

Формирование спектральных линий в неравновесных условиях





Локальное термодинамическое равновесие (ЛТР)

Концентрации атомов – по формулам Больцмана и Саха
при локальных T_e и N_e

$$T_{ion} = T_{exc} = T_e$$

При каких условиях предположение ЛТР удовлетворительно ?

1) $C_{ij} \gg R_{ij}$ в каждом переходе

$$\sum_{j \neq i} n_j C_{ji} = n_i \sum_{j \neq i} C_{ij} \longrightarrow \frac{n_j}{n_i} = \frac{g_j}{g_i} e^{-h\nu/kT}$$

Локальное термодинамическое равновесие (ЛТР)



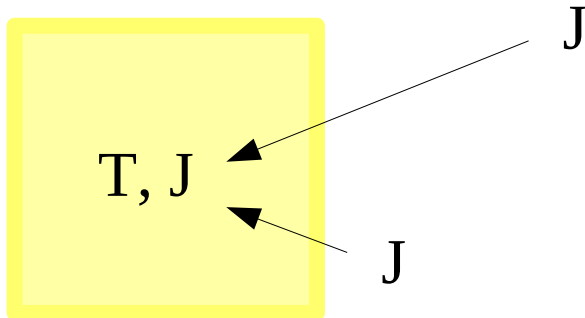
При каких условиях предположение ЛТР удовлетворительно ?

2) $J_\nu = B_\nu(T_e)$ на всех частотах $\rightarrow$ детальный баланс
или $\tau_\nu > 1$ на всех важных для исследуемого атома частотах

