální čáry každé této částice je lorentzovský, částice se však tepelně pohybují.

Částice (atom nebo iont) pohybující se rychlostí \mathbf{v}_p vyzáří foton o frekvenci ν_0 (v klidové soustavě částice) ve směru \mathbf{n} (aberci zanedbáme). Průmět rychlosti částice do směru šíření záření je $v_\xi = \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_p$. Frekvence fotonu v soustavě pozorovatele je dána Dopplerovým posunem (například Mihalas and Weibel-Mihalas 1984, rovnice 89.7, Castor 2004, rovnice 6.9)

$$\nu' = \nu_0 \left(1 - \frac{v_p^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_p}{c}\right). \quad (5.45)$$

Pro tepelné pohyby ($v_p \ll c$) můžeme zanedbat relativistický člen

$$\nu' = \nu_0 \left(1 + \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_p}{c}\right) = \nu_0 \left(1 + \frac{v_\xi}{c}\right) \quad (5.46)$$

Čáry budou absorbovat nebo vyzařovat na dopplerovsky posunuté frekvenci. Výsledný profil absorpčního nebo emisního koeficientu souboru částic můžeme dostat pomocí rozdělení jejich rychlostí (maxwellovského, rovnice 4.13) v_ξ ve směru paprsku,

$$f(v_\xi) dv_\xi = \frac{1}{v_{th}\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{v_\xi^2}{v_{th}^2}\right) dv_\xi, \quad (5.47)$$

kde

$$v_{th} = \sqrt{\frac{2kT}{m_a}}$$

je nejpravděpodobnější rychlost (tepelná rychlost, viz rovnice 4.14). Výsledný profil dostaneme integrací posunutých Lorentzových profilů (zde je označíme ϕ_L) přes rozdělení rychlostí (5.47),

$$\phi(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_L\left(\nu - \frac{v_\xi \nu}{c}\right) f(v_\xi) dv_\xi. \quad (5.48)$$

Za profil ϕ_L dosadíme z rovnice (5.42) a po úpravách dostaneme

$$\phi(\nu) = \frac{1}{\Delta\nu_D\sqrt{\pi}} H[a, x(\nu)] \quad (5.49)$$

kde

$$H(a, x) = \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-y^2) dy}{(x-y)^2 + a^2} \quad (5.50)$$

je **Voigtova funkce**,

$$\Delta\nu_D = \frac{v_{th}\nu_0}{c} \quad (5.51)$$

je *dopplerovská pološířka*,

$$x = \frac{\nu - \nu_0}{\Delta\nu_D} \quad (5.52)$$

je bezrozměrná frekvence vyjádřená vzhledem ke středu čáry v dopplerovských pološířkách,

$$a = \frac{\Gamma}{4\pi\Delta\nu_D} \quad (5.53)$$

a

$$y = \frac{v_\xi}{v_{th}}. \quad (5.54)$$

Pro $a \ll 1$, což je běžný případ v astrofyzice, můžeme Voigtovu funkci rozvinout

$$H(a, x) = \sum_{n=0}^{\infty} a^n H_n(x) \quad (5.55)$$

kde jednotlivé členy rozvoje

$$H_n(x) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{\pi}n!} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{x'^2}{4}\right) x'^n \cos(xx') dx'. \quad (5.56)$$

Pro nultý a první člen rozvoje dostaneme

$$\begin{aligned} H_0(x) &= \exp(-x^2), \\ H_1(x) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} [2xF(x) - 1], \end{aligned} \quad (5.57)$$

kde

$$F(x) = \exp(-x^2) \int_0^x \exp(y^2) dy \quad (5.58)$$

je Dawsonův integrál⁵.

Dopplerovské rozšíření spektrálních čar reprezentuje **Voigtův profil** (5.49), který je vyjádřen jako funkce frekvence ν . Vyjádříme-li ho jako funkci bezrozměrné frekvence x vzhledem ke středu čáry (5.52), dostaneme i s ohledem na normalizační podmínku $\int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) dx = 1$ vztah

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} H(a, x). \quad (5.59)$$

⁵<https://mathworld.wolfram.com/DawsonsIntegral.html>

Přibližný tvar profilu, který dostaneme jako nejnižší člen rozvoje Voigtovy funkce (5.55) se nazývá **Dopplerův profil**

$$\phi(\nu) = \frac{1}{\Delta\nu_D\sqrt{\pi}} \exp \left[- \left(\frac{\nu - \nu_0}{\Delta\nu_D} \right)^2 \right], \quad (5.60a)$$

který poměrně dobře popisuje profil v okolí středu čáry. Dopplerův profil vyjádřený ve frekvencích x (5.52) je

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2). \quad (5.60b)$$

Pro Voigtův profil spektrálních čar uvádějí Hubeny and Mihalas (2014, rovnice 8.24) užitečné přibližné vyjádření

$$\phi(\nu) \approx \frac{1}{\Delta\nu_D\sqrt{\pi}} \left[\exp(-x^2) + \frac{a}{\sqrt{\pi}x^2} \right]. \quad (5.61a)$$

První člen (Dopplerův profil – viz rovnice 5.60a) popisuje profil v okolí středu čáry, kde je dominantní dopplerovské rozšíření ($a \ll 1$, podle (5.53) i $\Gamma \ll 4\pi\Delta\nu_D$). Druhý člen popisuje daleká křídla čar ($|x| \gg 1$), kde je dominantní lorentzovské rozšíření. Jako funkce frekvence x (5.52) vztah (5.61a) je

$$\phi(x) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\exp(-x^2) + \frac{a}{\sqrt{\pi}x^2} \right]. \quad (5.61b)$$

Vztahy (5.61) budeme v dalších kapitolách používat k přibližnému analytickému vyjádření Voigtova profilu.

5.3.2.1 Turbulentní rozšíření spektrálních čar

Dopplerovsky rozšířený profil někdy nepopisuje rozšíření spektrálních čar hvězdných atmosfér dostatečně přesně, pozorované rozšíření čar je větší. Je to způsobené tím, že kromě tepelných pohybů mají na šířku čáry vliv i netepelné pohyby na škálách menších než je střední volná dráha fotonu. Vliv těchto pohybů na šířku spektrální čáry bývá zvykem popsat druhou mocninou volného parametru v_{turb} nazývaným **turbulentní rychlost** nebo **mikroturbulentní rychlost**. Tento efekt započteme tak, že do výrazu pro dopplerovskou pološířku (5.51) přidáme dodatečný člen obsahující tento volný parametr,

$$\Delta\nu_D = \frac{\nu_0}{c} v_{\text{th}} = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{2kT}{m_a}} \rightarrow \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{2kT}{m_a} + v_{\text{turb}}^2}. \quad (5.62)$$

Na rozdíl od tepelné rychlosti v_{th} , která je různá pro atomy různé hmotnosti, je turbulentní rychlost pro všechny atomy stejná.

Nedávne 3-D hydrodynamické výpočty sluneční atmosféry ukázaly, že při tak podrobném popisu již není třeba turbulentní rychlost zavádět jako přídatný volný parametr, protože turbulence je nedílnou součástí 3-D hydrodynamického popisu.

5.3.3 Srážkové rozšíření spektrálních čar

vzniká v důsledku srážek s částicemi (atomy, ionty a elektrony)

perturbace horní i dolní hladiny přechodu

závisí na hustotě a teplotě (\Rightarrow tlak)

proto zvané také tlakové rozšiřování

přesné zahrnutí nesnadné

vyšší hladiny snadněji perturbovány

různé interakce s různými částicemi

různý dosah interagujících sil ($\sim r^{-p}$)

nárazové (impaktní) přiblížení – Weisskopf (1932) – „klasická teorie“

vyzařování atomu je přerušeno srážkou \rightarrow okamžitý posun fáze vlnového balíku (případně posun v čáře nebo posun na jinou hladinu)

střední časový interval mezi těmito srážkami – Δt_c ,

časově středované energetické spektrum srážkově rozšířené čáry přes čas Δt_c (pomocí Fourierovy transformace, viz například Pradhan and Nahar, 2011, rovnice 9.43)

$$E(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\frac{1}{\Delta t_c}}{(\omega - \omega_{lu})^2 + \left(\frac{1}{\Delta t_c}\right)^2} \quad (5.63)$$

zavedeme $\Gamma_{\text{col}} = 2/\Delta t_c$

v nárazovém přiblížení stejný profil jako přirozené zářivé rozšíření

$$E(\nu) = \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\Gamma_{\text{col}}}{4\pi}}{(\nu - \nu_{lu})^2 + \left(\frac{\Gamma_{\text{col}}}{4\pi}\right)^2} \quad (5.64)$$

(proto $\Gamma = \Gamma_{\text{rad}} + \Gamma_{\text{col}}$)

každý přechod je jiný a musí se započítat kvantově mechanicky

rozšíření se započítává statisticky

předpoklady Weisskopfova přiblížení:

1. narážející částice je klasická částice
2. pohybuje se konstantní rychlostí po přímce
3. narážející částice nezpůsobuje žádné přechody v atomu
4. způsobuje posun frekvence vyjádřitelný jako $\Delta\omega = C_p r^{-p}$,
 r je vzdálenost od středu atomu
 C_p se určí pomocí kvantově mechanických výpočtů
 typy interakcí podle p
 - $p = 2$ srážky nabitých částic s vodíkem nebo s vodíku podobným atomem (lineární Starkův efekt)
 - $p = 3$ srážky atomů se stejnými atomy (rezonanční rozšíření)
 - $p = 4$ srážky nabitých částic s jinými atomy než s vodíkem nebo s vodíku podobným atomem (kvadratický Starkův efekt)
 - $p = 6$ srážky s neutrálními částicemi (převážně s neutrálním vodíkem, van der Waalsova interakce)

nárazové rozšíření čar elektrony (electron impact broadening) – započtení rozšíření spodní i horní hladiny – vede k posunu spektrální čáry

Starkovské rozšíření je významné pro hvězdy s vysokou hustotou (bílé trpaslíky) – spektrální čáry H I široké i několik desítek nm

5.4 Ionizace a rekombinace

zářivá ionizace atomu X na iont X^+



týká se elektronu z vnější slupky

zářivá ionizace může probíhat i do excitovaných hladin iontu, má-li foton dostatečnou energii



$[X^+]$ * značí excitovaný iont

má-li foton ještě více energie, může být uvolněn elektron z nižší slupky (nižšího kvantového čísla n), tím vznikne iont s mnoha excitovanými elektrony (označíme ho $[X^+]^{***\dots}$)



vznikne vysokoenergetický elektron e_{high}^- , který může způsobit další ionizaci
může proběhnout řada dalších zářivých i srážkových procesů deexcitace i ionizace
(Augerovy procesy, kapitola 8.4)

autoionizace pro atomy/ionty, které jsou ve stavu se dvěma excitovanými elektrony, pak může být energie stavu větší, než je ionizační energie



uvolnění elektronu a energie bez vyzáření fotonu, uvolněná energie se přemění na kinetickou energii elektronu

zářivá excitace atomu z vázaného stavu do autoionizačního stavu



následovaná autoionizací (5.68) způsobuje vyšší možnost ionizace pro frekvence odpovídající danému přechodu $h\nu_{\text{exc}} \rightarrow \text{rezonance}$

zářivá rekombinace – srážkový proces
spontánní rekombinace



nebo stimulovaná rekombinace s přispěním záření

dielektronická rekombinace :

nejdříve zachycení elektronu atomem se vznikem vázaného stavu se dvěma excitovanými elektrony



následuje deexcitace dvakrát excitovaného stavu do jednou excitovaného stavu, jehož energie je nižší než ionizační energie



je možný i srážkový přechod na nižší hladinu (srážková stabilizace, Bates and Dalgarno, 1962, section 2.2)



nebo autoionizace (5.68), tím se dostaneme do původního stavu (ionizovaného)

5.4.1 Fotoionizační účinný průřez

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.8: Vázaně-volný účinný průřez atomu vodíku. Obrázek v Hubeny and Mihalas (2014, str.192).

Vodík a vodíkpodobné ionty Závislost účinného průřezu na frekvenci odvodil semiklasicky pro vodík Kramers (1923), s korekcemi pro kvantovou mechaniku Gaunt (1930a,b). Účinný průřez je dán výrazem (Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 7.91)

$$\alpha_{\text{bf}}(n, \nu) = \frac{64\pi^4 m_e e^{10}}{3\sqrt{3}ch^6} Z^4 \frac{1}{n^5 \nu^3} g_{\text{bf}}(n, \nu), \quad (5.73)$$

což je součin semiklasického výrazu a Gauntova faktoru $g_{\text{bf}}(n, \nu)$. Výraz složený ze základních fyzikálních konstant má v soustavě CGS číselnou hodnotu $2.815 \cdot 10^{29} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$, jeho odvození naznačuje Příloha B.3.1. Vztah (5.73) vyjadřuje typickou závislost účinného průřezu vodíku na frekvenci ($\sim \nu^{-3}$, Mihalas, 1978, obr. 4-1). I když se jedná o vztah platný pro vodíkpodobné atomy, někdy se používá jako přibližné vyjádření i pro nevodíkové ionty, převážně v případech, kdy nejsou k dispozici lepší data. Kvantověmechanické odvození tohoto vztahu lze nalézt v Hubeny and Mihalas (2014, rovnice 7.85 – 7.91).

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.9: Ilustrace fotoionizačního účinného průřezu.

Ostatní prvky Fotoionizační účinný průřez prvků s více elektrony má obecně složitější závislost na frekvenci, zejména kvůli přítomnosti rezonancí, které jsou způsobeny započtením možnosti autoionizace zmíněné v úvodu kapitoly 5.4. Související výpočty jsou poměrně náročné a vyžadují zahrnutí řady interakcí mezi

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.10: Vázaně-vázaný a vázaně volný účinný průřez záporného iontu vodíku. Obrázek v Hubeny and Mihalas (2014, str.207).

energetickými hladinami (viz Pradhan and Nahar, 2011, kapitola 6.6). Důsledkem je vyšší účinný průřez a jeho velká proměnnost. Jako příklad může sloužit fotoionizační průřez iontu C II (viz obrázek 5.9, také Hubeny and Mihalas, 2014, obrázek 7.4).

Záporný iont vodíku Významným zdrojem fotoionizační opacity je záporný iont vodíku (H^-), který má dva vázané elektrony⁶. Důležitý je zejména pro hvězdy slunečního typu a chladnější, kde může záporný vodíkový iont existovat.

Tento iont má dvě rezonance v ultrafialové oblasti spektra, na sluneční atmosféru však nemají vliv, protože ultrafialový tok je pro Slunce malý. Zanedbáme-li je, dostaneme pro závislost fotoionizačního příčného průřezu na frekvenci hladkou křivku (obrázek 5.10).

5.5 Volně-volné přechody

Volně-volné přechody jsou přechody mezi dvěma volnými stavy atomu X (z kontinua nad ionizační energií). Jsou to procesy typu

$$e + X^+ + h\nu \leftrightarrow X^+ + e'. \quad (5.74)$$

V těchto procesech dochází k přiblížení elektronu e k iontu X^+ a foton je absorbován nebo emitován v soustavě iont+elektron. Po interakci se elektron opět oddělí od iontu, obecně bude mít jinou rychlost, což je naznačeno čárkou (e'). Při interakci může dojít i k ionizaci nebo rekombinaci, je to však dvouelektronový přechod, který je podstatně méně pravděpodobný. Procesy bez ionizace či rekombinace jsou častější.

Vodík Pro volně-volný účinný průřez ionizovaného vodíku nebo vodíkpodobného iontu, který se potká s elektronem o rychlosti v , platí vztah (Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 7.99)

$$\alpha_{\text{ff}}(\nu, v) = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2 e^6}{chm_e^2} \frac{g_{\text{ff}}(\nu, v)}{\nu^3 v} \quad (5.75)$$

⁶Možnost vytváření H^- objevili nezávisle Hans Bethe (1929) a Egil Hylleraas (1930a,b), jeho význam pro opacitu hvězd slunečního typu ukázal Rupert Wildt (1939a,b).

kde $g_{\text{ff}}(\nu, v)$ je **volně-volný Gauntův faktor**. Většinou rychlosti v jednotlivých elektronů neznáme, užitečnější pro řadu případů bude střední hodnota pro statistický soubor elektronů. Vystředováním přes maxwellovské rozdělení rychlostí elektronů dostaneme (Mihalas 1978, rovnice 4-122; Hubeny and Mihalas 2014, rovnice 7.100)

$$\alpha_{\text{ff}}(\nu, T) = \frac{\sqrt{32\pi} Z^2 e^6}{3\sqrt{3} ch \sqrt{km_e^3 T}} \frac{\bar{g}_{\text{ff}}(\nu, T)}{\nu^3} \quad (5.76)$$

kde $\bar{g}_{\text{ff}}(\nu, T)$ je střední hodnota volně-volného Gauntova faktoru pro maxwellovské rozdělení rychlostí elektronů. Semiklasické odvození vztahu můžeme nalézt v Hubeny and Mihalas (2014, kapitola 5.6) nebo v Rybicki and Lightman (1979, kapitola 5).

5.6 Interakce záření s molekulami

molekuly nacházíme

- u chladných hvězd (K, M, S, C, ...), do asi 8000K
- trochu i u hvězd slunečního typu
- v okolohvězdném prostředí
- v mezihvězdném prostředí (detekováno více jak 120 molekul, Tennyson, 2005, str.124)

polyatomické molekuly

diatomické molekuly (ty v dalším textu)

odlišnosti od atomů

- neexistuje střed, kolem kterého se elektrony v molekule pohybují
- jednotlivé atomy v molekule se pohybují → vibrační a rotační pohyby atomů v molekule

Energetické stavy molekul

Bornova-Oppenheimerova aproximace dovoluje

- oddělení pohybů jádra a elektronů (protože elektrony jsou lehké a pohybují se výrazně rychleji)
- vlnovou funkci molekuly lze zapsat jako součin vlnové funkce jádra molekuly a vlnové funkce elektronů

- můžeme oddělit i rotační a vibrační pohyby

rotační hladiny molekula se může otáčet
model pevného rotátoru

- energie hladin

$$E_{\text{rot},J} = J(J+1)B \quad (5.77)$$

J – rotační kvantové číslo, $J = 0, 1, 2, 3, \dots$

B – rotační konstanta molekuly

hladiny degenerovány, $g_J = 2J + 1$

M nebo m – kvantové číslo průmětu impulsmomentu do význačné osy, hodnoty z intervalu $\langle -J, \dots, J \rangle$

vibrační hladiny atomy v molekule mohou vibrovat

- energie hladin

$$E_{\text{vib},v} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0, \quad v = 0, 1, 2, 3, \dots$$

v – vibrační kvantové číslo

ω_0 – přirozená vibrační frekvence

- obrázek vibračních hladin s rotační jemnou strukturou (5.12)

elektronické hladiny energetické hladiny podobné atomům, ale rozdíly

- molekuly nejsou sféricky symetrické,
- celkový elektronický impulsmoment L rotuje kolem mezijaderné osy (precese)
- složka orbitálního impulsmomentu ve směru osy molekuly
 $M_L \in \langle L, L-1, \dots, 0, \dots, -L \rangle$
značí se $\Lambda = |M_L|$ – je degenerované ($g = 2$ pro $\Lambda \neq 0$)
 $\Lambda = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$, značení $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \Gamma \dots$
- celkový spin S , průmět do mezijaderné osy $M_S \equiv \Sigma$, také, neplést s označením pro $\Lambda = 0$
značení: $^{2S+1}\Lambda$
- symetrie (analogie parity) vlnové funkce při záměně atomů;
 - nemění znaménko – sudá – g (gerade)
 - mění znaménko – lichá – u (ungerade)

značení $^{2S+1}\Lambda_{g/u}$

- značení elektronických hladin – používá se ad hoc systém:
 - X – označuje základní elektronický stav
 - A, B, C, ... označuje stavy stejné multiplicity jako základní stav.
 - a, b, c, ... označuje stavy jiné multiplicity než základní stav

příklad H_2 :

řazení podle energie hladin, ne vždy

celková vnitřní energie molekul

$$E_{\text{int}} = E_{\text{el}} + E_{\text{vib}} + E_{\text{rot}} \quad (5.78)$$

Přechody v molekulách

- elektronické přechody $\sim eV \rightarrow$ optický, UV obor
analogické atomárním dipólovým přechodům
- vibrační přechody \rightarrow near-IR, mid-IR
- rotační přechody \rightarrow far-IR, mm

celková energie hladin se skládá podle (5.78)

řádové odhady poměru energií (viz Rybicki and Lightman, 1979, kap. 11.1)

$$E_{\text{rot}} : E_{\text{vib}} : E_{\text{el}} \sim \frac{m_e}{M} : \sqrt{\frac{m_e}{M}} : 1$$

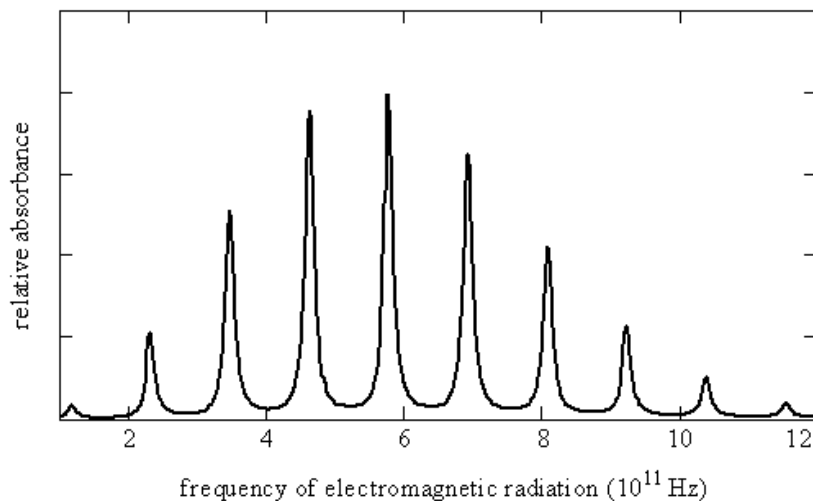
M je hmotnost jádra molekuly

čistě rotační přechody

- frekvence přechodů, z (5.77)

$$\nu_{J+1,J} = \frac{E_{J+1} - E_J}{h} = 2(J+1) \frac{B}{h}$$

- základní výběrové pravidlo $\Delta J = \pm 1$
- nutný permanentní dipólový moment molekuly ($d \neq 0$)
homoatomické dvouatomové molekuly: $d = 0$
jen kvadrupólové přechody ($\Delta J = \pm 2$)
příklad: kvadrupólové přechody H_2 pozorovány v mezihvězdném prostředí
příklad čistě rotačního spektra – obr. 5.11



Obrázek 5.11: Rotační spektrum molekuly CO. Obrázek 7.1.1. z Hanson et al. (2021), licence CC BY-NC-SA 3.0.

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.12: Rotační hladiny jednotlivých vibračních stavů. Obrázek v McQuarrie (2008, Figure 6.3).

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.13: Vibračně-rotační spektrum vibračního přechodu 0 – 1 HBr(g). Obrázek v McQuarrie (2008, Figure 6.4).

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.14: Elektronicko-vibračně-rotační spektrum CO. Obrázek v Al-Tuwirqi et al. (2012, Fig. 5).

vibračně-rotační přechody

- energie pro excitaci vibračních modů \gg energie pro excitaci rotačních modů
 \Rightarrow existence čistě vibračního spektra nepravděpodobná
- kombinovaná vibračně-rotační hladina v aproximaci pevného rotátoru a harmonického oscilátoru

$$E_{v,J} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0 + J(J+1)B \quad (5.79)$$

- výběrová pravidla
 $\Delta v = \pm 1$, pro rozdíly ± 2 atd. “vyšší harmonické” přechody
- vibrační přechody mají jemnou strukturu způsobenou existencí rotačních hladin
 uplatňují se i výběrová pravidla pro rotační přechody
 může nastat rotační emise i absorpce
 systém jemné struktury čar pro $\Delta J = +1$ (R branch) a $\Delta J = -1$ (P branch)
- obrázek vibračních hladin s rotační jemnou strukturou (5.12)
- obrázek vibračně rotačního spektra (obr. 5.13)

elektronicko-vibračně-rotační přechody

- nutno započítat změny elektronických, rotačních i vibračních stavů
- každý elektronický přechod je vlastně soustavou pásů (vibrační přechody) s jemnou strukturou (rotační přechody)
- výběrová pravidla
 - elektronické hladiny
 - * $\Delta \Lambda = 0, \pm 1$
 - * $\Delta S = 0$ (zachování spinu)
 - vibrační hladiny
 - * Δv jakékoli kladné nebo záporné celé číslo
 - rotační hladiny

- * $\Delta J = -1, 0, 1$, ale $J = 0 \rightarrow J = 0$ zakázaný
- * $\Delta J = 0$ je zakázaný pro Σ elektronické stavy
- obrázek elektronicko vibračně rotačního spektra (obr. 5.14)

astrofyzikálně významné molekuly

nejvýše zastoupené molekuly nemusejí být nejvýznamnější z hlediska přenosu záření (H_2) – maximální opacita v UV, tam je ale málo záření pro atmosféry, kde H_2 existuje

některé nepříliš početné molekuly významné zdroje opacity (TiO, VO) – rozdíl ve hmotách jednotlivých prvků způsobuje silné vibrační přechody

CO, CH_4 (metan), N_2 , NH_3 (čpavek), H_2O , H_2 – dominantní pro chemickou rovnováhu

na Slunci: CN, CH, C_2 , OH, MgH

molekulární ionty – H_2^+ , H_2^-

možní molekulární původci difúzních mezihvězdných pásů (DIB)

- fulereny (C_{60} , C_{70})
- polycyklické aromatické uhlovodíky (PAH)

Ramanovská spektra molekul viz (Rau, 2002, Ch.6, 3.3)

nepružný rozptyl záření na molekulách,
významný pro homonukleární molekuly

během rozptylu dojde k přechodu mezi vibračně rotačními stavy
výběrové pravidlo $\Delta J = 2$

přechodné dipóly příklad: H_2 – častá molekula, nemá stálý dipólový moment
srážkou s jinou H_2 , He – dočasný dipólový moment
podmínka: nízké teploty a vysoká hustota

molekulární satelity vodíkových čar u bílých trpaslíků
interakce



vytvoří přechodné molekuly

“quasi-molecular satellites” - přechody mezi elektronickými stavy těchto molekul

satelity jsou daleko od $\text{Ly}\alpha$ na 1400Å a 1600Å

5.7 Rozptyl v kontinuu

5.7.1 Rozptyl na volných elektronech

Při interakci fotonu s volným elektronem se dopadající foton rozptýlí obecně do jiného směru, případně se může během interakce změnit jeho energie. Jedná se o skutečný rozptylový proces s centrem rozptylu (na rozdíl od rozptylu v rezonančních čarách). Při interakci fotonu a elektronu se obecně projevují i vlnové vlastnosti elektronu, které ale nejsou pro vlnové délky záření mnohem větší než de Broglieova vlnová délka elektronu ($\lambda_{\text{dB}} = h/[m_e v]$) podstatné. Pro účinný průřez rozptylu záření o nízkých energiích ($h\nu \ll m_e c^2$, což je splněno ve většině hvězdných atmosfér) na volných elektronech hovoříme o **Thomsonově rozptylu** a pro účinný průřez platí frekvenčně nezávislý vztah

$$\sigma_e = \frac{8\pi}{3} r_0^2 = \frac{8\pi e^4}{3m_e^2 c^4} \quad (5.81)$$

V tomto vztahu je $r_0 = e^2/(m_e c^2)$ „klasický poloměr elektronu“, udává „rozměr“ bodového náboje (například Rybicki and Lightman, 1979, rovnice 3.38). Číselná hodnota tohoto účinného průřezu je $\sigma_e = 6.65 \cdot 10^{-25} \text{cm}^2$. Úhlová závislost rozptylu ze směru \mathbf{n}' do směru \mathbf{n} (ϕ je zde úhel mezi těmito směry) je popsána **Rayleighovou (dipólovou) fázovou funkcí**

$$g(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = \frac{3}{4} \left[1 + (\mathbf{n}' \cdot \mathbf{n})^2 \right] = \frac{3}{4} (1 + \cos^2 \phi) . \quad (5.82)$$

Často se úhlová závislost Thomsonova rozptylu zanedbává a rozptyl se považuje za izotropní. Pak

$$g(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = 1. \quad (5.83)$$

Odvození vztahů (5.81) a (5.82) lze nalézt v knize Hubeny and Mihalas (2014, kapitoly 6.1 a 6.2).

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.15: Schéma Rayleighova (a) a Ramanova (b) rozptylu. Obrázek v (Hubeny and Mihalas, 2014, Obr. 6.2).

Zde chybí obrázek

Obrázek 5.16: Účinný průřez Rayleighova rozptylu na atomu vodíku. Obrázek v Hubeny and Mihalas (2014, str.156).

Pro vysoké energie přechází Thomsonův rozptyl na **Comptonův rozptyl**, jehož účinný průřez frekvenčně závislý je (viz např. Rybicki and Lightman, 1979, rovnice 7.5),

$$\sigma_c = \frac{3}{4}\sigma_e \times \left\{ \frac{1+u}{u^3} \left[\frac{2u(1+u)}{1+2u} - \log(1+2u) \right] + \frac{\log(1+2u)}{2u} - \frac{1+3u}{(1+2u)^2} \right\}, \quad (5.84)$$

kde $u = (h\nu)/(m_e c^2)$. Tento účinný průřez také nazýváme **Kleinovým-Nishinovým účinným průřezem**. V nerelativistické limitě $u \ll 1$ můžeme psát rozvoj (Rybicki and Lightman, 1979, rovnice 7.6a)

$$\sigma_c = \sigma_e \left(1 - 2u + \frac{26u^2}{5} + \dots \right) \approx \sigma_e. \quad (5.85)$$

V nerelativistické limitě, tj. pro nízké energie záření, dostáváme Thomsonův účinný průřez (5.81).

5.7.2 Rozptyl na elektronech vázaných v atomu

Kromě rozptylu na volných elektronech může docházet i k rozptylu na elektronech vázaných v atomech. Při **Rayleighově rozptylu** je atom excitován do nestabilního stavu (který není vlastním stavem) a vzápětí deexcitován (viz obr. 5.15). Účinný průřez rozptylu závisí na rozdílu energie nestabilního stavu a energie stabilního vlastního stavu, s rostoucím rozdílem klesá. Pokud se frekvence rozptýleného fotonu změní (například foton absorbovaný v dalekém křídle čáry Lyman- β je vyzářen v dalekém křídle čáry Balmer- α), hovoříme o **Ramanovu rozptylu**. Pomocí Ramanova rozptylu na vodíkových atomech můžeme vysvětlit zvláštní emisní čáry v dalekých křídlech Balmerovských čar ve spektrech symbiotických hvězd (např. Schmid, 1989).

5.8 Rozptyl ve spektrálních čarách

Rozptyl ve spektrálních čarách jsme jako protiklad pravé absorpce zmínili již na začátku kapitoly 3.1. Podrobně jej rozebírá Hubeny and Mihalas (2014, kapitola 10).

Uvažujme přechod mezi dvěma hladinami atomu ve spektrální čáře, jejíž frekvenčně závislý účinný průřez je popsán vztahem (5.41). Po absorpci fotonu v této čáře následuje emise ve stejné spektrální čáře. Podívejme se nyní na to, jaká bude souvislost mezi pohlceným a vyzářeným fotonem.

V následujících úvahách budeme interakci popisovat v souřadné soustavě spojené s interagujícím atomem a nebudeme se zabývat frekvenčně nezávislou částí účinného průřezu v čáře (viz vztah 5.41), která vyjadřuje pravděpodobnost, že k prvotní absorpci vůbec dojde. Foton o frekvenci ν' letí k atomu ze směru \mathbf{n}' . Po interakci foton odletí směrem \mathbf{n} a bude mít frekvenci ν . Vztah mezi těmito stavy popisuje **redistribuční funkce** $r(\nu', \mathbf{n}'; \nu, \mathbf{n})$, což je společná pravděpodobnost rozptylu fotonu z frekvenčního intervalu $(\nu'; \nu' + d\nu')$ a směru \mathbf{n}' do frekvenčního intervalu $(\nu; \nu + d\nu)$ a směru \mathbf{n} . Pro nerelativistický případ můžeme redistribuční funkci rozdělit na frekvenční a úhlovou část

$$r(\nu', \mathbf{n}'; \nu, \mathbf{n}) = r(\nu', \nu)g(\mathbf{n}', \mathbf{n}). \quad (5.86)$$

Pokud budeme dále předpokládat izotropní opacitu a emisivitu, můžeme položit $g(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = 1$. V dalším budeme uvažovat redistribuční funkci pouze ve frekvencích.

Jednotlivé hladiny jsou rozšířené jako důsledek relací neurčitosti (přirozeného rozšíření popsaného v kapitole 5.3.1) a navíc i srážkového rozšíření (kapitola 5.3.3). Tato neurčitost se promítá do neurčitosti vyzařované frekvence fotonu. Pro další úvahy použijeme semiklasický popis (viz například Hubeny and Mihalas, 2014, kapitola 10.1), kdy hladinu považujeme v důsledku rožřření za spojité rozdělení podhladin okolo její energie. Budeme pro zjednodušení uvažovat přechody mezi základní hladinou, která rozšířená není (doba života této hladiny je nekonečná), a excitovanou hladinou, která rozšířená je. Excitovaný atom je vždy superpozicí stavů (vyplývající z přirozeného rozšíření), takže nelze říci, v které podhladině excitovaného stavu se nachází. Kromě toho srážkové rozšíření stavu způsobí další posun mezi podhladinami. Frekvence vyzářeného fotonu bude však závislá na tom, v kterém podstavu excitovaného stavu se atom nacházel. Další otázkou je závislost vyzářené frekvence na frekvenci absorbovaného fotonu, kterou popisujeme frekvenční redistribuční funkcí $r(\nu', \nu)$.

Limitním případem je situace, kdy je frekvence vyzářeného fotonu stejná jako frekvence pohlceného fotonu. Tomuto případu říkáme **monochromatický rozptyl**, případně úplně korelovaný rozptyl nebo koherentní rozptyl. Redistribuční funkci

označíme $r^{\text{corr}}(\nu', \nu)$. Ta se v tomto případě redukuje na δ -funkci,

$$r(\nu', \nu) = r^{\text{corr}}(\nu', \nu) = \delta(\nu' - \nu) \quad (5.87)$$

Opačný limitní případ je, když se foton po absorpci vyzáří na kterékoli frekvenci čáry s pravděpodobností danou profilem čáry. Tomuto případu říkáme **úplná frekvenční redistribuce**, je popsána redistribuční funkcí $r^{\text{ncorr}}(\nu', \nu)$, která se redukuje na součin absorpčního a emisního profilu

$$r(\nu', \nu) = r^{\text{ncorr}}(\nu', \nu) = \phi(\nu')\phi(\nu). \quad (5.88)$$

V obecném případě bude situace dána poměrným vlivem pružných srážek na změnu podstavu excitované hladiny. Pravděpodobnost koherentního rozptylu p^{corr} můžeme vyjádřit jako (Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 10.23)

$$p^{\text{corr}} = \frac{P_j}{P_j + Q_j} \quad (5.89)$$

kde P_j je četnost *všech* přechodů (způsobených zářeními i nepružnými srážkami – podrobně se jimi budeme zabývat v kapitolách 9.3 a 9.4) z hladiny j a Q_j je četnost pružných srážek způsobujících přechody mezi podhladinami. Tomuto případu říkáme **částečná frekvenční redistribuce**. Redistribuční funkce v tomto obecném případě je dána vztahem

$$r(\nu', \nu) = p^{\text{corr}} r^{\text{corr}}(\nu', \nu) + (1 - p^{\text{corr}}) r^{\text{ncorr}}(\nu', \nu), \quad (5.90)$$

který kombinuje monochromatický rozptyl a úplnou redistribuci záření.

Kapitola 6

Formální řešení rovnice přenosu záření

Formální řešení rovnice přenosu záření je její řešení při *zadané* opacitě a emisivitě. Nejdříve se budeme zabývat řešením nejjednoduššího případu rovnice přenosu záření, a to jejím řešením pro planparalelní atmosféru. Na příkladu planparalelní atmosféry lze poměrně jednoduše ukázat řadu vlastností rovnice přenosu záření a jejího řešení, které však mají obecnou platnost i ve složitějších případech. Budeme řešit planparalelní rovnici přenosu záření (3.15) nebo (3.27), nejdříve s využitím dalších zjednodušujících předpokladů.

Pokud jsou v prostředí nulové opacita i emisivita ($\chi = 0$, $\eta = 0$), má rovnice přenosu záření (3.15) pro každou frekvenci ν a směr šíření záření μ (závislost intenzity I , opacity χ a emisivity η na frekvenci ν zde nebudeme explicitně uvádět) jednoduchý tvar

$$\frac{dI(z, \mu)}{dz} = 0, \quad (6.1a)$$

jehož řešením je konstantní specifická intenzita záření podél paprsku,

$$I(z, \mu) = \text{const}, \quad (6.1b)$$

což jsme jiným způsobem ukázali v kapitole 2.1 jako nezávislost specifické intenzity na vzdálenosti od zdroje záření. V prostředí, kde je nulová jen opacita ($\chi = 0$) a emisivita je nenulová ($\eta > 0$), má rovnice přenosu záření tvar

$$\mu \frac{dI(z, \mu)}{dz} = \eta(z, \mu) \quad (6.2a)$$

a jejím řešením v intervalu $\langle z_2; z_1 \rangle$ je

$$I(z_1, \mu) = I(z_2, \mu) + \int_{z_2}^{z_1} \eta(z', \mu) \frac{dz'}{\mu} \quad (6.2b)$$

6. FORMÁLNÍ ŘEŠENÍ ROVNICE PŘENOSU ZÁŘENÍ

Toto řešení je velmi blízké řešení rovnice přenosu záření v opticky tenkém prostředí ($\tau \ll 1$), což je například prostředí planetárních mlhovin. Vztah (6.2b) se také často používá pro *přibližné* určení emise z okolohvězdného nebo mezihvězdného prostředí. Nutnou podmínkou pro takové řešení je zanedbatelná absorpce.

Pokud je v prostředí nenulová opacita ($\chi > 0$), můžeme rovnici přenosu zapsat pomocí optické hloubky (3.27, pro nulovou opacitu to nešlo). Pak pro nulovou emisivitu dostaneme vztah

$$\mu \frac{dI(\tau, \mu)}{d\tau} = I(\tau, \mu), \quad (6.3a)$$

jehož řešením v intervalu $\langle \tau_2; \tau_1 \rangle$, $\tau_2 > \tau_1$ je

$$I(\tau_1, \mu) = I(\tau_2, \mu) \exp\left(-\frac{\tau_2 - \tau_1}{\mu}\right) \quad (6.3b)$$

což v případě $\tau_2 = \tau$ a $\tau_1 = 0$ popisuje zeslabení záření při průchodu od místa s optickou hloubkou τ do místa s optickou hloubkou 0. Typickým příkladem použití je zeslabování záření při průchodu zemskou atmosférou.

V případě, že jsou opacita i emisivita nenulové, řešíme v planparalelním prostředí úplnou rovnici (3.27). Řešení této rovnice najdeme nejjednodušeji jejím vynásobením integračním faktorem $\exp(-\tau/\mu)$. Po úpravě dostaneme

$$\frac{d\left[I(\tau, \mu) \exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right)\right]}{d\tau} = -\frac{S(\tau, \mu)}{\mu} \exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right)$$

Rovnici zintegrujeme od většího τ_2 k menšímu τ_1 ,

$$I(\tau_1, \mu) = I(\tau_2, \mu) \exp\left(-\frac{\tau_2 - \tau_1}{\mu}\right) + \int_{\tau_1}^{\tau_2} S(t, \mu) \exp\left(-\frac{t - \tau_1}{\mu}\right) \frac{dt}{\mu}. \quad (6.4)$$

První člen na pravé straně popisuje zředění záření vycházejícího z místa τ_2 absorpcí mezi místy τ_2 a τ_1 , druhý člen popisuje záření vzniklé mezi místy τ_2 a τ_1 snížené o tu část, která se při jeho cestě do τ_1 absorbuje.

Limitním případem, který lze použít pro popis hvězdné atmosféry, je případ $\tau_1 = 0$, $\tau_2 \rightarrow \infty$. Říkáme mu *polonekonečná atmosféra* (*semi-infinite atmosphere*)¹. V tomto případě přejde rovnice (6.4) na tvar

$$I(0, \mu) = \int_0^{\infty} S(t, \mu) \exp\left(-\frac{t}{\mu}\right) \frac{dt}{\mu}. \quad (6.5)$$

¹Polonekonečná atmosféra je zmíněna i v kapitole 3.5.

6. FORMÁLNÍ ŘEŠENÍ ROVNICE PŘENOSU ZÁŘENÍ

Tato rovnice vyjadřuje specifickou intenzitu záření, které vychází ve směru μ z povrchu polonekonečné atmosféry.

Zajímavý výsledek dostaneme, pokud můžeme aproximovat vydatnost pomocí lineárního vztahu $S(\tau) = a + b\tau$. Předpokládáme, že S nezávisí na směru. Dosažením do (6.5) dostaneme jednoduchý vztah

$$I(0, \mu) = a + b\mu = S(\tau = \mu) \quad (\text{Eddingtonova-Barbierova relace}), \quad (6.6)$$

z něhož například vyplývá, že intenzita vystupujícího záření v kolmém směru ($\mu = 1$) z planparalelní atmosféry je rovna vydatnosti v jednotkové optické hloubce ($\tau = 1$). Eddingtonova-Barbierova relace nabízí pro řadu případů vhodnou aproximaci intenzity vystupujícího záření.

Posledním zjednodušeným případem, který v této části zmíníme, je záření vycházející z konečné homogenní vrstvy. V celé takové vrstvě můžeme psát $S = \text{const}$. Potom pro $\tau_2 = T$ ($T < \infty$ je celková optická tloušťka vrstvy) a $\tau_1 = 0$ dostaneme z rovnice (6.4) pro záření vystupující ve směru $\mu = 1$

$$I(0, 1) = S(1 - e^{-T}) \quad (6.7)$$

Pro opticky tenkou vrstvu ($T \ll 1$) je $I(0, 1) = ST$, což je v souladu s faktem, že vydatnost vyjadřuje počet fotonů vyzářených na jednotkovou optickou hloubku (viz 3.30). Pro opticky tlustou vrstvu ($T \gg 1$) je $I(0, 1) = S$, intenzita se saturuje na hodnotě S , protože prakticky všechny fotony vyzářené na optických hloubkách větších než 1 jsou absorbovány a ven se dostanou jen ty, vyzářené na optických hloubkách menších než 1.

6.1 Difúzní přiblížení

Ve velkých hloubkách hvězdné atmosféry je opacita velmi velká a pravděpodobnost absorpce záření má hodnotu blízkou jedné. Pole záření je téměř izotropní. Prostředí je blízko termodynamické rovnováže, takže můžeme uvažovat vydatnost odpovídající termálnímu záření, $S_\nu \rightarrow B_\nu$. Pro zjednodušení budeme hledat řešení pro planparalelní atmosféru, což je pro uvedené fyzikální podmínky vhodné přiblížení. Budeme hledat řešení v místě o optické hloubce τ_ν . Napíšeme Taylorův rozvoj S_ν pro $t_\nu \geq \tau_\nu$,

$$S_\nu(t_\nu) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d^n B}{d\tau_\nu^n} \frac{(t_\nu - \tau_\nu)^n}{n!}, \quad (6.8)$$

který dosadíme do formálního řešení (6.4) pro $\tau_1 = \tau_\nu$ a $\tau_2 = \infty$. Pro specifickou intenzitu záření tak dostaneme

$$I_\nu(\tau_\nu, \mu) = \sum_{n=0}^{\infty} \mu^n \frac{d^n B}{d\tau_\nu^n} = B_\nu(\tau_\nu) + \mu \frac{dB_\nu}{d\tau_\nu} + \mu^2 \frac{d^2 B_\nu}{d\tau_\nu^2} + \dots, \quad (6.9a)$$

6. FORMÁLNÍ ŘEŠENÍ ROVNICE PŘENOSU ZÁŘENÍ

Řešení ve formě rozvoje pro momenty intenzity záření dostaneme dosazením (6.9a) do vztahů (2.31), (2.34) a (2.36),

$$J_\nu = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2n+1} \frac{d^{2n} B_\nu}{d\tau_\nu^{2n}} = B_\nu(\tau_\nu) + \frac{1}{3} \frac{d^2 B_\nu}{d\tau_\nu^2} + \dots \quad (6.9b)$$

$$H_\nu = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2n+3} \frac{d^{2n+1} B_\nu}{d\tau_\nu^{2n+1}} = \frac{1}{3} \frac{dB_\nu}{d\tau_\nu} + \frac{1}{5} \frac{d^3 B_\nu}{d\tau_\nu^3} + \dots \quad (6.9c)$$

$$K_\nu = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2n+3} \frac{d^{2n} B_\nu}{d\tau_\nu^{2n}} = \frac{1}{3} B_\nu(\tau_\nu) + \frac{1}{5} \frac{d^2 B_\nu}{d\tau_\nu^2} + \dots \quad (6.9d)$$

Ve velkých hloubkách ve hvězdné atmosféře stačí, když v rozvoji ponecháme jenom členy nejnižších řádů,

$$I_\nu(\tau_\nu, \mu) \approx B_\nu(\tau_\nu) + \mu \frac{dB_\nu}{d\tau_\nu} \quad (6.10a)$$

$$J_\nu \approx B_\nu(\tau_\nu) \quad (6.10b)$$

$$H_\nu \approx \frac{1}{3} \frac{dB_\nu}{d\tau_\nu} \quad (6.10c)$$

$$K_\nu \approx \frac{1}{3} B_\nu(\tau_\nu) \quad (6.10d)$$

Z rovnic (6.10) vyplývá, že se střední intenzita J_ν blíží rovnovážné hodnotě zářivé energie B_ν a že pole záření je téměř izotropní, neboť Eddingtonův faktor (2.46)

$$f_\nu^K \approx \frac{1}{3}. \quad (6.11)$$

Pro Eddingtonův tok (2.34) můžeme podle rovnice (6.10c) psát

$$H_\nu = \frac{1}{3} \frac{dB_\nu}{d\tau_\nu} = -\frac{1}{3} \frac{1}{\chi_\nu} \frac{dB_\nu}{dz} = -\left(\frac{1}{3} \frac{1}{\chi_\nu} \frac{dB_\nu}{dT} \right) \frac{dT}{dz} \quad (6.12)$$

Rovnice (6.12) má formálně tvar rovnice pro vedení (konduktivitu), v tomto případě se jedná o vedení záření. Člen na pravé straně v závorce lze považovat za koeficient zářivé vodivosti (zářivou konduktivitu). Integrací rovnice (6.12) přes frekvence dostaneme pro **celkový Eddingtonův tok v difúzním přiblížení**

$$H = \int_0^\infty H_\nu d\nu = - \int_0^\infty \frac{1}{3} \frac{1}{\chi_\nu} \frac{dB_\nu}{dT} \frac{dT}{dz} d\nu = -\frac{1}{3} \frac{dT}{dz} \int_0^\infty \frac{1}{\chi_\nu} \frac{dB_\nu}{dT} d\nu. \quad (6.13)$$

Zavedeme **Rosselandovu střední opacitu** $\bar{\chi}_R$ vztahem

$$\frac{1}{\bar{\chi}_R} \frac{dB}{dT} = \int_0^\infty \frac{1}{\chi_\nu} \frac{dB_\nu}{dT} d\nu \quad (6.14)$$

a dosazením do (6.13) dostaneme

$$H = - \left(\frac{1}{3} \frac{1}{\bar{\chi}_R} \frac{dB}{dT} \right) \frac{dT}{dz} \quad (6.15)$$

Protože vidíme hvězdu, záření směřuje k nám a tok $H > 0$. Ze vztahu (6.15) musí být $dT/dz < 0$, vzhledem k orientaci osy z musí teplota směrem dovnitř hvězdy růst.

Rosselandova střední opacita určuje v difúzní aproximaci teplotní strukturu hvězdné atmosféry. Vztahem

$$d\bar{\tau}_R = -\bar{\chi}_R dz \quad (6.16)$$

definujeme **Rosselandovu optickou hloubku**, která se hojně využívá jako nezávislá proměnná v modelování hvězdných atmosfér.

6.2 Schwarzschildova rovnice (Λ operátor)

V případě planparalelního prostředí, kde je jedna okrajová podmínka vyjádřena pro optickou hloubku $\tau \rightarrow \infty$ (polonekonečná atmosféra, viz kapitola 3.5), můžeme řešení rovnice přenosu záření v bodě τ_ν podél paprsku definovaného směrovým kosinem $\mu > 0$ vyjádřit pro oba proti sobě jdoucí směry ve tvaru

$$\begin{aligned} I_\nu(\tau_\nu, \mu) &= \int_{\tau_\nu}^{\infty} S_\nu(t) \exp\left(-\frac{t - \tau_\nu}{\mu}\right) \frac{dt}{\mu} \quad \text{pro směr } \mu > 0 \\ I_\nu(\tau_\nu, \mu) &= \int_0^{\tau_\nu} S_\nu(t) \exp\left(-\frac{t - \tau_\nu}{-\mu}\right) \frac{dt}{-\mu} \quad \text{pro směr } \mu < 0. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Dosazením (6.17) do definičního vztahu pro střední intenzitu záření v rovinné geometrii (2.31) (tj. integrací přes všechny směry μ) dostaneme **Schwarzschildovu rovnici** odvozenou Karlem Schwarzschildem (viz Mihalas 1978, rovnice 2.57; Hubeny and Mihalas 2014, rovnice 11.108)

$$J_\nu(\tau_\nu) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} S_\nu(t) E_1(|t - \tau_\nu|) dt \quad (6.18)$$

Funkce $E_1(x) = \int_0^1 e^{-x/\mu} d\mu/\mu$ je speciální případ **n -té exponenciální integrální funkce** (*exponential integral*, viz Příloha A.1, rovnice A.1)²

$$E_n(x) = \int_1^{\infty} e^{-xt} t^{-n} dt, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

²V původní německé práci Schwarzschild (1914) označuje exponenciální integrální funkci K_n a nazývá ji *Integrallogarithmus*. Pozdější překlad této práce do angličtiny od Rudolfa Loesera (Schwarzschild, 1966) používá současné značení E_n a název *exponential integral*.

6. FORMÁLNÍ ŘEŠENÍ ROVNICE PŘENOSU ZÁŘENÍ

pro $n = 1$ a substituci $t = 1/\mu$. Rovnici (6.18) můžeme formálně zapsat jako

$$J_\nu(\tau_\nu) = \Lambda_{\tau_\nu}[S_\nu(t)], \quad (6.19)$$

kde

$$\Lambda_{\tau_\nu}[f(t)] = \frac{1}{2} \int_0^\infty E_1(|t - \tau_\nu|) f(t) dt. \quad (6.20)$$

Tento operátor zavedli Kourganoff and Busbridge (1952, rovnice 11.12), nazývá se **Λ operátor** a převádí zdrojovou funkci (vydatnost) na střední intenzitu záření. To je základní zavedení Λ -operátoru, kde τ_ν v indexu značí přechod od funkce proměnné t k funkci proměnné τ_ν . Tento původní význam indexu, který Kourganoff and Busbridge zavedli, se však vytratil a v současné době se píše v indexu u operátoru Λ frekvence ν , která spíše vyjadřuje monochromaticnost Λ operátoru, směrový kosinus μ označující směr šíření záření, případně se nepíše index žádný. Někdy se používají i jiné formy, které převádějí vydatnost na specifickou intenzitu, případně na intenzitu (specifickou nebo střední) integrovanou přes nějaký frekvenční interval, nejčastěji přes spektrální čáru.

Operátor $\Lambda_{\nu\mu}$ pro přenos záření ve směru μ odpovídající rovnici (6.17) (převod vydatnosti na specifickou intenzitu záření) zavedeme rovnicí

$$I_\nu(\tau_\nu, \mu) = I_{\nu\mu} = \Lambda_{\nu\mu}[S_\nu(\tau_\nu)]. \quad (6.21)$$

Integrací tohoto operátoru přes úhly dostaneme operátor Λ_ν , který byl zaveden rovnicí (6.20),

$$\Lambda_\nu[f(\tau)] = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \Lambda_{\nu\mu}[f(\tau)] d\mu. \quad (6.22)$$

Zde jsme použili výše diskutované a častěji používané označení $\Lambda_\nu = \Lambda_{\tau_\nu}$. Střední intenzita integrovaná přes profil spektrální čáry je

$$\bar{J} = \int_0^\infty \phi_\nu J_\nu d\nu = \bar{\Lambda}[S], \quad (6.23)$$

kde je zaveden frekvenčně středovaný Λ operátor

$$\bar{\Lambda}[f] = \int_0^\infty \phi_\nu \Lambda_\nu[f] d\nu. \quad (6.24)$$

Zjednodušeně řečeno, za Λ -operátor lze považovat každý operátor, který nám převede vydatnost na střední nebo specifickou intenzitu záření.

Ostatní operátory Podobně jako Λ -operátor převádí vydatnost na střední intenzitu, můžeme definovat operátory, které budou z vydatnosti vytvářet tok nebo tlak záření (K -integrál). Nejdříve vyjádříme závislost H_ν (2.34) na vydatnosti jako

$$H_\nu(\tau_\nu) = \frac{1}{2} \int_{\tau_\nu}^{\infty} S_\nu(t) E_2(t - \tau_\nu) dt - \frac{1}{2} \int_0^{\tau_\nu} S_\nu(t) E_2(\tau_\nu - t) dt \quad (6.25)$$

(viz Milne, 1930, část c, rovnice 163)³. Podobně závislost K_ν (2.36) na vydatnosti lze vyjádřit jako

$$K_\nu(\tau_\nu) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} S_\nu(t) E_3(|t - \tau_\nu|) dt. \quad (6.26)$$

Funkce E_2 a E_3 jsou také exponenciální integrální funkce (viz Příloha A.1). Rovnicím (6.25) a (6.26) se říká **Milneho rovnice**. Můžeme definovat operátory Φ_{τ_ν} a X_{τ_ν}

$$\Phi_{\tau_\nu} [f(t)] = 2 \int_{\tau_\nu}^{\infty} f(t) E_2(t - \tau_\nu) dt - 2 \int_0^{\tau_\nu} f(t) E_2(\tau_\nu - t) dt \quad (6.27)$$

$$X_{\tau_\nu} [f(t)] = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} f(t) E_3(|t - \tau_\nu|) dt \quad (6.28)$$

Operátory Λ , Φ a X jsou podrobně rozebírány v knize Kourganoff and Busbridge (1952, kapitola II) a převádějí vydatnost na astrofyzikální tok

$$F_\nu(\tau_\nu) = \Phi_{\tau_\nu} [S_\nu(t)] \quad (6.29)$$

nebo na tlak záření (K -integrál)

$$K_\nu(\tau_\nu) = X_{\tau_\nu} [S_\nu(t)]. \quad (6.30)$$

Hubeny and Mihalas (2014) používají místo označení X označení Ξ .

Pravděpodobnostní interpretace Schwarzschildovy rovnice (6.18). Na rozdíl od makroskopického popisu založeného na využití statistické střední veličiny I , která popisuje chování souboru fotonů, je pravděpodobnostní popis využívá popisu toho, co se děje s *jedním* fotonem, s jakou pravděpodobností je absorbován, emitován a rozptylován.

Předpokládejme, že v místě s optickou hloubkou $\tau = 0$ má specifická intenzita hodnotu $I(0)$. Budeme-li dále předpokládat prostředí, které pouze absorbuje,

³viz také Milne (1966)

je specifická intenzita v místě τ dána vztahem (6.3a) $I(\tau) = I(0)e^{-\tau}$. Potom pravděpodobnost, že foton *není* absorbován mezi 0 a τ , je

$$p(\tau) = e^{-\tau}. \quad (6.31)$$

Pravděpodobnost, že foton *je* absorbován mezi 0 a τ , je podobně

$$p_a(\tau) = 1 - e^{-\tau}. \quad (6.32)$$

Pro velmi malé optické vzdálenosti $\delta\tau \ll 1$ můžeme použít Taylorův rozvoj rovnice (6.32). Pro pravděpodobnost, že foton je absorbován, dostaneme s přesností do 1. řádu

$$p_a(\delta\tau) = \delta\tau. \quad (6.33)$$

Vynásobením pravděpodobností ze vztahů (6.31) a (6.33) dostáváme vztah pro pravděpodobnost, že foton proletí optickou vzdálenost τ a potom je mezi místy τ a $\tau + d\tau$ pohlcen vztah

$$p(\tau)p_a(d\tau) = p(\tau) d\tau = e^{-\tau} d\tau. \quad (6.34)$$

Je-li v planparalelní atmosféře foton vyzářen v $\tau = 0$ do směru μ , pak pravděpodobnost, že je absorbován v oblasti $(\tau, \tau + d\tau)$, je

$$p(\tau) d\tau = \exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right) \frac{d\tau}{\mu}. \quad (6.35)$$

Integrací vztahu (6.35) přes všechny směry μ dostáváme

$$\bar{p}(\tau) d\tau = \int_0^1 \exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right) \frac{d\tau}{\mu} d\mu = E_1(\tau) d\tau, \quad (6.36)$$

kde $\bar{p}(\tau) d\tau$ vyjadřuje celkovou pravděpodobnost, že foton šířící se libovolným směrem $0 \leq \mu \leq 1$ je pohlcen v intervalu $(\tau, \tau + d\tau)$. $E_1(x)$ je první exponenciální integrální funkce (rovnice A.1). Tato funkce tedy v rovnici (6.18) udává pravděpodobnost, že vyzářený foton (jejich počet je úměrný vydatností S – viz rovnice 3.30) letí mezi t a τ a je potom v $(\tau, \tau + d\tau)$ pohlcen.

6.3 Numerické řešení rovnice přenosu záření

V řadě případů, zejména pokud chceme řešením rovnice přenosu záření získat teoretické spektrum, které chceme porovnat s pozorovaným, nevystačíme s analytickým řešením rovnice přenosu záření. Jako příklad si vezměme rovnici přenosu záření v planparalelní geometrii (3.27). Přenos záření mezi body τ_2 a τ_1 lze v planparalelní geometrii vyjádřit pomocí rovnice (6.4). Tato rovnice se řeší často numericky. V dalším se budeme zabývat numerickým řešením rovnice přenosu záření.

6.3.1 Diskretizace rovnice přenosu záření

Při numerickém řešení rovnice přenosu záření je diskretizace nevyhnutelná. Diskretizaci používáme hlavně pro vyjádření diferenciálů i integrálů. Jedním ze základních výpočtů při různých částech řešení rovnice přenosu záření je výpočet určitého integrálu nějaké funkce $f(x)$ v mezích od a do b , který se numericky řeší jako součet funkčních hodnot ve vybraných bodech x_i ($a \leq x_i \leq b, i = 1, \dots, I$) vynásobených kvadraturními vahami w_i ,

$$\int_a^b f(x) dx \rightarrow \sum_{i=1}^I w_i f(x_i). \quad (6.37)$$

Jak kvadraturní váhy, tak i výběr bodů x_i jsou pro přesnost výpočtu klíčové. Je třeba je zvolit tak, aby výsledný součet co nejpřesněji odpovídal hodnotě integrálu. Pro zpřesnění výpočtu je kvadraturní váhy vhodné normalizovat. Dosáhneme toho dosazením funkce $f(x) = 1$ do (6.37). Spočteme

$$S_I \equiv \sum_{i=1}^I w_i \quad (6.38)$$

Pokud $S_I \neq b - a$, podělíme všechny kvadraturní váhy hodnotou S_I ,

$$w_i \rightarrow \frac{w_i}{S_I}. \quad (6.39)$$

Problematika přesných numerických výpočtů integrálů je podrobně studována v monografiích o numerické matematice.

Při řešení rovnice přenosu v diferenciálním tvaru používáme diskretizaci pro výpočet derivací. Jako příklad si uvedeme nejjednodušší diferenční vyjádření první derivace funkce $f(x)$ v bodě x_i ,

$$\left. \frac{df(x)}{dx} \right|_i \rightarrow \frac{f_{i+1}(x) - f_i(x)}{x_{i+1} - x_i}. \quad (6.40)$$

Existuje řada přesnějších formulí, které lze nalézt v monografiích věnovaných numerické matematice.

6.3.1.1 Prostorová diskretizace

Prostorová diskretizace pro numerické výpočty se provádí s ohledem na to, jak se mění vlastnosti prostředí v prostoru.

V jednorozměrném případě (planoparalelním nebo sféricky symetrickém) se jedná o hloubkovou diskretizaci nezávislé proměnné z . Prostředí (hvězdná atmosféra, mlhovina) je reprezentováno pomocí D hloubkových bodů vhodně rozdělných tak, aby co nejlépe popisovaly dané prostředí. Pro stabilní řešení rovnice

přenosu záření v atmosféře, která je v hydrostatické rovnováze, je vhodné volit diskretizaci ekvidistantní v $\ln \tau$, ale pro každou frekvenci. Obecně je pro každou frekvenci jiná škála optických hloubek (3.22), protože opacita je v každé frekvenci jiná. Ideální by tedy bylo použít pro každou frekvenci jinou hloubkovou diskretizaci. To ovšem narazí na jiný problém. Kdybychom v takovém případě chtěli spočítat integrál intenzity záření přes nějaký frekvenční interval v dané hloubce, například v integrovaných momentových rovnicích (3.36) nebo přes profil spektrální čáry, neobešli bychom se bez prostorových interpolací téměř pro každou frekvenci. Abychom se této situaci vyhnuli, volíme diskretizaci pro nějakou „střední“ optickou hloubku a tu pak použijeme pro všechny frekvence. Často se používá Rosselandova optická hloubka $\bar{\tau}_R$ (6.16), v některých případech i optická hloubka kontinua pro vlnovou délku $\lambda = 500$ nm, případně i pro jinou vlnovou délku.

Maticová reprezentace Λ -operátoru Pokud vyjádříme střední intenzitu pro diskrétní hloubkové body, můžeme působení Λ -operátoru (viz kapitola 6.2) vyjádřit pomocí maticové rovnice (D je počet hloubkových bodů)

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \\ \dots \\ J_D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda_{1,1} & \Lambda_{1,2} & \dots & \dots & \Lambda_{1,D} \\ \Lambda_{2,1} & \Lambda_{2,2} & \dots & \dots & \Lambda_{2,D} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Lambda_{D,1} & \Lambda_{D,2} & \dots & \dots & \Lambda_{D,D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ \dots \\ S_D \end{pmatrix} \quad (6.41)$$

Λ -operátor můžeme zjednodušit na tzv. přibližný Λ -operátor, o němž se zmíníme později (kapitola 10.2.2).

6.3.1.2 Úhlová diskretizace

Vzhledem k tomu, že rovnici přenosu záření vždy řešíme podél omezeného počtu paprsků definovaných směrovým vektorem \mathbf{n} , je při výpočtu střední intenzity (2.13), toku (2.19) a tenzoru tlaku (2.23) nutné integrovat specifickou intenzitu přes úhly. V případě planparalelní geometrie řešíme numericky integrál přes μ (2.28). Podle (6.37) dostáváme

$$\int_{-1}^1 I(\mu) d\mu \approx \sum_{m=1}^M w_m I(\mu_m). \quad (6.42)$$

kde M je počet směrů, pro něž známe specifickou intenzitu záření. Musí platit normalizační podmínka, kterou získáme z rovnice (6.42) pro $I(\mu) = 1$,

$$S_M = \sum_{m=1}^M w_m = 1. \quad (6.43)$$

Pokud tato podmínka splněna není a výsledkem součtu (6.43) je číslo $S_M \neq 1$, je nutné všechny kvadrurní váhy w_m nahradit váhami w_m/S_M .

Sít' M paprsků může být vybrána různými způsoby. Pokud je oněch M paprsků vybráno tak, aby hodnoty kosinů μ byly kořeny Legendreových polynomů řádu M (Gaussova-Legendreova kvadratura, viz například Hildebrand, 1974, kapitola 8.5) výsledná integrace je alespoň dvakrát přesnější než v případě M libovolných směrů. Nevýhodou může být pevné zadání směrů, v nichž se rovnice přenosu záření řeší. V případě, že není možné využít Gaussovu-Legendreovu kvadraturu, je možné použít libovolné směry a integrovat lichoběžníkovou metodou. Nevýhodou je nižší přesnost, ale směry můžeme volit podle potřeby.

6.3.1.3 Frekvenční diskretizace

Podobně jako v případě úhlové diskretizace je vhodné zavést frekvenční diskretizaci (tj. zvolit frekvenční body $\nu_n, n = 1, \dots, F$) tak, aby co nejlépe vystihla optické vlastnosti protředí. Základní rysy frekvenčního spektra, které je třeba vhodnou diskretizací popsat, jsou dány závislostí opacity χ a emisivity η na frekvenci ν . Tato závislost pak určuje i závislost intenzity záření I na frekvenci. Přechody v kontinuu (rozptyl na elektronech, volně-volné přechody) se s frekvencí mění poměrně pomalu (malé $\partial\chi/\partial\nu$) a rovnoměrně ($\partial^2\chi/\partial\nu^2 \approx 0$). Tím jsou malé i změny intenzity záření I s frekvencí ν (malé $\partial I/\partial\nu$). Ionizace a rekombinace mají pro většinu frekvencí rovněž malé a rovnoměrné změny (malé $\partial\chi/\partial\nu$ a malé $\partial^2\chi/\partial\nu^2$), ale v případě ionizačních hran se opacita (a tím i intezita záření) mění skokem. Čárové přechody se vyznačují velkou změnou opacity (velké $\partial\chi/\partial\nu$) v úzké čáře. Často lze však úspěšně využít fakt, že spektrální čáry bývají symetrické vzhledem ke své centrální frekvenci a řešit rovnici přenosu jen v půlce spektrální čáry.

Závislost derivace $\partial\chi/\partial\nu$ na frekvenci ν určuje vhodné rozdělení frekvenčních bodů. Pokud se opacita mění rovnoměrně ($\partial^2\chi/\partial\nu^2 \approx 0$), můžeme frekvenční body volit prakticky ekvidistantně. S ohledem na skutečnost, že $|\partial^2\chi/\partial\nu^2| \gtrsim 0$, je vhodná diskretizace ekvidistantní v $\ln \nu$. Pokud však je $|\partial^2\chi/\partial\nu^2| \gg 0$, musíme volbu frekvenčních bodů přizpůsobit funkci $\chi(\nu)$ tak, aby případné integrování přes frekvence mělo co nejmenší chybu.

Pro integraci přes frekvence je nejvhodnější lichoběžníková metoda, protože minimalizuje počet nutných frekvenčních bodů. Umožňuje nám je rozmístit jen tam, kde je jich třeba.

integrace přes profil čáry

$$\int_0^\infty J(\nu) d\nu \approx \int_{\nu_{\min}}^{\nu_{\max}} J(\nu) d\nu \approx \sum_{n=1}^F w_n J(\nu_n). \quad (6.44)$$

normalizace profilu čáry

$$S_F = \sum_{n=1}^F w_n = 1. \quad (6.45)$$

pro $S_F \neq 1$: $w_n \rightarrow w_n/S_F$

6.3.2 Dlouhé a krátké charakteristiky

Metoda charakteristik převádí řešení parciální diferenciální rovnice na řešení množiny obyčejných diferenciálních rovnic. *Charakteristika* je přímka, podél níž řešíme parciální diferenciální rovnici jako obyčejnou diferenciální rovnici. V astronomickém přenosu záření pro ni také používáme název paprsek.

Dlouhé charakteristiky je pojem používaný v astronomickém přenosu záření pro charakteristiky. Při použití metody dlouhých charakteristik se řeší rovnice přenosu záření podél paprsků procházejících *celým* prostředím (od okraje k okraji). V případě planparalelní geometrie je pro daný paprsek úhel θ mezi směrem šíření záření \mathbf{n} a polohovým vektorem $\mathbf{r} = (0, 0, z)$ konstantní. V tomto případě jde o „triviální“ charakteristiku, protože časově nezávislá planparalelní rovnice přenosu záření je obyčejnou diferenciální rovnicí. Pro sféricky symetrickou geometrii (obrázek 6.1) má každý paprsek jistou minimální vzdálenost p od středu symetrie. Tato vzdálenost se nazývá *impact parameter* (Hummer and Rybicki, 1971). Sféricky symetrickou rovnici přenosu záření pak řešíme podél jednotlivých paprsků s různým p , přičemž úhel θ mezi směrem šíření záření \mathbf{n} a polohovým vektorem \mathbf{r} se mění podél paprsku.

Krátké charakteristiky vzniknou rozdělením charakteristik na menší úsečky. V jednorozměrném případě jen rozdělíme řešení na několik navazujících částí, což je jen malá změna v porovnání s dlouhými charakteristikami. Výhody krátkých charakteristik se více projeví ve vícerozměrných (2-D a 3-D) případech. Použití dlouhých charakteristik ve vícerozměrných případech bývá často nevýhodné. Pokud jsou hodnoty základních veličin atmosféry definovány numericky pomocí sítě, dlouhá charakteristika vycházející z uzlového bodu často mine většinu dalších uzlových bodů, takže pro pokračování integrace podél paprsku musíme velmi často interpolovat z hodnot v uzlových bodech. Podobně musíme interpolovat, chceme-li zjistit hodnoty intenzity v uzlových bodech. Pomocí krátkých charakteristik, které jsou celé obsaženy jen v jedné buňce ohraničené uzlovými body a nemusejí na sebe navazovat, můžeme množství interpolací významně snížit. Krátké

charakteristiky můžeme zvolit tak, že hodnoty veličin z uzlových bodů interpolujeme pouze na jejich začátku nebo konci. Užití krátkých charakteristik znamená použití rovnice (6.4) na „krátkých“ intervalech.

6.3.3 Integrální metody

řešení 1-D rovnice (6.4), metody jsou použitelné i ve více rozměrech

$$I(\tau_1, \mu) = I(\tau_2, \mu) \exp\left(-\frac{\tau_2 - \tau_1}{\mu}\right) + \int_{\tau_1}^{\tau_2} S(t, \mu) \exp\left(-\frac{t - \tau_1}{\mu}\right) \frac{dt}{\mu} \quad (6.4)$$

- optická hloubka se mění ve hvězdných atmosférách až o několik řádů
- pro numerické řešení
 - provedeme hloubkovou diskretizaci (kapitola 6.3.1.1) podle optických hloubek
 $\tau_d, d = 1, \dots, D$ (D je celkový počet hloubkových bodů)
 - integrál vyjádříme pomocí (6.37)
 - je třeba vhodným způsobem interpolovat průběh vydatnosti i optické hloubky mezi body τ_1 a τ_2
 - bývá vhodné rozdělit interval $\langle \tau_2; \tau_1 \rangle$ na menší, je-li to třeba
 - řešíme podél dlouhých nebo krátkých charakteristik (kapitola 6.3.2)
 - řešení podél dlouhých charakteristik výpočetně náročné
 problém s globální interpolací,
 lokální interpolace nutností (Jones, 1973)
 - metoda krátkých charakteristik pro integrální metody vhodnější

lineární interpolace

$$S(t) = S_d \frac{\tau_{d+1} - t}{\tau_{d+1} - \tau_d} + S_{d+1} \frac{t - \tau_d}{\tau_{d+1} - \tau_d}, \quad \tau_d \leq t \leq \tau_{d+1} \quad (6.46)$$

kvadratická interpolace (například Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 12.123)

$$S(t) = \sum_{i=-1}^1 \frac{\prod_{j \neq i} (t - \tau_{d+j})}{\prod_{j \neq i} (\tau_{d+i} - \tau_{d+j})} S_{d+i} \quad (6.47)$$

Obecnou nevýhodou integrálních metod řešení rovnice přenosu záření je velké množství výpočtů exponenciál (ve členech obsahujících $\exp(-\Delta\tau)$), což je sice přímočarý výpočet, ale náročný na výpočetní čas.

6.3.4 Feautrierova metoda

Řešením rovnice přenosu záření se hodnota specifické intenzity $I_{\nu\mu}$ získá vždy jen v jednom směru. Existuje ale i snadná možnost, jak získat řešení rovnice přenosu záření současně v proti sobě jdoucích směrech. Rovnici přenosu záření můžeme převést na rovnici druhého řádu (viz Schuster, 1905) a řešit diferenciací podle Feautriera (1964). Zde uvedeme postup pro planoparalelní statickou atmosféru a monochromatickou rovnici přenosu záření.

Zavedeme proměnné $j_{\nu\mu}$ a $h_{\nu\mu}$ pomocí vztahů (pro $0 \leq \mu \leq 1$)⁴

$$j_{\nu\mu} \equiv \frac{1}{2} [I(+\mu, \nu) + I(-\mu, \nu)] \quad (6.48a)$$

$$h_{\nu\mu} \equiv \frac{1}{2} [I(+\mu, \nu) - I(-\mu, \nu)] \quad (6.48b)$$

Sečtením (3.15) pro $+\mu$ a $-\mu$ dostaneme s využitím (6.48)

$$\mu \frac{dh_{\nu\mu}}{d\tau_\nu} = j_{\nu\mu} - S_\nu \quad (6.49a)$$

$$\mu \frac{dj_{\nu\mu}}{d\tau_\nu} = h_{\nu\mu} \quad (6.49b)$$

Derivováním rovnice (6.49b) podle τ_ν a následným dosazením z (6.49a) dostaneme rovnici druhého řádu pro proměnnou j ,

$$\mu^2 \frac{d^2 j_{\nu\mu}}{d\tau_\nu^2} = j_{\nu\mu} - S_\nu, \quad (6.50)$$

kteřou budeme nazývat **Schusterovou rovnicí** přenosu záření druhého řádu (viz Hubeny and Mihalas, 2014, kapitola 11.6).

Okrajové podmínky Rovnici (6.50) řešíme mezi optickými hloubkami τ_{\min} (nejnižší hodnota) a τ_{\max} (nejvyšší hodnota). Horní okrajovou podmínku rovnice (3.15),

$$I(-\mu, \nu, \tau_{\min}) = I_{\nu\mu}^-, \quad 0 \leq \mu \leq 1, \quad (6.51a)$$

kteřá většinou definuje záření dopadající na hvězdnou atmosféru z vnějšku, a dolní okrajovou podmínku téže rovnice,

$$I(+\mu, \nu, \tau_\nu = \tau_{\max}) = I_{\nu\mu}^+, \quad 0 \leq \mu \leq 1, \quad (6.51b)$$

⁴Proměnné se někdy značí u a v . Proměnným se běžně říká Feautrierovy proměnné, i když je Schuster zavedl o hodně let dříve (1905). Feautrier (1964) je použil k formulaci numerické metody řešení rovnice přenosu záření. Oba autoři je značili odlišně od značení použitého zde, Schuster použil označení A a B a Feautrier J a F .

6. FORMÁLNÍ ŘEŠENÍ ROVNICE PŘENOSU ZÁŘENÍ

kteřá popisuje záření přicházející do atmosféry z nitra hvězdy, přepíšeme pomocí vztahů $I(+\mu, \nu) = j_{\nu\mu} + h_{\nu\mu}$ a $I(-\mu, \nu) = j_{\nu\mu} - h_{\nu\mu}$, které vyplývají z definice proměnných (6.48). Dostaneme tak vztahy pro horní okrajovou podmínku

$$\mu \left. \frac{dj_{\nu\mu}}{d\tau_\nu} \right|_{\tau_{\min}} = j_{\nu\mu}(\tau_{\min}) - I_{\nu\mu}^- \quad (6.52a)$$

a pro dolní okrajovou podmínku

$$\mu \left. \frac{dj_{\nu\mu}}{d\tau_\nu} \right|_{\tau_{\max}} = I_{\nu\mu}^+ - j_{\nu\mu}(\tau_{\max}). \quad (6.52b)$$

Pro hvězdné atmosféry se často uvažuje nulové dopadající záření,

$$I_{\nu\mu}^- = 0, \quad (6.53)$$

není to však podmínkou. Nejčastější podmínkou na spodním okraji hvězdných atmosfér je difúzní přiblížení,

$$I_{\nu\mu}^+ = B_\nu(\tau_{\max}) + \mu \left. \frac{dB_\nu}{d\tau_\nu} \right|_{\tau_{\max}}. \quad (6.54)$$

opět však můžeme nalézt případy, kdy je vhodnější jiná okrajová podmínka. Pro případ symetrické vrstvy můžeme stanovit hraniční podmínku ve středu symetrie, kde je $h_{\nu\mu}(\tau) = 0$. Položíme-li $\tau = \tau_{\max}$, máme okrajovou podmínku

$$\mu \left. \frac{dj_{\nu\mu}}{d\tau_\nu} \right|_{\tau_{\max}} = 0 \quad (6.55)$$

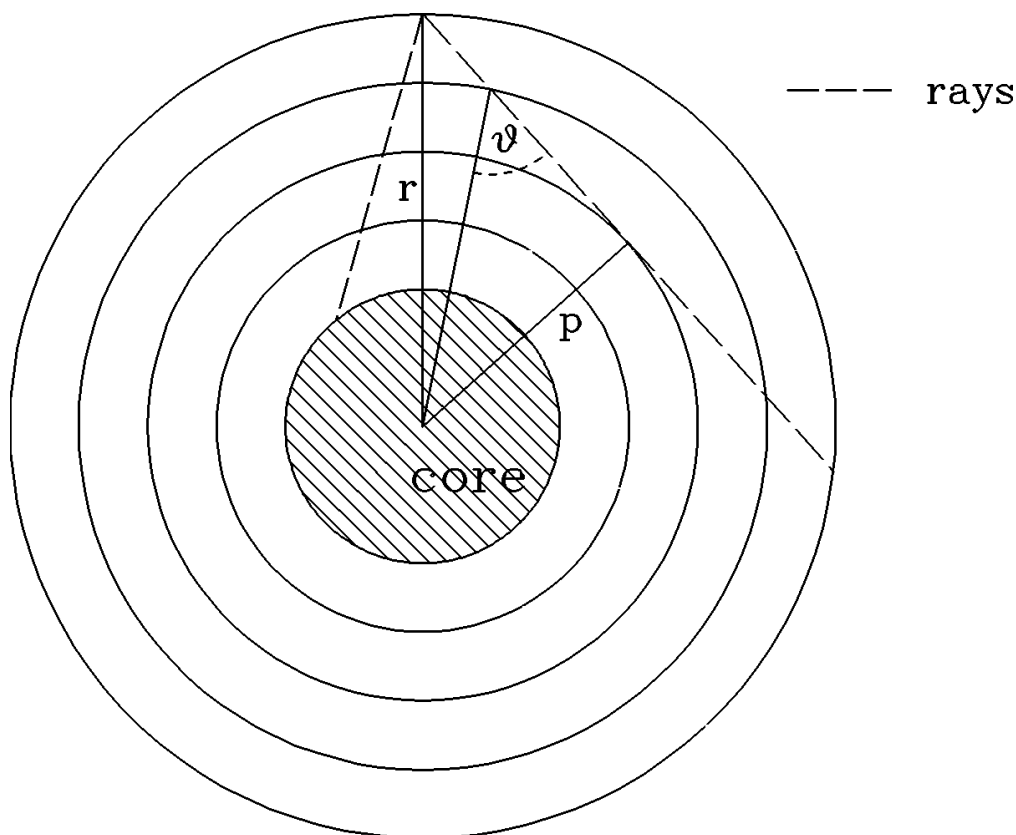
Dále se problém diskretizuje a řeší numericky (viz Příloha C.1).

6.3.5 Sféricky symetrická rovnice přenosu záření

Rozdíl mezi planparalelní a sférickou geometrií je patrný z obrázku 6.1. Některé paprsky, podél kterých se šíří záření, procházejí skrz prostředí, oba jejich konce jsou vnější. Doprostřed souřadné soustavy umístíme opticky tlustou hvězdu, která se při formulaci řešení rovnice přenosu ve sférické geometrii často nazývá jádrem (*core*). Některé paprsky protínají jádro, způsob řešení rovnice přenosu záření bude pro tyto paprsky odlišný od způsobu řešení podél paprsků jádro neprotínajících.

Výraz na levé straně sféricky symetrické rovnice přenosu záření (3.19) je přesně derivace ve směru (3.17). Směr označíme s a nahradíme levou stranu derivací ve směru d/ds ,

$$\frac{dI_{\nu\mu}}{ds} = \eta_\nu(r) - \chi_\nu(r)I_{\nu\mu}(r), \quad (6.56)$$



Obrázek 6.1: Paprsky ve sféricky symetrickém modelu, $\mu = \cos \vartheta$ v obrázku.

což je rovnice přenosu záření ve sférické geometrii podél paprsku. Zavedeme optickou hloubku podél paprsku s jako $d\tau_{\nu s} = -\chi_{\nu} ds$, vydatnost pomocí (3.25) a rovnici přenosu záření podél paprsku přepíšeme

$$\frac{dI_{\nu\mu}}{d\tau_{\nu s}} = I_{\nu\mu} - S_{\nu}. \quad (6.57)$$

Podobně jako v planparalelním případě sečteme a odečteme rovnice přenosu záření v protichůdných směrech, využijeme Schusterovy-Feautrierovy proměnné (6.48) a zapíšeme rovnici přenosu záření druhého řádu podél paprsku s jako

$$\frac{d^2 j_{\nu\mu}}{d\tau_{\nu s}^2} = j_{\nu\mu} - S_{\nu} \quad (6.58)$$

Je to stejná rovnice jako (6.50), liší se jen v optické hloubce ($d\tau_{\nu}/\mu \rightarrow d\tau_{\nu s}$). Intenzitu dopadajícího záření označíme stejně jako v planparalelním případě (6.51)

a podobné budou i okrajové podmínky (6.52). Na horním okraji je okrajová podmínka

$$\left. \frac{dj_{\nu\mu}}{d\tau_{\nu s}} \right|_{\tau_{\min}} = j_{\nu\mu}(\tau_{\min}) - I_{\nu\mu}^- \quad (6.59a)$$

pro volbu $I_{\nu\mu}^-$ platí stejné poznámky jako v planparalelním případě. Pro paprsky protínající jádro (*core*) použijeme okrajovou podmínku jako v planparalelním případě na spodním okraji,

$$\left. \frac{dj_{\nu\mu}}{d\tau_{\nu s}} \right|_{\tau_{\max}} = I_{\nu\mu}^+ - j_{\nu\mu}(\tau_{\max}). \quad (6.59b)$$

Pro paprsky neprotínající jádro je druhým okrajem opět horní okraj. Vzhledem ke sférické symetrii však stačí řešit rovnici přenosu jen v půlce paprsku. Okrajovou podmínku potom formulujeme v tom místě paprsku, kde je vzdálenost od středu hvězdy nejkratší,

$$\left. \frac{dj_{\nu\mu}}{d\tau_{\nu s}} \right|_{\tau_{\max}} = 0. \quad (6.59c)$$

Problém diskretizujeme a řešíme numericky stejnou metodou jako v planparalelním případě (viz Příloha C.1).

Kapitola 7

Přenos záření s obecnou vydatností

V této části se začneme zabývat zobecněním rovnice přenosu pro případy, kdy při řešení rovnice přenosu neznáme vydatnost (opacitu a emisivitu), protože nějakým způsobem závisí na poli záření. V této kapitole se podíváme na vliv rozptylu na pohyb fotonu v prostředí a na to, jak započtení rozptylu ovlivní rovnici přenosu záření a jaké máme možnosti řešení rovnice přenosu záření s rozptylem. Později (v kapitole 9) se budeme zabývat složitější závislostí vydatnosti na poli záření přes rovnice kinetické rovnováhy.

7.1 Vydatnost spektrální čáry

Odvodíme si nyní vztah pro vydatnost (zdrojovou funkci) spektrální čáry. Opacitu můžeme se zahrnutím stimulované emise jako záporné absorpce zapsat jako

$$\chi(\nu) = \frac{h\nu}{4\pi} (\phi(\nu)n_l B_{lu} - \psi^{\text{stim}}(\nu)n_u B_{ul}) \quad (7.1)$$

kde $\phi(\nu)$ je absorpční profil a $\psi^{\text{stim}}(\nu)$ je profil stimulované emise. Obecně mohou být tyto profily rozdílné. Emisivitu v čáře můžeme zapsat jako

$$\eta(\nu) = \frac{h\nu}{4\pi} \psi^{\text{spont}}(\nu)n_u A_{ul}, \quad (7.2)$$

kde $\psi^{\text{spont}}(\nu)$ je profil spontánní emise, který se obecně opět může lišit od absorpčního profilu i od profilu stimulované emise. Vydatnost v čáře S_L dostaneme jako podíl emisivity a opacity

$$S_L(\nu) = \frac{\eta(\nu)}{\chi(\nu)} = \frac{\psi^{\text{spont}}(\nu)n_u A_{ul}}{\phi(\nu)n_l B_{lu} - \psi^{\text{stim}}(\nu)n_u B_{ul}}. \quad (7.3)$$

V případě nepříliš intenzivního pole záření (což je případ běžných hvězdných atmosfér) jsou emisní profily pro spontánní a stimulovanou emisi stejné (Cooper

et al., 1983), $\psi^{\text{spont}}(\nu) = \psi^{\text{stim}}(\nu) \equiv \psi(\nu)$. Pokud navíc dochází k úplné redistribuci záření ve spektrální čáře (B.29c), jsou stejné i absorpční a emisní profily, $\phi(\nu) = \psi(\nu)$, pak

$$S_L = \frac{n_u A_{ul}}{n_l B_{lu} - n_u B_{ul}} = \frac{2h\nu_{lu}^3}{c^2} \frac{1}{\frac{n_l g_u}{n_u g_l} - 1}. \quad (7.4)$$

Tento vztah přejde na Planckovu funkci (rovnovážný stav), pokud platí

$$\frac{n_u}{n_l} = \frac{g_u}{g_l} \exp\left(-\frac{h\nu_{lu}}{kT}\right). \quad (7.5)$$

Tento vztah je splněn nejen v případě termodynamické rovnováhy, kdy obsazení hladin n_l a n_u mají rovnovážné hodnoty n_l^* a n_u^* , ale může být splněn i pro obecně nerovnovážné hodnoty n_l a n_u . V tom případě někdy říkáme, že hladiny l a u jsou *vuči sobě* v (lokální) termodynamické rovnováze. Typickým příkladem jsou hladiny, jejichž excitační energie mají vzájemně blízké hodnoty, nebo hladiny s excitačními energiemi blízkými ionizační energii.

7.2 Vydatnost s rozptylem

Zahrnutí rozptylu vnáší do rovnice přenosu záření člen, který je přímo závislý na intenzitě záření. Při rozptylu nedochází ke zničení fotonu jako například při pravé absorpci, ale může se jeho měnit frekvence ν (například kapitola 5.8) i směr \mathbf{n} (například kapitola 5.7).

V této kapitole oddělíme od opacity a emisivity jejich část způsobenou rozptylem. Důvodem je hlavně emisivita, která při rozptylu závisí na dopadajícím záření. Zbylou část opacity a emisivity budeme označovat přívlastkem termální, což charakterizuje zničení (termalizaci) fotonu při pravé absorpci a jeho vznik z tepelné energie přes vnitřní energii atomů při emisi. Celkovou opacitu označíme χ , opacitu rozptylu σ a absorpční opacitu bez rozptylu (termální opacitu) κ . Pro celkovou opacitu platí

$$\chi(\mathbf{n}, \nu) = \kappa(\mathbf{n}, \nu) + \sigma(\mathbf{n}, \nu). \quad (7.6)$$

Podobně celkovou emisivitu označíme η , rozptylovou emisivitu η^S a termální emisivitu (bez rozptylu) η^{th} a pro celkovou emisivitu napíšeme vztah

$$\eta(\mathbf{n}, \nu) = \eta^{\text{th}}(\mathbf{n}, \nu) + \eta^S(\mathbf{n}, \nu). \quad (7.7)$$

Podělením rovnic pro emisivitu (7.7) a opacitu (7.6) dostaneme vztah pro celkovou vydatnost

$$S(\mathbf{n}, \nu) = \frac{\eta(\mathbf{n}, \nu)}{\chi(\mathbf{n}, \nu)} = \frac{\eta^{\text{th}}(\mathbf{n}, \nu) + \eta^{\text{S}}(\mathbf{n}, \nu)}{\kappa(\mathbf{n}, \nu) + \sigma(\mathbf{n}, \nu)} \quad (7.8)$$

Rovnice přenosu záření bez časového členu (3.9) získá po dosazení za opacitu a emisivitu z (7.6) a (7.7) tvar

$$\mathbf{n} \cdot \nabla I(\mathbf{n}, \nu) = - [\kappa(\mathbf{n}, \nu) + \sigma(\mathbf{n}, \nu)] I(\mathbf{n}, \nu) + \eta^{\text{th}}(\mathbf{n}, \nu) + \eta^{\text{S}}(\mathbf{n}, \nu) \quad (7.9)$$

Rozptylová emisivita η^{S} závisí na dopadajícím poli záření. Obecně ji můžeme vyjádřit vztahem

$$\eta^{\text{S}}(\mathbf{n}, \nu) = \frac{1}{4\pi} \oint d\varpi' \int_0^\infty d\nu' \sigma(\mathbf{n}', \nu') \tilde{R}(\mathbf{n}', \nu'; \mathbf{n}, \nu) I(\mathbf{n}', \nu') \quad (7.10)$$

kde $\tilde{R}(\mathbf{n}', \nu'; \mathbf{n}, \nu)$ je redistribuční funkce vyjadřující pravděpodobnost rozptylu $(\mathbf{n}', \nu') \rightarrow (\mathbf{n}, \nu)$ v soustavě pozorovatele. Můžeme ji získat vystředováním atomární redistribuční funkce (zavedené v kapitole 5.8) přes rozdělení rychlostí. Pro nerelativistický případ můžeme podobně jako v případě rovnice (5.86) redistribuční funkci rozdělit na úhlovou a frekvenční část,

$$\tilde{R}(\mathbf{n}', \nu'; \mathbf{n}, \nu) = g(\mathbf{n}', \mathbf{n}) R(\nu'; \nu), \quad (7.11)$$

kde $g(\mathbf{n}', \mathbf{n})$ je úhlová redistribuční funkce a $R(\nu'; \nu)$ je frekvenční redistribuční funkce. Podívejme se nyní jednotlivě na obě redistribuční funkce.

Úhlová redistribuce záření je podrobně rozebrána v knize Chandrasekhar (1960, kapitola III a následující). Pro zjednodušení předpokládáme frekvenčně koherentní rozptyl,

$$\tilde{R}(\mathbf{n}', \nu'; \mathbf{n}, \nu) = g(\mathbf{n}', \mathbf{n}) \delta(\nu - \nu').$$

Rozptylová emisivita (7.10) pro čistě úhlovou redistribuci záření a za předpokladu izotropní rozptylové opacity (σ nezávisí na směru, odkud přichází záření) je

$$\eta^{\text{S}}(\mathbf{n}, \nu) = \sigma(\nu) \oint I(\mathbf{n}', \nu) g(\mathbf{n}', \mathbf{n}) \frac{d\varpi'}{4\pi}, \quad (7.12)$$

po jejím dosazení do rovnice přenosu záření dostaneme

$$\mathbf{n} \cdot \nabla I(\mathbf{n}, \nu) = - [\kappa(\mathbf{n}, \nu) + \sigma(\mathbf{n}, \nu)] I(\mathbf{n}, \nu) + \eta^{\text{th}}(\mathbf{n}, \nu)$$

$$+ \sigma(\nu) \oint I(\mathbf{n}', \nu) g(\mathbf{n}', \mathbf{n}) \frac{d\varpi'}{4\pi}. \quad (7.13)$$

V případě izotropního rozptylu ($g(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = 1$) se rovnice přenosu záření zjednoduší na

$$\mathbf{n} \cdot \nabla I(\mathbf{n}, \nu) = - [\kappa(\mathbf{n}, \nu) + \sigma(\nu)] I(\mathbf{n}, \nu) + \eta^{\text{th}}(\mathbf{n}, \nu) + \sigma(\nu) J(\nu). \quad (7.14)$$

Termální opacita κ a emisivita η^{th} bývají také často nezávislé na směru dopadajícího záření. Pokud budou navíc i tyto nulové, budeme mít pro čistě rozptylující prostředí rovnici přenosu záření

$$\mathbf{n} \cdot \nabla I(\mathbf{n}, \nu) = -\sigma(\nu) [I(\mathbf{n}, \nu) - J(\nu)]. \quad (7.15)$$

Příkladem použití takovéto rovnice může být prostředí, kde jediným zdrojem opacity je rozptyl na volných elektronech (kapitola 5.7.1). Zobecnění rovnice (7.15) pro anizotropní rozptyl je zřejmé.

Frekvenční redistribuce záření je stručně popsána v kapitole 5.8. Pro zjednodušení předpokládáme izotropní rozptyl ($g(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = 1$) a nezávislost rozptylové opacity na směru dopadajícího záření. Z rovnice (7.11) tak dostaneme

$$\tilde{R}(\mathbf{n}', \nu'; \mathbf{n}, \nu) = R(\nu', \nu)$$

a rozptylová emisivita pro čistě frekvenční redistribuci záření po integraci přes všechny směry bude

$$\eta^{\text{S}}(\nu) = \int_0^\infty \sigma(\nu') R(\nu', \nu) J(\nu') d\nu'. \quad (7.16)$$

Rovnice přenosu záření (7.9) získá tvar

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot \nabla I(\mathbf{n}, \nu) = & - [\kappa(\mathbf{n}, \nu) + \sigma(\nu)] I(\mathbf{n}, \nu) + \eta^{\text{th}}(\mathbf{n}, \nu) \\ & + \int_0^\infty \sigma(\nu') R(\nu', \nu) J(\nu') d\nu' \end{aligned} \quad (7.17)$$

Tato rovnice svazuje různé frekvence v závislosti na rozptylové opacitě $\sigma(\nu)$ a redistribuční funkci $R(\nu', \nu)$ jako funkcí frekvence. Pro speciální případ úplné redistribuce ve spektrálních čarách můžeme pro součin rozptylové opacity a redistribuční funkce v rovnici (7.16) psát

$$\sigma(\nu') R(\nu', \nu) = \sigma_0 \phi(\nu') \phi(\nu),$$

kde rozptylová opacita $\sigma_0 = \pi e^2 / (m_e c) f_{lu}$ (rovnice 5.41) nezávisí na frekvenci. Potom rozptylová emisivita

$$\eta^S(\nu) = \sigma_0 \phi(\nu) \int_0^\infty \phi(\nu') J(\nu') d\nu' \quad (7.18)$$

a rovnice přenosu záření bude mít tvar

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot \nabla I(\mathbf{n}, \nu) = & - [\kappa(\mathbf{n}, \nu) + \sigma(\nu)] I(\mathbf{n}, \nu) + \eta^{\text{th}}(\mathbf{n}, \nu) \\ & + \sigma_0 \phi(\nu) \int_0^\infty \phi(\nu') J(\nu') d\nu' \end{aligned} \quad (7.19)$$

V případě koherentního rozptylu je

$$\sigma(\nu') R(\nu', \nu) = \sigma_0 \phi(\nu') \delta(\nu - \nu'),$$

rozptylová emisivita se zjednoduší na

$$\eta^S(\nu) = \sigma(\nu) J(\nu) \quad (7.20)$$

a rovnice přenosu záření získá tvar (7.14). Příkladem procesu s frekvenční redistribucí záření je rozptyl ve spektrálních čarách (kapitola 5.8).

7.2.1 Planparalelní rovnice přenosu záření s koherentním rozptylem

Podíváme se nyní blíže na rovnici (7.14) pro případ rovinné geometrie. Budeme uvažovat planparalelní rovnici přenosu záření (3.15) s optickou hloubkou, která bude zahrnovat opacitu termální absorpce κ_ν i rozptylu σ_ν (viz kapitola 5), $d\tau_\nu = -(\kappa_\nu + \sigma_\nu) dz$,

$$\mu \frac{dI_{\nu\mu}}{d\tau_\nu} = I_{\nu\mu} - S_\nu. \quad (7.21)$$

Budeme se zabývat různými tvary vydatnosti S_ν .

V jednoduchém případě lokální termodynamické rovnováhy (LTE – viz kapitola 4.6 a později 9.1) bez rozptylu ($\chi_\nu = \kappa_\nu$) má vydatnost jednoduchý tvar $S_\nu = B_\nu$. Opačným extrémním případem je čistě koherentní (frekvence se při rozptylu nemění) izotropní rozptyl. V tomto případě je vydatnost rovna

$$S_\nu = \frac{\sigma_\nu J_\nu}{\sigma_\nu} = J_\nu = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I_{\nu\mu} d\mu. \quad (7.22)$$

7. PŘENOS ZÁŘENÍ S OBECNOU VYDATNOSTÍ

Rovnice přenosu záření s vydatností tohoto typu a její řešení jsou podobně studovány v knize Chandrasekhar (1960, kapitola III a další).

Kombinací těchto dvou limitních případů dostáváme případ tepelného (LTE) záření spojeného s koherentním rozptylem v kontinuu. V tomto případě obsahuje vydatnost jak termální člen, tak i rozptylový člen,

$$S_\nu = \frac{\eta_\nu}{\chi_\nu} = \frac{\kappa_\nu B_\nu + \sigma_\nu J_\nu}{\kappa_\nu + \sigma_\nu}. \quad (7.23)$$

Podíl termální opacity k celkové opacitě

$$\varepsilon_\nu = \frac{\kappa_\nu}{\kappa_\nu + \sigma_\nu} \quad (7.24)$$

udává pravděpodobnost, že bude foton pohlcen („zničen“). Tento podíl se nazývá **parametr tepelné vazby** (*thermal coupling parameter*) nebo také **pravděpodobnost zničení fotonu** (*photon destruction probability*). S tímto parametrem získá výraz pro vydatnost tvar

$$S_\nu = \varepsilon_\nu B_\nu + (1 - \varepsilon_\nu) J_\nu \quad (7.25)$$

Z tohoto vztahu vyplývá, že v případě, když převládá tepelná opacita a opacita rozptylu je malá, je pravděpodobnost zničení fotonu velká ($\varepsilon_\nu \rightarrow 1$) a vydatnost se blíží své rovnovážné hodnotě. Pokud převládá opacita rozptylu, je pravděpodobnost zničení fotonu malá a vydatnost se blíží vztahu (7.22)

Formálně zobecníme tento výsledek i pro případ rozptylu ve spektrální čáře (kapitola 5.8) na pozadí kontinua, které se formuje v LTE. Opacitu χ_ν v tomto případě můžeme vyjádřit jako

$$\chi_\nu = \chi_c + \chi_l \phi_\nu, \quad (7.26)$$

kde χ_c je opacita kontinua (ionizací, volně volných přechodů a rozptylu na elektronech), χ_l je opacita ve středu čáry (nezávisí na frekvenci) a ϕ_ν je profil této čáry. Opacita kontinua χ_c je pro frekvence v čáře prakticky konstantní, protože spektrální čáry jsou většinou velmi úzké. Pro emisivitu v této čáře platí, že část ε pochází z termálních procesů a část $1 - \varepsilon$ z rozptylu v čáře. Předpokládáme úplnou redistribuci záření při rozptylu v čáře. Pro celkovou emisivitu můžeme psát

$$\eta_\nu = \chi_c B_\nu + \chi_l \phi_\nu \left[\varepsilon B_\nu + (1 - \varepsilon) \int_0^\infty \phi_{\nu'} J_{\nu'} d\nu' \right] \quad (7.27)$$

Vztah pro vydatnost můžeme přepsat do tvaru podobného vztahu (7.25),

$$S_\nu = \xi_\nu B_\nu + (1 - \xi_\nu) \int_0^\infty \phi_{\nu'} J_{\nu'} d\nu', \quad (7.28)$$

kde $r = \chi_c/\chi_l$ a $\xi_\nu = (r + \varepsilon\phi_\nu)/(r + \phi_\nu)$.

Rovnice přenosu záření (7.21) je díky vydatnostem (7.25) nebo (7.28) integrodiferenciální. Její řešení můžeme formálně zapsat pomocí Λ -operátoru (viz kapitola 6.2),

$$J_\nu(\tau_\nu) = \Lambda_{\tau_\nu} [S_\nu] = \Lambda_{\tau_\nu} [(1 - \varepsilon_\nu) J_\nu] + \Lambda_{\tau_\nu} [\varepsilon_\nu B_\nu]. \quad (7.29)$$

Bez rozptylu (tj. kdyby $\varepsilon_\nu = 1$) by bylo řešení rovnice (7.29) jednoduché formální řešení rovnice přenosu pro $S_\nu = B_\nu$. V opačném případě řešení (když $\varepsilon_\nu < 1$) není již tak přímočaré.

7.3 Termalizační délka

Pro jednoduchost budeme zde uvažovat koherentní a izotropní rozptyl. Střední volná dráha ℓ_ν fotonu o frekvenci ν je dána převrácenou hodnotou absorpčního koeficientu χ_ν (viz kapitola 3.1.1),

$$\ell_\nu = \frac{1}{\chi_\nu} = \frac{1}{\kappa_\nu + \sigma_\nu}. \quad (7.30)$$

Absorpční koeficient χ_ν se zde skládá z termální opacity κ_ν a rozptylu σ_ν , $\chi_\nu = \kappa_\nu + \sigma_\nu$. Po každém proletu střední volné dráhy je foton buď *absorbován* nebo *rozptýlen*. Po rozptylu foton pokračuje ve své cestě (obecně jiným směrem), po absorpci svou cestu končí, protože jeho energie se nakonec převede pomocí srážek do tepelné energie (říkáme, že foton je *termalizován*). Nás bude zajímat celková střední dráha, kterou foton proletí, než bude termalizován (viz také Rybicki and Lightman, 1979, kapitola 1.7), kterou nazveme *termalizační délka*.

Celková dráha \mathbf{L} , kterou foton proletí po N rozptylech, je dána vektorovým součtem $\mathbf{L} = \sum_{n=1}^N \boldsymbol{\ell}_n$, kde $\boldsymbol{\ell}_n$ jsou dráhy mezi jednotlivými interakcemi. V případě náhodných procesů bude prostá střední hodnota \mathbf{L} nulová, neboť je to vektor a v důsledku vektorového sčítání se jednotlivé dráhy vzájemně odečtou. Vezmeme proto střední hodnotu L z kvadrátů středních volných drah (což odpovídá druhé mocnině velikostí jednotlivých drah),

$$L^2 = \langle \mathbf{L}^2 \rangle = \sum_{n=1}^N \langle \ell_n^2 \rangle + 2 \sum_{n=1}^N \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^N \langle \boldsymbol{\ell}_n \cdot \boldsymbol{\ell}_m \rangle.$$

Pro izotropní rozptyl je střední hodnota všech skalárních součinů $\langle \boldsymbol{\ell}_n \cdot \boldsymbol{\ell}_m \rangle$ nulová a $\langle \ell_n^2 \rangle = \ell^2$ (čtverec střední volné dráhy fotonu). Střední celková dráha fotonu po N rozptylech je tedy

$$L = \sqrt{N} \ell. \quad (7.31)$$

Veličina ε_ν ze vztahu (7.24) vyjadřuje pravděpodobnost zničení fotonu frekvence ν (pravděpodobnost absorpce). Celkový střední počet rozptylů je roven její převrácené hodnotě, $N = 1/\varepsilon_\nu$. Celková dráha fotonu o frekvenci ν je

$$L_\nu = \frac{\ell_\nu}{\sqrt{\varepsilon_\nu}} = \frac{\ell_\nu}{\sqrt{\frac{\kappa_\nu}{\kappa_\nu + \sigma_\nu}}} = \frac{1}{\sqrt{\kappa_\nu(\kappa_\nu + \sigma_\nu)}} \quad (7.32)$$

Této vzdálenosti se kromě již zmíněného názvu termalizační délka říká také difúzní délka nebo efektivní střední volná dráha fotonu. Vyjádříme-li termalizační délku jako optickou vzdálenost τ_{th} , dostaneme

$$\tau_{\text{th}} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_\nu}}. \quad (7.33)$$

To je *termalizační délka vyjádřená v jednotkách střední volné dráhy* ℓ_ν fotonu o frekvenci ν .

7.4 Přímé metody řešení rovnice přenosu záření s rozptylem

Při řešení monochromatické rovnice přenosu záření s rozptylem se musíme vypořádat se zahrnutím závislosti vydatnosti (zdrojové funkce) na záření ze všech směrů (viz rovnice 7.25). V této části se opět omezíme na řešení rovnice přenosu záření v planparalelním přiblížení.

Rovnici přenosu záření (7.21) diskretizujeme pro úhlovou proměnnou μ . Zvolíme $2M + 1$ hodnot μ_m , $m = -M, \dots, -1, 0, 1, \dots, M$. Touto volbou m chceme zdůraznit, že budeme řešit rovnice přenosu pro proti sobě jdoucí směry. Hodnota $m = 0$ bude odpovídat vodorovnému směru pro $\mu = 0$). Rovnici přenosu záření přepíšeme

$$\mu_m \frac{dI(\nu, \mu_m, \tau_\nu)}{d\tau_\nu} = I(\nu, \mu_m, \tau_\nu) - S(\nu, \tau_\nu), \quad (7.34)$$

kde vydatnost (zdrojová funkce) je dána (z 7.25)

$$S(\nu, \tau_\nu) = (1 - \varepsilon_\nu) \sum_{m=-M}^M w_m^\mu I(\nu, \mu_m, \tau_\nu) + \varepsilon_\nu B_\nu(\tau_\nu). \quad (7.35)$$

V této rovnici byl integrál specifické intenzity přes úhly nahrazen součtem (viz kapitola 6.3.1). Veličiny w_m^μ jsou odpovídající kvadraturní váhy (6.44), které jsou normalizovány k 1 (viz 6.43).

Základní problém řešení rovnice (7.34) je v okrajových podmínkách. Rovnice přenosu záření je diferenciální rovnice prvního řádu, pro její řešení v jednom směru stačí jedna okrajová podmínka. Pro výpočet rozptylového integrálu potřebujeme však znát záření přicházející ze *všech* směrů. V případě $2M + 1$ směrů je to $2M + 1$ okrajových podmínek. S výhodou lze využít Schusterovy proměnné (6.48) a místo $2M + 1$ rovnic prvního řádu řešit $M + 1$ rovnic druhého řádu.

Feautrierova metoda popsaná v kapitole 6.3.4 převádí rovnici přenosu záření pro specifickou intenzitu I , která je prvního řádu, na rovnici druhého řádu (6.50) pro proměnnou j (6.48a). Tím se jedním řešením rovnice přenosu záření získá záření přicházející z protilehlých směrů. Pro přenos záření s termální absorpcí a rozptylem řešíme rovnici (6.50) s vydatností, která zahrnuje rozptyl. Nejjednodušší takový případ je vydatnost zadaná rovnicí (7.23). Okrajové podmínky můžeme použít stejně jako v případě formálního řešení (6.52). Rozdíl oproti formálnímu řešení tkví v tom, že nyní musíme řešit *současně* rovnice pro danou frekvenci a *různé* směry μ , které jsou vzájemně svázány přes střední intenzitu záření v rozptylovém členu vydatnosti. Více o numerickém řešení uvádí Příloha C.1.4.

Rybickiho řešení je speciální metoda numerického řešení rovnice přenosu záření se zahrnutím rozptylu, kde se systém přetransformuje na řešení pro střední intenzitu záření v čáře $\bar{J} \equiv \int \phi_\nu J_\nu$ (Rybicki, 1971). Použitelná je pro poměrně častý případ úplné redistribuce záření v čáře.

7.5 Iterační metody řešení rovnice přenosu záření s rozptylem

Užití iteračních metod při numerickém řešení rovnic je často velmi dobrou alternativou k přímému řešení, která má nižší nároky na paměť počítače a častokrát bývá i rychlejší, i když se výpočty opakují po několik iterací.

7.5.1 Λ iterace

Jednoduchá iterační metoda se přímo nabízí z rovnice (7.29) (závislost na hloubkové proměnné τ nebudeme uvádět),

$$J_\nu = \Lambda [S_\nu] = \Lambda [(1 - \varepsilon_\nu) J_\nu] + \Lambda [\varepsilon_\nu B_\nu]. \quad (7.36)$$

V iteračním postupu budeme střídavě určovat střední intenzitu J_ν a vydatnost S_ν . Jako úvodní iterační hodnotu pro pole záření vezmeme Planckovu funkci

$$J_\nu^{(0)} = B_\nu. \quad (7.37a)$$

V první iteraci určíme střední intenzitu s využitím (7.36) jako

$$J_\nu^{(1)} = \Lambda [(1 - \varepsilon_\nu)J_\nu^{(0)}] + \Lambda [\varepsilon_\nu B_\nu]. \quad (7.37b)$$

Zobecněním této rovnice pro $n + 1$. iteraci dostaneme

$$J_\nu^{(n+1)} = \Lambda [(1 - \varepsilon_\nu)J_\nu^{(n)}] + \Lambda [\varepsilon_\nu B_\nu]. \quad (7.37c)$$

Tomuto postupu určování střední intenzity říkáme **Lambda iterace**. Tato metoda konverguje ke správnému řešení. Rychlost konvergence je možné měřit pomocí odchylek od správného řešení, které se musí dostatečně rychle zmenšovat. Protože během iteračního postupu správné řešení ještě neznáme, standardní kritérium konvergence používané v těchto iteračních metodách je, že změna iterované veličiny mezi po sobě následujícími iteracemi je velmi (dostatečně) malá, tj.

$$\left| \frac{J_\nu^{(n+1)} - J_\nu^{(n)}}{J_\nu^{(n)}} \right| \ll 1. \quad (7.38)$$

Iterační postup můžeme místo iterování střední intenzity J_ν pomocí vztahů (7.37) vyjádřit pomocí iterování vydatnosti S_ν . Pokud do rovnice pro vydatnost (například 7.25) dosadíme za J_ν vyjádření pomocí lambda operátoru, dostaneme rovnici

$$S_\nu = (1 - \varepsilon_\nu) \Lambda [S_\nu] + \varepsilon_\nu B_\nu. \quad (7.39)$$

s jejíž pomocí můžeme zavést iterační postup pro vydatnost S_ν ,

$$\begin{aligned} S_\nu^{(0)} &= B \\ S_\nu^{(n+1)} &= (1 - \varepsilon_\nu) \Lambda [S_\nu^{(n)}] + \varepsilon_\nu B_\nu. \end{aligned} \quad (7.40)$$

Jako kritérium konvergence použijeme stejný výraz jako v případě středních intenzit,

$$\left| \frac{S_\nu^{(n+1)} - S_\nu^{(n)}}{S_\nu^{(n)}} \right| \ll 1. \quad (7.41)$$

Pro tento případ se blíže podíváme na rychlost konvergence Λ -iterace. Vyjádříme S_ν z (7.39),

$$S_\nu = [1 - (1 - \varepsilon_\nu)\Lambda]^{-1} [\varepsilon_\nu B_\nu]. \quad (7.42)$$

Rozvineme operátor $[1 - (1 - \varepsilon_\nu)\Lambda]^{-1}$ v řadu,

$$\begin{aligned} [1 - (1 - \varepsilon_\nu)\Lambda]^{-1} &\approx \\ &\approx 1 + (1 - \varepsilon_\nu)\Lambda + (1 - \varepsilon_\nu)^2 \Lambda^2 + \dots + (1 - \varepsilon_\nu)^n \Lambda^n + \dots \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} [(1 - \varepsilon_\nu)\Lambda]^i \end{aligned} \quad (7.43)$$

Nyní můžeme zapsat hodnotu vydatnosti po n -té iteraci vztahem

$$S_\nu^{(n)} = \sum_{i=0}^n (1 - \varepsilon_\nu)^i \Lambda^i [\varepsilon_\nu B_\nu] \quad (7.44)$$

Pokud je $(1 - \varepsilon_\nu) \ll 1$, což je v případě slabého rozptylu, změny při jednotlivých iteracích rychle klesají a iterační procedura konverguje. Naopak pro $(1 - \varepsilon_\nu) \approx 1$, což je v případě silného rozptylu, jsou změny při jednotlivých iteracích zhruba stejné (byť malé), iterační procedura se stabilizuje a ke konvergenci je třeba extrémně velkého množství iterací.

Z uvedeného vyplývá, že Λ -iterace není vhodná iterační metoda pro silně rozptylující prostředí. Příčina je kromě výše uvedeného matematického zdůvodnění také fyzikální. Jeden iterační krok představuje šíření informace o jednu střední volnou dráhu fotonu. Při vysokém podílu rozptylu se informace šíří v prostředí pomalu. Je třeba vysoký počet středních volných drah než je foton absorbován. Důsledkem je velmi pomalá konvergence.

7.5.2 Metoda proměnných Eddingtonových faktorů

Metodu proměnných Eddingtonových faktorů navrhli pro řešení rovnice přenosu záření Auer and Mihalas (1970). Metoda je založena na iterativním určování Eddingtonových faktorů (3.40).

Zde si uvedeme konkrétní případ, kdy metoda proměnných Eddingtonových faktorů je použita spolu s Feautrierovým řešením v planparalelní atmosféře. Budeme řešit rovnici přenosu záření pro $j_{\nu\mu}$ (6.50) s okrajovými podmínkami (6.52) a známou vydatností (formální řešení). Pro Eddingtonův faktor (3.40) vyjádřený pomocí Schusterovy proměnné j platí

$$f_\nu^K \equiv \frac{K_\nu}{J_\nu} = \frac{\int_0^1 \mu^2 j_{\nu\mu} d\mu}{\int_0^1 j_{\nu\mu} d\mu}. \quad (7.45)$$

Na okrajích prostředí (pro $\tau = \tau_{\min}$ a $\tau = \tau_{\max}$) zavedeme **povrchový Eddingtonův faktor** vztahem (viz také Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 18.3)

$$f_\nu^H \equiv \frac{\int_0^1 \mu j_{\nu\mu} d\mu}{\int_0^1 j_{\nu\mu} d\mu} \Bigg|_{\tau_{\min}, \tau_{\max}}. \quad (7.46)$$

Při řešení využijeme i kombinovanou momentovou rovnici (3.41) s Eddingtonovým faktorem (7.45)

$$\frac{d^2(f_\nu^K J_\nu)}{d\tau_\nu^2} = J_\nu - S_\nu \quad (3.41)$$

a vydatností (7.8). Okrajové podmínky získáme vynásobením rovnic (6.52) úhlovým kosinem μ a jejich integrací přes μ v intervalu od 0 do 1,

$$\left. \frac{d(f_\nu^K J_\nu)}{d\tau_\nu} \right|_{\tau_{\min}} = f_\nu^H J_\nu(\tau_{\min}) - H_\nu^- \quad (7.47a)$$

$$\left. \frac{d(f_\nu^K J_\nu)}{d\tau_\nu} \right|_{\tau_{\max}} = H_\nu^+ - f_\nu^H J_\nu(\tau_{\max}), \quad (7.47b)$$

kde jsme využili povrchový Eddingtonův faktor (7.46). Povrchový Eddingtonův faktor se někdy zavádí jako $f_\nu^H(\tau_{\min}) = H_\nu(\tau_{\min})/J_\nu(\tau_{\min})$ (například Hubeny and Mihalas, 2014, kapitola 12.5), který se však od definice (7.46) liší o $2 \int_0^1 \mu I_{-\mu} d\mu$.

Okrajový tok na horním okraji H_ν^- a na spodním okraji H_ν^+ dostaneme integrací $I_{\nu\mu}^-$ a $I_{\nu\mu}^+$ přes μ v intervalu $\langle 0; 1 \rangle$,

$$H_\nu^- = \int_0^1 I_{\nu\mu}^- d\mu \quad (7.48a)$$

$$H_\nu^+ = \int_0^1 I_{\nu\mu}^+ d\mu \quad (7.48b)$$

Numerické řešení rovnice (3.41) s okrajovými podmínkami (7.47) se provádí jako řešení rovnice přenosu pro Feautrierovu proměnnou (viz také Příloha C.1).

Nyní můžeme zformulovat iterační postup pro řešení celé úlohy. Nejdříve určíme vydatnost S_ν , kterou buď vezmeme z předcházejícího iteračního kroku nebo (pokud začínáme výpočet) ji položíme rovnu například Planckově funkci. V prvním iteračním kroku pro tuto zadanou vydatnost S_ν řešíme rovnici (6.50) a určíme Feautrierovu intenzitu $j_{\nu\mu}$. V dalším kroku ze známé intenzity $j_{\nu\mu}$ spočteme Eddingtonovy faktory f_ν^K a f_ν^H s využitím vztahů (7.45) a (7.46). Následuje řešení momentové rovnice přenosu (3.41) s okrajovými podmínkami (7.47) pro zadané Eddingtonovy faktory, řešením je střední intenzita záření J_ν . V závěrečném kroku určíme relativní rozdíl J_ν mezi dvěma posledními iteracemi. Pokud je tento relativní rozdíl větší než hodnota, kterou jsme vybrali jako kritérium konvergence (například 10^{-4}), určíme novou vydatnost podle rovnice (7.25) a vracíme se zpět na první krok iteračního postupu, kdy řešíme rovnici (6.50) pro $j_{\nu\mu}$ se zadanou vydatností. Pokud je kritérium konvergence splněno, končíme výpočet.

Pro metodu proměnných Eddingtonových faktorů ve sférické geometrii použijeme momentovou rovnici druhého řádu (3.47) s Eddingtonovým činitelem (7.45), faktorem (funkcí) sféricnosti q_ν (3.43) a nezávislou proměnnou X_ν (3.45). Rovnici doplníme o okrajové podmínky

$$\left. \frac{d(f_\nu^K q_\nu J_\nu)}{dX_\nu} \right|_{\tau_{\min}} = r^2 [f_\nu^H J_\nu(\tau_{\min}) - H_\nu^-] \quad (7.49a)$$

$$\left. \frac{d(f_{\nu}^K q_{\nu} J_{\nu})}{dX_{\nu}} \right|_{\tau_{\max}} = r^2 [H_{\nu}^+ - f_{\nu}^H J_{\nu}(\tau_{\max})] \quad (7.49b)$$

v nichž okrajové toky H_{ν}^{\pm} jsou zavedeny stejně jako v planparalelním případě vztahy (7.48), stejný je i povrchový Eddingtonův faktor (7.46). Iterační postup je identický s planparalelním případem.

Kapitola 8

Srážkové procesy

podle Pradhan and Nahar (2011, kapitoly 3 a 5)

srážka elektronu (nebo jiné částice) s atomem nebo iontem:

- pružná (častější)
- nepružná
 - přímé procesy
 - nepřímé procesy – mohou vést k více různým výsledkům

zajímají nás účinné průřezy procesů

8.1 Srážková excitace a deexcitace

(Pradhan and Nahar, 2011, kapitola 3.2.3)

přímá excitace ze stavu X_l do stavu X_u



nepřímá excitace elektron v coulombickém poli při přiblížování k iontu získává kinetickou energii

Zde chybí obrázek

Obrázek 8.1: Dominantní atomární procesy v plazmatu: elektronová srážková excitace, fotoionizace, autoionizace, dielektronická rekombinace a zářivá rekombinace. Obrázek v Pradhan and Nahar (2011, obr. 3.5, str. 49).

8. SRÁŽKOVÉ PROCESY

elektronu musí po excitaci zbyít energie k úniku, jeho energie musí být $E = \frac{1}{2}mv^2 \geq E_{lu}$

pokud po excitaci nemá dost energie k úniku, zůstane vázaný v atomu/iontu, který bude ve dvojeexcitovaném stavu

poté dojde k autoionizaci (5.68) (výsledek je excitovaný stav) nebo k dielektronické rekombinaci (5.71b) (výsledek je iont s nižším nábojem – není to excitace, ale rekombinace)

(Pradhan and Nahar, 2011, kapitola 5.1)

- pro srážkovou excitaci neexistují výběrová pravidla
- **účinný průřez** (značení podle Pradhan and Nahar, 2011, rovnice 5.1)

$$\sigma(E) = \frac{\text{počet interagujících částic}}{\text{počet částic dopadajících na jednotkovou plochu}}$$

úhlově závislý, úhel rozptylu θ

elektrony rozptylovány do prostorového úhlu ϖ (kolem směru určeného rozptylovým úhlem θ , $d\varpi = \sin \theta d\theta d\phi$)

- **diferenciální účinný průřez** $d\sigma$

$$\frac{d\sigma(E, \theta)}{d\varpi} = |f(\theta)|^2$$

$f(\theta)$ – amplituda rozptylu (*scattering amplitude*)

celkový účinný průřez pro danou energii E – integrál přes všechny směry

$$\sigma(E) = \int \frac{d\sigma}{d\varpi} d\varpi$$

srážková síla (*collision strength*) Ω_{lu} , zavedl Menzel, pojmenoval Seaton (píší Pradhan and Nahar, 2011), bezrozměrná veličina

$$\sigma_{lu}(E) = \frac{\Omega_{lu}}{g_l k_l^2} (\pi a_0^2) \quad (8.2)$$

g_l – statistická váha dolní hladiny,

$E = k_l^2$ – energie dopadajícího elektronu v Rydberzích (viz kapitola B.1)

$\pi a_0^2 \approx 8.797 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2$, a_0 je Bohrovův poloměr

8. SRÁŽKOVÉ PROCESY

Ω_{lu} je na energii dopadajícího elektronu E jen slabě závislá (díky podělení energií dopadajícího elektronu)

přítomnost rezonancí v závislosti na energii elektronu (pro vyšší energie elektronu)
rozdílná forma pro neutrální atomy a pro ionty

$\sigma_{lu} = 0$ pro $E < E_{lu}$

kladné ionty coulombická síla (daleký dosah)

nenulový účinný průřez i pro energie trochu nižší než excitační energie (vliv přitažlivé coulombické síly, která elektron urychluje)

rezonance Rydbergova typu (hodně „ostrých“ rezonancí)

neutrální atomy účinný průřez pro $E \leq E_{lu}$ nulový

rezonance v blízkosti hraničních energií (*shape resonances*) – vlivem sil krátkého dosahu

složitější elektron-elektronové korelace (díky absenci coulombické síly)

obtížné i měření – nedá se fokusovat (zaostřit) elektronový paprsek coulombickou silou

nicméně pro nízké hladiny je poměrně dobrá shoda s teorií

nejsou v astronomii tolik důležité, většina hmoty je ionizovaná

efektivní srážková síla $\Upsilon(T)$ (Pradhan and Nahar, 2011, rovnice 5.31)

$\Omega(E)$ vystředovaná přes maxwellovské rozdělení rychlostí elektronů

$$\Upsilon(T) = \int_0^{\infty} \Omega_{lu}(E) e^{-\frac{E}{kT}} d\left(\frac{E}{kT}\right) \quad (8.3)$$

užitečná tam, kde nepotřebujeme explicitní závislost účinného průřezu na energii dopadajícího elektronu

škálování srážkové síly

$x = E/E_{ul}$ pro přechod $l \rightarrow u$

pro hladiny s LS vazbou přibližně platí (viz Pradhan and Nahar, 2011, kapitola 5.5)

- a) $\Omega(l, u) \sim \text{konst.}$ pro zakázané přechody (electrické kvadrupólové),
 $\Delta L \neq 1, \Delta S = 0$
- b) $\Omega(l, u) \sim x^{-2}$ pro přechody se změnou spinu $\Delta S \neq 0$
- c) $\Omega(l, u) \sim a \ln(4x)$, dovolené přechody, $\Delta L = 0, \pm 1, \Delta S = 0$
 $a \sim f_{lu}$

měření srážkové síly

nesnadné, většinou souhlasí s teoretickými výpočty na 10 – 20%

měření rezonancí je závislé na rozlišení paprsku dopadajících elektronů

data pro srážkovou excitaci v literatuře, existují „hodnocené kompilace“ (*evaluated compilations*), které kriticky hodnotí publikovaná data a doporučují nejlepší hodnoty (například Pradhan and Gallagher, 1992)

srážková deexcitace je inverzní proces ke srážkové excitaci
v termodynamické rovnováze platí detailní rovnováha

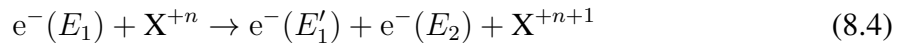
8.2 Srážková ionizace a rekombinace

(Pradhan and Nahar, 2011, kapitoly 3.2.6 a 5.8)

(Dopita and Sutherland, 2005, kapitola 5.1)

přímá ionizace iontu X^{+n} na iont $X^{+(n+1)}$

rozdílný mechanismus od excitace – problém tří těles (po interakci)



platí zákon zachování $E_1 = E'_1 + E_2 + E_{\text{ion}}$

E_1 – energie elektronu před ionizací;

E'_1 – energie ionizujícího elektronu po ionizaci;

E_2 – energie elektronu uvolněného ionizací;

E_{ion} – ionizační energie

elektrony po ionizaci korelované pro nízké energie (posrážková interakce)

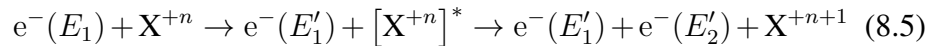
ovlivňuje účinný průřez pro energie dopadajícího elektronu blízké excitační energii

blízko ionizační hrany $\sigma \sim E^a$ (Wannierova relace), kde $a = 1.127$ pro ionizaci neutrálních atomů

přímá ionizace do vyšších hladin pro vyšší energie elektronů zvyšuje účinný průřez

alternativní autoionizační kanál (*excitation-autoionization*)

excitace do dvakrát excitovaného stavu s následnou autoionizací (5.68)



dvojitá autoionizace (*resonant excitation double autoionization – REDA*)

v případě, že výsledný stav po excitaci-autoionizaci je znovu dvakrát excitovaný, po autoionizaci



účinný průřez teoretický popis složitější než u excitace (problém tří těles), měření snadnější než pro excitaci (pouze jeden vázaný stav)

semiempirické vztahy (například Seaton, 1964; Lotz, 1967a,b, další v Pradhan and Nahar 2011), také kapitola 9.4

srážková rekombinace je inverzní proces ke srážkové ionizaci v termodynamické rovnováze platí detailní rovnováha v mezihvězdném prostředí je zanedbatelná

8.3 Další srážkové procesy

Výměna náboje

charge transfer (Pradhan and Nahar, 2011, kapitola 3.2.7), je to výměna elektronu mezi ionty, viz také Dopita and Sutherland (2005, kapitola 5.4) nejčastější proces je reakce s neutrálním vodíkem



a v mezihvězdném prostředí i s neutrálním heliem



ΔE je přebytek energie, který přejde do kinetické energie částic

zpětná reakce je možná jen v případě, že srážející se ionty mají dostatečně velkou kinetickou energii

8. SRÁŽKOVÉ PROCESY

důležitý příklad – rezonanční výměna náboje mezi O a H – přibližně stejná ionizační energie O I a H I (rezonanční výměna náboje – *resonant charge exchange*)
častý proces v oblasti nad ozonovou vrstvou Země



nerezonanční výměny náboje méně časté
výměna náboje i při srážkách s molekulami, například



účinné průřezy výměny náboje v Dopita and Sutherland (2005, kapitola 5.4)

Srážky s protony

výrazně menší účinný průřez

- proton je $1836\times$ těžší než elektron, takže $43\times$ pomalejší
- je odpuzován kladnými ionty

pro některé případy za vhodných teplot (vysokých – $kT_p \gg E_{\text{exc}}$, T_p je teplota protonů a E_{exc} je excitační energie daného přechodu) četnost může být značná

Srážky atomů a iontů s atomy nebo ionty

například excitace hladin jemné struktury neutrálních atomů srážkami s neutrálním vodíkem

srážky s protony, atomy, ionty a výměna náboje se považují za molekulární procesy

8.4 Augerovy procesy

(Pradhan and Nahar, 2011, kapitola 5.9)

- ionizace elektronu z vnitřní slupky (K) (srážkou nebo vysokoenergetickým zářením)
- výsledkem vysoce excitovaný iont s „dírou“ v K slupce
⇒ téměř všechny elektrony excitovány
pak může následovat

8. SRÁŽKOVÉ PROCESY

- autoionizace (uvolnění elektronu spojené s vyzářením energie, viz kapitola 5.4)
- zářivý rozpad
- fluorescence (postupná deexcitace, přechod jednotlivých elektronů do nižších energetických stavů)

zářivý rozpad: foton emitovaný při přechodu elektronu do nižší slupky může způsobit další ionizaci

existuje mnoho cest k opět stabilnímu atomu

příklad: po ionizaci z K slupky následuje přechod $L \rightarrow K$, potom může nastat:

- vyražení dalšího elektronu ze slupky L
energie vyraženého elektronu (Pradhan and Nahar, 2011, rovnice 5.46)

$$\Delta E_e = h\nu(L - K) - E_{\text{IP}}(L)$$

rozdíl mezi energií přechodu $L \rightarrow K$ a ionizační energií ze slupky L
zdroj elektronů s nízkou energií

- $L \rightarrow L$ (přechod uvnitř slupky), další ionizace M (přechod uvnitř jedné slupky vyrazí elektron z jiné slupky – Costerův-Kronigův proces)
- $N \rightarrow N$ (přechod uvnitř slupky), další ionizace N (přechod uvnitř jedné slupky vyrazí elektron z téže slupky – super-Costerův-Kronigův proces)

může vzniknout ionizační kaskáda

spojeno s postupnou deexcitací (fluorescence)

pomocí zářivých i autoionizačních přechodů

Kapitola 9

Obsazení energetických hladin atomů

Pro určení schopnosti hmoty absorbovat záření je nutná znalost dvou základních informací. Je třeba znát interakční vlastnosti hmoty se zářením pro jednotlivé druhy interakcí a množství interagující hmoty, tj. kolik jednotlivých částic hmota obsahuje. Interakční vlastnosti hmoty jsme probrali v kapitole 5, zde se budeme zabývat určením množství absorbujících částic.

To je dáno hustotou hmoty, jejím chemickým složením a její ionizační a excitační rovnováhou. První dvě veličiny, tj. hustotu ρ a chemické složení (abundance), budeme v této kapitole považovat za dané. Zabývat se budeme rozdělením mezi jednotlivé ionty a jejich energetické hladiny (stavy). Pro zadané chemické složení, celkovou hustotu a pro známé absorpční vlastnosti částic určuje toto rozdělení opacitu a je pro formování vystupujícího záření rozhodující. Můžeme je určit za předpokladu termodynamické rovnováhy nebo bez tohoto předpokladu.

9.1 Lokální termodynamická rovnováha

V termodynamické rovnováze platí kromě Maxwellova rozdělení rychlostí, Boltzmannova rozdělení excitačních stavů a Sahaova rozdělení ionizačních stavů také Planckovo rozdělení pro pole záření (4.44). Z pozorování hvězdných spekter ale víme, že jejich záření není popsáno rovnovážným Planckovým rozdělením a že obsahuje ionizační hrany a velké množství spektrálních čar. Proto rovnovážnou aproximaci pro pole záření můžeme těžko přijmout. Lze však předpokládat platnost termodynamické rovnováhy pro hodnotu teploty T a elektronové hustoty n_e v daném místě (lokálně), přičemž se obě veličiny mohou místo od místa měnit. Lokálně platí i rovnovážné rozdělení rychlostí částic, excitačních stavů a ionizační rovnováhy. Lokálně platí i rovnováha mezi vyzářenou a pohlcenou zářivou ener-

gií (Kirchhoffův zákon, rovnice 4.53). Přenos energie mezi vzájemně vzdálenými místy atmosféry *probíhá zářením* a intenzitu záření určíme řešením rovnice přenosu záření pro vydatnost vyplývající z Kirchoffova zákona, tj. rovnou Planckově funkci ($S_\nu = B_\nu$). V lokální termodynamické rovnováze (LTE) je tedy obsazení energetických stavů atomů určeno v termodynamické rovnováze, pole záření však musíme určit řešením rovnice přenosu záření.

9.1.1 Podmínky pro lokální termodynamickou rovnováhu a jejich porušení vlivem záření

V termodynamické rovnováze je četnost, kterou probíhá libovolný proces, stejná jako četnost, kterou probíhá proces k němu opačný. Této vlastnosti se říká *detailní rovnováha*. V termodynamické rovnováze musí platit detailní rovnováha jak pro srážkové, tak i pro zářivé procesy.

Zda hmota bude splňovat podmínky termodynamické rovnováhy či nikoli, závisí na četnostech jednotlivých interakcí vzájemně mezi částicemi a na četnostech interakcí mezi částicemi a zářením. *Pružné srážky* mezi částicemi ustavují rovnovážné rozdělení rychlostí. Celková kinetická energie srážejících se částic se při pružných srážkách zachovává a dochází pouze k přerozdělení hybnosti mezi nimi. Pružné srážky vedou k ustavení rovnovážného rozdělení rychlostí. Při *nepružných srážkách* mezi částicemi je část kinetické energie přeměněna na vnitřní energii částic (excitace) nebo naopak, vnitřní energie částic je přeměněna na kinetickou (deexcitace). Při nepružných srážkách může také dojít k vyrazení elektronu z iontu (ionizace) nebo k jeho zachycení (rekombinace). Při všech těchto procesech může dojít k porušení rovnovážného rozdělení rychlostí. Ve většině astronomických aplikací je frekvence pružných srážek vyšší než frekvence nepružných srážek, což zaručuje zachování rovnovážného rozdělení rychlostí. Proto můžeme považovat rozdělení rychlostí částic za rovnovážné. Pro rovnovážné rozdělení rychlostí vedou nepružné srážky k ustavení rovnovážného rozdělení i pro vnitřní energii částic. Rozdělení do excitačních a ionizačních stavů je tedy vlivem nepružných srážek také rovnovážné. Jednotlivé excitační a ionizační procesy jsou v detailní rovnováze.

Pokud pole záření není rovnovážné, což je případ hvězdných atmosfér i jiných vesmírných objektů, interakce mezi hmotou a zářením (těmto interakcím říkáme často zkráceně *zářivé procesy*) obecně v detailní rovnováze nejsou. Tyto procesy mají tendenci narušovat ionizační a excitační rovnováhu. Naopak srážkové excitace, deexcitace, ionizace a rekombinace (zkráceně často *srážkové procesy*) mají tendenci ionizační a excitační rovnováhu ustavovat. Mezi srážkové procesy počítáme i zářivou rekombinaci (jde o interakci fotonu, iontu a elektronu, poslední dvě částice se “srazí”) a volně-volné přechody (jde vlastně o srážku iontu a elektronu).

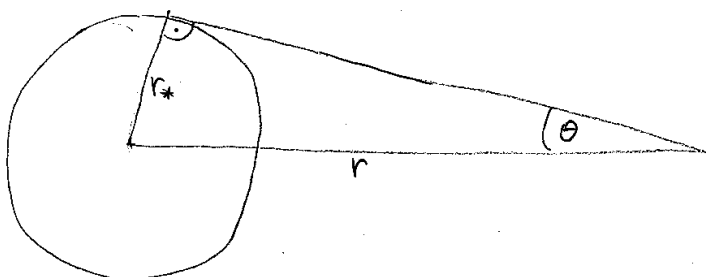
Lokální a nelokální pole záření V případě, že pole záření má rovnovážné rozdělení, jsou i zářivé procesy v detailní rovnováze. V hlubokých vrstvách hvězdných atmosfér, kde pro šíření záření můžeme použít difúzní přiblížení (viz kapitola 6.1), je odchylka pole záření od rovnovážného stavu poměrně malá. Proto v této oblasti zářivé procesy nenarušují příliš lokální termodynamickou rovnováhu a tato je pro popis této oblasti poměrně vhodná.

Pokud však difúzní přiblížení neplatí, získáme pole záření řešením rovnice přenosu záření. Takové záření již není rovnovážné a tím i přiblížení lokální termodynamické rovnováhy není vhodné. Další vlastností takového záření (nejen ve hvězdných atmosférách) je jeho nelokálnost. Díky nezanedbatelné střední volné dráze fotonu nelze záření považovat za lokální veličinu. Záření mohou být propojena místa od sebe velmi vzdálená. Tím se může snadno stát, že teplota záření v daném místě (daná teplotou vystupující v Planckově funkci 4.44) může být dosti různá od lokální elektronové teploty (dané Maxwellovým rozdělením rychlostí 4.13). Záření může způsobovat ohřev nebo ochlazování.

Anizotropie záření ve hvězdných atmosférách Záření vycházející z hvězd a z jiných vesmírných objektů musí být vně těchto objektů anizotropní. Tuto anizotropii můžeme charakterizovat geometrickou veličinou nazývanou **faktor zředění** (*dilution factor*) a označovanou W . Z každého bodu vně hvězdy je hvězda vidět pod prostorovým úhlem $\varpi_* < 4\pi$. Tento úhel použijeme pro definici faktoru zředění,

$$W = \frac{\varpi_*}{4\pi}. \quad (9.1)$$

Je-li r_* je poloměr zářícího povrchu hvězdy a r je vzdálenost k pozorovateli od středu hvězdy, můžeme vyjádřit prostorový úhel jako $\varpi_* = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\theta \sin \theta' d\theta' =$



Obrázek 9.1: Schéma pro výpočet faktoru zředění (r_* je poloměr hvězdy, r je vzdálenost od středu hvězdy)

$2\pi(1 - \cos \theta)$, přičemž $\sin \theta = r_*/r$ (viz obrázek 9.1). Odtud dostaneme pro faktor zředění vztah

$$W = \frac{1}{2} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{r_*}{r}\right)^2} \right] \quad (9.2)$$

Na povrchu hvězdy ($r = r_*$) je faktor zředění $W = \frac{1}{2}$.

Faktor zředění můžeme použít pro přibližné vyjádření střední intenzity záření i ve hvězdných atmosférách, protože v nich platí, že $r > r_*$. V nich je vždy $W < \frac{1}{2}$, s rostoucí vzdáleností od povrchu hvězdy W klesá. V planetárních mlhovinách ozařovaných centrální hvězdou je $W \ll 1$. Pro termodynamickou rovnováhu však potřebujeme $W = 1$, aby záření mělo rovnovážnou hodnotu. Anizotropie záření rovněž významně přispívá k nekorektnosti předpokladu lokální termodynamické rovnováhy.

Rozdělení rychlostí elektronů Jelikož dominantní zastoupení ve hvězdných atmosférách mají volné elektrony, je základní podmínkou pro použitelnost lokální termodynamické rovnováhy lokální platnost rovnovážného (Maxwellova) rozdělení jejich rychlostí. Ta bude zajištěna, pokud budou pružné srážky mezi elektrony převažovat nad nepružnými. Nepružné srážky (vázaně-vázané, vázaně-volné a volně-volné srážkové atomární přechody) sice nastavují rovnováhu v excitaci a ionizaci (Sahovo-Boltzmannovo rozdělení), ale za cenu porušení rovnovážného rozdělení rychlostí. Pokud však mezi dvěma nepružnými srážkami bude dostatek pružných, rovnovážné rozdělení rychlostí se vrátí zpět. Tato podmínka naštěstí ve hvězdných atmosférách platí. **Relaxační doba** (doba potřebná k obnovení rovnovážného rozdělení rychlostí) je mnohem menší než časový interval mezi dvěma následujícími nepružnými srážkami. Existují však situace, kdy je elektronů méně nebo kdy dochází k velkým odchýlkám od Maxwellova rozdělení (například na Slunci v případě elektronových svazků v erupcích). V těchto případech je třeba řešit Boltzmannovu kinetickou rovnici pro elektrony (např. Chevalier, 2001; Scudder, 1992, 1994; Shoub, 1977a,b).

Neplatnost lokální termodynamické rovnováhy Rozhodující informací pro to, jestli je aproximace lokální termodynamické rovnováhy pro dané prostředí vhodná, je porovnání účinnosti srážkových a zářivých procesů při ionizaci, excitaci a deexcitaci. Ukazuje se (viz například rozsáhlou diskusi v učebnici Mihas, 1978), že zejména pro atmosféry horkých hvězd je účinnost zářivých procesů velmi vysoká. Proto není lokální termodynamická rovnováha pro studium hvězdných atmosfér obecně přijatelná aproximace.

Úlohou této kapitoly bude zavést metodu, která umožní určit rozdělení excitačních a ionizačních stavů v případě, že zářivé procesy jsou významné a nelze

Tabulka 9.1: Schematická tabulka vyjadřující určení rozdělení záření, rychlostí, excitací a ionizací za předpokladu termodynamické rovnováhy (TE), lokální termodynamické rovnováhy (LTE) a předpokladu NLTE. Zpracováno podle Hubený (1976, kapitola 6).

	rychlosti	ionizace a excitace (obsazení energetických hladin)	záření
TE	rovnovážné (Maxwellovo rozdělení)	rovnovážné (Sahovo a Boltzmannovo rozdělení)	rovnovážné (Planckovo rozdělení)
LTE	rovnovážné (Maxwellovo rozdělení)	rovnovážné (Sahovo a Boltzmannovo rozdělení)	řešením rovnice přenosu záření, vydatnost $S = B$
NLTE	rovnovážné (Maxwellovo rozdělení)	řešením rovnic kinetické (statistické) rovnováhy	řešením rovnice přenosu záření, vydatnost S je obecná

je jednoduše zanedbat. Pro určení excitační a ionizační rovnováhy nebude stačit použít poměrně jednoduché Sahovo-Boltzmannovo rozdělení, ale bude nutné řešit **rovnice kinetické rovnováhy** (často nazývané rovnice statistické rovnováhy), v nichž je zahrnut i vliv záření.

Pro studium interakce hmoty se zářením v případech, že nelze použít přiblížení lokální termodynamické rovnováhy (LTE) se v literatuře běžně používá označení **non-LTE** nebo **NLTE**. Toto označení někdy může vést k nesprávným interpretacím fyzikálního stavu, protože zejména zkratka non-LTE přímo vyzývá k použití nesprávného slovního spojení „nelokální termodynamická rovnováha“ (non-local thermodynamic equilibrium). Tento název však nepopisuje skutečnost správně, protože termodynamická rovnováha pro rozdělení excitačních a ionizačních stavů neexistuje (ani lokální, ani nelokální), ale je nahrazena kinetickou (statistickou) rovnováhou. Zkratky non-LTE a NLTE je lépe chápat jako označení *jakékoli* odchylky od předpokladu lokální termodynamické rovnováhy (viz Hubený and Mihalas, 2014, kapitola 9.1). Fyzikální obsah obsah pojmů TE, LTE a NLTE je stručně popsán v tabulce 9.1.

9.2 Rovnice kinetické rovnováhy

Z rovnic pro časový vývoj matice hustoty (viz například Cooper et al., 1982) vyplývá, že pokud budeme uvažovat pouze čisté stavy (tj. její diagonální členy), tak pro změnu koncentrace částic ve stavu i každého atomu (nebo molekuly) v atmosféře platí

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (n_i \mathbf{v}) = \sum_{j \neq i} (n_j P_{ji} - n_i P_{ij}), \quad (9.3)$$

kde P_{ij} je **četnost přechodu** (*transition rate*) ze stavu i do stavu j a je úměrná pravděpodobnosti přechodu ze stavu i do stavu j za jednotku času. Sečtením (9.3) přes všechny energetické stavy prvku k dostaneme rovnici kontinuity pro prvek k (N_k je jeho koncentrace),

$$\frac{\partial N_k}{\partial t} + \nabla \cdot (N_k \mathbf{v}) = 0. \quad (9.4)$$

Vynásobíme-li rovnici (9.4) hmotností m_k jednotlivých prvků a sečteme-li přes všechna k , dostaneme rovnici kontinuity,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (9.5)$$

kde hustota $\rho = \sum_k m_k N_k$.

V časově nezávislém případě ($\partial/\partial t = 0$) se rovnice (9.3) zjednoduší na tvar

$$\nabla \cdot (n_i \mathbf{v}) = \sum_{j \neq i} (n_j P_{ji} - n_i P_{ij}) \quad (9.6)$$

a ve statickém případě ($\mathbf{v} = 0$) na

$$\sum_{j \neq i} (n_j P_{ji} - n_i P_{ij}) = \sum_{j \neq i} n_j P_{ji} - n_i \sum_{j \neq i} P_{ij} = 0. \quad (9.7)$$

Poznamenejme ještě, že detailní rovnováha nastane, když pro každé i, j platí $n_j P_{ji} = n_i P_{ij}$. V další části se budeme zabývat otázkou určení četností přechodu P_{ij} . Jak jsme zmínili v předcházející diskusi, přechody mezi jednotlivými stavy mohou být způsobeny zářením (četnosti označíme R_{ij}) nebo srážkami s jinými částicemi (četnosti označíme C_{ij}), přičemž platí

$$P_{ij} = R_{ij} + C_{ij}. \quad (9.8)$$

Odchyly od LTE populací, b -faktory

Řešením rovnic kinetické rovnováhy získáme koncentrace atomů v daných energetických stavech, které obecně nebudou rovnovážné. Odchylku od rovnovážných hodnot často popisujeme pomocí veličiny zvané **koeficient odchyly** (*departure coefficient*)¹, častěji však s ohledem na její ustálené značení **b -faktor**. Tato veličina je pro hladinu l zavedena vztahem

$$b_l = \frac{n_l}{n_l^*} \quad (9.9)$$

¹Dopita and Sutherland (2005, rovnice 5.13) používají označení occupation factor.

kde n_l je nerovnovážná hodnota koncentrace l a n_l^* je její rovnovážná hodnota. Používají se dvě odlišné definice závislé na tom, jak se chápe hodnota n_l^* . Menzel (1937) zavedl b -faktory jako odchylku od termodynamické rovnováhy. V tomto pojetí je n_l^* koncentrace atomu ve stavu l , která by byla za předpokladu termodynamické rovnováhy. Mihalas (1978) naopak používá definici (5.22), podle níž je n_l^* určeno ze Sahovy a Boltzmannovy rovnice vzhledem k aktuálnímu obsazení základní hladiny nejbližšího vyššího iontu, které nemusí mít rovnovážnou hodnotu. Tato druhá definice sice nevystihuje změnu, ke které dojde při opuštění předpokladu LTE, ale má široké využití v modelování hvězdných atmosfér.

9.3 Četnost zářivých přechodů

V této části se budeme zabývat pravděpodobnostmi přechodů mezi dvěma energetickými stavy atomu způsobenými zářením. Takovým přechodům se běžně říká **zářivé přechody** (*radiative transitions*).

Absorbovaná energie při přechodech (absorpcích) ze stavu l s nižší energií do stavu m (vázaného i volného) s vyšší energií způsobených zářením o intenzitě I_ν ve frekvenčním intervalu $d\nu$ z prostorového úhlu $d\varpi$ je $n_l \alpha_{lm}(\nu) I_{\nu, \nu} d\nu d\varpi$, kde $\alpha_{lm}(\nu)$ absorpční účinný průřez přechodu $l \rightarrow m$ (5.41) a n_l je koncentrace částic ve stavu l . Protože nás zajímá celkový efekt způsobený zářením dopadajícím ze všech směrů, zintegrujeme výraz přes úhly a pro monochromatickou absorbovanou energii dostaneme $n_l 4\pi \alpha_{lm}(\nu) J_\nu d\nu$. Počet přechodů dostaneme podělením energií fotonu. Celkový počet přechodů $l \rightarrow m$ za jednotku času pak získáme integrací přes frekvence

$$n_l R_{lm} = n_l 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{lm}(\nu)}{h\nu} J_\nu d\nu, \quad (9.10)$$

kde jsme zavedli veličinu R_{lm} jako **četnost zářivého přechodu** (*radiation transition rate*) $l \rightarrow m$. Vztahy pro inverzní procesy $m \rightarrow l$ se budou lišit v závislosti na tom, jestli se jedná o přechod do vázaného nebo do volného stavu, proto obě možnosti probereme odděleně.

9.3.1 Vázaně-vázané přechody

Absorpční přechody Četnost absorpcí v čáře při přechodu z vázaného stavu l s nižší energií do vázaného stavu u s vyšší energií označíme R_{lu} . Počet přechodů v jednotkovém objemu $n_l R_{lu}$ je dán vztahem (9.10) a dostaneme ho také z rovnice (5.1) integrací přes $d\varpi$ a $d\nu$ a s využitím (5.13),

$$n_l R_{lu} = n_l B_{lu} \int_0^\infty \phi_\nu J_\nu d\nu = n_l 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{lu}(\nu)}{h\nu} J_\nu d\nu, \quad (9.11)$$

kde ϕ_ν je profil čáry (viz kapitola 5.3). Pomocí integrované střední intenzity v přechodu $l \leftrightarrow u$ (srovnej s 6.23)

$$\bar{J}_{lu} = \int_0^\infty \phi_\nu J_\nu d\nu \quad (9.12)$$

můžeme celkovou četnost absorpcí v čáře vyjádřit také jako

$$n_l R_{lu} = n_l B_{lu} \bar{J}_{lu}. \quad (9.13)$$

Integrál absorpčního průřezu přes frekvence označíme α_{lu} . S využitím faktu, že plná šířka v polovině maxima absorpčního profilu je mnohem menší než frekvence přechodu, můžeme nahradit frekvenci v integrálu přes profil její hodnotou pro střed čáry $h\nu_{lu}$, čímž dostaneme

$$\alpha_{lu} = \int_0^\infty \alpha_{lu}(\nu) d\nu = \int_0^\infty \frac{h\nu}{4\pi} B_{lu} \phi(\nu) d\nu \approx \frac{h\nu_{lu}}{4\pi} B_{lu}. \quad (9.14)$$

Pak můžeme vyjádřit celkovou četnost absorpcí v jednotkovém objemu *přibližně* také jako (viz Mihalas, 1978, rovnice 5-53),

$$n_l R_{lu} \approx n_l 4\pi \alpha_{lu} \frac{\bar{J}_{lu}}{h\nu_{lu}}. \quad (9.15)$$

Vztahy (9.11), (9.13) a (9.15) jsou jen různými vyjádřeními pro četnost zářivých excitací v jednotkovém objemu.

Emisní přechody Pro určení četnosti emisí musíme uvážit dva způsoby emise, spontánní emisi a stimulovanou emisi. Celkovou četnost stimulovaných emisí získáme s využitím (5.8b) podobně jako vztah (9.11)

$$\begin{aligned} n_u R_{ul}^{\text{stim}} &= n_u B_{ul} \int_0^\infty \phi_\nu J_\nu d\nu \\ &= n_u \frac{g_l}{g_u} B_{lu} \int_0^\infty \phi_\nu J_\nu d\nu = n_u \frac{g_l}{g_u} 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{lu}(\nu)}{h\nu} J_\nu d\nu \end{aligned} \quad (9.16)$$

nebo pomocí (9.12) také jako

$$n_u R_{ul}^{\text{stim}} = n_u B_{ul} \bar{J}_{lu} = n_u \frac{g_l}{g_u} B_{lu} \bar{J}_{lu}, \quad (9.17)$$

případně pomocí (9.14) získáme přibližný vztah

$$n_u R_{ul}^{\text{stim}} \approx n_u \frac{4\pi}{h\nu_{lu}} \frac{g_l}{g_u} \alpha_{lu} \bar{J}_{lu}. \quad (9.18)$$

Podobně dostaneme i celkovou četnost spontánních emisí

$$n_u R_{ul}^{\text{spont}} = n_u A_{ul} = n_u \frac{2h\nu_{lu}^3}{c^2} B_{ul} = n_u \frac{g_l}{g_u} \frac{2h\nu_{lu}^3}{c^2} B_{lu} \quad (9.19)$$

Výraz $(2h\nu_{lu}^3)/c^2$ můžeme vsunout pod integrál profilu ϕ_ν přes frekvence (který je roven 1) a opět s využitím faktu, že plná šířka čáry v polovině maxima profilu je mnohem menší než její frekvence, můžeme provést záměnu $\nu_{lu} \rightarrow \nu$. Po úpravách dostaneme

$$\begin{aligned} n_u R_{ul}^{\text{spont}} &= n_u A_{ul} \int_0^\infty \phi_\nu d\nu \approx n_u B_{ul} \int_0^\infty \frac{2h\nu^3}{c^2} \phi_\nu d\nu \\ &= n_u \frac{g_l}{g_u} B_{lu} \int_0^\infty \frac{2h\nu^3}{c^2} \phi_\nu d\nu = n_u \frac{g_l}{g_u} 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{lu}(\nu)}{h\nu} \frac{2h\nu^3}{c^2} d\nu \end{aligned} \quad (9.20)$$

případně pomocí (9.14) také přibližně jako

$$n_u R_{ul}^{\text{spont}} \approx n_u \frac{4\pi}{h\nu_{lu}} \frac{2h\nu_{lu}^3}{c^2} \frac{g_l}{g_u} \alpha_{lu}. \quad (9.21)$$

Celkovou četnost emisí dostaneme jako součet stimulovaných emisí (9.17) a spontánních emisí (9.21)

$$n_u R_{ul} = n_u (A_{ul} + B_{ul} \bar{J}_{lu}), \quad (9.22)$$

případně pomocí (9.16) a (9.20) jako

$$n_u R_{ul} \approx n_u \frac{g_l}{g_u} 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{lu}(\nu)}{h\nu} \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} + J_\nu \right) d\nu \quad (9.23)$$

Mihalas (1978) dává přednost využití Boltzmannovy excitační rovnice (4.5), s jejíž pomocí lze vztah (9.23) přepsat

$$n_u R_{ul} \approx n_u \left(\frac{n_l}{n_u} \right)^* 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{lu}(\nu)}{h\nu} \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} + J_\nu \right) \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) d\nu. \quad (9.24)$$

Jak uvidíme dále, tato forma je stejná jako vztah pro četnost rekombinací (9.33).

9.3.2 Vázaně-volné přechody

V této části se budeme zabývat přechody mezi vázanými stavy l a volnými stavy k daného atomu.

Fotoionizace Pro fotoionizaci atomu z vázaného stavu l (s nižší energií) do volného stavu k (s vyšší energií) ze vztahu (9.10) dostáváme

$$n_l R_{lk} = n_l 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{\text{bflk}}(\nu)}{h\nu} J_\nu d\nu, \quad (9.25)$$

kde $\alpha_{\text{bflk}}(\nu)$ je odpovídající fotoionizační absorpční účinný průřez, který můžeme pro frekvence menší než ionizační hrana ν_{0lk} položit rovný 0.

Fotorekombinace Pro odvození vztahu pro četnost fotorekombinačních přechodů využijeme výsledky z kapitoly 5.1.2. Při rekombinaci dochází k zachycení elektronu iontem, jedná se tedy v podstatě o srážkový proces. Napíšeme nejdříve četnost fotorekombinačních přechodů pro případ termodynamické rovnováhy. V tomto případě je střední intenzita záření rovna Planckově funkci ($J_\nu = B_\nu$) a kvůli platnosti detailní rovnováhy je celkový počet fotoionizací stejný jako celkový počet rekombinací²,

$$(n_k R_{kl})^* = (n_l R_{lk})^* = n_l^* 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{\text{bflk}}(\nu)}{h\nu} B_\nu d\nu. \quad (9.26)$$

Pravou stranu můžeme přepsat odečtením a přičtením členu obsahujícího $\exp[-h\nu/(kT)]$,

$$\begin{aligned} (n_k R_{kl})^* &= n_l^* 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{\text{bflk}}(\nu)}{h\nu} B_\nu \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) \right] d\nu \\ &\quad + n_l^* 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{\text{bflk}}(\nu)}{h\nu} B_\nu \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) d\nu. \end{aligned} \quad (9.27)$$

První člen na pravé straně odpovídá spontánní rekombinaci (srovnej s rovnicí 5.20, která je psaná pro energii), druhý stimulované rekombinaci. Četnost *spontánních rekombinací v termodynamické rovnováze* získáme z rovnice (5.20) zobecněné pro libovolnou hladinu l , jejím vydělením energií fotonu $h\nu$ a integrací přes frekvence

$$(n_k R_{kl})_{\text{spont}}^* = n_l^* 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{\text{bflk}}(\nu)}{h\nu} B_\nu \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) \right] d\nu, \quad (9.28)$$

což je přesně první člen na pravé straně rovnice (9.27). Pomocí Planckovy funkce (4.44) můžeme upravit

$$(n_k R_{kl})_{\text{spont}}^* = n_l^* 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{\text{bflk}}(\nu)}{h\nu} \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) d\nu. \quad (9.29)$$

²Hvězdička označuje rovnovážné hodnoty.

Jelikož rekombinace je srážkový proces zahrnující elektrony a ionty, je jeho četnost úměrná součinu $n_e n_k$. Pro danou teplotu T (a tím i rozdělení rychlostí) vztah platí po vydělení n_k^* pro jeden iont bez ohledu na předpoklad termodynamické rovnováhy. Proto pro získání počtu spontánních rekombinací v obecném případě stačí vynásobit rovnici (9.29) podílem n_k/n_k^* .

$$(n_k R_{kl})_{\text{spont}} = n_k \left(\frac{n_l^*}{n_k^*} \right) 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{\text{bf}lk}(\nu)}{h\nu} \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) d\nu. \quad (9.30)$$

Stimulovaná rekombinace v termodynamické rovnováze je dána druhým členem na pravé straně rovnice (9.27),

$$(n_k R_{kl})_{\text{stim}}^* = n_l^* 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{\text{bf}lk}(\nu)}{h\nu} B_\nu \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) d\nu. \quad (9.31)$$

Počet stimulovaných rekombinací v obecném případě dostaneme opět vynásobením rovnice (9.31) podílem n_k/n_k^* a nahrazením rovnovážné hodnoty intenzity záření (Planckovy funkce) aktuální hodnotou střední intenzity záření J_ν ,

$$(n_k R_{kl})_{\text{stim}} = n_k \left(\frac{n_l^*}{n_k^*} \right) 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{\text{bf}lk}(\nu)}{h\nu} J_\nu \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) d\nu \quad (9.32)$$

Výslednou četnost rekombinačních přechodů dostaneme sečtením rovnic (9.30) a (9.32),

$$\begin{aligned} n_k R_{kl} &= n_k (R_{kl,\text{spont}} + R_{kl,\text{stim}}) \\ &= n_k \underbrace{\left(\frac{n_l^*}{n_k^*} \right)}_{n_e \Phi_{lk}(T)} 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{\text{bf}lk}(\nu)}{h\nu} \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} + J_\nu \right) \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) d\nu \end{aligned} \quad (9.33)$$

Podíl $n_l^*/n_k^* = n_e \Phi_{lk}(T)$, což je rovnice (4.23), v níž je Φ_{lk} jinak označený Sahův-Boltzmannův faktor (4.24). Rekombinace tedy závisejí na elektronové hustotě n_e , na hustotě iontů n_k a na zbytku, který je funkcí teploty. Ten označíme $\alpha_R(T)$ a budeme mu říkat **rekombinační koeficient**,

$$n_k R_{kl} = n_k n_e \alpha_R(T). \quad (9.34)$$

Rekombinační koeficient se často používá při formulaci rovnic kinetické rovnováhy pro prostředí mlhovin.

Kromě výše zmíněných ionizací a rekombinací mohou hrát důležitou úlohu v ionizační rovnováze složitější procesy autoionizace a dielektronové rekombinace (viz kapitola 5.4), jejichž započtení do četností zářivých procesů zde však nebudeme rozebírat.

9.3.3 Celková četnost zářivých přechodů

Ze vztahů (9.11) a (9.25) dostáváme pro počet absorpcí (přechodů z nižšího (l) do vyššího (u) energetického stavu) v jednotkovém objemu výraz $n_l R_{lu}$, kde četnost

$$R_{lu} = 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{lu}(\nu)}{h\nu} J_\nu d\nu. \quad (9.35a)$$

Podobně ze vztahů (9.24) a (9.33) dostaneme pro počet emisí (přechodů z vyššího (u) do nižšího (l) energetického stavu) v jednotkovém objemu výraz $n_u (n_l^*/n_u^*) R_{ul}$, kde četnost

$$R_{ul} = 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{lu}(\nu)}{h\nu} \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} + J_\nu \right) \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) d\nu. \quad (9.35b)$$

9.4 Četnost srážkových přechodů

Atomy mohou přecházet mezi svými jednotlivými energetickými stavy také vlivem srážek s jinými částicemi, například s elektrony, atomy nebo molekulami. Srážky s těžšími částicemi jsou méně časté. Kromě toho je i poměr tepelné rychlosti elektronů k tepelné rychlosti iontů $v_{th,e}/v_{th,i} \approx 43\sqrt{A}$. Proto se můžeme v prvním přiblížení omezit pouze na nepružné srážky s elektrony.

Pro **četnost excitačního nebo ionizačního srážkového přechodu** (přechodu ze stavu o nižší energii do stavu o vyšší energii) můžeme psát (abychom předešli používání stejných písmen pro různé veličiny, budeme v této podkapitole horní hladinu přechodu místo u značit m)

$$n_l C_{lm} = n_l n_e \int_{v_0}^\infty \sigma_{lm}(v) f(v) v dv \quad (9.36)$$

kde $\sigma_{lm}(v)$ je účinný průřez srážkového přechodu $l \rightarrow m$ (je funkcí rychlosti elektronu) a $f(v)$ je rozdělení rychlostí elektronů. Zavedeme-li **koeficient srážkové četnosti** (*collisional rate coefficient*, Pradhan and Nahar, 2011, kapitola 8.1.1),

$$q_{lm}(T) = \int_{v_0}^\infty \sigma_{lm}(v) f(v) v dv \quad (9.37)$$

který dostaneme integrací účinného průřezu přes rovnovážné (Maxwellovo) rozdělení rychlostí elektronů, můžeme četnost srážkového excitačního nebo ionizačního přechodu zapsat jako

$$C_{lm} = n_e q_{lm}(T). \quad (9.38)$$

Pro četnost srážkového deexcitačního a rekombinačního přechodu v případě termodynamické rovnováhy platí podmínka detailní rovnováhy (n_l^* , n_m^* značí rovnovážné hodnoty koncentrací)

$$n_m^* C_{ml} = n_l^* C_{lm}, \quad (9.39)$$

z níž dostaneme pro četnost srážkového deexcitačního a rekombinačního přechodu vztah

$$n_m C_{ml} = n_m \left(\frac{n_l^*}{n_m^*} \right) C_{lm}. \quad (9.40)$$

Samotnou deexcitační a rekombinační srážkovou četnost můžeme vyjádřit pomocí koeficientu srážkové četnosti,

$$C_{ml} = \left(\frac{n_l^*}{n_m^*} \right) n_e q_{lm}(T). \quad (9.41)$$

Problémem ve výpočtu srážkových četností je určení účinného průřezu σ_{lm} . V zásadě existují dva způsoby určení, buď experimentálně nebo s použitím kvantové mechanických výpočtů. Ve většině astronomických aplikací nás zajímá spíše hodnota středovaná přes maxwellovské rozdělení ($q_{lm}(T)$) než $\sigma_{lm}(v)$ jako funkce rychlosti elektronů.

Určení koeficientu srážkové četnosti Srážkový účinný průřez závisí na energii dopadajícího fotonu a často se vyjadřuje jako funkce πa_0^2 (a_0 je Bohrov poloměr) ve tvaru $\sigma_{lm} = \pi a_0^2 Q_{lm}$. Veličina Q_{lm} je často tabelována jako funkce kinetické energie dopadající částice $E = \frac{1}{2}mv^2$. Někdy se místo Q používá veličina Ω (rovnice 8.2), kde se pro vyjádření energie používají Rydberg.

Dosadíme za rychlost do (9.37) a za $f(v)$ použijeme maxwellovské rozdělení rychlostí (4.13). Po úpravách dostaneme vztah

$$q_{lm}(T) = C_0 \sqrt{T} \int_{u_0}^{\infty} Q_{lm}(ukT) u e^{-u} du, \quad (9.42)$$

kde $u = E/(kT)$, $C_0 = \pi a_0^2 \sqrt{8kT/(m\pi)} \doteq 5.5 \cdot 10^{-11}$ a $u_0 = E_{lm}/(kT)$ odpovídá energii přechodu $l \leftrightarrow m$. Zavedeme-li $x = u - u_0$, můžeme převést rovnici (9.42) na tvar

$$q_{lm}(T) = C_0 \sqrt{T} \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right) \Gamma_{lm}(T) \quad (9.43)$$

kde

$$\Gamma_{lm}(T) = \int_0^{\infty} Q_{lm}(E_0 + xkT)(x + u_0) e^{-x} dx \quad (9.44)$$

je pomalu se měnící funkce T . Koeficient srážkové četnosti lze také vyjádřit pomocí efektivní srážkové síly (8.3), která využívá vyjádření energií v Rydberzích (viz Pradhan and Nahar 2011, rovnice 5.32 a Hubeny and Mihalas 2014, rovnice 9.57),

$$q_{lm}(T) = \frac{8.63 \times 10^{-6}}{g_l \sqrt{T}} \exp\left(-\frac{E_{lm}}{kT}\right) \Upsilon(T). \quad (9.45)$$

Hodnoty Υ jsou často tabelovány, jejich použití je pak jednoduché. Pro některé ionty (například H I, He I, He II) jsou dostupná měření. V těchto případech je možné na základě měřených dat zformulovat přibližné analytické závislosti.

Přibližné vztahy pro excitace a ionizace Pro dovolené vázaně vázané srážkové přechody lze použít přibližný výraz (van Regemorter 1962, viz také Mihalas 1978, rovnice 5.75 a Hubeny and Mihalas 2014, rovnice 9.58)

$$q_{lm} = C_0 \sqrt{T} \left[14.5 f_{lm} \left(\frac{I_H}{E_0} \right)^2 \right] u_0 e^{-u_0} \Gamma(u_0), \quad (9.46)$$

kde I_H je ionizační energie vodíku,

$$\Gamma(u_0) = \max \left[\bar{g}, \frac{\sqrt{3}}{2\pi} e^{u_0} E_1(u_0) \right], \quad (9.47)$$

E_1 je exponenciální integrální funkce (viz Příloha A.1) a

$$\begin{aligned} \bar{g} &= 0.7 & nl &\rightarrow nl' \\ &= 0.2 & nl &\rightarrow n'l'. \end{aligned} \quad (9.48)$$

Pro ionizační srážkové přechody lze použít přibližný výraz nazývaný Seatonův, který je založen na Seatonově aproximaci účinného průřezu Q_{lk} (Seaton, 1962, rovnice (147)) a který je uveden i s odvozením v Jefferies (1968, rovnice 6.39) a bez odvození v Mihalas (1978, rovnice 5-79) a Hubeny and Mihalas (2014, rovnice 9.60),

$$q_{lk} = 1.55 \cdot 10^{13} \frac{1}{\sqrt{T}} \bar{g}_l \alpha_{\text{bf}}(\nu_0) \frac{e^{-u_0}}{u_0} \quad (9.49)$$

kde

$$\begin{aligned} \bar{g}_l &= 0.1 & \text{pro } Z &= 1 \\ &= 0.2 & Z &= 2 \\ &= 0.3 & Z &> 2 \end{aligned} \quad (9.50)$$

Další vztahy pro srážkové excitace ionizace a odkazy na ně lze najít v učebnici Hubeny and Mihalas (2014, kapitola 9.3) a především v Pradhan and Nahar (2011, kapitola 5).

9.5 Soustava rovnic kinetické rovnováhy

Pro každý energetický stav (hladinu $i, i = 1, \dots, L$) můžeme napsat rovnici

$$n_i \sum_m (R_{im} + C_{im}) - \sum_m n_m (R_{mi} + C_{mi}) = 0. \quad (9.51)$$

Sečtením přes i (všech L hladin) dostaneme $0 = 0$, jedná se tedy o lineárně závislé rovnice. Abychom mohli z těchto rovnic určit obsazení energetických hladin, musíme soustavu doplnit nějakou další nezávislou rovnicí. Rovnice (9.51) nám určují, kolik částic přejde z jednoho stavu do jiného, ale neurčují, kolik hmoty je k dispozici. To nám určí jedna z doplňujících rovnic. Můžeme použít **rovnici elektrické neutrality** (veličina N_{jk} označuje celkovou koncentraci iontu j prvku k , kterou dostaneme sečtením koncentrací všech hladin i patřících iontu j)

$$\sum_k \sum_j q_j N_{jk} = n_e, \quad (9.52a)$$

kde sčítáme přes všechny ionty j všech atomů k , nebo **rovnici pro celkový počet částic**

$$\sum_k \sum_j N_{jk} = \tilde{N}_N, \quad (9.52b)$$

kde sčítáme podle stejných indexů. Celkový počet atomů a iontů \tilde{N}_N jsme zavedli v kapitole 4.3.1. Pokud řešíme rovnice kinetické (statistické) rovnováhy najednou pro více prvků (každý prvek tvoří vlastní soustavu rovnic), doplníme rovnice **abundanční rovnici**

$$\sum_j N_{jk} = \frac{\tilde{\alpha}_k}{\tilde{\alpha}_H} \sum_j N_{jH} \quad (9.52c)$$

kteřá svazuje hustotu atomů řešeného prvku k s nějakým referenčním prvkem různým od k (často s vodíkem, proto jsme zvolili v rovnici (9.52c) index H). Index j opět probíhá přes všechny ionty a k značí vybraný atom.

Soustavu L rovnic (9.51) doplněnou o některou z rovnic (9.52) můžeme formálně zapsat v maticovém tvaru jako

$$\mathcal{A} \cdot \mathbf{n} = \mathcal{B} \quad (9.53)$$

kde vektor $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots, n_L)^T$ obsahuje koncentrace jednotlivých energetických hladin, matice \mathcal{A} je tvořena četnostmi přechodů (viz rovnice 9.51). Tato matice má rozměr $L \times L$ a nazveme ji **maticí četností (rate matrix)**. Můžeme se setkat

i s poločeským názvem rate (čti rejt) matice. Vektor pravých stran \mathcal{B} je nenulový pouze pro doplňující rovnice (9.52).

Pokud matice \mathcal{A} a vektor pravé strany \mathcal{B} nezávisí na obsazeních energetických stavů \mathbf{n} , je (9.53) snadno řešitelnou soustavou lineárních rovnic. V případě, kdy neplatí termodynamická rovnováha ani lokální termodynamická rovnováha, matice \mathcal{A} závisí na poli záření, protože na poli záření závisí četnosti zářivých přechodů R_{im} . Pro určení pole záření musíme řešit rovnici přenosu záření (viz kapitola 3.2), což znamená, že musíme znát opacitu a emisivitu, které závisí kromě jiných veličin i na obsazení energetických stavů \mathbf{n} . Soustava (9.53) tedy představuje soustavu nelineárních rovnic. Zahrnutím rovnic kinetické (statistické) rovnováhy se obsazení energetických hladin stávají funkcí nejen teploty T a elektronové hustoty n_e (viz kapitoly 4.1 a 4.3), ale i pole záření J_ν ,

$$n_i = n_i(n_e, T, J_\nu). \quad (9.54)$$

Započtení pole záření do určení obsazení energetických hladin znamená hodně nových proměnných, pro které je třeba současně řešit soustavu rovnic kinetické rovnováhy a rovnic přenosu záření pro všechny potřebné frekvence. Způsoby řešení této soustavy se budeme zabývat v kapitole 10.

9.5.1 Některé speciální případy

Pro pochopení důsledků rovnic kinetické rovnováhy je užitečné se podívat na některé speciální zjednodušené případy rovnic kinetické (statistické) rovnováhy a jejich řešení.

Rosselandův teorém cyklických přechodů Uvažujme atom, který má 3 stavy (označíme je 1,2,3), mezi kterými existují jen zářivé přechody. Symboly $R_{1 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1}$ a $R_{1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1}$ označíme četnosti postupných zářivých přechodů do hladin uvede-ných v indexu. Určíme poměr $R_{1 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1} / R_{1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1}$. V dalších úvahách zane-dbáme indukovanou emisí. Počet excitací z hladiny 1 do hladiny 3 je $n_1 B_{13} W B(\nu_{13})$, počet deexcitací z hladiny 3 do hladiny 2 je $A_{32} / (A_{31} + A_{32})$ počet deexcitací z hladiny 2 do hladiny 1 je $A_{21} / [A_{21} + B_{23} W B(\nu_{23})]$. Pro četnost přechodů ve směru $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ dostaneme

$$n_1 R_{1 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1} = n_1 B_{13} W B(\nu_{13}) \cdot \frac{A_{32}}{A_{32} + A_{31}} \cdot \frac{A_{21}}{A_{21} + B_{23} W B(\nu_{23})} \quad (9.55)$$

Analogickým postupem dostáváme pro četnost ve směru $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$ dostá-váme

$$n_1 R_{1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1} = n_1 B_{12} W B(\nu_{12}) \cdot \frac{B_{23} W B(\nu_{23})}{A_{21} + B_{23} W B(\nu_{23})} \cdot \frac{A_{31}}{A_{32} + A_{31}}. \quad (9.56)$$

Pro podíl (9.56) a (9.55) platí

$$\frac{R_{1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1}}{R_{1 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1}} = \frac{B_{12}WB(\nu_{12})B_{23}WB(\nu_{23})A_{31}}{B_{13}WB(\nu_{13})A_{21}A_{32}} = W < 1 \quad (9.57)$$

kde jsme využili vztahu pro $B(\nu)$ platného pro Wienovu limitu ($h\nu/kT \gg 1$)

$$\frac{B_{ij}}{A_{ji}}B(\nu_{ij}) = \left(\frac{n_j}{n_i}\right)^* \quad (9.58)$$

Cykly mají různou pravděpodobnost.

Jednohladinový atom s kontinuem se skládá jen z jedné vázané hladiny a jedné hladiny iontu (kontinua). Tento případ je podobněji popsán v knihách Mihalas (1978, kapitola 5.5) a Hubeny and Mihalas (2014, kapitola 9.5). V tomto případě jsou rovnice kinetické rovnováhy reprezentovány pouze dvěma rovnicemi, jednou pro hladinu $l = 1$ a druhou pro hladinu iontu k . Tyto rovnice jsou však stejné,

$$n_1(R_{1k} + C_{1k}) = n_k(R_{k1} + C_{k1}). \quad (9.59)$$

Do této rovnice dosadíme za n_1R_{1k} ze vztahu (9.25), za n_1C_{1k} a n_kC_{k1} ze vztahu (9.40) a za n_kR_{k1} z (9.33). V posledně jmenovaném vztahu zanedbáme stimulovanou emisi a použijeme přiblížení $\exp[h\nu/(kT)] \gg 1$. Dále využijeme fakt, že pro jednohladinový atom s kontinuem je $n_k = n_k^*$, protože k odpovídá nejvyššímu iontu atomu. Rovnice kinetické rovnováhy přejde na tvar (viz Mihalas 1978, rovnice 5.94 nebo Hubeny and Mihalas 2014, rovnice 9.90)

$$\frac{n_1}{n_1^*} = \frac{4\pi \int_{\nu_0}^{\infty} \frac{\alpha_{bf1k}(\nu)B_\nu}{h\nu} d\nu + n_e q_{1k}}{4\pi \int_{\nu_0}^{\infty} \frac{\alpha_{bf1k}(\nu)J_\nu}{h\nu} d\nu + n_e q_{1k}} \quad (9.60)$$

V případě vysokých elektronových koncentrací (vysokých hustot) jsou dominantní srážkové přechody a podíl $n_1/n_1^* \rightarrow 1$ bez ohledu na hodnotu střední intenzity záření J_ν . Obsazení hladiny je tedy rovnovážné a podmínky LTE jsou splněny. Pokud se pole záření blíží rovnovážnému, $J_\nu \rightarrow B_\nu$ (například ve velkých hloubkách atmosféry), je také $n_1/n_1^* \rightarrow 1$. Pro rovnovážné pole záření tak rovněž dostáváme splnění podmínek pro LTE.

Naopak v případě nízkých hustot je člen $n_e q_{1k}$ malý a v rovnici (9.60) dominují zářivé členy. Můžeme psát

$$\frac{n_1}{n_1^*} \approx \frac{4\pi \int_{\nu_0}^{\infty} \frac{\alpha_{bf1k}(\nu)B_\nu}{h\nu} d\nu}{4\pi \int_{\nu_0}^{\infty} \frac{\alpha_{bf1k}(\nu)J_\nu}{h\nu} d\nu} \quad (9.61)$$

Pokud je četnost ionizací větší než četnost rekombinací, hladina 1 má nižší obsazení než v LTE, pokud jsou naopak četnější rekombinace, hladina 1 má vyšší obsazení než v LTE. Abychom získali alespoň přibližné odhady efektů, použijeme velmi zjednodušující předpoklad, který využívá faktu, že fotoionizační příčný průřez je nejvyšší na ionizační hraně a pro rostoucí frekvence je úměrný ν^{-3} . Nahradíme integrály přes celé frekvenční spektrum hodnotou na ionizační hraně ($\nu = \nu_0$). Rovnice (9.61) se zjednoduší na tvar

$$\frac{n_1}{n_1^*} \approx \frac{B(\nu_0)}{J(\nu_0)}. \quad (9.62)$$

Hladina má pro $B_{\nu_0} < J_{\nu_0}$ nižší obsazení než v případě termodynamické rovnováhy.

Ionizace v koróně je variantou předcházejícího případu. Teplota v koróně je velmi vysoká ($T_{\text{local}} \sim 10^6 \text{K}$) a je mnohem vyšší než teplota sluneční fotosféry ($T_R \sim 6000 \text{K}$). Četnost srážkových ionizací závisí na lokální teplotě, četnost zářivých ionizací závisí na fotosférické teplotě. Srážkové ionizace budou tedy výrazně převažovat ($C_{1k} \gg R_{1k}$). Četnosti srážkových i zářivých rekombinací závisí na lokální teplotě, proto bude platit nerovnost $C_{k1} \ll R_{k1}$. Z rovnice (9.59) dostaneme

$$n_1 n_e q_{1k}(T) = n_k n_e \alpha_R(T), \quad (9.63)$$

kde α_R je celkový rekombinační koeficient (9.34). V případě koróny tento koeficient zahrnuje přímou i dielektronickou rekombinaci. Z rovnice (9.63) vyjádříme poměr

$$\frac{n_k}{n_1} = \frac{q_{1k}(T)}{\alpha_R(T)} = f(T) \quad (9.64)$$

Získali jsme zajímavou informaci, že ionizační rovnováha v koróně *nezávisí* na elektronové hustotě n_e v koróně, je pouze funkcí lokální teploty.

Opticky tenké kaskádové přechody

(Hubeny and Mihalas, 2014, str. 286)

zjednodušený mnohohladinový atom pro prostředí mlhovin uvažujeme vodík, předpokládáme

- velmi slabé pole záření \Rightarrow
 - vodík převážně v základním stavu

- předpokládáme rezonanční čáry neprůhledné \Rightarrow jsou v detailní zářivé rovnováze
- fotoionizace z vyšších hladin zanedbány
fotoionizace jen ze základní hladiny
rekombinace probíhají do všech hladin
- zářivé excitace zanedbány (přechody z vyšších hladin průhledné)
- pouze spontánní deexcitace z vyšších hladin úměrné A_{ul}
- nízká hustota prostředí
 - srážky zcela zanedbány

rovnice kinetické rovnováhy pro ionizovaný vodík (hladina k),
 L je celkový počet hladin

$$n_k \sum_{l=1}^L R_{kl} = n_1 R_{1k} \quad (9.65)$$

vyjádříme pomocí rekombinačního koeficientu (9.34),

položíme $n_k = n_p$ (koncentrace protonů), pro čistě vodíkový plyn $n_p = n_e$,

$$n_1 R_{1k} = n_p n_e \sum_{l=1}^L \alpha_{Rkl}(T) = n_e^2 \sum_{l=1}^L \alpha_{Rkl}(T) \quad (9.66)$$

rovnice kinetické rovnováhy pro hladinu j

$$n_j \sum_{z=1}^{j-1} R_{jz} = n_k R_{kj} + \sum_{z=j+1}^L n_z R_{zj} \quad (9.67)$$

zavedeme

- rozvětvací poměr (*branching ratio*)
(pravděpodobnost spontánního přechodu $u \rightarrow l$ vzhledem ke všem ostatním spontánním přechodům z hladiny u)

$$a_{ul} \equiv \frac{A_{ul}}{\sum_{j < u} A_{uj}} \quad (9.68)$$

- kaskádové pravděpodobnosti (*cascade probabilities*) p_{ul} – celkové pravděpodobnosti, že se atom nějak dostane ze stavu u do stavu l
definovány rekurzivně pomocí (9.68)

$$p_{l+1,l} = a_{l+1,l}$$

$$p_{ul} = a_{ul} + \sum_{i'=l+1}^{u-1} p_{ui'} a_{i'l} \quad \text{pro } u \geq l+2 \quad (9.69)$$

rovnice kinetické rovnováhy pro hladinu j s pomocí rekombinačního koeficientu a kaskádových pravděpodobností (9.69)

$$n_j \sum_{z=1}^{j-1} A_{jz} = n_e^2 \alpha_{Rkj}(T) + \sum_{z=j+1}^L n_z A_{zj} = n_e^2 \left[\alpha_{Rkj}(T) + \sum_{z=j+1}^L p_{zj} \alpha_{Rkz}(T) \right] \quad (9.70)$$

můžeme určit poměry populací

emisivita pro přechod $u \rightarrow l$

$$\eta = \frac{h\nu}{4\pi} n_u A_{ul}$$

užití – přibližné určení relativní intenzity Balmerovských čar (Balmer decrement)

$$\frac{I(H_j)}{I(H_i)} = \frac{n_j A_{j2} h\nu_{j2}}{n_i A_{i2} h\nu_{i2}} \quad (9.71)$$

Jemná struktura hladin v mezihvězdném prostředí – formulace rovnic (Bahcall and Wolf, 1968)

extrémně nízká hustota i teplota \Rightarrow atomy a ionty převážně v základním stavu

základní stav (term) má více hladin

zajímají nás absorpční čáry ze základního stavu

tyto čáry jsou multiplety, jejich vzájemná intenzita bude záviset na obsazení hladin základního termu (stavu)

základní stav doublet ($J = \frac{1}{2}$ a $J = \frac{3}{2}$) – C II, N III (oba $2s^2 2p^2 P_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}}^o$); Al I, Si II, S IV (všechny $3s^2 3p^2 P_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}}^o$)

- označíme hladiny indexy 1,2 podle jejich rostoucí energie (hladina ${}^2P_{\frac{1}{2}}^o$ má nižší energii než hladina ${}^2P_{\frac{3}{2}}^o$)
- přechod mezi hladinami 1 a 2 je magnetický dipólový
- v mezihvězdném prostředí slabé záření \rightarrow zanedbáme členy s intenzitou záření

$$n_1 C_{12} = n_2 (A_{21} + C_{21}) \quad (9.72)$$

odtud poměr obsazení hladin

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{C_{12}}{A_{21} + C_{21}} \quad (9.73)$$

doplněno uzavírací rovnicí

$$n_1 + n_2 = n_I \quad (9.74)$$

n_I je celková koncentrace iontu

- pro $A_{21} \ll C_{21} \Rightarrow$ LTE obsazení, jinak ne
- pro klesající hustotu klesá C_{12} i $C_{21} \Rightarrow$ klesá poměr n_2/n_1
- intenzita absorpčních čar závisí na obsazení spodní hladiny přechodu
- změněný poměr n_2/n_1 změní sílu složek absorpčního doubletu ze základního termu
- poměr n_2/n_1 závisí na elektronové hustotě \Rightarrow možnost určení mezihvězdné elektronové hustoty na základě poměru intenzit složek absorpčního doubletu daných prvků

základní stav triplet ($J = 0, J = 1, J = 2$) – C I, N II O III (všechny $2s^22p^2\ ^3P_{0,1,2}$), Si I, S III (oba $3s^23p^2\ ^3P_{0,1,2}$), O I ($2s^22p^4\ ^3P_{2,1,0}$), S I ($3s^23p^4\ ^3P_{2,1,0}$)

dva přechody magnetické dipólové (mezi hladinami $^3P_0 \leftrightarrow ^3P_1$ a $^3P_1 \leftrightarrow ^3P_2$), jeden elektrický kvadrupólový (mezi hladinami $^3P_0 \leftrightarrow ^3P_2$)

- označíme hladiny podle jejich rostoucí energie čísly 1,2,3; (pro konfiguraci ns^2np^2 rostou energie hladin pro kvantová čísla J podle posloupnosti 0,1,2; pro konfiguraci ns^2np^4 podle posloupnosti 2,1,0)
- uvažujme jen přechody 1-2 a 2-3, A_{31} zanedbáme (elektrický kvadrupólový přechod méně pravděpodobný než magnetický dipólový); C_{31} také zanedbáme

$$\begin{aligned} n_1(C_{12} + C_{13}) &= n_2(A_{21} + C_{21}) \\ n_2(A_{21} + C_{21} + C_{23}) &= n_1C_{12} + n_3(A_{32} + C_{32}) \end{aligned} \quad (9.75)$$

poměry obsazení

$$\begin{aligned} \frac{n_2}{n_1} &= \frac{C_{12} + C_{13}}{A_{21} + C_{21}} \\ \frac{n_3}{n_1} &= \frac{C_{13}(A_{21} + C_{21} + C_{23}) + C_{12}C_{13}}{(A_{21} + C_{21})(A_{32} + C_{32})} \end{aligned} \quad (9.76)$$

doplněno uzavírací rovnicí

$$n_1 + n_2 + n_3 = n_I \quad (9.77)$$

pokud $A_{ij} \ll C_{ij} \Rightarrow$ LTE obsazení

- podobně jako v případě doubletunižší hustota ovlivní relativní obsazení n_1, n_2, n_3
- změněné poměry $n_2/n_1, n_3/n_2$ změní síly složek absorpčního tripletu ze základního termu
- poměry $n_2/n_1, n_3/n_2$ závisejí na elektronové hustotě \Rightarrow možnost určení mezihvězdné elektronové hustoty na základě poměru intenzit složek absorpčního tripletu daných prvků

Pravděpodobnost obsazení hladin v rovnicích kinetické rovnováhy

pravděpodobnosti obsazení w_l jsme zmínili v kapitole 4.1 v rovnici (4.8)

obsazení n_l hladiny l iontu I o koncentraci N_I v termodynamické rovnováze

$$\left(\frac{n_l}{N_I}\right)^* = w_l \frac{g_l}{U_I} e^{-\frac{E_l}{kT}} \quad (9.78)$$

partiční funkce dána vztahem (4.8)

pravděpodobnosti obsazení hladin w_l statisticky vyjadřují vliv okolních atomů na daný atom, který se projevuje tím, že vyšší hladiny nemusejí existovat

vztahy pro výpočet w_l v Hubeny and Mihalas (2014, kap. 9.4)

do rovnic kinetické (statistické) rovnováhy musíme zavést možnost neexistence vázané hladiny, do níž iont přechází

$$n_l \sum_{u \neq l} w_u P_{lu} - w_l \sum_{u \neq l} n_u P_{ul} = 0 \quad (9.79)$$

excitace do neexistující hladiny se stane ionizací

modifikace ionizačního účinného průřezu (zahrnutí frekvencí nižších než ionizační frekvence), viz Hubeny et al. (1994)

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_{bflk} &= \alpha_{bflk} & \text{pro } \nu &\geq \nu_{lk} \\ &= \left(1 - \frac{w_{n^*}}{w_l}\right) \alpha_{bflk} & \text{pro } \nu < \nu_{lk} \end{aligned} \quad (9.80)$$

kde

$$n_* = \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{h\nu}{\mathcal{E}_I} \right) \quad (9.81)$$

\mathcal{E}_I je ionizační energie

vztahy pro srážkové i zářivé četnosti se nemění

Kapitola 10

Řešení NLTE problému

Úlohu současného nalezení řešení rovnice přenosu záření a rovnic kinetické (statistické) rovnováhy nazýváme *NLTE problémem*, případně *NLTE problémem formování spektrálních čar*. Soustava rovnic kinetické (statistické) rovnováhy (9.53) je soustavou nelineárních rovnic, kdy jednotlivé prvky matice \mathcal{A} závisejí na poli záření. Současně s rovnicemi kinetické (statistické) rovnováhy (9.53) je tedy nutné řešit i rovnici přenosu záření (například 3.41), a to pro každou frekvenci. Ve výsledku se pak jedná o ohromnou soustavu rovnic pro záření na všech frekvencích a obsazení všech uvažovaných energetických stavů. Dohromady tyto rovnice tvoří soustavu nelineárních integrodiferenciálních rovnic. Jejich řešení nelze nalézt analyticky, je třeba použít numerických iteračních metod. Některé možné cesty k řešení této soustavy rovnic si v této kapitole ukážeme pro případ rovinné geometrie.

10.1 Dvouhadinový atom

V přiblížení dvouhadinového atomu předpokládáme, že atom má pouze dvě vázané energetické hladiny. Je to aproximace, která je dobře použitelná prakticky jen pro přechody ze základní hladiny. Příkladem mohou být některé velmi silné rezonanční čáry. Může však posloužit i jako velmi názorný příklad, na němž je možné pochopit a vysvětlit základní efekty, které nastávají při řešení složitějších NLTE problémů pro mnohohladinové atomy. Základní vztahy pro vydatnost a rovnici přenosu záření pro dvouhadinový atom formuloval Thomas (1957). Metody řešení NLTE problému využívající dvouhadinového atomu posloužily k sestrojení řady užitečných modelů hvězdných atmosfér (například Avrett and Loeser, 2003).

Spodní hladinu dvouhadinového atomu označíme l , horní hladinu u . Frekvenční závislost opacity dvouhadinového atomu můžeme vyjádřit jako

$$\chi_\nu = \kappa_{lu}\phi(\nu) \quad (10.1)$$

kde s využitím rovnice (5.41)

$$\kappa_{lu} = n_l \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{lu}, \quad (10.2a)$$

případně se započtením stimulované emise jako záporné absorpce

$$\kappa_{lu} = \frac{\pi e^2}{m_e c} g_l f_{lu} \left(\frac{n_l}{g_l} - \frac{n_u}{g_u} \right) \quad (10.2b)$$

a $\phi(\nu)$ je profil čáry. Pokud budeme uvažovat existenci i opacitu kontinua χ_C (například rozptyl na volných elektronech nebo vázaně-volné a volně-volné přechody jiných prvků), celkovou opacitu (10.1) můžeme zapsat jako

$$\chi_\nu = \kappa_{lu} \phi(\nu) + \chi_C. \quad (10.3)$$

Opacitě χ_C se také říká opacita pozadí (*background opacity*).

10.1.1 Termalizační hloubka ve spektrálních čarách

Střední volná dráha ℓ_ν fotonu dané frekvence ν je dána převrácenou hodnotou opacitu χ_ν (viz rovnice 7.30),

$$\ell_\nu = \frac{1}{\chi_\nu} = \frac{1}{\kappa_{lu} \phi(\nu) + \chi_C}. \quad (10.4)$$

Pro zavedení střední volné dráhy je vhodnější použít opacitu (10.2a), bez započtení stimulované emise. Z rovnice (10.4) je zřejmé, že pokud $\kappa_{lu} \gg \chi_C$, je střední volná dráha pro různé frekvence profilu čáry značně rozdílná, protože $\phi(\nu)$ nabývá hodnot mezi 0 a 1. Ve středu spektrální čáry je střední volná dráha nejkratší a v křídlech nejdelší. Integrací střední volné dráhy (10.4) pro různé frekvence přes profil čáry dostaneme střední hodnotu středních volných pro danou čáru. Tuto veličinu označíme ℓ a nazveme *střední volnou dráhou fotonu v čáře*,

$$\ell = \langle \ell_\nu \rangle = \int_0^\infty \ell_\nu \phi_\nu d\nu = \int_0^\infty \frac{\phi_\nu}{\kappa_{lu} \phi_\nu + \chi_C} d\nu. \quad (10.5)$$

Po absorpci fotonu ve dvouhladinovém atomu dojde k excitaci atomu do horního stavu. Poté může dojít ke srážkové deexcitaci, která vede k tomu, že je energie fotonu převedena do kinetické energie srážející se částice. Této možnosti se říká termální absorpce. Druhou možností je zářivá deexcitace spojená s vyzářením fotonu na některé z frekvencí spektrální čáry popsané profilem $\phi(\nu)$. Tato frekvence se může lišit od frekvence absorbovaného fotonu. Foton vlastně pokračuje ve své

cestě, obecně jiným směrem a na jiné frekvenci. Tato možnost odovídá rozptylu ve spektrální čáře (kapitola 5.8).

Podobně jako v případě rozptylu v kapitole 7.3 nás bude zajímat termalizační délka (hloubka), ale v tomto případě pro celou čáru se zahrnutím rozdílné opacity ve středu čáry a v jejích křídlech. Tato termalizační délka se také někdy nazývá délka zničení (*destruction length*).

Pravděpodobnost zničení fotonu P_d , jinými slovy pravděpodobnost převedení energie absorbovaného fotonu do tepelné energie prostředí, je dána podílem četností srážkových přechodů z hladiny u do hladiny l (C_{ul}) k celkové četnosti přechodů z hladiny u do hladiny l ($C_{ul} + A_{ul}$ se zanedbáním stimulované emise),

$$P_d = \frac{C_{ul}}{C_{ul} + A_{ul}} (\equiv \varepsilon). \quad (10.6)$$

Ve velkých hloubkách v hustém prostředí s velkým množstvím srážejících se částic je $C_{ul} \gg A_{ul}$ a $P_d \rightarrow 1$. Naopak v prostředí nízkou hustotou (a tím i nízkou koncentrací elektronů a $C_{ul} \ll A_{ul}$) je hodnota P_d velmi malá. Označíme $P_e(\tau)$ pravděpodobnost úniku fotonu z místa v optické hloubce τ . V hustém prostředí s velkou pravděpodobností zničení fotonu je $P_e(\tau) \ll P_d$, naopak tam, kde je P_d malá, je $P_e(\tau) \gg P_d$. Rozumná definice **termalizační hloubky** τ_{th} je na rozhraní těchto dvou oblastí, kde

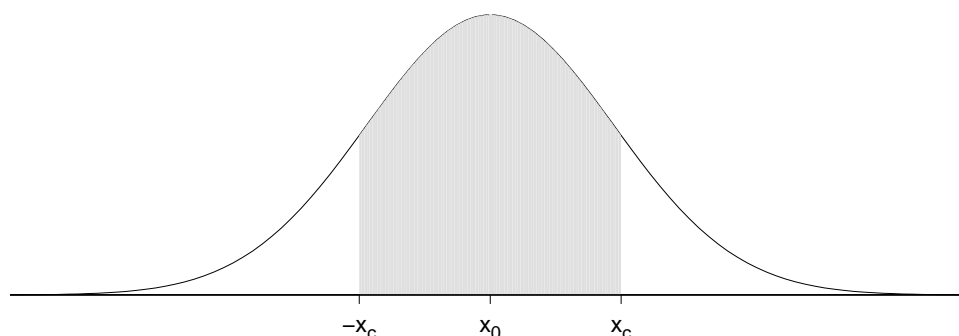
$$P_e(\tau_{th}) \approx P_d \quad (10.7)$$

Určit termalizační délku můžeme řadou různých přístupů, jejich výčet nalezneme v Hubeny and Mihalas (2014, kapitola 14.1). Zde uvedeme její přibližné určení pro homogenní atmosféru (vycházející z práce Osterbrock, 1962). Tento dodatečný předpoklad znamená, že pravděpodobnost zničení fotonu (10.6) se nemění s hloubkou.

Přejdeme k bezrozměrné frekvenci $x = (\nu - \nu_0)/\Delta\nu_D$ (viz 5.52). Čáru rozdělíme na opticky tlustou ($\tau_x > 1$) a opticky tenkou ($\tau_x < 1$) část (viz obr. 10.1). Dělicí frekvenci x_c mezi opticky tlustou a opticky tenkou částí čáry získáme z podmínky

$$\tau\phi(x_c) = 1, \quad (10.8)$$

kde τ zde označuje střední optickou hloubku v čáře. Dále budeme předpokládat, že přechod od opticky tenké k opticky tlusté části profilu je náhlý, tj. že pro opticky tenkou část profilu platí $\tau_x \ll 1$ a pro opticky tlustou část profilu platí $\tau_x \gg 1$. V opticky tenké části profilu unikne polovina vyzářených fotonů (druhá polovina je vyzářena opačným směrem). Pokud je profil čáry symetrický (což v naprosté



Obrázek 10.1: Opticky tlustá a opticky tenká část spektrální čáry, $\tau_x > 1$ v intervalu $\langle -x_c; x_c \rangle$, jinak $\tau_x < 1$.

většinou případů je), pravděpodobnost úniku fotonu je

$$P_e(\tau) \approx \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{-x_c} \phi(x) dx + \frac{1}{2} \int_{x_c}^{\infty} \phi(x) dx = \int_{x_c}^{\infty} \phi(x) dx. \quad (10.9)$$

Vyjádříme tuto pravděpodobnost úniku pro Dopplerův (5.60b) a Voigtův (5.59) profil. Použitím aproximace pro daleká křídla čáry ($|x_c| \gg 1$) dostaneme pro Dopplerův profil

$$P_e^D(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{x_c}^{\infty} e^{-x^2} dx \approx \frac{e^{-x_c^2}}{2\sqrt{\pi}x_c}, \quad (10.10a)$$

a pro Voigtův profil s využitím přibližné rovnice (5.61b)

$$P_e^V(\tau) \approx \frac{a}{\pi x_c}. \quad (10.10b)$$

Dělicí frekvenci určíme z podmínky (10.8). Pro případ Dopplerova profilu dostaneme s využitím (5.60b)

$$x_c^D = \sqrt{\ln \left(\frac{\tau}{\sqrt{\pi}} \right)}, \quad (10.11a)$$

pro případ Voigtova profilu s využitím (5.61b)

$$x_c^V = \sqrt{\frac{a\tau}{\pi}}. \quad (10.11b)$$

Do rovnic (10.10) dosadíme za x_c z rovnic (10.11) a dostaneme vztahy pro pravděpodobnost úniku pro Dopplerův profil čáry,

$$P_e^D(\tau) \approx \frac{1}{2\tau \sqrt{\ln \left(\frac{\tau}{\sqrt{\pi}} \right)}}, \quad (10.12a)$$

a pro Voigtův profil čáry,

$$P_e^V(\tau) \approx \sqrt{\frac{a}{\pi\tau}}. \quad (10.12b)$$

S využitím rovnic (10.6) a (10.7) dostaneme vztahy pro termalizační délku pro případ Dopplerova profilu čáry (C má hodnotu řádově jednotek a slabě závisí na ε),

$$\tau_{\text{th}}^D \sim \frac{C}{\varepsilon}, \quad (10.13a)$$

a pro případ Voigtova profilu čáry,

$$\tau_{\text{th}}^V \sim \frac{a}{\varepsilon^2}. \quad (10.13b)$$

Pro srovnání připomeňme vztah pro termalizační délku při koherentním rozptylu

$$\tau_{\text{th}}^{\text{coh}} \sim \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}. \quad (7.33)$$

Porovnáním vztahů (7.33) a (10.13) vidíme, že nekoherence rozptylu zvyšuje termalizační délku.

10.1.2 Rovnice pro dvouhladinový atom

vydatnost dvouhladinového atomu

absorpce s následnou emisí je rozptyl ve spektrální čáře (viz kapitola 5.8)

dvouhladinový atom bez kontinua

vydatnost viz rovnice (7.4) v kapitole 7.1

$$S_L = \frac{n_u A_{ul}}{n_l B_{lu} - n_u B_{ul}} = \frac{2h\nu_{lu}^3}{c^2} \frac{1}{\frac{n_l g_u}{n_u g_l} - 1}. \quad (7.4)$$

- jedna rovnice kinetické rovnováhy pomocí (9.13) a (9.22) (stejná pro obě hladiny)

$$n_l (B_{lu} \bar{J}_{lu} + C_{lu}) = n_u (A_{ul} + B_{ul} \bar{J}_{lu} + C_{ul}) \quad (10.14)$$

- \bar{J}_{lu} zavedeno v (9.12)

- kombinací s (7.4),
s užitím Einsteinových relací (5.8)
a vztahu (9.39) ($n_u^* C_{ul} = n_l^* C_{lu}$)

$$S_L = \frac{\bar{J}_{lu} + \varepsilon' B}{1 + \varepsilon'} \quad (10.15)$$

kde

$$\varepsilon' = \frac{C_{ul}}{A_{ul}} \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu_{lu}}{kT}\right) \right] \quad (10.16)$$

položíme

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon'}{1 + \varepsilon'} \quad (10.17)$$

ε – pravděpodobnost zničení fotonu – stejná jako v (10.6)

$$S_L = (1 - \varepsilon) \bar{J} + \varepsilon B \quad (10.18)$$

pro vysoké hustoty: $C_{ul} \gg A_{ul} \Rightarrow \varepsilon' \gg 1 \Rightarrow \varepsilon \rightarrow 1 \Rightarrow S_L \rightarrow B(\nu_{lu}, T)$
většinou je ale $\varepsilon \ll 1$

rovnice přenosu záření + vydatnost dvouhladinového atomu

současně se řeší rovnice přenosu záření bez kontinua

$$\mu \frac{dI(\tau, \nu)}{d\tau} = \phi(\tau, \nu) [I(\tau, \nu) - S_L(\tau)] \quad (10.19)$$

(τ – optická hloubka v čáře, $d\tau = -\kappa_{lu} ds$)

s vydatností (přepsaná rovnice (10.18) s explicitní závislostí na τ a integrací přes profil čáry)

$$S_L(\tau) = [1 - \varepsilon(\tau)] \int_0^\infty \phi(\tau, \nu) J(\tau, \nu) d\nu + \varepsilon(\tau) B(\tau) \quad (10.20)$$

podobně i pro dvouhladinový atom s opacitou kontinua v pozadí

vlastnosti řešení dvouhladinového atomu bez kontinua

- (i) povrchová hodnota

$$S(0) = \sqrt{\varepsilon} B \quad (10.21)$$

- (ii) pro $\tau \approx 1/\varepsilon$ je $S(\tau) \rightarrow B$ (velké hloubky)

dvouhladinový atom s kontinuem v pozadí

opacita

$$\chi_\nu = (\chi_L)_{lu}(\nu) + \chi_C(\nu) = \kappa_{lu}\phi(\nu) + \chi_C \quad (10.22)$$

κ_{lu} – opacita v čáře
emisivita

$$\eta_\nu = (\eta_L)_{lu}(\nu) + \eta_C(\nu) = (\chi_L)_{lu}(\nu)S_L + \chi_C S_C \quad (10.23)$$

S_L z rovnice (10.18), $S_C \equiv \eta_C/\chi_C$ – vydatnost kontinua, $r \equiv \chi_C/\kappa_{ul}$

$$S_\nu = \frac{\phi_\nu}{\phi_\nu + r} S_L + \frac{r}{\phi_\nu + r} S_C \quad (10.24)$$

lze převést na vztah (7.28)

$$S_\nu = \xi_\nu S_C + (1 - \xi_\nu) \int_0^\infty \phi_{\nu'} J_{\nu'} d\nu', \quad (7.28)$$

kde $\xi_\nu = (r + \varepsilon\phi_\nu)/(r + \phi_\nu)$

ekvivalentní dvouhladinový atom

pro ionty s dominantním rezonančním přechodem, zájemci vizte Hubeny and Michals (2014, kapitola 14.4)

10.2 Iterační řešení dvouhladinového atomu

10.2.1 Λ iterace

Pro případ koherentního rozptylu jsme si Λ -iteraci uvedli v kapitole 7.5.1. Tuto jednoduchou iterační metodu můžeme zformulovat i pro případ rozptylu ve spektrální čáře dvouhladinového atomu. Rovnici (7.29) přepíšeme pro případ dvouhladinového atomu (závislost na hloubkové proměnné τ nebudeme uvádět),

$$\bar{J} = \bar{\Lambda}[S_L] = \bar{\Lambda}[(1 - \varepsilon)\bar{J}] + \bar{\Lambda}[\varepsilon B]. \quad (10.25)$$

Zde $\bar{\Lambda}$ je frekvenčně středovaný Λ -operátor (6.24) pro čáru, \bar{J} je integrovaná střední intenzita přes profil spektrální čáry (6.23) a B je střední hodnota Planckovy funkce v čáře. Podobně jako v kapitole 7.5.1 budeme v iteračním postupu střídavě určovat střední intenzitu \bar{J} a vydatnost S_L , která je vyjádřena pomocí vztahu (10.18).

Jako úvodní iterační hodnotu pro pole záření vezmeme Planckovu funkci

$$\bar{J}^{(0)} = B. \quad (10.26a)$$

Iterační určení střední intenzity zapíšeme

$$\bar{J}^{(n+1)} = \bar{\Lambda} \left[S_L^{(n)} \right] = \bar{\Lambda} \left[(1 - \varepsilon) \bar{J}^{(n)} \right] + \bar{\Lambda} [\varepsilon B]. \quad (10.26b)$$

Tato iterační metoda má stejné vlastnosti jako v případě koherentního rozptylu. Konverguje pouze pro $\varepsilon \rightarrow 1$ a pokud $\varepsilon \ll 1$, spíše se stabilizuje a pro praktické řešení problému je nepoužitelná.

10.2.2 Urychlená Λ iterace

Pomalost Λ -iterace je možné odstranit, pokud z iteračního procesu odstraníme část informace, která se šíří pomalu. To lze udělat, pokud vhodným způsobem modifikujeme v rovnici (10.25) operátor $\bar{\Lambda}$. Základní myšlenku (Cannon, 1973b,a) můžeme formálně objasnit následujícím způsobem. K operátoru $\bar{\Lambda}$ přičteme a odečteme jiný operátor, který označíme Λ^* .

$$\bar{\Lambda} = \Lambda^* + (\bar{\Lambda} - \Lambda^*). \quad (10.27)$$

Operátor (10.27) dosadíme do (10.25)

$$\bar{J} = \bar{\Lambda} [S_L] = \Lambda^* [S_L] + (\bar{\Lambda} - \Lambda^*) [S_L]. \quad (10.28)$$

S pomocí této rovnice můžeme definovat iterační schéma

$$\bar{J}^{(n+1)} = \Lambda^* \left[S_L^{(n+1)} \right] + (\bar{\Lambda} - \Lambda^*) \left[S_L^{(n)} \right]. \quad (10.29)$$

V limitě $n \rightarrow \infty$ je tato rovnice splněna přesně. Rozdíl oproti Λ -iteraci spočívá v tom, operátor Λ^* působí i na novou hodnotu $S_L^{(n+1)}$, kterou chceme v odpovídajícím iteračním kroku určit. Do členu $\Lambda^* \left[S_L^{(n+1)} \right]$ tak můžeme nějakým vhodným zjednodušeným způsobem zahrnout rozptylový člen. Abychom lépe ocenili konvergenční vlastnosti metody, z rovnice (10.29) dosadíme do (10.18),

$$S_L^{(n+1)} = (1 - \varepsilon) \Lambda^* \left[S_L^{(n+1)} \right] + (1 - \varepsilon) (\bar{\Lambda} - \Lambda^*) \left[S_L^{(n)} \right] + \varepsilon B \quad (10.30)$$

Odsud vyjádříme vydatnost $S_L^{(n+1)}$,

$$S_L^{(n+1)} = [1 - (1 - \varepsilon) \Lambda^*]^{-1} \left[(1 - \varepsilon) (\bar{\Lambda} - \Lambda^*) \left[S_L^{(n)} \right] + \varepsilon B \right]. \quad (10.31)$$

Pro konvergenci metody a její rychlost je rozhodující největší vlastní číslo zesilovací matice (amplification matrix)

$$A = [1 - (1 - \varepsilon) \Lambda^*]^{-1} [(1 - \varepsilon) (\bar{\Lambda} - \Lambda^*)], \quad (10.32)$$

které označíme λ_{\max} . Pro $\Lambda^* = 0$ dostaneme Λ -iteraci, pro kterou je $\lambda_{\max} \approx 1$, což znamená velmi pomalou konvergenci. Nejvhodnější volbou Λ^* -operátoru dávající rozumně malé hodnoty λ_{\max} zaručující rychlou konvergenci je diagonála $\bar{\Lambda}$ -operátoru (Olson et al., 1986). Spočítat ho lze jednoduše podobně jako Rybicki and Hummer (1991) jako součást numerického formálního řešení.

Iterační proces lze ještě více urychlit (někdy za cenu stability) nějakou numerickou extrapolací (např. Ng, 1974).

Další iterační metody

- successive overrelaxation method (SOR) – Trujillo Bueno and Fabiani Bendicho (1995)
- FBILI - A Forth-and-Back Implicit Λ -Iteration (Atanacković-Vukmanović et al., 1997)

10.3 Mnohohladinový atom

- pro zjednodušení – planparalelní geometrie
- soustava rovnic kinetické rovnováhy – celkem L rovnic

$$\mathcal{A} \cdot \mathbf{n} = \mathcal{B} \quad (9.53)$$

hledáme obsazení L explicitních hladin, $\mathbf{n} = (n_l), l = 1, \dots, L$

–1 rovnice pro každý atom kvůli lineární závislosti rovnic

+1 uzavírací rovnice pro referenční atom svazující všechny uvažované atomy (rovnice pro počet částic nebvo rovnice elektrické neutrality)

+1 uzavírací rovnice pro každý další atom

koeficienty rate matice \mathcal{A} závisejí na střední intenzitě záření J_ν

- rovnice přenosu záření pro střední intenzitu

$$\frac{d^2(f_\nu^K J_\nu)}{d\tau_\nu^2} = J_\nu - S_\nu \quad (3.41)$$

opacita (vydatnost) v rovnici přenosu záření závisí na obsazení energetických hladin atomů \mathbf{n} , ty získáme řešením (9.53)

- Eddingtonovy faktory f_ν^K určíme řešením rovnice přenosu se Schusterovými proměnnými (6.50) – popsáno v kapitole 7.5.2
- použijeme diskretizaci
 - F frekvenčních bodů (viz kapitola 6.3.1.3), $f = 1, \dots, F$
 - D hloubkových bodů (viz kapitola 6.3.1.1) v případě jednorozměrného prostředí, $d = 1, \dots, D$
 - celkem F hloubkově diskretizovaných rovnic pro F frekvenčních bodů v (9.53) integrály přes frekvence lichoběžníkovou metodou
- iterační postup $(J_f) \rightarrow (n_l) \rightarrow (J_f) \rightarrow (n_l) \rightarrow J(f) \rightarrow \dots$ je v podstatě Λ -iterace \Rightarrow nepoužitelný
- soustavu rovnic (3.41) a (9.53) je třeba řešit současně pro $n_l, l = 1, \dots, L$ a $J_\nu \forall \nu$ v celém prostředí (například v atmosféře)

10.3.1 Řešení mnohohladinového atomu metodou úplné linearizace

Řešení soustavy tvořené rovnicemi (3.41) a (9.53) hledáme v nějaké diskrétní reprezentaci hloubkových bodů, frekvencí a směrů šíření záření. Tuto soustavu je možné řešit podobně jako v kapitole 4.3.1 linearizací

- řešíme
 - L rovnic kinetické rovnováhy
(počet odpovídá počtu explicitně uvažovaných energetických hladin)
 - F rovnic přenosu záření
(počet vyplývá ze zvolené frekvenční diskretizace)
- formálně zavedeme vektor neznámých (koncentrací energetických stavů a středních intenzit záření ve frekvenčních bodech) jako $\psi = (n_i, J_f)$
($i = 1, \dots, L, f = 1, \dots, F$)
- formálně zapíšeme soustavu řešených rovnic (rovnic přenosu záření a rovnic kinetické rovnováhy)

$$f(\psi) = 0 \tag{10.33}$$

- hledáme řešení ψ iteračně

- necht' máme (po n -té iteraci) nepřesné řešení této soustavy rovnic označíme ho $\boldsymbol{\psi}^{(n)} = \left(n_i^{(n)}, J_f^{(n)} \right)$

- hledáme přesnější řešení ve tvaru $\boldsymbol{\psi}^{(n+1)} = \boldsymbol{\psi}^{(n)} + \delta\boldsymbol{\psi}$
jinak zapsáno $\left(n_i^{(n+1)}, J_f^{(n+1)} \right) = \left(n_i^{(n)} + \delta n_i, J_f^{(n)} + \delta J_f \right)$
aby

$$f\left(\boldsymbol{\psi}^{(n+1)}\right) = f\left(\boldsymbol{\psi}^{(n)} + \delta\boldsymbol{\psi}\right) = 0$$

- použijeme první řád Taylorova rozvoje (\Rightarrow název linearizace)

$$f\left(\boldsymbol{\psi}^{(n)}\right) + \frac{\partial f\left(\boldsymbol{\psi}^{(n)}\right)}{\partial\boldsymbol{\psi}}\delta\boldsymbol{\psi} = 0 \quad (10.34)$$

- rozepíšeme všechny veličiny závislé na linearizovaných neznámých, například opacita $\chi_f^{(n+1)} = \chi_f^{(n)} + \delta\chi_f$, kde

$$\delta\chi_f = \sum_{i=1}^L \frac{\partial\chi_f^{(n)}}{\partial n_i} \delta n_i + \sum_{j=1}^F \frac{\partial\chi_f^{(n)}}{\partial J_j} \delta J_j$$

podobně pro další veličiny (emisivita, vydatnost, ...)

- nakonec vyjádříme z (10.34)

$$\delta\boldsymbol{\psi} = - \left[\frac{\partial f\left(\boldsymbol{\psi}^{(n)}\right)}{\partial\boldsymbol{\psi}} \right]^{-1} f\left(\boldsymbol{\psi}^{(n)}\right) \quad (10.35)$$

- $\frac{\partial f\left(\boldsymbol{\psi}^{(n)}\right)}{\partial\boldsymbol{\psi}}$ je matice (každá složka vektoru $f\left(\boldsymbol{\psi}^{(n)}\right)$ se derivuje podle každé nezávislé proměnné z $\boldsymbol{\psi}$)
- (10.34) je soustava lineárních rovnic pro $(\delta n_i, \delta J_f)$, řešíme ji iterativně:
 1. známe řešení $\boldsymbol{\psi}^{(n)}$, které není přesné
 2. řešíme soustavu lineárních rovnic (10.34) pro $\delta\boldsymbol{\psi} = (\delta n_i, \delta J_f)$, řešení je vyjádřené v (10.35)
 3. provedeme korekce: $n_i^{(n+1)} = n_i^{(n)} + \delta n_i, J_f^{(n+1)} = J_f^{(n)} + \delta J_f$

4. určíme nejvyšší relativní změnu iterovaných veličin

$$\varepsilon = \max \left(\max_l \left| \frac{n_l^{(n+1)} - n_l^{(n)}}{n_l^{(n)}} \right|, \max_f \left| \frac{J_f^{(n+1)} - J_f^{(n)}}{J_f^{(n)}} \right| \right)$$

5. pokud $\varepsilon > \varepsilon_{\max}$ (požadovaná přesnost), pokračujeme bodem 1, v opačném případě máme výsledek

- pokud je počáteční hodnota $\psi^{(0)}$ dostatečně blízko řešení, postup konverguje kvadraticky; relativní chyba ε (*fractional error*) se kvadraticky zmenšuje ($\varepsilon, \varepsilon^2, \varepsilon^4, \dots$)
- při problémech s konvergencí může pomoci
 - v kroku 3 iteračního postupu provést korekci jen pro J_f ;
 - poté $n_i^{(n+1)}$ určit řešením rovnic kinetické rovnováhy (9.53) pro zadané pole záření
 - provést navíc několik lambda iterací mezi iteračními cykly linearizace (tím se změní hodnoty $\psi^{(n+1)}$)
- mezi jednotlivými iteračními cykly vždy provedeme formální řešení rovnice přenosu záření (tím se změní hodnoty $J_f^{(n+1)}$)

autoři této metody pro modelování hvězdných atmosfér: Auer and Mihalas (1969)

10.3.2 Řešení pomocí urychlené Λ -iterace

použijeme monochromatický Λ - operátor (pro úplnou frekvenční redistribuci můžeme)

- iterační schéma pro určení střední intenzity

$$J_\nu^{(n+1)} = \Lambda_\nu^* [S_\nu^{(n+1)}] + (\Lambda_\nu - \Lambda_\nu^*) [S_\nu^{(n)}]. \quad (10.36)$$

- ve vztazích pro četnosti zářivých přechodů (9.35) v rovnicích kinetické rovnováhy dosadíme za střední intenzitu záření z rovnice (10.36)

$$\begin{aligned} R_{lu} &= 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{lu}(\nu)}{h\nu} (\Lambda_\nu^* [S_\nu^{(n+1)}] + \Delta J_\nu^{(n)}) d\nu. \\ R_{ul} &= 4\pi \int_0^\infty \frac{\alpha_{lu}(\nu)}{h\nu} \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} + (\Lambda_\nu^* [S_\nu^{(n+1)}] + \Delta J_\nu^{(n)}) \right) \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) d\nu. \end{aligned} \quad (10.37)$$

kde $\Delta J_\nu^{(n)} = (\Lambda_\nu - \Lambda_\nu^*) [S_\nu^{(n)}]$ nazýváme **korekční člen**

- rovnice kinetické rovnováhy (9.53) budou nelineární v n_i , linearizujeme je

$$\left(\mathcal{A} + \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial \mathbf{n}} \delta \mathbf{n} \right) \cdot (\mathbf{n} + \delta \mathbf{n}) = \mathcal{B} + \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \mathbf{n}} \delta \mathbf{n} \quad (10.38)$$

- rovnici přenosu záření nelinearizujeme, záření je zahrnuto pomocí přibližného operátoru Λ^* přesná hodnota se dopočítá z korekčního členu použitého na *minulou* iteraci
- postupujeme iterativně:

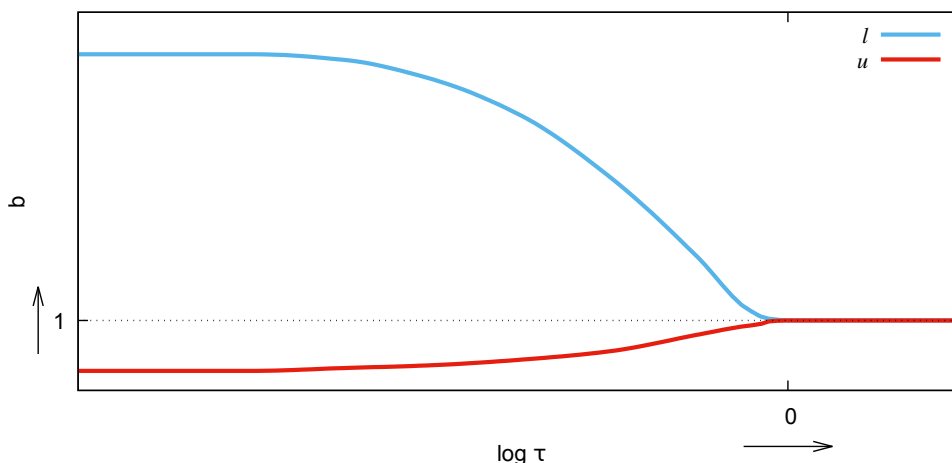
1. známe řešení $(n_i^{(n)})$, které není přesné
2. pro $n_i^{(n)}$ provedeme formální řešení rovnice přenosu záření a spočteme korekční členy v rovnici (10.36): $\Delta J_\nu^{(n)} = (\Lambda - \Lambda^*) S_\nu^{(n)}$, pro počáteční odhad položíme $S_\nu^{(0)} = B_\nu$
3. řešíme linearizované rovnice kinetické rovnováhy pro δn_i
4. provedeme korekci $n_i^{(n+1)} = n_i^{(n)} + \delta n_i$
5. určíme nejvyšší relativní změnu iterovaných veličin

$$\varepsilon = \max_i \left| \frac{n_i^{(n+1)} - n_i^{(n)}}{n_i^{(n)}} \right|$$

6. pokud $\varepsilon > \varepsilon_{\max}$ (požadovaná přesnost), pokračujeme bodem 1, v opačném případě máme výsledek
- užití urychlené lambda iterace (ALI)
 - snižuje velikost invertovaných matic z rozměru $(L + F) \times (L + F)$ na $L \times L$, \Rightarrow snižuje čas potřebný na jednu iteraci
 - zvyšuje potřebný počet iterací
 - výsledek – urychlení výpočtu
 - lze použít další urychlovací metody (například Ng, 1974)

10.4 Základní NLTE efekty v polonekonečné atmosféře

V této části se podrobněji podíváme na některé důsledky NLTE přístupu na obsazení energetických hladin v polonekonečném prostředí, kde ve velkých optických hloubkách je popis pomocí LTE aproximace správný, ale ve vnějších vrstvách nikoli (podle Hubeny and Mihalas, 2014, kapitola 14.6).



Obrázek 10.2: Příklad možné závislosti b -faktorů dvouhladinového atomu na optické hloubce čáry (l – spodní hladina, u – horní hladina).

10.4.1 NLTE efekty v čarách

Dvouhladinový atom Vydátost pro dvouhladinový atom podle (7.4), s využitím b -faktorů (9.9) a Boltzmannovy excitační rovnice (4.5) je

$$S_L = \frac{2h\nu_{lu}^3}{c^2} \frac{1}{\frac{b_l}{b_u} \exp\left(\frac{h\nu_{lu}}{kT}\right) - 1} = \frac{b_u}{b_l} B(\nu_{lu}, T) \frac{1 - \exp\left(-\frac{h\nu_{lu}}{kT}\right)}{1 - \frac{b_u}{b_l} \exp\left(-\frac{h\nu_{lu}}{kT}\right)}. \quad (10.39)$$

kde l označuje spodní hladinu, u označuje horní hladinu a $B(\nu_{lu}, T)$ je Planckova funkce (4.44). Můžeme-li zanedbat stimulovanou emisi (pro $\exp\left(-\frac{h\nu_{lu}}{kT}\right) \ll 1$), rovnice se zjednoduší na

$$S_L \approx \frac{b_u}{b_l} B(\nu_{lu}, T). \quad (10.40)$$

Pro optické hloubky menší než termalizační hloubka čáry ($\tau < \tau_{\text{th}}$, kapitola 10.1.1) je vydátost menší než Planckova funkce ($S_L < B$). Na povrchu navíc platí přesný vztah (10.21), z něhož vyplývá

$$\frac{b_u}{b_l} \approx \sqrt{\varepsilon} \ll 1 \quad (10.41)$$

pokud je pravděpodobnost zničení fotonu (10.6) malá. Pokud je však excitační energie $E_{lu} = h\nu_{lu}$ menší než tepelná energie prostředí (kT), zvýší se četnost srážkových procesů a odchylky obsazení uvažovaných hladin od termodynamické rovnováhy budou malé.

V oblastech, kde jsou četnosti srážkových přechodů dvouhadinového atomu menší než četnosti zářivých přechodů, způsobuje přenos záření ve spektrální čáře stav, kdy má spodní hladina přechodu vyšší obsazení než v případě platnosti termodynamické rovnováhy (říkáme, že hladina je *přepopulována* – *overpopulated*) a horní hladina naopak nižší obsazení (je *podpopulována* – *underpopulated*). Excitace a stimulovaná deexcitace jsou totiž úměrné počtu dopadajících fotonů, spontánní deexcitace však ne. Pole záření cestou z hvězdy slábne, což vede ke snížení četnosti zářivých excitací a stimulovaných deexcitací, četnost spontánních deexcitací není zářením ovlivněna. To vede k podpopulování horní hladiny (viz obr. 10.2).

Tříhadinový atom je nejjednodušším zobecněním předcházejícího případu. Jednotlivé hladiny označíme čísly 1, 2 a 3 podle rostoucí excitační energie. Chování tříhadinového atomu se bude lišit podle toho, jakých poměrných hodnot nabývají energie jednotlivých hladin.

V případě, že se excitační energie hladin 2 a 3 ze základní hladiny (1) nebudou příliš lišit, budou srážkové přechody mezi hladinami 2 a 3 výrazně čtenější než zářivé. Po zanedbání četností zářivých přechodů mezi těmito dvěma hladinami můžeme psát $n_2 C_{23} \approx n_3 C_{32}$, přechod mezi hladinami 2 a 3 bude tedy v detailní rovnováze. Protože vždy platí vztah (9.39), dostaneme z definice b -faktorů (9.9) rovnost $b_2 \approx b_3$. Mezi koncentracemi hladin 2 a 3 bude platit vztah

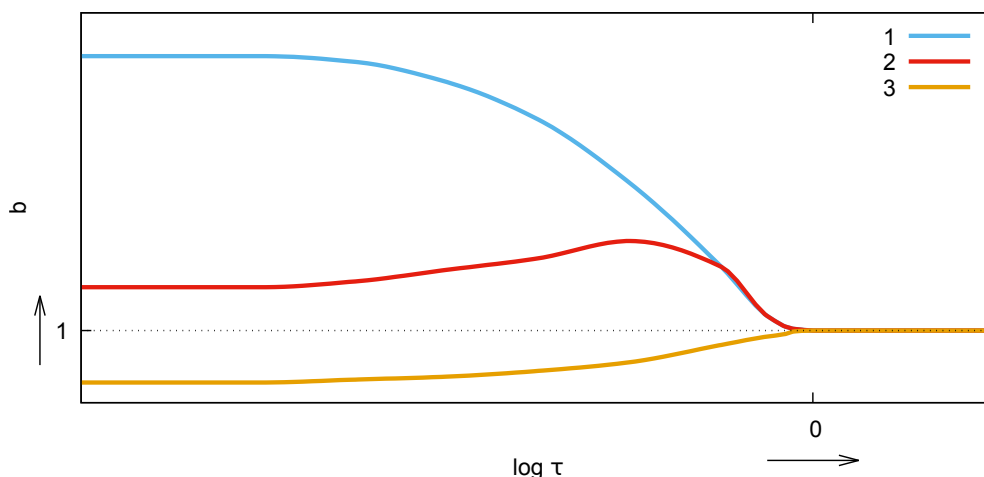
$$\frac{n_2}{n_3} = \frac{g_2}{g_3} \exp\left(\frac{E_{23}}{kT}\right) \approx \frac{g_2}{g_3}$$

(excitační energie E_{23} z hladiny 2 do hladiny 3 je malá). Můžeme definovat společnou hladinu $\overline{23}$, jejíž populaci $n_{\overline{23}}$, statistickou váhu $g_{\overline{23}}$ a Einsteinův koeficient $A_{\overline{23},1}$ definujeme jako

$$\begin{aligned} n_{\overline{23}} &= n_2 + n_3, \\ g_{\overline{23}} &= g_2 + g_3, \\ A_{\overline{23},1} &= \frac{g_2 A_{21} + g_3 A_{31}}{g_2 + g_3}. \end{aligned} \tag{10.42}$$

Pak také platí $n_{\overline{23}} A_{\overline{23},1} = n_2 A_{21} + n_3 A_{31}$. Hladina $\overline{23}$ se pak chová jako horní hladina u v předchozím případě dvouhadinového atomu.

Výše uvedený postup zavedení společných hladin se často využívá ke snížení počtu řešených hladin atomů při studiu multipletů nebo i při zavádění superhadin



Obrázek 10.3: Příklad možné závislosti b -faktorů tříhladinového atomu na optické hloubce.

(středních hladin zjednodušujících velmi složité modely atomů). Nutné je však splnění podmínky detailní rovnováhy mezi jednotlivými hladinami, zde označenými 2 a 3.

V případě, že pro excitační energie hladin neplatí $E_{12} \approx E_{13}$, je situace jiná. Pokud jsou excitační energie E_{12} a E_{23} menší než tepelná energie prostředí, budou odchylky obsazení uvažovaných hladin od termodynamické rovnováhy malé. Pokud však budou zmíněné excitační energie větší než tepelná energie prostředí, je situace zajímavější. Pro velké hloubky je optická hloubka všech uvažovaných přechodů (τ_{12} , τ_{13} a τ_{23}) větší než jejich termalizační hloubka, proto jsou obsazení všech hladin blízka rovnovážné hodnotě ($b_1 \approx 1$, $b_2 \approx 1$, $b_3 \approx 1$). Obsazení základní hladiny je větší než obsazení vyšších hladin ($n_1 \gg n_j$, $j = 2, 3$), opacita (a tedy i optická hloubka) přechodů ze základní hladiny je vyšší než pro přechod $2 \leftrightarrow 3$ ($\tau_{23} < \tau_{12}$, $\tau_{23} < \tau_{13}$). Postupujeme-li k menším hloubkám, optická hloubka τ_{23} klesne pod termalizační hodnotu nejdříve. Podobně jako pro dvouhladinový atom to způsobí snížení obsazení n_3 vzhledem k rovnovážné hodnotě ($b_3 < 1$) a zvýšení obsazení n_1 a n_2 (jsou vůči sobě v detailní rovnováze) vzhledem k jejich rovnovážným hodnotám ($b_1 > 1$, $b_2 > 1$). Pro ještě menší hloubky klesne i optická hloubka τ_{13} pod svou termalizační hodnotu a efekt snížení b_3 a

zvýšení b_1 a b_2 ještě zesílí (přechod mezi hladinami 1 a 2 je stále ještě v detailní rovnováze). Pro ještě nižší hloubky klesne i τ_{12} pod termalizační hodnotu, což způsobí další zvýšení b_1 a současně snížení b_2 (viz obr. 10.3). V kombinaci se zvýšením b_2 díky přechodu $2 \leftrightarrow 3$ to může v závislosti na atomárních parametrech vést jak k hodnotám $b_2 < 1$, tak i k hodnotám $b_2 > 1$ ve vnějších vrstvách. Na obrázku 10.3 je znázorněna pouze druhá z těchto možností.

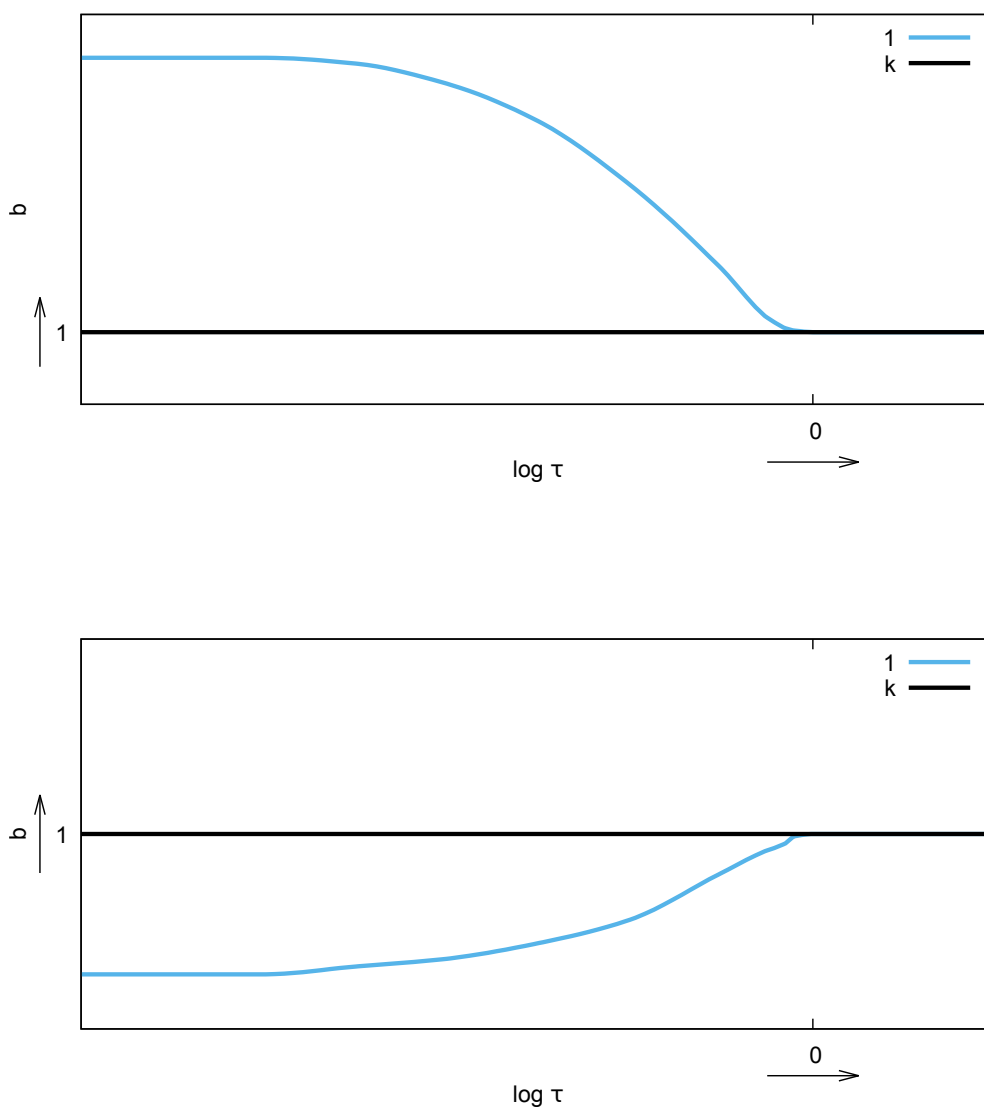
Mnohohladinový atom Pro atom s mnoha energetickým stavy se celkový vliv nerovnovážného rozdělení obsazení energetických hladin (NLTE efekt) získá jako výsledek „soutěže“ srážkových a zářivých procesů všech přechodů mezi energetickými stavy. Základní efekty byly popsány v předcházející části této kapitoly. Interakce v přechodech $l \leftrightarrow u$ s malou pravděpodobností zničení ($C_{lu} \ll R_{lu}$) způsobuje zvýšení obsazení spodní hladiny přechodu vzhledem k její rovnovážné hodnotě ($b_l > 1$) a snížení obsazení horní hladiny přechodu vzhledem k její rovnovážné hodnotě ($b_u < 1$). Pro hladiny l, u s blízkými excitačními energiemi naopak velmi často platí $C_{lu} \gg R_{lu}$. Pro ně srážkové procesy způsobují boltzmannovskou rovnováhu (popsanou rovnicí 4.5) mezi nimi. Takovými hladinami jsou například kromě hladin multipletů i hladiny s vysokým hlavním kvantovým číslem n . Kromě těchto limitních případů vztahů četností zářivých (R_{lu}) a srážkových (C_{lu}) přechodů mohou samozřejmě nastávat situace, kdy $C_{lu} \approx R_{lu}$. Všechny tyto efekty tvoří poměrně nepřehlednou skládku, jejíž výsledek lze v jeho úplnosti jen obtížně předpovědět. Výsledky získané řešením soustavy rovnic kinetické rovnováhy lze ale pomocí těchto efektů vysvětlit.

10.4.2 NLTE efekty pro kontinua

Přechody z vázaných stavů do volných (ionizace) a z volných do vázaných (rekombinace) nazýváme často přechody do a z kontinua. Můžeme je rozdělit podle opacity na přechody s velkou opacitou, které jsou i silným zdrojem záření a tím ovlivňují prostředí, v němž se nacházejí (**aktivní kontinua**), a na přechody s malou opacitou, které jsou poměrně slabým zdrojem záření a spíše jsou zářením pouze ovlivňovány (**pasivní kontinua**).

Aktivní kontinua jsou ionizační přechody vysoce zastoupených prvků. Pro případ atmosfér hvězd hlavní posloupnosti jsou to nejčastěji přechody vodíku a helia. Účinný průřez všech ionizačních přechodů je nulový pro frekvence nižší než je ionizační hrana a zhruba úměrný ν^{-3} pro vyšší frekvence. Velmi přibližně lze na tyto přechody pohlížet jako na široké spektrální čáry s poněkud podivným profilem. Protože výsledné vztahy pro vydatnost (10.40) a b -faktory (10.41) dvouhladinového atomu nezávisí na profilu čáry, můžeme je použít i pro aktivní kontinua.

10. ŘEŠENÍ NLTE PROBLÉMU



Obrázek 10.4: Příklad možné závislosti b -faktorů základní hladiny (1 – modrá čára) na optické hloubce vlivem ionizace. Faktor pro základní hladinu vyššího iontu (k) je roven 1. *Horní obrázek*: aktivní kontinua, *dolní obrázek*: pasivní kontinua.

Obsazení základní hladiny atomu bude vyšší než v rovnovážném případě ($b_1 > 1$) a obsazení základní hladiny vyššího ionizačního stupně (označíme ji k) bude mít nižší obsazení než v rovnovážném případě, což by znamenalo, že $b_k < 1$. Pokud se přidržíme definice LTE populací vzhledem k základní hladině vyššího iontu (5.22), musí být $b_k = 1$ a hodnota b_1 se tím ještě zvýší (viz obr. 10.4).

Pro danou hladinu je ionizační opacita nižší než opacita spektrálních čar. Pro případ hvězdných atmosfér to znamená, že se kontinua formují níže než spektrální čáry se stejnou spodní hladinou. Obsazení základní hladiny bude vykazovat nerovnovážné hodnoty $b_1 > 1$ už v oblasti formování kontinua, což je oblast, kde je optická hloubka v kontinuu přibližně rovna jedné.

Pasivní kontinua jsou ionizační přechody méně zastoupených prvků. Je to většina přechodů v kontinuu. Jsou typické poměrně malým příspěvkem k celkové opacitě, ale mají podstatný vliv na excitační a ionizační rovnováhu svých prvků. Přibližnou ionizační rovnováhu pro základní hladinu můžeme vyjádřit pomocí jednohladinového atomu s kontinuem (kapitola 9.5.1). Při zanedbání stimulované emise můžeme ionizační rovnováhu vyjádřit vztahem (9.60). Pro zanedbatelné četnosti srážkových přechodů dostaneme zjednodušený vztah (9.61). Aproximací celkového fotoionizačního účinného průřezu jeho hodnotou na ionizační hraně dostaneme pro odchylku obsazení základní hladiny od rovnovážného stavu b_1 vztah (9.62), který můžeme přibližně zapsat jako

$$b_1 = \frac{n_1}{n_1^*} \approx \frac{B(\nu_0, T)}{J(\nu_0)} \approx \frac{B(\nu_0, T)}{WB(\nu_0, T_R)}. \quad (10.43)$$

V tomto vztahu jsme vyjádřili intenzitu záření na povrchu atmosféry pomocí faktoru zředění W (9.1) a Planckovy funkce o teplotě T_R , což je teplota v hloubce, z níž záření vychází.

Odhadneme tuto hloubku i faktor zředění pomocí Eddingtonovy-Barbierovy relace (6.6). Na povrchu hvězdné atmosféry lze střední intenzitu vystupujícího záření (předpokládáme nulové záření ve směru dovnitř atmosféry) přibližně vyjádřit jako (ν_0 je frekvence ionizační hrany)

$$J(\nu_0, \tau_{\nu_0} \rightarrow 0) \approx \frac{1}{2} B \left(\nu_0, \tau_{\nu_0} = \frac{1}{2} \right), \quad (10.44)$$

kde jsme navíc aproximovali vydatnost pomocí Planckovy funkce. Odtud dostáváme $W = \frac{1}{2}$, $T_R = T(\tau_{\nu_0} = \frac{1}{2})$. Ve Wienově limitě (pro vysoké frekvence, rovnice 4.45) je Planckova funkce závislá na teplotě exponenciálně a s klesající teplotou rychle klesá. Teplota pro $\tau(\nu_0) \rightarrow 0$ (na povrchu hvězdy) je nižší než teplota pro $\tau(\nu_0) = \frac{1}{2}$ (místo, kde se formuje kontinuum), platí tedy i

$$B(\nu_0, T(\tau_{\nu_0} \rightarrow 0)) \ll \frac{1}{2} B \left(\nu_0, T \left(\tau_{\nu_0} = \frac{1}{2} \right) \right) = \frac{1}{2} B(\nu_0, T_R). \quad (10.45)$$

10. ŘEŠENÍ NLTE PROBLÉMU

Ze vztahu (10.43) dostáváme $b_1 \ll 1$. Obsazení základní hladiny bude nižší než v případě termodynamické rovnováhy (viz obr. 10.4). S ohledem na NLTE efekty v čarách (kapitola 10.4.1) bude důsledkem nižší obsazení všech hladin iontu ($b_l < 1$) ve srovnání s rovnovážným rozdělením. Zvýšená ionizace je jedním ze základních NLTE efektů.

Kapitola 11

Přenos záření v pohybujícím se prostředí

Opustíme nyní předpoklad statického prostředí a zjednodušení planparalelní atmosféry a budeme předpokládat, že se studovaná hmota pohybuje rychlostí $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ vzhledem k pozorovateli. Foton, který se šíří ve směru \mathbf{n} a jehož frekvence ve vztažné soustavě pozorovatele je ν , bude mít ve vztažné soustavě spojené s pohybující se hmotou frekvenci ν' , která je dopplerovsky posunutá. Za předpokladu $v \ll c$ můžeme psát

$$\nu' = \nu \left(1 - \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}}{c} \right). \quad (11.1)$$

Vztahy pro dopplerovský posun pro libovolně velké rychlosti lze nalézt například v knize Castor (2004, rovnice 6.9 a 6.10).

Posun frekvence fotonu znamená, že foton v místě, kde se hmota pohybuje rychlostí $\mathbf{v}(\mathbf{r})$, „potká“ opacitu odpovídající posunuté frekvenci, kde může mít jinou hodnotu. Pro opacitu v kontinuu to nepředstavuje vážný problém, protože závislost opacity v kontinuu na frekvenci je většinou slabá. V čáře se však opacita mění s frekvencí velmi rychle, někdy až o několik řádů při malé změně frekvence. V důsledku vztahu (11.1) se opacita i emisivita vyjádřené v soustavě pozorovatele stávají i úhlově závislé. Konkrétně závisejí na úhlu, který svírá směr šíření záření \mathbf{n} s vektorem lokální rychlosti $\mathbf{v}(\mathbf{r})$. Tyto vlastnosti je třeba vzít při řešení rovnice přenosu záření v úvahu. Máme v zásadě dvě možnosti, jak to udělat v závislosti na souřadné soustavě, v níž budeme řešit rovnici přenosu záření. Rovnici můžeme řešit buď v soustavě pozorovatele (*observer frame*) nebo v soustavě pohybující se s prostředím (*comoving frame*, *CMF*).

V prvním případě je rovnice přenosu poměrně jednoduchá (viz rovnice 3.8), při jejím řešení je však třeba zahrnout anizotropní opacitu a v případě numerického řešení vzniká nutnost použití značně vyššího počtu frekvenčních bodů díky

různému dopplerovskému posunu spektrálních čar v místech s rozdílnou makroskopickou rychlostí.

V případě řešení ve spolupohybující se soustavě tyto problémy nenastávají, rovnice přenosu záření získá složitější tvar. Objevuje se v ní například derivace intenzity podle frekvence (Castor, 2004, rovnice 6.83),

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial I(\mathbf{n}, \nu)}{\partial t} + \mathbf{n} \cdot \nabla I(\mathbf{n}, \nu) - \frac{1}{c} (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \nu \frac{\partial I(\mathbf{n}, \nu)}{\partial \nu} \\ - \frac{1}{c} \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} (1 - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot \nabla_{\mathbf{n}} I(\mathbf{n}, \nu) + \frac{3}{c} (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) I(\mathbf{n}, \nu) \\ = \eta(\nu) - \chi(\nu) I(\mathbf{n}, \nu) \end{aligned} \quad (11.2)$$

V nerelativistických prouděních můžeme zanedbat člen s úhlovou derivací specifické intenzity záření (obsahující $\nabla_{\mathbf{n}} I$) a dilatační člen (obsahující I bez derivace). Rovnice (11.2) se tak zjednoduší na

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial I(\mathbf{n}, \nu)}{\partial t} + \mathbf{n} \cdot \nabla I(\mathbf{n}, \nu) - \frac{1}{c} (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \nu \frac{\partial I(\mathbf{n}, \nu)}{\partial \nu} \\ = \eta(\nu) - \chi(\nu) I(\mathbf{n}, \nu). \end{aligned} \quad (11.3)$$

Po zanedbání časové derivace (předpokladu stacionárních proudění) dostaneme rovnici

$$\mathbf{n} \cdot \nabla I(\mathbf{n}, \nu) - \frac{1}{c} (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \nu \frac{\partial I(\mathbf{n}, \nu)}{\partial \nu} = \eta(\nu) - \chi(\nu) I(\mathbf{n}, \nu). \quad (11.4)$$

což je nejčastěji používaná rovnice přenosu záření ve spolupohybující se souřadné soustavě při studiu hvězdných atmosfér.

11.1 Sobolevova aproximace

V případě prostředí s velkými rychlostními gradienty lze řešení rovnice přenosu záření ve spektrální čáře významně zjednodušit. Pro velké rychlostní gradienty $\nabla \mathbf{v}$ je druhý člen na levé straně rovnice (11.4) mnohem větší než první, můžeme ho také zanedbat,

$$-\frac{1}{c} (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \nu \frac{\partial I(\mathbf{n}, \nu)}{\partial \nu} = \eta(\nu) - \chi(\nu) I(\mathbf{n}, \nu) \quad (11.5)$$

Dále předpokládejme, že jediným zdrojem opacit je spektrální čára (opacita v kontinuu je nulová). Necht' má tato čára profil $\phi(\nu)$, který je „ostrý“ (se slabými křídly

čáry, například dopplerovský 5.60) a normalizovaný ($\int_0^\infty \phi(\nu) d\nu = 1$). Celkovou opacitu v čáře χ_L vyjádříme pomocí vztahů z kapitoly 5.1.1 jako

$$\chi_L = \frac{\pi e^2}{m_e c} g_l f_{lu} \left(\frac{n_l}{g_l} - \frac{n_u}{g_u} \right) \quad (11.6)$$

Pro frekvenčně závislou opacitu a emisivitu v čáře můžeme psát

$$\begin{aligned} \chi(\nu) &= \chi_L \phi(\nu) \\ \eta(\nu) &= \chi_L S_L \phi(\nu), \end{aligned} \quad (11.7)$$

kde S_L je vydatnost v čáře (7.4).

V dalších úvahách o interakci záření s hmotou ve spektrální čáře bez opacitu v kontinuu využijeme existence velkých rychlostních gradientů. Při popisu v soustavě pozorovatele se v tomto případě interakce záření s hmotou omezuje na velmi malou prostorovou oblast v okolí rezonanční podmínky vyplývající z Dopplerova posunu. V sousedních místech absorbuje spektrální čára na jiných frekvencích. Velikost této malé oblasti je dána velikostí rychlostního gradientu a profilem spektrální čáry. Čím je rychlostní gradient větší, tím je oblast interakce menší a čím je profil spektrální čáry užší, tím je také tato oblast menší. Čím je oblast menší, tím je Sobolevova metoda řešení rovnice přenosu záření přesnější.

Při popisu ve spolupohybující se soustavě se tento Dopplerův posun transformuje do změny frekvence záření, která je popsána derivací $\partial I / \partial \nu$. Změna frekvence (daná Dopplerovým posunem), na níž absorbuje hmota v rezonanční oblasti, se transformuje do změny frekvence záření přes profil spektrální čáry. Resonanční oblast vymezená v soustavě pozorovatele prostorově je ve spolupohybující se soustavě vymezena frekvenčním intervalem. Řešení rovnice přenosu záření v Sobolevově aproximaci se proto převede na výpočet integrálu rovnice (11.5) přes profil spektrální čáry. Počáteční podmínka pro specifickou intenzitu záření na okraji oblasti se změní na počáteční podmínku na kraji profilu spektrální čáry, tuto intenzitu označíme I_c .

Zavedeme proměnnou y pro integrál profilu, jejíž hodnota se bude měnit od 0 na jednom konci čáry do 1 na druhém konci čáry, přičemž konec čáry s $y = 0$ je ten, kde je definována počáteční intenzita I_c ,

$$\begin{aligned} y &= \int_\nu^\infty d\nu' \phi(\nu') \quad \text{pro } \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} > 0 \\ y &= \int_{-\infty}^\nu d\nu' \phi(\nu') \quad \text{pro } \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < 0 \end{aligned} \quad (11.8)$$

Za předpokladu, že je spektrální čára úzká, můžeme v rovnici (11.5) nahradit činitel ν centrální frekvencí čáry ν_0 . Substitucí y za ν v (11.5) a s využitím vztahů

(11.7) a (11.8) dostaneme

$$\frac{\nu_0}{c} |\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}| \frac{dI(\mathbf{n}, y)}{dy} = \chi_L [S_L - I(\mathbf{n}, y)]. \quad (11.9)$$

Zavedeme *Sobolevovu optickou hloubku*

$$\tau(\mathbf{n}) = \frac{\chi_L c}{\nu_0 |\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}|}. \quad (11.10)$$

Integrací rovnice (11.9) od 0 do y' s okrajovou podmínkou $I(\mathbf{n}) = I_c(\mathbf{n})$ pro $y = 0$ dostaneme pro změnu intenzity $I(\mathbf{n}, y')$ přes profil čáry

$$I(\mathbf{n}, y') = I_c(\mathbf{n}) \exp[-\tau(\mathbf{n})y'] + S_L \{1 - \exp[-\tau(\mathbf{n})y']\} \quad (11.11)$$

Integrací vztahu (11.11) v mezích $0 < y' < 1$ (přes profil čáry) dostaneme pro specifickou intenzitu celé čáry ($\bar{I}(\mathbf{n}) = \int_0^1 I(\mathbf{n}, y') dy'$) ve směru \mathbf{n}

$$\bar{I}(\mathbf{n}) = I_c(\mathbf{n})\beta(\mathbf{n}) + S_L [1 - \beta(\mathbf{n})], \quad (11.12)$$

kde

$$\beta(\mathbf{n}) = \frac{1 - \exp[-\tau(\mathbf{n})]}{\tau(\mathbf{n})}. \quad (11.13)$$

Integrací (11.12) přes úhly dostaneme střední intenzitu záření celé čáry

$$\bar{J} = \frac{1}{4\pi} \oint d\varpi I_c(\mathbf{n})\beta(\mathbf{n}) + S_L (1 - \beta), \quad (11.14)$$

kde β je *Sobolevova pravděpodobnost úniku* fotonu,

$$\beta = \frac{1}{4\pi} \oint d\varpi \beta(\mathbf{n}) = \frac{1}{4\pi} \oint d\varpi \frac{1 - \exp[-\tau(\mathbf{n})]}{\tau(\mathbf{n})}. \quad (11.15)$$

Jak již bylo v úvodu této kapitoly řečeno, pro užití Sobolevovy aproximace (Sobolev, 1947) je nutný velký rychlostní gradient v prostředí. Zabezpečíme to tím, že se vlivem Dopplerova posuvu spektrální čára posune ve frekvenci tak, že lze přenos záření v čáře řešit pouze lokálně přes malou oblast určenou **rezonanční podmínkou**

$$\frac{\nu - \nu_0}{\nu_0} = \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}}{c} = \frac{v_l}{c}. \quad (11.16)$$

Tuto rovnici diferencujeme,

$$\frac{\Delta\nu}{\nu_0} = \frac{1}{c} \frac{dv_l}{dl} \Delta l. \quad (11.17)$$

Rovnice (11.17) spojuje frekvenční interval $\Delta\nu$ záření, které interaguje s hmotou v dané spektrální čáře, se vzdáleností Δl , na které se změní makroskopická rychlost (velocity scale height). Frekvenční interval $\Delta\nu$ je šířka absorpčního profilu čáry. Vhodným přiblížením této veličiny je dopplerovská pološířka $\Delta\nu_D$ (5.51). Vzdálenost Δl popisuje velikost oblasti, v níž dochází k interakci hmoty a záření v dané spektrální čáře. Této oblasti se často říká rezonanční oblast. Její velikost označíme Δl_S a nazveme ji **Sobolevovou délkou**. Platí pro ni vztah

$$\Delta l_S = \frac{c\Delta\nu_D}{\nu_0 \frac{dv_l}{dl}} \quad (11.18)$$

Derivaci v rovnici (11.18) můžeme *pro velké rychlostní gradienty* napsat přibližně pomocí vztahu

$$\frac{dv_l}{dl} \approx \frac{v_0}{l_0} \quad (11.19)$$

kde v_0 je typická rychlost prostředí, což je rychlost expanze v daném místě, a l_0 je typická délka prostředí (typical length scale). Vyjádříme dopplerovskou pološířku pomocí tepelné rychlosti (5.51) a gradient rychlosti ve směru šíření záření vztahem (11.19), dosadíme do (11.18) a dostaneme kritérium použitelnosti Sobolevovy aproximace

$$\frac{\Delta l_S}{l_0} \approx \frac{v_{th}}{v_0}. \quad (11.20)$$

Rezonanční oblast musí být malá ve srovnání s charakteristickou délkou prostředí, což se stane v případě, že rychlost prostředí je výrazně vyšší, než je tepelná rychlost prostředí, která až na faktor $\sqrt{2}$ odpovídá izotermické rychlosti zvuku ($v_s = v_{th}/\sqrt{2}$). Proto se někdy říká Sobolevově aproximaci také nadzvuková aproximace.

P Cyg profil

P Cyg profil u expandujících obálek hvězd – vysvětlení podle obrázku 11.1

Zde chybí obrázek

Obrázek 11.1: Schéma formování P Cygni profilu. Obrázek v <https://www.ifa.hawaii.edu/users/kud/windsfromhotstars/plots/pcyg.gif>.

Kapitola 12

Přenos záření metodou Monte Carlo

- není to přímé řešení rovnice přenosu záření
- studium záření jako souboru fotonů
- 3 základní kroky
 1. vypuštění fotonových balíčků (photon packets)
 2. sledování průchodu fotonu prostředím
 3. po opuštění prostředí se zaznamená, kde a jak foton prostředí opustil

rozdělovací funkce pravděpodobnosti $p(x) dx$ – pravděpodobnost, že x leží v $\langle x, x + dx \rangle$

kumulativní pravděpodobnostní distribuční funkce

$$\int_a^{x_0} p(\xi) d\xi = \psi(x_0) \quad (12.1)$$

a platí $0 \leq \psi(x_0) \leq 1$, $\int_a^b p(\xi) d\xi = 1$

náhodné číslo ζ se vybírá jako $\zeta = \psi(x_0)$

- pravděpodobnost, že foton nebude absorbován (6.31):

$$p(\tau) = e^{-\tau}$$

pravděpodobnost, že foton bude absorbován (6.32):

$$p_a(\tau) = 1 - e^{-\tau}$$

rovnice (6.32) je vlastně kumulativní pravděpodobnostní distribuční funkce

- vybíráme náhodné číslo ζ , které definuje optickou hloubku τ_ζ
tu určíme ze vztahu (získáme logaritmováním rovnice 6.32)

$$\tau_\zeta = -\ln(1 - \zeta) \quad (12.2)$$

τ_ζ určuje náhodně vybranému fotonu optickou dráhu, kam až může doletět
 τ potom počítána („sčítána“) z opacity podél dráhy fotonu
když foton proletí dráhu τ_ζ , interaguje s hmotou
typ interakce vybírán náhodně podle relativního účinného průřezu

- vypouštění fotonů
rozdělení $I(\nu)$ často popsáno funkcí, která není analytická (například výsledek numerického výpočtu syntetického spektra)

metoda accept-reject – příklad

kolem grafu funkce $I(\nu)$ sestrojíme obdélník

1. náhodně vybíráme body o souřadnicích $[I_{\zeta_1}, \nu_{\zeta_2}]$
(ζ_1 a ζ_2 jsou náhodná čísla)
2. pro $I_{\zeta_1} \leq I(\nu_{\zeta_2})$ (bod je pod grafem funkce) je vypuštěn foton o frekvenci ν_{ζ_2}
3. pro $I_{\zeta_1} > I(\nu_{\zeta_2})$ opakujeme výběr (1.)

metoda accept/reject je pomalejší než užití kumulativní pravděpodobnostní distribuční funkce

- metoda Monte Carlo je pomalá pro přenos záření v opticky tlustém prostředí (příliš mnoho interakcí)
- přehled Monte Carlo přenosu záření – například Whitney (2011)

Část II

Přílohy

Příloha A

Speciální matematické funkce

A.1 Exponenciální integrální funkce

V kapitole 6.2 jsme použili funkce $E_1(x)$, $E_2(x)$ a $E_3(x)$. Tato funkce se nazývá ***n-tá exponenciální integrální funkce*** (*n-th exponential integral*) $E_n(x)$ a je pro $n \geq 1$ definována jako

$$E_n(x) = \int_1^\infty t^{-n} e^{-tx} dt = \int_0^1 e^{-\frac{x}{\mu}} \mu^{n-1} \frac{d\mu}{\mu}. \quad (\text{A.1})$$

Mezi jednotlivými exponenciálními integrálními funkcemi platí rekurentní vztah (pro $n \geq 1$)

$$nE_{n+1}(x) = e^{-x} - xE_n(x) \quad (\text{A.2})$$

Derivace lze jednoduše vyjádřit jako

$$E'_{n+1}(x) = -E_n(x) \quad (\text{A.3})$$

a

$$E'_1(x) = \frac{e^{-x}}{x} \quad (\text{A.4})$$

Pro $n > 1$ platí užitečný vztah

$$E_n(0) = \int_0^1 \frac{dt}{t^n} = \frac{1}{n-1} \quad (\text{A.5})$$

Více o exponenciálních integrálních funkcích je možno nalézt v Appendixu I v Chandrasekhar (1950).

A.2 Gaussova funkce

$$f(x) = \exp(-x^2) \tag{A.6}$$

A.2.1 Některé integrály Gaussovy funkce

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) = \sqrt{\pi}$$
$$\int_0^{\infty} \exp(-x^2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \tag{A.7}$$

Příloha B

Doplňky k atomární fyzice

B.1 Rydbergovy konstanty a jednotky energie

V literatuře lze nalézt sousloví „Rydbergova konstanta“ (*Rydberg constant*) v různých spojeních a souvislostech a navíc k jejímu číselnému vyjádření se používají různé jednotky, což může vést k nejasnostem, pokud se snažíme pomocí Rydbergovy konstanty něco spočítat a nejsme zběhlí v atomové fyzice.

Rydbergova konstanta pro atom nekonečné hmotnosti \mathcal{R}_∞ souvisí s ostatními základními fyzikálními konstantami vztahem (v soustavě CGS, viz například Sobelman, 1992, List of Symbols)

$$\mathcal{R}_\infty = \frac{m_e e^4}{4\pi c \hbar^3}, \quad (\text{B.1})$$

kde m_e je hmotnost elektronu, e je elementární náboj, c je rychlost světla ve vakuu, $\hbar = h/(2\pi)$ a h je Planckova konstanta. Hodnota Rydbergovy konstanty (2018) podle CODATA¹ je $10973731.568160 \pm 0.000021 \text{ m}^{-1}$, což je $109737.31568160 \pm 0.00000021 \text{ cm}^{-1}$ v soustavě CGS.

Zavádí se i **Rydbergova konstanta pro vodík** \mathcal{R}_H nahrazením hmotnosti elektronu m_e jeho redukovanou hmotností $\mu_H^{-1} = m_e^{-1} + m_p^{-1}$ (m_p je hmotnost protonu) m která s konstantou \mathcal{R}_∞ souvisí vztahem

$$\mathcal{R}_H = \frac{m_p}{m_e + m_p} \mathcal{R}_\infty \quad (\text{B.2})$$

Tuto konstantu pak můžeme použít ve známém vztahu pro energii E_n hladiny atomu vodíku s hlavním kvantovým číslem n ,

$$E_n = -\frac{\mathcal{R}_H}{n^2} \quad (\text{B.3})$$

¹<http://www.codata.org>

s tím, že výsledná energie bude vyjádřena v Rydberzích ($Ry = hc\mathcal{R}_\infty$, $1Ry = 2.1798723611035 \cdot 10^{-18}$ erg). Pokud chceme energii vyjádřit v jednotkách CGS (v erzích), musíme Rydbergovu konstantu vynásobit hc ,

$$E_n = -\frac{hc\mathcal{R}_H}{n^2} = -\frac{\bar{\mathcal{R}}_H}{n^2}. \quad (\text{B.4})$$

Konstanta $\bar{\mathcal{R}}_H = hc\mathcal{R}_H$ se také nazývá Rydbergovou konstantou, je to Rydbergova konstanta pro vodík vyjádřená v jednotkách energie.

Můžeme zavést **Rydbergovu konstantu pro libovolný atom** $\bar{\mathcal{R}}_Z$ vyjádřenou v jednotkách energie,

$$\bar{\mathcal{R}}_Z = hc \frac{m_Z}{m_Z + m_e} \mathcal{R}_\infty \quad (\text{B.5})$$

kde m_Z je hmotnost atomu s atomovým číslem Z . Tuto konstantu pak použijeme v pozměněném vztahu (B.4) pro energii vodíkpodobných iontů.

$$E_n = -Z^2 \frac{\bar{\mathcal{R}}_Z}{n^2}. \quad (\text{B.6})$$

B.2 Klasický oscilátor

- Hubeny and Mihalas (2014, str. 146)
- klasický oscilátor o hmotnosti m oscilující na úhlové frekvenci ω_0 v elektromagnetickém poli, které má intenzitu elektrického pole $\mathbf{E}_0(\omega)$, přičemž $\omega \neq \omega_0$
- pohybová rovnice tohoto oscilátoru (Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 6.10)

$$m(\ddot{\mathbf{x}} + \omega_0^2 \mathbf{x}) = e\mathbf{E}_0(\omega) - m\gamma \dot{\mathbf{x}}$$

- má řešení

$$\mathbf{x}(t) = -\frac{e}{m} \Re \left[\frac{\mathbf{E}_0(\omega) e^{i\omega t}}{(\omega^2 - \omega_0^2) + i\gamma\omega} \right] \quad (\text{B.7})$$

kde ($\nu_0 = \omega_0/(2\pi)$)

$$\gamma = \frac{4\pi e^2 \nu_0^2}{3mc^3} \quad (\text{B.8})$$

je **klasická konstanta útlumu**.

- celkový zářivý výkon (z Poyntingových vektorů) do všech směrů (Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 6.4)

$$P(t) = \frac{2e^2 [\ddot{x}(t)]^2}{3c^3}$$

- střední výkon (vystředováno přes čas po dosažení z (B.7))

$$\langle P(\omega) \rangle_T = \frac{e^4 \omega^4}{3m^2 c^3} \frac{E_0^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2}$$

- použijeme (2.58: $I_0 = cE_0^2/(8\pi)$), ze vztahu $\langle P(\omega) \rangle_T = \oint \sigma(\omega) I_0 d\varpi = \sigma(\omega) cE_0^2/(8\pi)$ dostaneme účinný průřez

$$\sigma(\omega) = \frac{8\pi e^4 \omega^4}{3m^2 c^4} \frac{1}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \gamma^2 \omega^2}$$

- aproximace $(\omega^2 - \omega_0^2) = (\omega - \omega_0)(\omega + \omega_0) \approx 2\omega_0(\omega - \omega_0)$

$$\sigma(\omega) = \frac{\pi e^2}{mc} \frac{\gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2} \quad (\text{B.9})$$

- vyjádříme jako funkci ν pomocí $\omega = 2\pi\nu$,

$$\sigma(\nu) = \frac{\pi e^2}{mc} \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\gamma}{4\pi}}{(\nu - \nu_0)^2 + \left(\frac{\gamma}{4\pi}\right)^2} \quad (\text{B.10})$$

- integrujeme přes všechny frekvence, máme **celkový účinný průřez klasického oscilátoru** σ_{cl} :

$$\sigma_{\text{cl}} = \frac{\pi e^2}{m_e c} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\frac{\gamma}{4\pi} d\nu}{(\nu - \nu_0)^2 + \left(\frac{\gamma}{4\pi}\right)^2} = \frac{\pi e^2}{m_e c} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dx}{x^2 + 1} = \frac{\pi e^2}{m_e c}, \quad (\text{B.11})$$

kde $x = 4\pi(\nu - \nu_0)/\gamma$ a platí, že $4\pi\nu_0/\gamma \rightarrow -\infty$

B.3 Fotoionizační příčný průřez

B.3.1 Vodíkpodobné ionty

- fotoionizační příčný průřez z hladiny s hlavním kvantovým číslem n (Seaton, 1959, rovnice 3) pro iont s atomovým číslem Z

$$\alpha_{\text{bf}}(n, Z, \nu) = \frac{2^6 \alpha \pi a_0^2}{3\sqrt{3}} \frac{n}{Z^2} \left(\frac{\mathcal{R}_\infty c Z^2}{\nu n^2} \right)^3 g_{\text{bf}}(n, \nu) \quad (\text{B.12})$$

kde

$g_{\text{bf}}(n, \nu)$ – Gauntův faktor

a_0 – Bohrov poloměr

$$a_0 = \hbar^2 / (m_e e^2)$$

α – konstanta jemné struktury

$$\alpha = e^2 / (\hbar c)$$

\mathcal{R}_∞ – Rydbergova konstanta (B.1)

- po dosazení

$$\alpha_{\text{bf}}(n, \nu) = \underbrace{\frac{64\pi^4 m_e e^{10}}{3\sqrt{3}ch^6}}_{2.815 \cdot 10^{29}} Z^4 \frac{1}{n^5 \nu^3} g_{\text{bf}}(n, \nu), \quad (\text{B.13})$$

viz také (Pradhan and Nahar, 2011, kapitoly 6.1 až 6.4)

B.4 Interakce atomů s vnějším magnetickým polem

Zeemanův efekt (Sobelman 1992, Chapter 8.1; Landi Degl’Innocenti 2014, Chapter 9.6; Landi Degl’Innocenti and Landolfi 2004, Chapter 3.1)

- magnetický Hamiltonián (Landi Degl’Innocenti, 2014, Chapter 9.6), B – magnetická indukce

$$\mathcal{H}_M = \mu_0 (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B} \quad (\text{B.14})$$

- pokud je perturbací neperturovaného Hamiltoniánu \mathcal{H} (pro slabá magnetická pole)

- hladina se rozštěpí na $2J + 1$ podhladin
posun energie v závislosti na $M = -J, \dots, J$,

$$\Delta E_M = \mu_0 g B M \quad (\text{B.15})$$

μ_0 Bohrov magneton (5.40)

g Landého faktor

- pro LS vazbu (Landi Degl'Innocenti and Landolfi, 2004, rovnice 3.8)

$$g_{LS} = 1 + \frac{1}{2} \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)} \quad (\text{B.16})$$

- pro jj vazbu složitější (viz Landi Degl'Innocenti and Landolfi, 2004; Sobelman, 1992), tam vztahy i pro intermediate coupling

výběrové pravidlo $\Delta M = 0, \pm 1$ (viz 5.33c)

$\Delta M = -1$ složka σ_r (red)

$\Delta M = +1$ složka σ_b (blue)
elipticky polarizované záření, kruhově polarizované ve směru magnetického pole, lineárně polarizované ve směru kolmém k magnetickému poli

$\Delta M = 0$ složka π
lineární polarizace ve směru magnetického pole

podrobněji Sobelman (1992, Chapter 8.1); Landi Degl'Innocenti and Landolfi (2004, Chapter 3.1)

Paschenův-Backův efekt (Sobelman 1992, Chapter 8.2; Landi Degl'Innocenti 2014, Chapter 9.7; Landi Degl'Innocenti and Landolfi 2004, Chapter 3.4)

- pro ΔE_B alespoň srovnatelné s ΔE_J (mezi jednotlivými hladinami)

parametr

$$\gamma = \frac{\mu_0 B}{\zeta} \quad (\text{B.17})$$

ζ charakterizuje spin-orbitální interakci, závisí na kvantových číslech hladiny (Landi Degl'Innocenti and Landolfi, 2004, rovnice 3.59)

1. $\gamma \ll 1$ – režim Zeemanova efektu
2. $\gamma \sim 1$ neúplný Paschenův-Backův režim
3. $\gamma \gg 1$ úplný Paschenův-Backův režim

pro 3. je spin-orbitální interakce perturbací magnetické interakce

změna energie rozštěpených hladin

$$\Delta E_M = \mu_0 B (M_L + 2M_S) \quad (\text{B.18})$$

M_L, M_S průměty L a S do směru magnetického pole

přechody mezi složkami splňují výběrová pravidla $\Delta M_S = 0, \Delta M_L = \pm 1, 0$

B.5 Poznámky ke struktuře jednotlivých atomů

B.5.1 He II

- čáry objeveny ve spektru ζ Pup (Pickering, 1896)
- nový prvek, označen „proto-vodík” (Lockyer, 1899)
- Bohr (1913) – čáry přiřazeny ionizovanému heliu

B.5.2 Struktura alkalických atomů

například Tennyson (2005, kapitola 6), Sobelman (1992, kapitola 3.2),

- Li, Na, K, Rb, Fr
- jeden valenční elektron
- příklad sodík Na I
konfigurace základní hladiny $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 \ ^2S_{\frac{1}{2}}$
- známé čáry sodíku: přechody $3s \ ^2S_{\frac{1}{2}} \leftrightarrow 3p \ ^2P_{\frac{1}{2}}^o$ (5896 Å), $3s \ ^2S_{\frac{1}{2}} \leftrightarrow 3p \ ^2P_{\frac{3}{2}}^o$ (5890 Å)

konfigurace	term	hladina	
3s	2S	$^2S_{\frac{1}{2}}$	
3p	$^2P^o$	$^2P^o_{\frac{1}{2}}$	$^2P^o_{\frac{3}{2}}$
4s	2S	$^2S_{\frac{1}{2}}$	
3d	2D	$^2D_{\frac{3}{2}}$	$^2D_{\frac{5}{2}}$
4p	$^2P^o$	$^2P^o_{\frac{1}{2}}$	$^2P^o_{\frac{3}{2}}$
5s	2S	$^2S_{\frac{1}{2}}$	
4d	2D	$^2D_{\frac{3}{2}}$	$^2D_{\frac{5}{2}}$
4f	$^2F^o$	$^2F^o_{\frac{5}{2}}$	$^2F^o_{\frac{7}{2}}$
5p	$^2P^o$	$^2P^o_{\frac{1}{2}}$	$^2P^o_{\frac{3}{2}}$

Tabulka B.1: Nejnižší hladiny neutrálního sodíku Na I vzestupně podle excitační energie.

Zde chybí obrázek

Obrázek B.1: Grotrianův diagram Na I. Obrázek v Bashkin and Stoner (1975).

- spektrum alkalických kovů – původ označení *spdf*, série čar analogické Balmerově sérii vodíku, název podle toho, jak vypadaly čáry: principal (z *p* stavů do základního stavu), sharp (z *s* stavů), diffuse (z *d* stavů), fundamental (z *f* stavů)
historie v Jensen (2007)

- příklad Na I, obr. B.1
- podobná spektra jiných prvků

K I : Ca II (obr.B.4)

Na I : Mg II

Li I : C IV

B.5.3 Struktura kovů alkalických zemin

například Tennyson (2005, kapitola 7.3), Sobelman (1992, kapitola 3.3.2)

- Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra

- 2 valenční elektrony ns^2 , jako He
- podobné spektrum
- rozdíly:
 - pravděpodobnější interkombinační čáry
 - dvouexcitované stavy (obr. 5.5)
zmíněno v kapitole 5.2.7
 - více ionizačních hran

B.5.4 Struktura prvků s částečně zaplněnými p -slupkami

Sobelman (1992, kapitola 3.4)

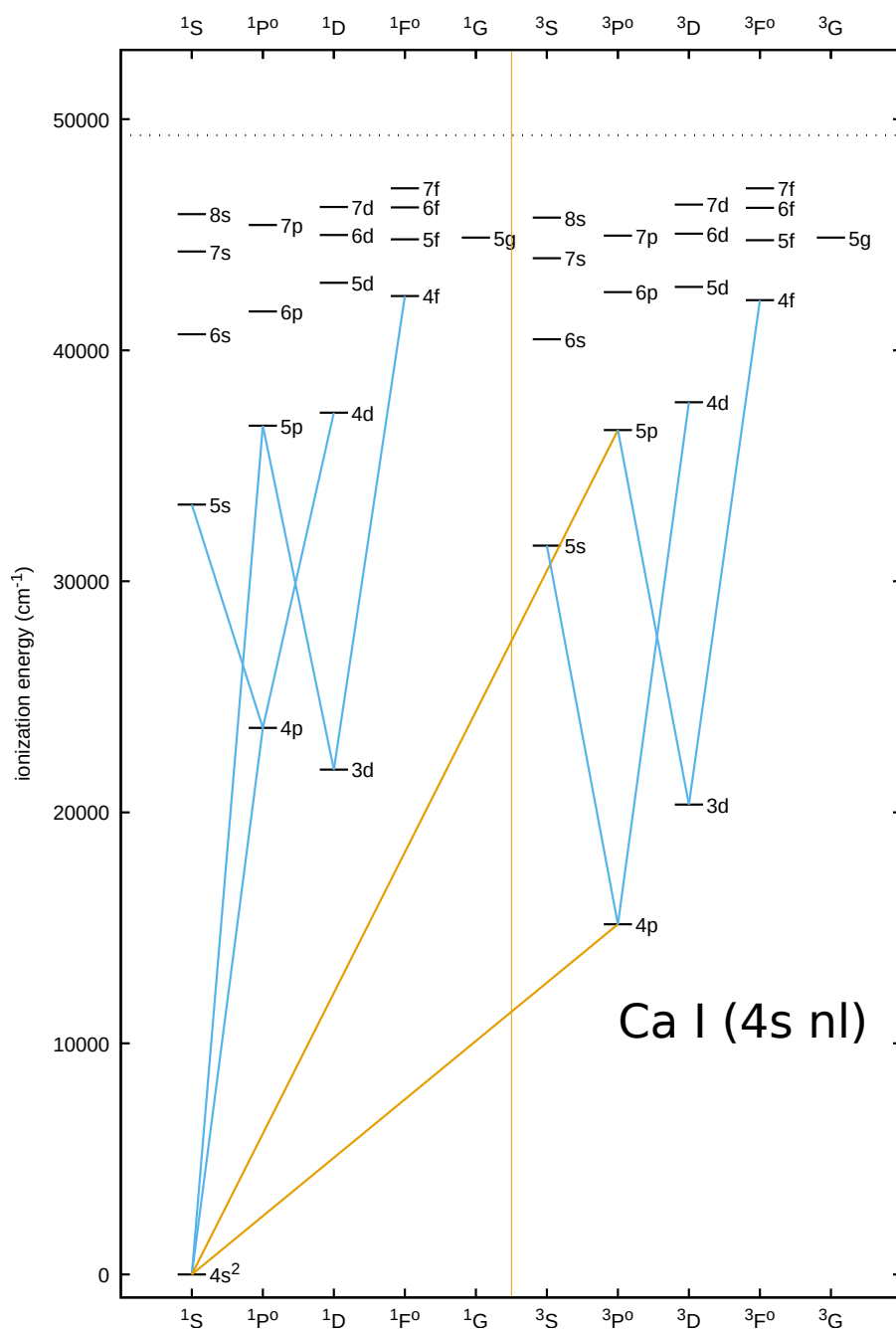
p^1 (B, Al, Ga, In, Tl)

- $1s^2 2s^2 2p^2 P_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}}$
- rezonanční přechod do $1s^2 3s^2 S_{\frac{1}{2}}$
spodní hladina doublet, horní ne \rightarrow čára doublet
- excitované konfigurace také $2s 2p^2$ (4P , 2D , 2P)
- příklad B I, obr. B.5

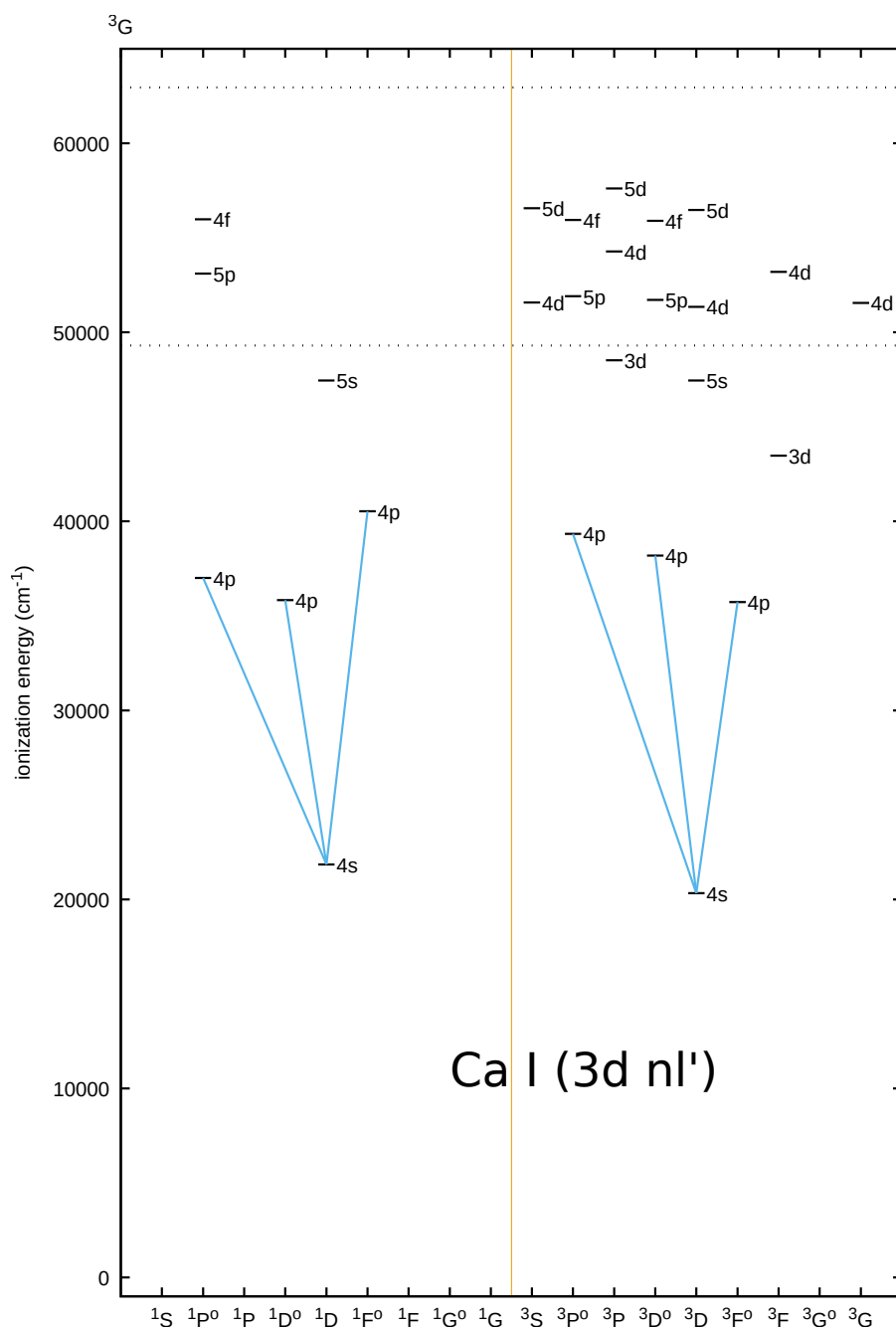
p^2 (C, Si, Ge, Sn, Pb)

- np^2 $^3P_{0,1,2}$, 1D_2 , 1S_0
- rezonanční přechod do $2s^2 2p 3s$ (1P_1 $^3P_{0,1,2}^o$)
- excitované konfigurace také $2s 2p^3$ ($^3S^o$, $^3D^o$, $^5S^o$)
- příklad Si I, obr. B.6

příklad pro dva p elektrony (p^2): C I obrázek B.7 a tabulky B.2 a B.3,
termy: 1S (singlet-S), 3P (triplet-P), 1D (singlet-D)
hladiny: 1S_0 , 3P_0 , 3P_1 , 3P_2 , 1D_2



Obrázek B.2: Schematický Grotrianův diagram termů Ca I konfigurace $4s nl$ s nižší energií. Přechody do hladin s $n = 4$ jsou vyznačeny modře, oranžově jsou interkombinační přechody mezi singlety a triplety. Ionizační hladina je vyznačena tečkovaně.



Obrázek B.3: Neúplný schematický Grotrianův diagram termů Ca I konfigurace $3dnl$ s nižší energií. Přechody do některých hladin s $n = 4$ jsou vyznačeny modře, oranžově jsou interkombinační přechody mezi singlety a triplety. Ionizační hladiny je vyznačena tečkovaně, horní čára odpovídá ionizaci do hladiny $3d$ ionizovaného vápníku. Hladiny $4s$ v tomto obrázku jsou hladiny $3d$ v obrázku B.2.

Zde chybí obrázek

Obrázek B.4: Grotrianův diagram Ca II. Obrázek v Moore and Merrill (1968, str. 12).

Zde chybí obrázek

Obrázek B.5: Grotrianův diagram B I. Obrázek v Bashkin and Stoner (1975).

p^3 (N, P, As, Sb, Bi)

- $2p^3 \ ^4S_{\frac{3}{2}}, \ ^2P_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}}^o, \ ^2D_{\frac{5}{2}, \frac{3}{2}}^o$
- rezonanční přechod do $2p^2 3s \ ^4P_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}}, \ ^2P_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}}, \ ^2D_{\frac{3}{2}, \frac{5}{2}}$
- existuje i intermediate coupling f stavů ($jl?$)
- obrázky moc složité

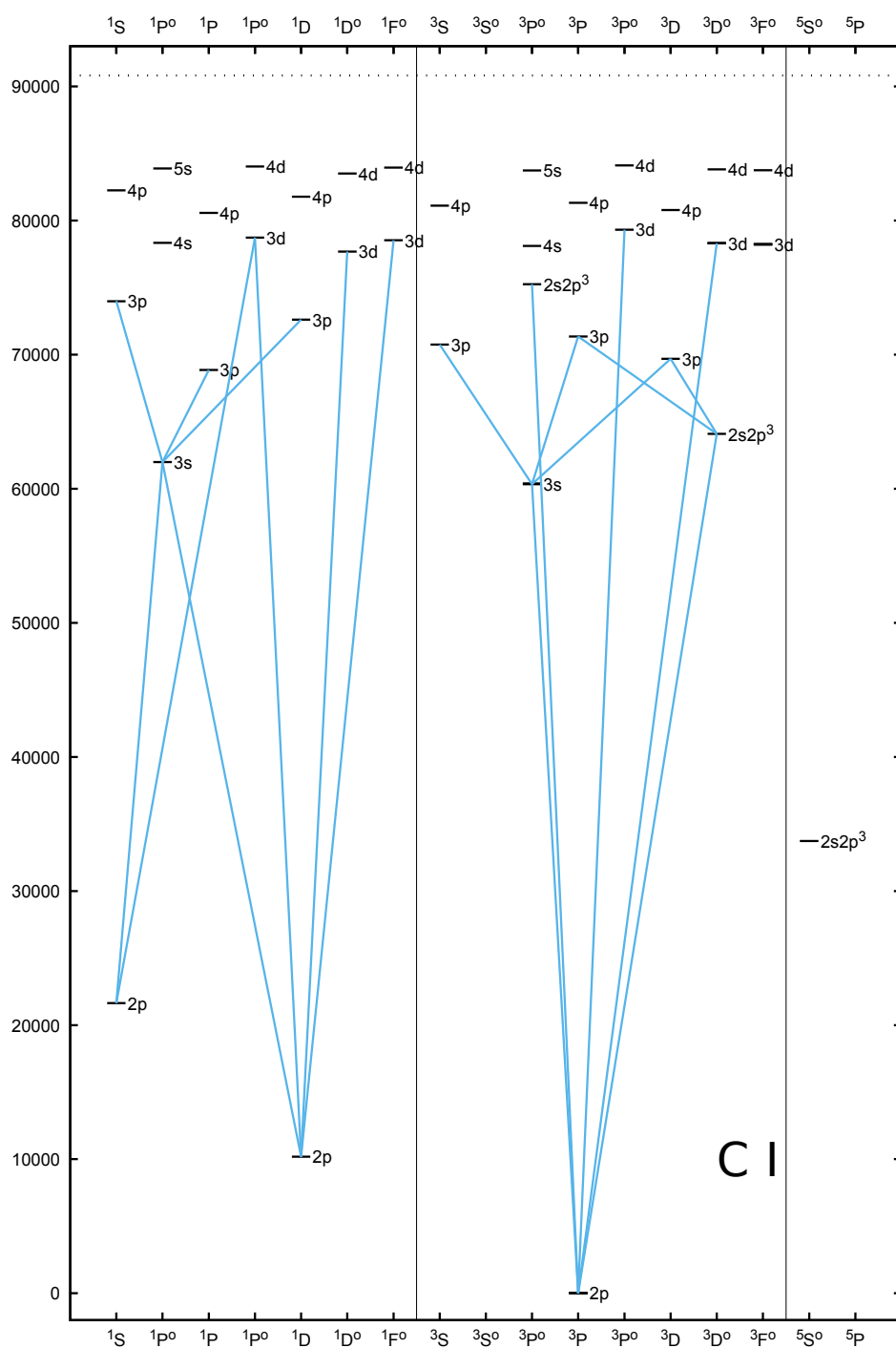
p^4 (O, S, Se, Te, Po)

- $np^4 \ ^3P_{2,1,0}, \ ^1D_2, \ ^1S_0$
- rezonanční přechod do $2p^4 3s \ ^3S_1, \ ^5S_2,$
- existuje i $2s 2p^5 \ ^3P^o$
- více systémů s různými ionizačními energiemi
- příklad O I, obr. B.8

Zde chybí obrázek

Obrázek B.6: Grotrianův diagram Si I. Obrázek v Moore and Merrill (1968, str. 26).

B. DOPLŇKY K ATOMÁRNÍ FYZICE



Obrázek B.7: Schematický Grotrianův diagram termů Cl I do $n = 4$ včetně. Zobrazeny jsou dovolené přechody mezi hladinami s $n = 2$ a $n = 3$. Dovolené přechody z hladin s $n \geq 3$ zobrazeny nejsou.

B. DOPLŇKY K ATOMÁRNÍ FYZICE

Tabulka B.2: Nejnižší hladiny neutrálního uhlíku C I.

konfigurace	singlety		triplety			kvintety	
	term	hladina	term	hladiny		term	hladiny
$2s^2 2p^2$ $2s^2 2p^2$ $2s^2 2p^2$	1D 1S	1D_1 1S_0	3P	3P_0 3P_1 3P_2			
$2s 2p^3$ $2s 2p^3$			$^3D^o$	$^3D_1^o$ $^3D_2^o$ $^3D_3^o$	$^5S^o$	$^5S_2^o$	
$2s^2 2p3s$ $2s^2 2p3s$	$^1P^o$	$^1P_1^o$	$^3P^o$	$^3P_0^o$ $^3P_1^o$ $^3P_2^o$			
$2s^2 2p3p$ $2s^2 2p3p$ $2s^2 2p3p$ $2s^2 2p3p$ $2s^2 2p3p$ $2s^2 2p3p$	1P 1D 1S	1P_1 1D_2 1S_0	3D 3S 3P	3D_1 3D_2 3D_3 3S_1 3P_0 3P_1 3P_2			
$2s 2p^3$			$^3P^o$	$^3P_0^o$ $^3P_1^o$ $^3P_2^o$			

Zde chybí obrázek

Obrázek B.8: Grotrianův diagram O I. Obrázek v Moore and Merrill (1968, str. 32).

p^5 (F, Cl, Br, I, At)

- $np^5 \ ^2P_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}}^o$,
- rezonanční přechod (u F I) do $2p^4 3s \ ^2P_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}}$, existuje i $2p^4 3s \ ^4P_{\frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}}$
- více systémů s různými ionizačními energiemi
- příklad: diagram Ar II (Cl-like), obr. B.9

Zde chybí obrázek

Obrázek B.9: Grotrianův diagram Ar II. Obrázek v Moore and Merrill (1968, str. 36).

Tabulka B.3: Možné kombinace kvantových čísel pro dva p elektrony (p^2). Podle Tatum (2020, kapitola 7.14).

	L	S	J	M	Term	Hladina
1	0	0	0	0	1S	1S_0
2	1	1	0	0	3P	3P_0
3	1	1	1	-1		3P_1
4	1	1	1	0		
5	1	1	1	1		
6	1	1	2	-2		3P_2
7	1	1	2	-1		
8	1	1	2	0		
9	1	1	2	1		
10	1	1	2	2		
11	2	0	2	-2	1D	1D_2
12	2	0	2	-1		
13	2	0	2	0		
14	2	0	2	1		
15	2	0	2	2		

Zde chybí obrázek

Obrázek B.10: Grotrianův diagram Ne I. Obrázek v Moore and Merrill (1968, str. 38).

B.5.5 Struktura vzácných plynů

Sobelman (1992, kapitola 3.4.6)

- Ne, Ar, Kr, Xe, Rn
- zaplněná p -slupka, konfigurace np^6 , základní stav $np^6 \ ^1S_0$
- silná vazba, $Z_{\text{eff}} = 5$ (viz rovnice 5.38) pro p elektrony
 \Rightarrow nejvyšší ionizační energie
- přechody ze základní hladiny v UV
- přechody mezi vyššími hladinami viditelné a infračervené
- excitované stavy $n's, n'p, n'd$
vazbová energie těchto stavů mnohem menší než vazbová energie elektronů np^5 (silná spin-orbitální interakce)
- „jádro“ (bez valenčního elektronu) charakterizováno kvantovými čísly L, S a j
- hladiny s $K = j + l$
- spin-orbitální interakce posledního elektronu: $J = K \pm \frac{1}{2}$
- notace $^{2S+1}L_j n l [K]_J$
- příklad, konfigurace $np^5 n's$
- hladiny $np^5 \left(^2P_{\frac{3}{2}}^o \right) n's \left[\frac{3}{2} \right]_{2,1}; np^5 \left(^2P_{\frac{1}{2}}^o \right) n's \left[\frac{1}{2} \right]_{1,0}$
- jl coupling
- příklad Ne I, obr. B.10
- ostatní typy vazeb zmíněny v kapitole 5.2.12

Zde chybí obrázek

Obrázek B.11: Grotrianův diagram Fe I. Obrázek v Moore and Merrill (1968, str. 62).

B.5.6 Struktura prvků s nezaplňenými *d* a *f* slupkami

Sobelman (1992, kapitola 3.5), odkaz z kapitoly 5.2.8

d slupky

- skupina železa (Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni)
- skupina paladia (Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd)
- skupina platiny (Lu, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt)
- „soutěž“ mezi hladinami *s* a *d* (například $4s$ a $3d$)
- *d* elektrony – velké množství termů a hladin
příklad: konfigurace $3d^3 4s$: 16 termů, 38 hladin
⇒ vysoké množství čar
absence velmi silných čar
- rezonanční čáry → spíše více čar
příklad Fe I, konfigurace základního stavu $3d^6 4s^2$
rezonanční přechod $3d^6 4s^2 \ ^5D_{4,3,2,1,0} \rightarrow 3d^6 4s [^6D] 4p^5 D_{4,3,2,1,0}^o$
termy s $J = 4$ mají nejnižší energii
- příklad Fe I, obr. B.11

f slupky

- lanthanoidy (Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Th, Dy, Ho, Er, Tm, Yb)
- aktinoidy (Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf)
- *f*-konfigurace – extrémně vysoké množství termů a hladin

B.6 Poznámky ke struktuře molekul

polyatomické molekuly

diatomické molekuly (ty v dalším textu)

Zde chybí obrázek

Obrázek B.12: Vibrační potenciál V dvouatomové molekuly. Srovnání harmonického (čárkovaná čára) a anharmonického potenciálu (plná čára) a souvisejících energetických hladin. D_0 je disociační energie. Obrázek v Tennyson (2005, obrázek 9.4).

odlišnosti od atomů

- neexistuje střed, kolem kterého se elektrony v molekule pohybují
- jednotlivé atomy v molekule se pohybují → vibrační a rotační pohyby atomů v molekule

B.6.1 Energetické stavy molekul

Bornova-Oppenheimerova aproximace (Born and Oppenheimer, 1927)

- oddělení pohybů jádra a elektronů (protože elektrony jsou lehké a pohybují se výrazně rychleji)
- vlnovou funkci molekuly lze zapsat jako součin vlnové funkce jádra molekuly a vlnové funkce elektronů
- můžeme oddělit i rotační a vibrační pohyby

rotační hladiny molekula se může otáčet,

- moment setrvačnosti molekuly: $I = \mu R_0^2$ (model pevného rotátoru) (R_0 je rovnovážná vzdálenost mezi jádry, $\mu = M_A M_B / (M_A + M_B)$ je redukovaná hmota molekuly)
- energetické hladiny (vlastní hodnoty energie, Hubeny and Mihalas 2014, rovnice 7.163; Rybicki and Lightman 1979, rovnice 11.22; Tennyson 2005, rovnice 9.15; Herzberg 1950, rovnice III.7)

$$E_{\text{rot}} = J(J+1) \frac{\hbar^2}{2I} = J(J+1) \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} = J(J+1)B \quad (\text{B.19})$$

pro rychlou rotaci (velké j) nutno započítat vliv odstředivé síly, hodnoty E_{rot} se trochu změní (McQuarrie, 2008, kapitola 6.5)

J nezáporné číslo (rotační kvantové číslo), $J = 0, 1, 2, \dots$
 ($J = 0 \Rightarrow E_{\text{rot}} = 0$)

B rotační konstanta molekuly (Hubeny and Mihalas 2014, rovnice 7.163; Tennyson 2005, rovnice 9.16)

$$B = \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} = \frac{\hbar^2}{2I_0} \quad (\text{B.20})$$

m kvantové číslo průmětu impulsmomentu do význačné osy (Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 7.162), Rau (2002) a ostatní knihy ho značí M
 nabývá hodnot od $-J$ do J ($2J + 1$ hodnot)

vibrační hladiny atomy v molekule mohou vibrovat

- vibrační potenciál $V(R)$ ve Schrödingerově rovnici aproximace parabolou (ok pro nízké stavy)

$$V(R) = k (R - R_e)^2$$

R_e – vzdálenost molekul

- vlastní hodnoty energie vibračních stavů (Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 7.169)

$$E_{\text{vib}} = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0, \quad v = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{B.21})$$

$\omega_0 = \sqrt{k/\mu}$ – přirozená vibrační frekvence, μ – redukovaná hmota molekuly, v – vibrační kvantové číslo,
 vztah platí dobře pro nízké energetické stavy

- nejnižší hodnota vibrační energie je $\frac{1}{2}\hbar\omega > 0$, důsledek relace neurčitosti
- realistický vibrační potenciál zahrnuje možnost disociace molekuly (obrázek B.12)
 ve vztahu pro E_{vib} nutno použít vyšší mocniny $(v + \frac{1}{2})$ (vyšší členy rozvoje)

elektronické hladiny energetické hladiny podobné atomům, ale rozdíly

- molekuly nejsou sféricky symetrické, aproximace centrálního pole nejde použít
- orbitální impulsmoment jednotlivých elektronů se nezachovává

- celkový elektronický impulsmoment L rotuje kolem mezijaderné osy (precese)
- zachovává se pouze složka orbitálního impulsmomentu ve směru osy molekuly
- $M_L \in \langle L, L - 1, \dots, 0, \dots, -L \rangle$
- $\hbar M_L$ – průmět do význačné osy (mezijaderné osy)
- používáme kvantové číslo $\Lambda = |M_L|$ – je degenerované ($g=2$)
- $\Lambda = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$, značení $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \Gamma \dots$
- celkový spin S , průmět do mezijaderné osy $M_S \equiv \Sigma$, také, neplést s označením pro $\Lambda = 0$
- značení: $^{2S+1}\Lambda$
- symetrie (analogie parity) – Tennyson (2005, kapitola 9.2.2), McQuarrie (2008, kapitola 10.2)
pro homonukleární molekuly (například H_2) se označuje symetrie vlnové funkce při záměně atomů; pokud vlnová funkce nemění znaménko, je sudá a označuje se g (gerade), pokud znaménko mění, je lichá a označuje se u (ungerade)
značení $^{2S+1}\Lambda_g$ nebo $^{2S+1}\Lambda_u$
- (McQuarrie, 2008, kapitola 10.5): pro Σ stavy: zrcadlení vlnové funkce pro zrcadlo procházející jádrem, nemění znaménko: +, mění znaménko: –
značení: $^{2S+1}\Lambda_{g/u}^{+/-}$, například $^2\Sigma_g^+$, $^3\Sigma_g^-$, $^1\Sigma_g^+$
- značení elektronických hladin – analogie s atomy (před označení termu dát kvantové číslo n valenčního elektronu) by nebyla jednoznačná, používá se ad hoc systém:
 - X – označuje základní elektronický stav
 - A, B, C, ... označuje stavy stejné multiplicity jako základní stav
 - a, b, c, ... označuje stavy jiné multiplicity než základní stav
 řazení podle energie hladin, ale jsou výjimky příklad H_2 : základní hladina: $X^1\Sigma_g^+$, vyšší hladina: $B^1\Sigma_u^+$ ještě vyšší hladina: $C^1\Pi_u$; ale hladina $b^3\Sigma_u^+$ má nižší energii než hladina $a^3\Sigma_g^+$ (Tennyson, 2005, kapitola 9.2.3)
- složka celkového impulsmomentu ve směru mezijaderné osy: $\Omega = |\Lambda + \Sigma|$, skládá se algebraicky (Hubeny and Mihalas, 2014, str. 218); není jednoznačný systém jak skládání probíhá, liší se pro různé molekuly a někdy i pro různé hladiny jedné molekuly (Tennyson, 2005, kapitola 10.4)

celková vnitřní energie molekul

$$E_{\text{int}} = E_e + E_{\text{vib}} + E_{\text{rot}} \quad (\text{B.22})$$

B.6.2 Přechody v molekulách

řádové odhady poměru energií (viz Rybicki and Lightman, 1979, kap. 11.1)

$$E_{\text{rot}} : E_{\text{vib}} : E_{\text{el}} \sim \frac{m_e}{M} : \sqrt{\frac{m_e}{M}} : 1$$

M je hmotnost jádra molekuly

- elektronické přechody $\sim \text{eV} \rightarrow$ optický, UV obor
- vibrační přechody \rightarrow near-IR, mid-IR
- rotační přechody \rightarrow far-IR, mm

elektrické dipólové přechody analogické atomárním dipólovým přechodům

čistě rotační přechody nutný permanentní dipólový moment molekuly ($d \neq 0$)

- výběrová pravidla:
 - $\Delta J = +1$ (absorpce) nebo $\Delta J = -1$ (emise)
 - $\Delta m = 0$ (McQuarrie 2008, kapitola 6.7; Hubeny and Mihalas 2014, str.221)
použita aproximace pevného rotátoru
- $d \neq 0 \Rightarrow$ homoatomické dvouatomové molekuly nemají čistě rotační spektrum v dipólovém přiblížení (jejich $d = 0$)
- frekvence přechodů

$$\omega_{J+1,J} = \frac{E_{J+1} - E_J}{\hbar} = 2(J+1)\frac{B}{\hbar} = (J+1)\frac{\hbar}{\mu R_0^2} \quad (\text{B.23})$$

- příklad čistě rotačního spektra – obr. 5.11
- závislost na $\mu \Rightarrow$ izotopy mají posunuté rotační spektrum
- rotační spektrum H_2 – elektrický kvadrupólový přechod (viz Tennyson, 2005, kapitola 10.1.3)
 - výběrové pravidlo $\Delta J = \pm 2$
 - přechody pozorovány v mezihvězdném prostředí

vibračně-rotační přechody (viz McQuarrie, 2008, kapitoly 6.3 a 6.4)

energie pro excitaci vibračních modů \gg energie pro excitaci rotačních modů,
proto existence čistě vibračního spektra nepravděpodobná

- další výběrové pravidlo
 $\Delta v = \pm 1$, pro rozdíly ± 2 atd. “vyšší harmonické” přechody

kombinovaná vibračně-rotační hladina v aproximaci pevného rotátoru a harmonického oscilátoru

$$E_{v,J} = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_0 + J(J+1)B \quad (\text{B.24})$$

- jemná struktura způsobena rotačními přechody při absorpci ($\Delta v = +1$):
 - $\Delta J = 0, \pm 1$, je možná rotační emise i absorpce, protože $E_{\text{vib}} \gg E_{\text{rot}}$
 - $\Delta J = +1$: R branch,
 - $\Delta J = -1$: P branch,
 - $\Delta J = 0$: Q branch (pokud je dovolen, pro $\Lambda \neq 0$)
 (Rybicki and Lightman 1979 má P a R obráceně)

započtení rotačně vibrační interakce způsobí posun hodnot energetických hladin daných rovnicí (B.24)

obrázek vibračně rotačního spektra (obr. 5.13)

elektronicko-vibračně-rotační přechody nutno započítat změny elektronických, rotačních i vibračních stavů

- každý elektronický přechod je vlastně soustavou pásů (vibrační přechody) s jemnou strukturou (rotační přechody)
- výběrová pravidla
 - elektronické hladiny
 - * $\Delta \Lambda = 0, \pm 1$
 - * $\Delta S = 0$ (zachování spinu)
 - vibrační hladiny
 - * Δv jakékoli kladné nebo záporné celé číslo
 - rotační hladiny
 - * $\Delta J = -1, 0, 1$, ale $J = 0 \rightarrow J = 0$ zakázaný

- * $\Delta J = 0$ je zakázaný pro Σ elektronické stavy
- dělení jemné struktury:
 - * $\Delta J = +1$: R branch,
 - * $\Delta J = -1$: P branch,
 - * $\Delta J = 0$: Q branch
- příklad značení pro H_2 :
 - $X^1\Sigma_g^+$ (základní stav) \rightarrow $B^1\Sigma_u^+$ (první excitovaný stav) – Lyman band ($\sim 1010\text{\AA}$)
 - $\rightarrow C^1\Pi_u$; (druhý excitovaný stav) – Werner band ($\sim 1100\text{\AA}$)
 - přechody jsou označovány jako pásy, mají hustou strukturu
- rotační konstanta B se pro vyšší hladiny mění, protože se mění vzdálenost mezi jádry (většinou se zvětšuje)

obrázek elektronicko vibračně rotačního spektra (obr. 5.14)

B.7 Rozptyl ve spektrálních čarách

semiklasický popis (Weisskopf, Woolley):

- předpoklady:
 - hladina se chápe jako spojitě rozdělení podhladin okolo její energie (důsledek rozšíření)
- 2 procesy rozšiřování hladin
 - přirozené rozšíření (natural / lifetime broadening), vyplývá z relace neurčitosti – vždy
 - srážkové (tlakové) rozšíření – závisí na hustotě prostředí pro hustší prostředí silnější, zanedbatelné v řídkém prostředí
- částice je vždy v určité podhladině dané hladiny

přechod mezi stavy $|i\rangle \rightarrow |e\rangle \rightarrow |f\rangle$, $E_i < E_e$, $E_f < E_e$

(i – initial, f – final, e – excited)

probíhá takto:

1. okamžitý přechod $i \rightarrow e$
2. okamžitý přechod mezi podhladinami e (způsoben srážkami)

3. okamžitý přechod $e \rightarrow f$

($i = f$ – rezonanční rozptyl, $i \neq f$ – rezonanční Ramanův rozptyl)

nutné podmínky pro semiklasický popis

- slabá pole záření (spontánní emise převažuje nad stimulovanou)
- izolovanost čar a hladin (rozšířené hladiny se nepřekrývají)

přirozené rozšíření hladiny (důsledek relace neurčitosti $\Delta E \Delta t \geq \hbar$)

profil hladiny označíme (srovnej s profilem přirozeného rozšíření čáry 5.42)

$$L(\chi, \gamma_n) \equiv \frac{\gamma_n}{\pi(\chi^2 + \gamma_n^2)} \quad (\text{B.25})$$

$L(\chi, \gamma)$ – pravděpodobnost, že atom v dané hladině je ve stavu χ

$\chi = (E - E_n)/\hbar$ – rozdíl energie podhladiny od energie n -té hladiny

$\gamma_n = \Gamma_n/(4\pi)$ – pološířka odpovídající době života hladiny n

v dalším

ξ, ξ' – frekvence v souřadné soustavě atomu,

profil čáry ϕ_{ie} mezi hladinami i a e

atom excitován z podhladiny χ_i do podhladiny $\chi'_e = \xi' - \xi_{ie} + \chi_i$

ξ' – energie absorbovaného fotonu

$\xi_{ie} = (E_e - E_i)/\hbar$ – energie mezi hladinami

$$\begin{aligned} \phi_{ie}(\xi') &= \int_{-\infty}^{\infty} L(\chi_i, \gamma_i) L(\chi'_e, \gamma_e) d\chi_i \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} L(\chi_i, \gamma_i) L(\xi' - \xi_{ie} + \chi_i, \gamma_e) d\chi_i = L(\xi' - \xi_{ie}, \gamma_i + \gamma_e) \end{aligned}$$

konvoluce dvou lorentzovských profilů (B.25) dá lorentzovský profil s pološířkou rovnou součtu pološířek

redistribuční funkce

- popisuje korelaci mezi pohlceným a vyzářeným fotonem ve spektrální čáře
- $r(\xi', \mathbf{n}'; \xi, \mathbf{n})$ – společná pravděpodobnost z $(\xi'; \xi' + d\xi')$, $d\varpi'$ a \mathbf{n}' do $(\xi; \xi + d\xi)$, $d\varpi$ a \mathbf{n}
- nerelativistický případ, můžeme tedy psát: $r(\xi', \mathbf{n}'; \xi, \mathbf{n}) = r(\xi', \xi)g(\mathbf{n}', \mathbf{n})$

limitní případy redistribuční funkce:

úplně korelovaný rozptyl – chybí krok 2.
(přechod mezi podhladinami)

$$\begin{aligned} r_{ief}^{\text{corr}}(\xi', \xi) &= \int_{-\infty}^{\infty} L(\chi_i, \gamma_i)L(\chi_e, \gamma_e)L(\chi_f, \gamma_f) d\chi_i \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} L(\chi_i, \gamma_i)L(\xi' - \xi_{ie} + \chi_i, \gamma_e)L(\xi' - \xi - \xi_{if} + \chi_i, \gamma_f) d\chi_i \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

po integraci docela složitý vztah – (viz Hubeny and Mihalas, 2014, rovnice 10.18)

zcela nekorelovaný rozptyl – úplná redistribuce záření

po excitaci do podhladiny χ'_e atom přejde náhodnými srážkami do náhodné podhladiny χ_e

$$\begin{aligned} r_{ief}^{\text{ncorr}}(\xi', \xi) &= \int_{-\infty}^{\infty} L(\chi'_i, \gamma_i)L(\chi'_e, \gamma_e)L(\chi_e, \gamma_e)L(\chi_f, \gamma_f) d\chi'_i d\chi_e \\ &= L(\xi' - \xi_{ie}, \gamma_i + \gamma_e)L(\xi - \xi_{fe}, \gamma_f + \gamma_e) = \phi_{ie}(\xi')\phi_{fe}(\xi) \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

pro $L(\chi_e, \gamma_e) = \delta(\chi'_e - \chi_e)$ dostáváme korelovaný rozptyl r_{ief}^{corr} (B.26)

obecná redistribuční funkce je kombinací redistribučních funkcí (B.26) a (B.27)

$$r_{ief}(\xi', \xi) = p_e^{\text{corr}} r_{ief}^{\text{corr}}(\xi', \xi) + (1 - p_e^{\text{corr}}) r_{ief}^{\text{ncorr}}(\xi', \xi) \quad (\text{B.28})$$

p_e^{corr} – pravděpodobnost, že foton bude vyzářen ze stejné podhladiny stavu $|e\rangle$

elementární redistribuční funkce:

rozšíření předchozího i na nerozšířené spodní hladiny

redistribuční funkce v souřadné soustavě atomu (Hummer, 1962),

skutečná redistribuční funkce je obvykle jejich lineární kombinací

I. mezi nerozšířenými hladinami

(limitní případ úplně korelované redistribuční funkce B.26)

$$\begin{aligned} r_{\text{I}}(\xi', \xi) &= \lim_{\gamma_i, \gamma_e \rightarrow 0} r_{ie}^{\text{corr}}(\xi', \xi) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - \xi') \delta(x - \xi_{ie}) \delta(x - \xi) dx \\ &= \delta(\xi' - \xi_{ie}) \delta(\xi' - \xi) \quad (\text{B.29a}) \end{aligned}$$

II. spodní hladina l nerozšířená, horní u rozšířená

(limitní případ úplně korelované redistribuční funkce B.26)

$$\begin{aligned} r_{\text{II}}(\xi', \xi) &= \lim_{\gamma_i \rightarrow 0} r_{ie}^{\text{corr}} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - \xi') L(x - \xi_{ie}, \gamma_e) \delta(x - \xi) dx \\ &= L(\xi' - \xi_{ie}, \gamma_e) \delta(\xi' - \xi) = \phi_{ie}(\xi') \delta(\xi' - \xi) \quad (\text{B.29b}) \end{aligned}$$

III. nekorelovaná redistribuce (úplná redistribuce, viz B.27)

$$r_{\text{III}}(\xi', \xi) = L(\xi' - \xi_{ie}, \gamma_{ie}) L(\xi - \xi_{ie}, \gamma_{ie}) = \phi_{ie}(\xi') \phi_{ie}(\xi) \quad (\text{B.29c})$$

IV. spodní i horní hladina rozšířené

(korelovaná redistribuce mezi dvěma rozšířenými hladinami)

$$\begin{aligned} r_{\text{V}}(\xi', \xi) &= \int_{-\infty}^{\infty} L(x - \xi', \gamma_i) L(x - \xi_{ie}, \gamma_e) L(x - \xi, \gamma_i) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} L(t, \gamma_i) L(t', \gamma_i) r_{\text{II}}(\xi' - t, \xi - t) dt' dt \quad (\text{B.29d}) \end{aligned}$$

vyjádření r_{V} pomocí r_{II} – Heinzl (1981)

redistribuční funkce v soustavě pozorovatele vystředování (B.29) přes maxwellovské rozdělení rychlostí atomů za předpokladu neměnné rychlosti během rozptylu a zanedbání aberace

$$R_X(\mathbf{n}', \nu'; \mathbf{n}, \nu) = \int_{-\infty}^{\infty} du_1 \int_{-\infty}^{\infty} du_2 \int_{-\infty}^{\infty} du_3 f(u_1, u_2, u_3) \times \\ r_X \left(\nu' - \nu_0 \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}'}{c}, \nu - \nu_0 \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}}{c} \right) g(\mathbf{n}', \mathbf{n}) \quad (\text{B.30})$$

kde

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{v}}{v_{\text{th}}} = \sqrt{\frac{m_a}{2kT}} \mathbf{v}$$

indexy stejné (X = I, II, III, V)

podrobné výpočty v Hubeny and Mihalas (2014, kapitoly 10.3, 10.4)

Příloha C

Numerické řešení rovnice přenosu záření

C.1 Diskretizace Feautrierova řešení rovnice přenosu záření

V této části popíšeme diskretizaci řešení rovnice přenosu záření druhého řádu, kterou jsme zavedli v kapitole 6.3.4 a poté použili i v kapitole 7.4.

C.1.1 Diferenční rovnice

Zapíšeme si diferenční rovnici pro danou frekvenci ν a směr šíření záření μ . Pro jednodušší zápis zavedeme označení $j \equiv j_{\nu\mu}$ a $\tau \equiv \tau_{\nu}/\mu_m$. Schusterovu rovnici přenosu záření (6.50) pak zapíšeme zjednodušeně jako

$$\frac{d^2 j}{d\tau^2} = j - S \quad (\text{C.1})$$

a podobně i okrajové podmínky (6.52)

$$\left. \frac{dj}{d\tau} \right|_{\tau_{\min}} = j(\tau_{\min}) - I^- \quad \left. \frac{dj}{d\tau} \right|_{\tau_{\max}} = I^+ - j(\tau_{\max}) \quad (\text{C.2})$$

nebo symetrickou podmínku (6.55),

$$\left. \frac{dj}{d\tau} \right|_{\tau_{\max}} = 0. \quad (\text{C.3})$$

Abychom mohli přistoupit k numerickému řešení problému, prostředí nyní diskretizujeme (viz kapitola 6.3.1.1) na D hloubkových bodů, $d = 1, \dots, D$. Derivace

j podle optické hloubky τ vyjádříme pomocí diferenčních vztahů. Pro první derivaci vyjádřenou v hloubkových bodech $d + \frac{1}{2}$ (mezi body d a $d + 1$) a $d - \frac{1}{2}$ (mezi body $d - 1$ a d) máme

$$\left. \frac{dj}{d\tau} \right|_{d+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta j_{d+\frac{1}{2}}}{\Delta \tau_{d+\frac{1}{2}}} = \frac{j_{d+1} - j_d}{\tau_{d+1} - \tau_d} \quad (\text{C.4a})$$

a

$$\left. \frac{dj}{d\tau} \right|_{d-\frac{1}{2}} = \frac{\Delta j_{d-\frac{1}{2}}}{\Delta \tau_{d-\frac{1}{2}}} = \frac{j_d - j_{d-1}}{\tau_d - \tau_{d-1}}. \quad (\text{C.4b})$$

Analogicky pro druhou derivaci vyjádřenou v bodě d pomocí prvních derivací (C.4) můžeme psát

$$\left. \frac{d^2 j}{d\tau^2} \right|_d = \frac{\left. \frac{dj}{d\tau} \right|_{d+\frac{1}{2}} - \left. \frac{dj}{d\tau} \right|_{d-\frac{1}{2}}}{\frac{1}{2} (\Delta \tau_{d+\frac{1}{2}} + \Delta \tau_{d-\frac{1}{2}})}. \quad (\text{C.5})$$

Zavedeme označení

$$\Delta \tau_d = \frac{1}{2} (\Delta \tau_{d+\frac{1}{2}} + \Delta \tau_{d-\frac{1}{2}}) \quad (\text{C.6})$$

a rovnici (C.5) přepíšeme

$$\left. \frac{d^2 j}{d\tau^2} \right|_d = \frac{1}{\Delta \tau_d} \left(\frac{j_{d+1} - j_d}{\Delta \tau_{d+\frac{1}{2}}} - \frac{j_d - j_{d-1}}{\Delta \tau_{d-\frac{1}{2}}} \right). \quad (\text{C.7})$$

Nahrazením druhé derivace v (C.1) vztahem (C.7) doplněním indexu d na pravé straně téže rovnice dostaneme diskretizovanou rovnici přenosu záření pro Schusterovy proměnné pro $d = 2, \dots, D - 1$,

$$\frac{1}{\Delta \tau_d} \left(\frac{j_{d+1} - j_d}{\Delta \tau_{d+\frac{1}{2}}} - \frac{j_d - j_{d-1}}{\Delta \tau_{d-\frac{1}{2}}} \right) = j_d - S_d. \quad (\text{C.8})$$

Kromě samotné rovnice přenosu je třeba diskretizovat i okrajové podmínky (C.2). Jejich diskretizací dostaneme pro horní okrajovou podmínku

$$\frac{j_2 - j_1}{\Delta \tau_{\frac{3}{2}}} = j_1 - I^- \quad (\text{C.9a})$$

a pro spodní okrajovou podmínku

$$\frac{j_D - j_{D-1}}{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}} = I^+ - j_D. \quad (\text{C.9b})$$

Tyto okrajové podmínky jsou přesné jen do 1. řádu. Diskretizovaná rovnice přenosu (C.8) je však přesná do 2. řádu. Okrajovou podmínku přesnou rovněž do 2. řádu získáme z Taylorova rozvoje $j(\tau)$ v bodě j_1 (Auer, 1967),

$$j_2 = j_1 + \Delta\tau_{\frac{3}{2}} \left. \frac{dj}{d\tau} \right|_1 + \frac{1}{2} \Delta\tau_{\frac{3}{2}}^2 \left. \frac{d^2j}{d\tau^2} \right|_1,$$

odkud s využitím (C.1) a (C.2) dostaneme

$$\frac{j_2 - j_1}{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}} = j_1 - I^- + \frac{1}{2} \Delta\tau_{\frac{3}{2}} (j_1 - S_1). \quad (\text{C.10})$$

Podobným postupem dostaneme i vztah pro spodní okrajovou podmínku přesnou do 2. řádu,

$$\frac{j_D - j_{D-1}}{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}} = I^+ - j_D - \frac{1}{2} \Delta\tau_{D-\frac{1}{2}} (j_D - S_D). \quad (\text{C.11})$$

C.1.2 Matice koeficientů diferenční rovnice

Diskretizované rovnice (C.8), (C.10) a (C.11) tvoří systém, který můžeme formálně zapsat jako ($d = 1, \dots, D$)

$$-A_d j_{d-1} + B_d j_d - C_d j_{d+1} = L_d, \quad (\text{C.12})$$

kde jednotlivé koeficienty pro hloubkové body $d = 2, \dots, D - 1$

$$\begin{aligned} A_d &= \frac{1}{\Delta\tau_{d-\frac{1}{2}} \Delta\tau_d} & C_d &= \frac{1}{\Delta\tau_{d+\frac{1}{2}} \Delta\tau_d} \\ B_d &= 1 + A_d + C_d & L_d &= S_d. \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

Z rovnic (C.9) dostaneme pro koeficienty v prvním hloubkovém bodě

$$\begin{aligned} A_1 &= 0, & A_D &= \frac{1}{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}} \\ B_1 &= \frac{1}{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}} + 1, & B_D &= \frac{1}{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}} + 1, \\ C_1 &= \frac{1}{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}}, & C_D &= 0 \\ L_1 &= I^-, & L_D &= I^+, \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

kteří zahrnují okrajové podmínky přesné do 1. řádu. Z rovnice (C.10) dostaneme pro koeficienty v prvním a posledním hloubkovém bodě přesné do 2. řádu

$$\begin{aligned} A_1 &= 0, & B_1 &= \frac{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}}{2} + 1 + \frac{1}{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}}, \\ C_1 &= \frac{1}{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}}, & L_1 &= \frac{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}}{2} S_1 + I^-, \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

případně po vydělení $\Delta\tau_{\frac{3}{2}}/2$

$$\begin{aligned} A_1 &= 0, & B_1 &= 1 + \frac{2}{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}} + \frac{2}{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}^2}, \\ C_1 &= \frac{2}{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}^2}, & L_1 &= S_1 + \frac{2}{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}} I^-. \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Z rovnice (C.11) pro poslední (nejhlubší) hloubkový bod dostaneme

$$\begin{aligned} A_D &= \frac{1}{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}}, & B_D &= \frac{1}{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}} + 1 + \frac{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}}{2}, \\ C_D &= 0, & L_D &= \frac{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}}{2} S_D + I^+, \end{aligned} \quad (\text{C.17})$$

případně po vydělení $\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}/2$

$$\begin{aligned} A_D &= \frac{2}{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}^2}, & B_D &= 1 + \frac{2}{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}} + \frac{2}{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}^2}, \\ C_D &= 0, & L_D &= S_D + \frac{2}{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}} I^+. \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

Dále budeme uvažovat okrajové podmínky přesné do 2. řádu. Systém (C.12) s koeficienty (C.13), (C.15) a (C.17) (případně (C.13), (C.16) a (C.18)) tvoří třídiagonální matici koeficientů (prvky matice mimo hlavní diagonálu a sousední diagonály jsou nulové) vynásobenou vektorem intenzit j . Na pravé straně rovnice je vektor pravých stran L . Pro názornost maticovou diferenční rovnici zapíšeme,

$$\begin{pmatrix} B_1 & -C_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -A_2 & B_2 & -C_2 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & -A_d & B_d & -C_d & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & -A_{D-1} & B_{D-1} & -C_{D-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & -A_D & B_D \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} j_1 \\ j_2 \\ \vdots \\ j_d \\ \vdots \\ j_{D-1} \\ j_D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ \vdots \\ L_d \\ \vdots \\ L_{D-1} \\ L_D \end{pmatrix}. \quad (\text{C.19})$$

Uvedené koeficienty zajišťují přesnost diferenční rovnice do druhého řádu. Existuje i formulace diferenčních rovnic pomocí Hermitovských diferencí, které jsou přesné do 4. řádu (Auer, 1976), ale řešení je pak méně stabilní.

C.1.3 Eliminační schéma

Soustavu rovnic (C.12) řešíme *Gaussovou eliminací*, která probíhá ve dvou krocích. V prvním kroku provádíme dopřednou eliminaci (*forward elimination*), kdy počítáme pomocné veličiny D_d a Z_d ,

$$\begin{aligned} D_1 &= B_1^{-1}C_1 \\ D_d &= (B_d - A_d D_{d-1})^{-1}C_d & d = 2, \dots, D \\ Z_1 &= B_1^{-1}L_1 \\ Z_d &= (B_d - A_d D_{d-1})^{-1}(L_d + A_d Z_{d-1}) & d = 2, \dots, D. \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

V následujícím kroku získáme zpětnou substitucí (*backward substitution*) z těchto dvou veličin řešení rovnice přenosu pro Schusterovu proměnnou j ,

$$\begin{aligned} j_D &= Z_D \\ j_d &= D_d j_{d+1} + Z_d & d = D - 1, \dots, 1. \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

Toto numerické schéma poskytuje rychlé a stabilní řešení planparalelní rovnice přenosu záření.

Vylepšená varianta eliminačního schématu (Rybicki and Hummer, 1991, Appendix A). odstraňuje některé numerické nepřesnosti plynoucí z odčítání velkých čísel, která vzniknou jako převrácené hodnoty velmi malých optických hloubek.

C.1.4 Monochromatická rovnice přenosu záření s rozptylem

Diferencujeme rovnice stejně jako v C.1. Jediná změna je, že vydatnost S_d v rovnici (C.8) je nyní vyjádřena součtem

$$S_d = [1 - (\varepsilon_\nu)_d] \sum_{m=1}^M w_m j_{dm} + (\varepsilon_\nu)_d B_d \quad (\text{C.22})$$

kde w_m jsou kvadraturní váhy (6.43) pro integraci v intervalu $\langle 0; 1 \rangle$. Zavedeme vektor $(\mathbf{j}_d) = (j_{d1}, \dots, j_{dM})$ a napíšeme maticovou analogii rovnice (C.12),

$$-A_d \mathbf{j}_{d-1} + B_d \mathbf{j}_d - C_d \mathbf{j}_{d+1} = \mathbf{L}_d, \quad (\text{C.23})$$

kde A_d , B_d a C_d jsou matice. Tuto rovnici řešíme eliminačním schématem (C.20) a (C.21), v němž jsou D_d matice a \mathbf{Z}_d vektory. Podrobné vztahy lze najít v Hubeny and Mihalas (2014, kapitola 12.2).

C.2 Diskretizace momentové rovnice přenosu záření

Numerické řešení rovnice (3.41) s vydatností (7.8), rozptyl jen na volných elektronech

- $d\tau = -\chi dz$
- celková opacita $\chi = \kappa + \sigma$ (7.6)
- celková emisivita $\eta = \eta^{\text{th}} + \eta^{\text{S}}$ (7.7)
- vydatnost bez započtení rozptylu $S = \eta^{\text{th}}/\kappa$
- celková vydatnost

$$S_{\text{tot}} = \frac{\eta^{\text{th}} + \eta^{\text{S}}}{\kappa + \sigma} = \frac{\eta^{\text{th}} + \sigma J}{\kappa + \sigma} = \frac{\kappa}{\kappa + \sigma} S + \frac{\sigma}{\kappa + \sigma} J$$

$$\frac{d^2(f^K J)}{d\tau^2} = J - S_{\text{tot}} \quad (\text{C.24})$$

dosadíme za S_{tot} , označíme

$$\tilde{r} = \frac{\kappa}{\kappa + \sigma} = \frac{1}{1 + \frac{\sigma}{\kappa}} \quad (\text{C.25})$$

a upravíme

$$\frac{d^2(f^K J)}{d\tau^2} = \tilde{r}(J - S) \quad (\text{C.26})$$

analogicky s (C.7)

$$\left. \frac{d^2(f^K J)}{d\tau^2} \right|_d = \frac{1}{\Delta\tau_d} \left(\frac{f_{d+1}^K J_{d+1} - f_d^K J_d}{\Delta\tau_{d+\frac{1}{2}}} - \frac{f_d^K J_d - f_{d-1}^K J_{d-1}}{\Delta\tau_{d-\frac{1}{2}}} \right). \quad (\text{C.27})$$

podobně jako (C.10)

$$\frac{f_2^K J_2 - f_1^K J_1}{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}} = f_1^H J_1 - H^- + \frac{1}{2}\Delta\tau_{\frac{3}{2}}\tilde{r}_1 (J_1 - S_1). \quad (\text{C.28})$$

podobně jako (C.11)

$$\frac{f_D^K J_D - f_{D-1}^K J_{D-1}}{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}} = H^+ - f_D^H J_D - \frac{1}{2}\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}\tilde{r}_D (J_D - S_D). \quad (\text{C.29})$$

C.2.1 Koeficienty diferenční rovnice

$$-A_d J_{d-1} + B_d J_d - C_d J_{d+1} = L_d, \quad (\text{C.30})$$

kde jednotlivé koeficienty pro hloubkové body $d = 2, \dots, D-1$

$$\begin{aligned} A_d &= \frac{f_{d-1}^K}{\Delta\tau_{d-\frac{1}{2}}\Delta\tau_d} & C_d &= \frac{f_{d+1}^K}{\Delta\tau_{d+\frac{1}{2}}\Delta\tau_d} \\ B_d &= \tilde{r}_d + \frac{f_d^K}{\Delta\tau_{d-\frac{1}{2}}\Delta\tau_d} + \frac{f_d^K}{\Delta\tau_{d+\frac{1}{2}}\Delta\tau_d} & L_d &= \tilde{r}_d S_d. \end{aligned} \quad (\text{C.31})$$

$$\begin{aligned} A_1 &= 0, & B_1 &= \tilde{r}_1 \frac{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}}{2} + f_1^H + \frac{f_1^K}{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}}, \\ C_1 &= \frac{f_2^K}{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}}, & L_1 &= \tilde{r}_1 \frac{\Delta\tau_{\frac{3}{2}}}{2} S_1 + H^-, \end{aligned} \quad (\text{C.32})$$

$$\begin{aligned} A_D &= \frac{f_{D-1}^K}{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}}, & B_D &= \frac{f_D^K}{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}} + f_D^H + \tilde{r}_D \frac{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}}{2}, \\ C_D &= 0, & L_D &= \tilde{r}_D \frac{\Delta\tau_{D-\frac{1}{2}}}{2} S_D + H^+, \end{aligned} \quad (\text{C.33})$$

opět se použije Gaussovo eliminační schéma (C.20), (C.21) z kapitoly C.1.3

Příloha D

Abundance chemických prvků a metalicita

typické značení proměnných a obsah pojmů *abundance* a *metalicita* se liší mezi různými astronomickými podobory

výčet a odkazy na literaturu jsou zatím neúplné

abundance

relativní abundance (zastoupení) $\tilde{\alpha}_k$ prvku k vzhledem k celkovému počtu atomů a iontů \tilde{N}_N podle počtu částic

$$\tilde{\alpha}_k = \frac{N_k}{\tilde{N}_N} \quad (\text{D.1})$$

vyjádřená vzhledem k vodíku

$$Y_k = \frac{\tilde{\alpha}_k}{\tilde{\alpha}_H} \quad (\text{D.2})$$

abundance podle hmotnosti (mass fraction)

$$\alpha_m = \frac{N_k m_k}{\tilde{N}_N \bar{m}} = \frac{N_k m_k}{\sum_k N_k m_k} \quad (\text{D.3})$$

častý zápis abundancí v astronomii (viz například Asplund et al., 2009)

příklad: abundance prvku X (*logaritmická abundance*)

$$\log \tilde{\varepsilon}_X = \log \left(\frac{N_X}{N_H} \right) + 12 \quad (\text{D.4})$$

a $\log \tilde{\varepsilon}_H = 12$

používá již Russell (1929, Tabulka 16)

D. ABUNDANCE CHEMICKÝCH PRVKŮ A METALICITA

abundance se často udávají vzhledem ke sluneční abundanci (referenční chemické složení)

metalicity

- X – abundance vodíku, Y – abundance helia, Z – abundance všeho ostatního (metalicity)
- zjednodušené souhrnné vyjádření chemického složení
- vyjadřuje se často vzhledem ke sluneční metalicitě ($Z_{\odot} = 1$)

Příloha E

Linearizace

Newtonova-Raphsonova metoda, metoda tečen

iterační metoda řešení nelineárních rovnic

jednorozměrný případ

hledáme řešení rovnice $f(x) = 0$

1. máme odhad řešení rovnice $x^{(\text{old})}$, který ale nespĺňuje rovnici přesně
2. hledáme řešení x , které rovnici splňuje přesně, řešení zapíšeme ve tvaru $x = x^{(\text{old})} + \delta x$
3. dosadíme: $f(x^{(\text{old})} + \delta x) = 0$
4. rozvineme

$$f(x) = f(x^{(\text{old})}) + \frac{df}{dx}(x^{(\text{old})})\delta x + \frac{d^2f}{dx^2}(x^{(\text{old})})(\delta x)^2 + \dots$$

členy s vyššími mocninami zanedbáme

hledáme δx , řešíme rovnici

$$f(x^{(\text{old})}) + \frac{df}{dx}(x^{(\text{old})})\delta x = 0$$

pro δx

5. upravíme řešení $x^{(\text{new})} = x^{(\text{old})} + \delta x$, řešení opět nepřesné
6. je-li δx „malé“, máme výsledek; není-li „malé“, vracíme se s novým odhadem řešení na začátek (položíme $x^{(\text{old})} = x^{(\text{new})}$)
„malost“ určíme například pomocí podmínky $|\delta x/x^{(\text{old})}| < \epsilon$, ϵ je malé a závisí na problému, který řešíme

Příloha F

Ostatní doplňky

F.1 Boltzmannova kinetická rovnice

Boltzmannova rovnice Necht' $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ je rozdělovací funkce libovolných částic vyjadřující jejich číselnou hustotu v elementu fázového prostoru $(\mathbf{r}, \mathbf{r} + d\mathbf{r})$, $(\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p})$. Sledujeme vývoj f za čas dt , ve kterém se \mathbf{r} změní na $\mathbf{r} + \mathbf{v}_p dt$ a \mathbf{p} na $\mathbf{p} + \mathbf{f}^{\text{ext}} dt$, \mathbf{f}^{ext} je vnější síla působící na částice. Pro funkci f pak platí Boltzmannova kinetická rovnice

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v}_p \cdot \nabla) f + (\mathbf{f}^{\text{ext}} \cdot \nabla_p) f = \left(\frac{Df}{Dt} \right)_{\text{coll}}, \quad (\text{F.1})$$

kde $(Df/Dt)_{\text{coll}}$ je tzv. srážkový člen.

Část III

Cvičení

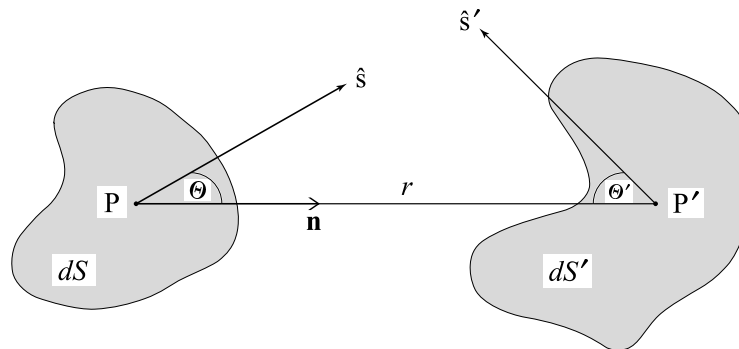
Příloha G

Cvičení

Příklady k procvičení (c7600-01)

Není-li uvedeno jinak, odkazy se vztahují k učebnímu textu „Základy fyziky hvězdných atmosfér“ (verze 21. prosince 2023) uloženému v IS.

1. Ukažte (pomocí obrázku 2.2), že specifická intenzita je podél paprsku (ve směru šíření záření) konstantní.



(kapitola 2.1)

2. Spočítejte složky vektoru toku, tenzoru tlaku záření a divergence tenzoru tlaku záření v rovinné a sférické geometrii.

(kapitola 2.7.1)

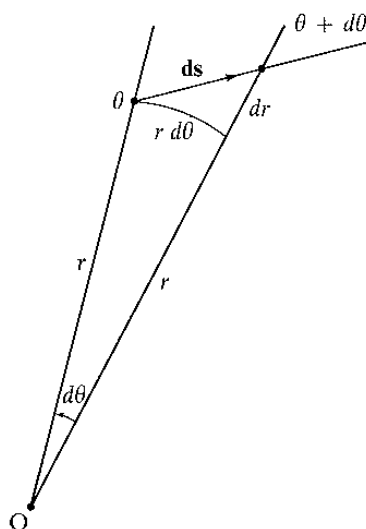
3. Ukažte, že tok popisuje celkové záření vystupující ze vzdálené hvězdy, kterou můžeme považovat za bodový zdroj.

(kapitola 2.7.4)

4. Ze základního obecného tvaru rovnice přenosu záření (3.8)

$$\left[\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{n} \cdot \nabla) \right] I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) = \eta(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) - \chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t).$$

odvoďte rovnici přenosu záření ve sférických souřadnicích. Jako pomůcku můžete použít obrázek znázorňující element dráhy ve sférických souřadnicích.



(kapitola 3.2.2)

Příklady k procvičení (c7600-02)

Není-li uvedeno jinak, odkazy se vztahují k učebnímu textu „Základy fyziky hvězdných atmosfér“ (verze 21. prosince 2023) uloženému v IS.

1. Odvoďte časově nezávislé momentové rovnice přenosu záření pro planparalelní a sféricky symetrickou aproximaci. Pro oba případy zformulujte momentové rovnice přenosu druhého řádu pro střední intezitu záření s použitím Eddingtonova faktoru.

(kapitola 3.6.1)

Příklady k procvičení (c7600-03)

Není-li uvedeno jinak, odkazy se vztahují k učebnímu textu „Základy fyziky hvězdných atmosfér“ (verze 21. prosince 2023) uloženému v IS.

1. Zapište rovnici elektrické neutrality (4.34) pro plyn, který se skládá pouze z vodíku a helia a který je v termodynamické rovnováze. Započtete i záporný vodíkový iont.

(kapitola 4.3.1)

2. Spočtete integrál Planckovy funkce přes frekvence.

(kapitola 4.5)

3. Určete hodnotu celkové hustoty zářivé energie při rovnovážném rozdělení záření.

(kapitola 4.5)

Příklady k procvičení (c7600-04)

Není-li uvedeno jinak, odkazy se vztahují k učebnímu textu „Základy fyziky hvězdných atmosfér“ (verze 21. prosince 2023) uloženému v IS.

1. Pro případ zadané teploty T a celkové koncentrace N odvod'te z rovnice elektrické neutrality

$$n_e = (N - n_e) \sum_{k=1}^K \tilde{\alpha}_k \sum_{j=1}^{J_k} j f_{jk}(n_e, T) \quad (4.34)$$

vztahy pro korekce δn_e numerického iteračního určení elektronové hustoty linearizací (Newtonovou-Raphsonovou metodou).

(kapitola 4.3.1)

Příklady k procvičení (c7600-05)

Není-li uvedeno jinak, odkazy se vztahují k učebnímu textu „Základy fyziky hvězdných atmosfér“ (verze 21. prosince 2023) uloženému v IS.

1. Ověřte, zda pro veličinu

$$a = \frac{\Gamma}{4\pi\Delta\nu_D} \quad (5.53)$$

v typických hvězdných atmosférách ($T_{\text{eff}} \approx 10\,000\text{ K}$) platí $a \ll 1$.

(kapitola 5.3.2)

2. Pro dvouatomovou molekulu je energie rotační hladiny s rotačním kvantovým číslem J

$$E_{\text{rot},J} = J(J+1)B, \quad (5.77)$$

kde B je rotační konstanta molekuly. Výběrové pravidlo pro rotační přechody je $\Delta J = \pm 1$. Jak bude vypadat rotační spektrum této molekuly?

(kapitola 5.6)

Příklady k procvičení (c7600-06)

Není-li uvedeno jinak, odkazy se vztahují k učebnímu textu „Základy fyziky hvězdných atmosfér“ (verze 21. prosince 2023) uloženému v IS.

1. Předpokládejte, že vydatnost (zdrojová funkce) je lineární funkcí optické hloubky. Řešením rovnice přenosu záření

$$\mu \frac{dI(\tau, \mu)}{d\tau} = I(\tau, \mu) - S(\tau) \quad (3.15)$$

odvodte výraz pro určení specifické intenzity $I(0, \mu)$ vystupující z polonekonečné atmosféry. Jinými slovy: odvoďte Eddingtonovu-Barbierovu relaci.

(začátek kapitoly 6)

2. Vydatnost má tvar $S(\tau) = a + b\tau$. Spočítejte $J(\tau)$, $H(\tau)$ a $K(\tau)$ pro případ planparalelní atmosféry. Zvolte vhodné okrajové podmínky.

(využijte vztah 6.6 a dosad' te do vhodných rovnic v kapitole 2.7.1)

3. Z řešení planparalelní statické rovnice přenosu záření

$$\mu \frac{dI(\tau, \mu)}{d\tau} = I(\tau, \mu) - S(\tau) \quad (3.15)$$

pro směry $+\mu$ a $-\mu$ v bodě τ_ν polonekonečné atmosféry bez z vnějšku dopadajícího záření odvoďte výraz pro střední intenzitu záření v tomto bodě (Schwarzschildovu rovnici).

(kapitola 6.2)

4. Pro kombinovanou momentovou rovnici druhého řádu s Eddingtonovým faktorem pro střední intezitu záření

$$\frac{d^2(f_\nu^K J_\nu)}{d\tau_\nu^2} = J_\nu - S_\nu$$

odvoďte okrajové podmínky. Využijte okrajové podmínky pro Feautrierovo řešení (6.52) a povrchový Eddingtonův faktor (7.46).

(kapitola 7.5.2)

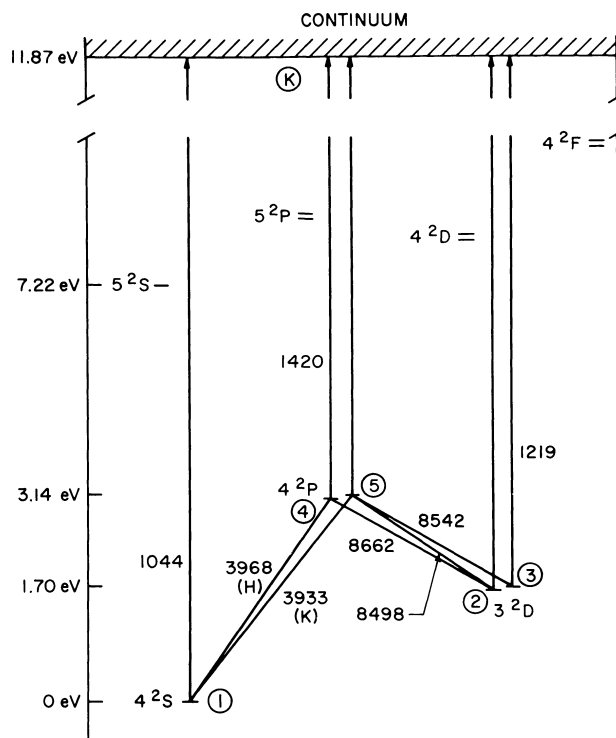
Příklady k procvičení (c7600-07)

Není-li uvedeno jinak, odkazy se vztahují k učebnímu textu „Základy fyziky hvězdných atmosfér“ (verze 21. prosince 2023) uloženému v IS.

1. Faktor zředění W je definován prostorovým úhlem ϖ , pod kterým pozorovatel vidí zdánlivý hvězdný disk, jako $W = \varpi/(4\pi)$. Vyjádřete W pomocí poloměru hvězdy a vzdálenosti pozorovatele od hvězdy.

(kapitola 9.1.1)

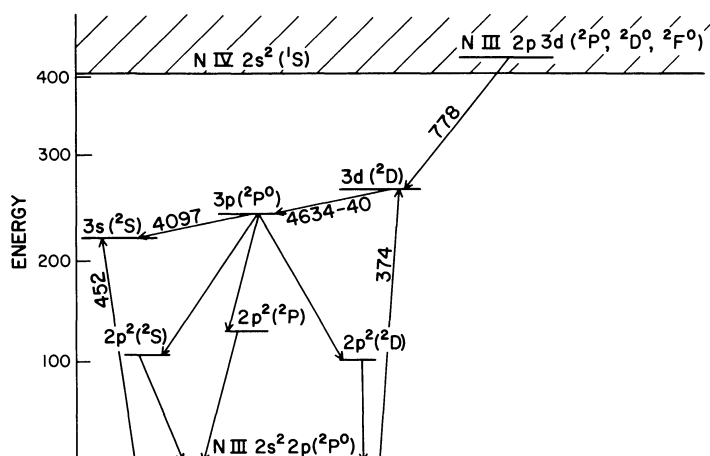
2. Pro dvě hladiny z přiloženého zjednodušeného Grotrianova diagramu ionizovaného vápníku (Ca II) napište rovnice kinetické (statistické) rovnováhy a vysvětlete je.



(kapitola 9.5, obrázek z Linsky and Avrett (1970)).

3. Pro dvě hladiny z přiloženého zjednodušeného Grotrianova diagramu dvakrát ionizovaného dusíku (N III) napište rovnice kinetické (statistické) rovnováhy a vysvětlete je. Šipky v přiloženém diagramu nemají pro toto zadání žádný význam.

G. CVIČENÍ



(kapitola 9.5, obrázek z Mihalas (1973))

4. Pro dvě hladiny z přiloženého zjednodušeného Grotrianova diagramu neutrálního sodíku (Na I) napište rovnice kinetické (statistické) rovnováhy a vysvětlete je.

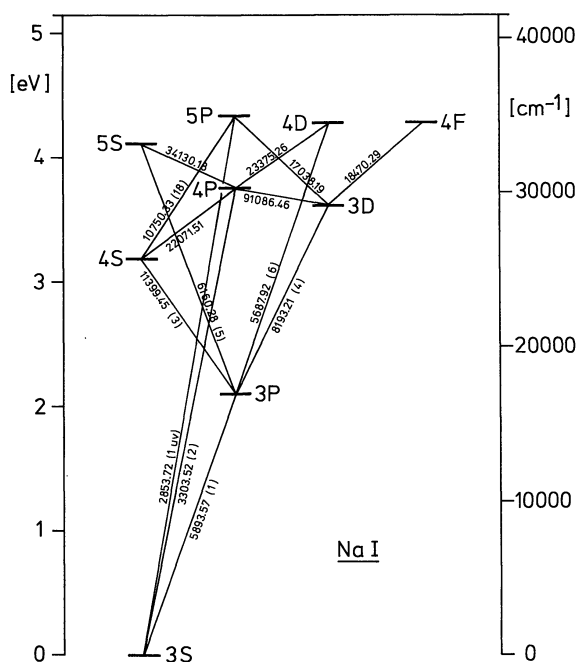


Fig. 2. Diagram of the 9-level Na I model atom

(kapitola 9.5, obrázek z Gehren (1975))

G. CVIČENÍ

5. Pro tříhladinový atom (hladiny 1, 2, 3) porovnejte četnosti přechodů v posloupnosti $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$ a v posloupnosti $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$. Zanedbejte stimulovanou emisi a srážkové přechody. Nerovnovážné záření vyjádřete zjednodušeně pomocí faktoru zředění a Planckovy funkce, použijte Wienovu limitu Planckovy funkce.

(kapitola 9.5.1)

6. Pro jednohladinový atom s možností ionizace (jednohladinový atom s kontinuem) odvod'te b -faktory vázané hladiny pro případ dominantních srážkových přechodů a pro případ dominantních zářivých přechodů.

(kapitola 9.5.1)

7. Zformulujte soustavu rovnic statistické rovnováhy pro excitační rovnováhu hladin $J = \frac{1}{2}$ a $J = \frac{3}{2}$ základního termu $2s^22p^2P^o$ ionizovaného uhlíku (C II) v mezihvězdném prostředí. Zanedbatelné četnosti přechodů zanedbejte a zanedbání zdůvodněte.

Úlohu zopakujte pro hladiny $J = 0, 1, 2$ základního termu $2s^22p^2^3P$ neutrálního uhlíku (C I).

(kapitola 9.5.1)

8. Za předpokladu hloubkově nezávislé pravděpodobnosti zničení fotonu a zanedbání stimulované emise určete pro dvouhladinový atom termalizační délku pro Dopplerův a Voigtův profil.

(kapitola 10.1.1)

9. Pro dvouhladinový atom bez kontinua odvod'te vztah pro vydatnost s využitím pravděpodobnosti zničení fotonu ε .

(kapitola 10.1.2)

Příklady k procvičení (c7600-08)

Není-li uvedeno jinak, odkazy se vztahují k učebnímu textu „Základy fyziky hvězdných atmosfér“ (verze 21. prosince 2023) uloženému v IS.

1. Za předpokladů pro Sobolevovu aproximaci vyjděte z rovnice (11.9)

$$\frac{\nu_0}{c} |\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}| \frac{dI(\mathbf{n}, y)}{dy} = \chi_L [S_L - I(\mathbf{n}, y)].$$

vyjadřující závislost specifické intenzity záření I na proměnné y zavedené jako

$$y = \int_{\nu}^{\infty} d\nu' \phi(\nu') \quad \text{pro} \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} > 0$$

$$y = \int_{-\infty}^{\nu} d\nu' \phi(\nu') \quad \text{pro} \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < 0$$

a odvod'te vztah pro specifickou intenzitu záření v Sobolevově aproximaci. Integrací rovnice odvod'te nejdříve vztah pro $I(\mathbf{n}, y)$ a pak výsledný vztah zintegrujte přes profil spektrální čáry. Využijte vztah definující Sobolevovu optickou hloubku $\tau(\mathbf{n})$ (11.10),

$$\tau(\mathbf{n}) = \frac{\chi_L c}{\nu_0 |\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}|}.$$

(kapitola 11.1)

Otázky k opakování (o7600)

Není-li uvedeno jinak, odkazy se vztahují k učebnímu textu „Základy fyziky hvězdných atmosfér“ (verze 21. prosince 2023) uloženému v IS.

1. Odvoďte rovnici přenosu záření ve sférických souřadnicích.

(kapitola 3.2.2)

2. Odvoďte Sahovu ionizační formuli ve tvaru svazujícím koncentrace základních hladin neutrálního atomu a jednou ionizovaného iontu (4.20), její zobecnění pro dva po sobě jdoucí ionty (rovnice 4.21) a ve tvaru svazujícím celkové koncentrace dvou po sobě jdoucích iontů (rovnice 4.25).

(kapitola 4.3)

3. Vyjádřete ionizační podíl iontu j atomu k

$$f_{jk}(n_e, T) = \frac{N_{jk}}{N_k}. \quad (4.27)$$

pomocí Sahových-Boltzmannových činitelů $\tilde{\Phi}_j$ iontů j zavedených pomocí

$$\frac{N_j^*}{N_{j+1}^*} = n_e \frac{U_j(T)}{U_{j+1}(T)} C_I T^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{\mathcal{E}_{Ij}}{kT}\right) = n_e \tilde{\Phi}_j(T). \quad (4.25)$$

(kapitola 4.3)

4. Definujme abundanci α_k k -tého prvku následujícím způsobem: $\alpha_k = n_k/n_n$, kde n_n je celková koncentrace všech prvků. Necht' $n = n_n + n_e$. Ukažte, že pro elektricky neutrální směs je možné podmínku zachování náboje zapsat v následujícím tvaru:

$$n_e = (n - n_e) \sum_{k=1}^K \alpha_k \sum_{j=1}^{J_k} j f_{jk}(n_e, T),$$

kde $f_{jk} = n_{j,k}/n_k$ a $n_{j,k}$ je koncentrace j -krát ionizovaného prvku k .

5. Popište procesy interakce hmoty a záření, které přispívají k opacitě, emisivitě a rozptylu.

(kapitola 5)

6. Odvoďte Milneho vztahy mezi koeficienty vázaně-volných přechodů.

(kapitola 5.1.2)

7. Profil spektrálních čar a mechanismy rozšíření.

8. Najděte formální řešení rovnice přenosu záření

$$\mu \frac{dI(\tau, \mu)}{d\tau} = I(\tau, \mu) - S(\tau) \quad (3.15)$$

mezi body τ_2 a τ_1 .

(začátek kapitoly 6)

9. Odvoďte řešení planparalelní rovnice přenosu záření v difúzním přiblížení.

(kapitola 6.1)

10. Zavedením Schusterových proměnných

$$\begin{aligned} j_{\nu\mu} &\equiv \frac{1}{2} [I(+\mu, \nu) + I(-\mu, \nu)], & (0 \leq \mu \leq 1) \\ h_{\nu\mu} &\equiv \frac{1}{2} [I(+\mu, \nu) - I(-\mu, \nu)], & (0 \leq \mu \leq 1) \end{aligned} \quad (6.48)$$

převeďte rovnici přenosu záření

$$\mu \frac{dI(\tau, \mu)}{d\tau} = I(\tau, \mu) - S(\tau) \quad (3.15)$$

na rovnici druhého řádu a zformulujte vhodné okrajové podmínky.

(kapitola 6.3.4)

11. S využitím pravděpodobnosti zničení fotonu

$$\varepsilon_\nu = \frac{\kappa_\nu}{\kappa_\nu + \sigma_\nu} \quad (7.24)$$

napište pro případ tepelné absorpce a emise za předpokladu lokální termodynamické rovnováhy v kombinaci s koherentním rozptylem vztah pro určení vydatnosti S_ν .

Za předpokladu, že pro interakci v kontinuu můžeme předpokládat lokální termodynamickou rovnováhu (LTE), napište vztah pro vydatnost pro případ rozptylu ve spektrální čáře s kontinuem v pozadí. Využijte pravděpodobnost zničení fotonu ε_ν a předpokládejte, že podíl opacit v kontinuu k opacitě ve spektrální čáře je $r = \chi_c/\chi_l$.

G. CVIČENÍ

(kapitola 7.2.1)

12. Odvod' te vztah pro termalizační optickou hloubku koherentního rozptylu a vyjádřete ji pomocí pravděpodobnosti zničení fotonu (7.24).

(kapitola 7.3)

13. Ukažte, že konvergence Λ -iterace je pro $\varepsilon \ll 1$ pomalá.

(kapitola 7.5.1)

Literatura

- Al-Tuwirqi, R., Al-Suliman, N., Khalil, A. A. I., and Gondal, M. A.: 2012, *Molecular Physics* **110(23)**, 2951
- Asplund, M., Grevesse, N., Sauval, A. J., and Scott, P.: 2009, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* **47**, 481
- Atanacković-Vukmanović, O., Crivellari, L., and Simonneau, E.: 1997, *Astrophys. J.* **487**, 735
- Auer, L.: 1967, *Astrophys. J.* **150**, L53
- Auer, L.: 1976, *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer* **16**, 931
- Auer, L. H.: 1971, *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer* **11**, 573
- Auer, L. H. and Mihalas, D.: 1969, *Astrophys. J.* **158**, 641
- Auer, L. H. and Mihalas, D.: 1970, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **149**, 65
- Avrett, E. H. and Loeser, R.: 2003, in N. Piskunov, W. W. Weiss, and D. F. Gray (eds.), *Modelling of Stellar Atmospheres*, Vol. 210 of *IAU Symposium*, p. A21, Astronomical Society of the Pacific
- Bahcall, J. N. and Wolf, R. A.: 1968, *Astrophys. J.* **152**, 701
- Bashkin, S. and Stoner, J. O.: 1975, *Atomic energy levels and Grotrian Diagrams - Vol.1: Hydrogen I - Phosphorus XV*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam
- Bates, D. R. (ed.): 1962, *Atomic and Molecular Processes*, Vol. 13 of *Pure And Applied Physics*, Academic Press
- Bates, D. R. and Dalgarno, A.: 1962, in Bates (1962), p. 245
- Bethe, H.: 1929, *Z. Phys.* **57(11-12)**, 815
- Bohr, N.: 1913, *Phil. Mag. Ser. 6* **26(151)**, 1
- Boltzmann, L.: 1884, *Ann. Phys.* **258(6)**, 291
- Born, M. and Oppenheimer, R.: 1927, *Ann. Phys.* **389(20)**, 457
- Breit, G. and Teller, E.: 1940, *Astrophys. J.* **91**, 215
- Cannon, C. J.: 1973a, *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer* **13**, 627
- Cannon, C. J.: 1973b, *Astrophys. J.* **185**, 621
- Castor, J. I.: 2004, *Radiation Hydrodynamics*, Cambridge University Press, Cambridge
- Chandrasekhar, S.: 1947, *Astrophys. J.* **105**, 424

LITERATURA

- Chandrasekhar, S.: 1950, *Radiative transfer*, Clarendon Press, Oxford
- Chandrasekhar, S.: 1958, *An introduction to the study of stellar structure.*, Dover Publications, New York
- Chandrasekhar, S.: 1960, *Radiative transfer*, Dover Publications, New York
- Chevallier, L.: 2001, in F. Combes, D. Barret, and F. Thévenin (eds.), *SF2A-2001: Semaine de l'Astrophysique Francaise*, p. 181, EDP Sciences
- Cooper, J., Ballagh, R. J., Burnett, K., and Hummer, D. G.: 1982, *Astrophys. J.* **260**, 299
- Cooper, J., Hubeny, I., and Oxenius, J.: 1983, *Astron. Astrophys.* **127**, 224
- Däppen, W., Anderson, L., and Mihalas, D.: 1987, *Astrophys. J.* **319**, 195
- De Greve, J. P., Blomme, R., and Hensberge, H. (eds.): 1997, *Stellar atmospheres : theory and observations*, Vol. 497 of *Lecture Notes in Physics*, Berlin, Springer Verlag
- Dopita, M. A. and Sutherland, R. S.: 2005, *Astrophysics of the diffuse universe*, Springer-Verlag, Berlin, 3rd printing edition
- Drake, G. W. F. (ed.): 2006, *Springer Handbook of Atomic, Molecular, and Optical Physics*, Springer Verlag Berlin
- Eggert, J.: 1919, *Phys. Z.* **20**, 570
- Einstein, A.: 1916a, *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* **18**, 318
- Einstein, A.: 1916b, *Mitteilungen der Physikalischen Gesellschaft Zürich* **18**, 47
- Feautrier, P.: 1964, *C. R. Acad. Sci. Paris* **258**, 3189
- Gaunt, J. A.: 1930a, *Proc. Roy. Soc. London A* **126**, 654
- Gaunt, J. A.: 1930b, *Phil. Trans. Roy. Soc. London A* **229**, 163
- Gehren, T.: 1975, *Astron. Astrophys.* **38(2)**, 289
- Gorham, G.: 1991, *Studies in History and Philosophy of Science* **22(3)**, 471
- Grottrian, W.: 1928, *Graphische Darstellung der Spektren von Atomen und Ionen mit ein, zwei und drei Valenzelektronen. Zweiter Teil*, Vol. 7 of *Struktur der Materie in Einzeldarstellungen*, Verlag von Julius Springer, Berlin
- Hanson, D. M., Harvey, E., Sweeney, R., and Zielinski, T. J.: 2021, *Quantum States of Atoms and Molecules*, <https://chem.libretexts.org/@go/page/4467>
- Heinzel, P.: 1981, *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer* **25**, 483
- Herzberg, G.: 1950, *Molecular spectra and molecular structure. Vol.1: Spectra of diatomic molecules*, D. Van Nostrand Company, Princeton, 2nd edition
- Hildebrand, F. B.: 1974, *Introduction to numerical analysis, 2nd ed.*, McGraw-Hill
- Hubený, I.: 1976, *Ph.D. thesis*, Astronomický ústav ČSAV, kandidátská disertační práce
- Hubeny, I.: 1997, in De Greve et al. (1997), p. 1
- Hubeny, I., Hummer, D. G., and Lanz, T.: 1994, *Astron. Astrophys.* **282**, 151
- Hubeny, I. and Mihalas, D.: 2014, *Theory of Stellar Atmospheres*, Princeton

LITERATURA

- University Press, Princeton
- Hummer, D. G.: 1962, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **125**, 21
- Hummer, D. G. and Mihalas, D.: 1988, *Astrophys. J.* **331**, 794
- Hummer, D. G. and Rybicki, G. B.: 1971, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **152**, 1
- Hund, F.: 1927, *Linienspektren und periodisches System der Elemente*, Vol. 4 of *Struktur der Materie in Einzeldarstellungen*, Verlag von Julius Springer, Berlin
- Hylleraas, E. A.: 1930a, *Z. Phys.* **60(9-10)**, 624
- Hylleraas, E. A.: 1930b, *Zeitschrift für Physik* **65(3-4)**, 209
- Jeans, J. H.: 1905, *Proc. Roy. Soc. London A* **76(513)**, 545
- Jefferies, J. T.: 1968, *Spectral line formation*, Blaisdell Publ. Comp., Waltham
- Jensen, W. B.: 2007, *Journal of Chemical Education* **84(5)**, 757
- Jones, H. P.: 1973, *Astrophys. J.* **185**, 183
- Kirchhoff, G.: 1860a, *Ann. Phys.* **185(2)**, 275
- Kirchhoff, G.: 1860b, in *Monatsberichte der Königlich Preussische Akademie des Wissenschaften zu Berlin. Aus dem Jahre 1859*, pp 783–788, Königliche Akademie der Wissenschaften, Berlin
- Kourganoff, V. and Busbridge, I. W.: 1952, *Basic methods in transfer problems*, Dover Publications, New York
- Kramers, H. A.: 1923, *Phil. Mag. Ser. 6* **46(275)**, 836
- Kubát, J.: 2010, in R. Monier, B. Smalley, G. Wahlgren, and P. Stee (eds.), *EAS Publications Series*, Vol. 43 of *EAS Publications Series*, pp 1–18
- Kvasnica, J.: 1983, *Statistická fyzika*, Academia, Praha
- Lamb, W. E. and Retherford, R. C.: 1947, *Phys. Rev.* **72(3)**, 241
- Landi Degl’Innocenti, E.: 2014, *Atomic Spectroscopy and Radiative Processes*, UNITEXT for Physics, Springer, Milan
- Landi Degl’Innocenti, E. and Landolfi, M.: 2004, *Polarization in Spectral Lines*, Vol. 307 of *Astrophysics and Space Science Library*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht
- Linsky, J. L. and Avrett, E. H.: 1970, *Publ. Astron. Soc. Pacific* **82(485)**, 169
- Lockyer, N.: 1899, *Proc. Roy. Soc. London A* **65**, 186
- Lotz, W.: 1967a, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **14**, 207
- Lotz, W.: 1967b, *Z. Phys.* **206**, 205
- Martin, W. C. and Wiese, W. L.: 2006, in Drake (2006), p. 175
- McCaughan, J. B. T.: 1980, *Physics Education* **15(4)**, 255
- McQuarrie, D. A.: 1976, *Statistical Mechanics*, Harper & Row Publ., New York
- McQuarrie, D. A.: 2008, *Quantum Chemistry*, University Science Books, Mill Valley, California, 2nd edition
- Menzel, D. H.: 1937, *Astrophys. J.* **85**, 330
- Menzel, D. H. (ed.): 1966, *Selected papers on the transfer of radiation*, Dover Publications, New York
- Menzel, D. H. and Pekeris, C. L.: 1935, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **96**, 77

LITERATURA

- Mihalas, D.: 1973, *Publ. Astron. Soc. Pacific* **85(507)**, 593
- Mihalas, D.: 1978, *Stellar Atmospheres*, W. H. Freeman & Co., San Francisco, 2nd edition
- Mihalas, D. and Weibel-Mihalas, B.: 1984, *Foundations of radiation hydrodynamics*, Oxford University Press, New York
- Milne, E. A.: 1921, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **81**, 361
- Milne, E. A.: 1924, *Phil. Mag. Ser. 6* **47**, 209
- Milne, E. A.: 1930, *Thermodynamics of the Stars*, Vol. 3 of *Handbuch der Astrophysik*, pp 65–255, Julius Springer, Berlin
- Milne, E. A.: 1966, in Menzel (1966), pp 77–269, reprinted
- Moore, C. E.: 1952, *Atomic energy levels. As Derived From the Analyses of Optical Spectra. Volume II.*, Vol. 467 of *Circular of the National Bureau of Standards*, National Bureau of Standards
- Moore, C. E. and Merrill, P. W.: 1968, *Partial Grotrian Diagrams of Astrophysical Interest*, Vol. 23 of *National Standard Reference Data Series*, National Bureau of Standards, NSRDS-NBS 23
- Ng, K. C.: 1974, *J. Chem. Phys.* **61**, 2680
- Olson, G. L., Auer, L. H., and Buchler, J. R.: 1986, *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer* **35**, 431
- Osterbrock, D. E.: 1962, *Astrophys. J.* **135**, 195
- Perrin, F.: 1942, *J. Chem. Phys.* **10**, 415
- Pickering, E. C.: 1896, *Harvard College Observatory Circular* **12**, 1
- Planck, M.: 1900a, *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* **2(13)**, 202
- Planck, M.: 1900b, *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* **2(17)**, 237
- Planck, M.: 1901, *Ann. Phys.* **309(3)**, 553
- Pradhan, A. K. and Gallagher, J. W.: 1992, *At. Data Nucl. Data Tables* **52**, 227
- Pradhan, A. K. and Nahar, S. N.: 2011, *Atomic Astrophysics and Spectroscopy*, Cambridge University Press, Cambridge
- Rau, A. R. P.: 2002, *Astronomy-inspired Atomic and Molecular Physics*, Vol. 271 of *Astrophysics and Space Science Library*, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht
- Rayleigh, L.: 1900, *Phil. Mag. Ser. 5* **49**, 539
- Russell, H. N.: 1929, *Astrophys. J.* **70**, 11
- Russell, H. N. and Saunders, F. A.: 1925, *Astrophys. J.* **61**, 38
- Russell, H. N., Shenstone, A. G., and Turner, L. A.: 1929, *Phys. Rev.* **33**, 900
- Rybicki, G. B.: 1971, *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer* **11**, 589
- Rybicki, G. B. and Hummer, D. G.: 1991, *Astron. Astrophys.* **245**, 171
- Rybicki, G. B. and Lightman, A. P.: 1979, *Radiative processes in astrophysics*, John Wiley & Sons Inc., New York
- Rydberg, J. R.: 1890, *Phil. Mag. Ser. 5* **29(179)**, 331

LITERATURA

- Saha, M. N.: 1920, *Phil. Mag. Ser. 6* **40(238)**, 472
- Schadee, A.: 1964, *Bull. Astron. Inst. Netherlands* **17**, 311
- Schmid, H. M.: 1989, *Astron. Astrophys.* **211**, L31
- Schuster, A.: 1905, *Astrophys. J.* **21**, 1
- Schwarzschild, K.: 1914, in *Sitzungsberichte der Königlich Preußischen Akademie der Wissenschaften*, pp 1183–1200, Verlag der Königlichen Akademie der Wissenschaften, Berlin
- Schwarzschild, K.: 1966, in Menzel (1966), pp 35–51, translated by Rudolf Loeser
- Scudder, J. D.: 1992, *Astrophys. J.* **398**, 319
- Scudder, J. D.: 1994, *Astrophys. J.* **427**, 446
- Seaton, M. J.: 1959, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **119**, 81
- Seaton, M. J.: 1962, in D. R. Bates (ed.), *Atomic and Molecular Processes*, Vol. 13 of *Pure and Applied Physics*, pp 374–420, Academic Press, New York and London
- Seaton, M. J.: 1964, *Planet. Space Sci.* **12**, 55
- Shoub, E. C.: 1977a, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **34**, 259
- Shoub, E. C.: 1977b, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **34**, 277
- Shu, F. H.: 1991, *The Physics of Astrophysics, Volume I Radiation*, University Science Books, Mill Valley
- Sobelman, I. I.: 1992, *Atomic spectra and radiative transitions, 2nd ed.*, Springer Berlin
- Sobolev, V. V.: 1947, *Dvižuščijesja oboločki zvězd*, Izdatělstvo LGU, Leningrad
- Spitzer, Lyman, J. and Greenstein, J. L.: 1951, *Astrophys. J.* **114**, 407
- Spitzer, L.: 1956, *Physics of Fully Ionized Gases*, Interscience Publishers, New York
- Stefan, M. J.: 1879, *Sitzungsberichte der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Classe der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften* **79**, 391
- Stewart, B.: 1858, *Transactions of the Royal Society of Edinburgh* **22**, 1
- Stewart, B.: 1859, *Transactions of the Royal Society of Edinburgh* **22**, 59
- Stewart, B.: 1860, *Proc. Roy. Soc. London* **10**, 385
- Stokes, G. G.: 1852, *Trans. Cambridge Phil. Soc.* **9**, 399
- Tatum, J.: 2020, *Stellar Atmospheres*, Libretexts, University of Victoria (<http://orca.phys.ubic.ca/~tatum/stellatm.html>), <https://phys.libretexts.org/@go/page/6642>
- Tatum, J. B.: 1966, *Publ. DAO Victoria* **13**, 1
- Tennyson, J.: 2005, *Astronomical Spectroscopy: An Introduction to the Atomic and Molecular Physics of Astronomical Spectra*, Vol. 2 of *Imperial College Press Advanced Physics Texts*, Imperial College Press, London
- Thomas, R. N.: 1957, *Astrophys. J.* **125**, 260
- Trujillo Bueno, J. and Fabiani Bendicho, P.: 1995, *Astrophys. J.* **455**, 646

LITERATURA

- Unsöld, A.: 1955, *Physik der Sternatmosphären*, Springer Verlag, Berlin
van Regemorter, H.: 1962, *Astrophys. J.* **136**, 906
Walker, J.: 1904, *The Analytical Theory of Light*, Cambridge University Press
Walker, M. J.: 1954, *Amer. J. Phys.* **22**, 170
Weisskopf, V.: 1932, *Z. Phys.* **75**, 287
Whitney, B. A.: 2011, *Bull. Astron. Soc. India* **39**, 101
Wien, W.: 1893, *Annalen der Physik* **285(8)**, 633
Wien, W.: 1896, *Ann. Phys.* **294(8)**, 662
Wildt, R.: 1939a, *Astrophys. J.* **89**, 295
Wildt, R.: 1939b, *Astrophys. J.* **90**, 611
-

0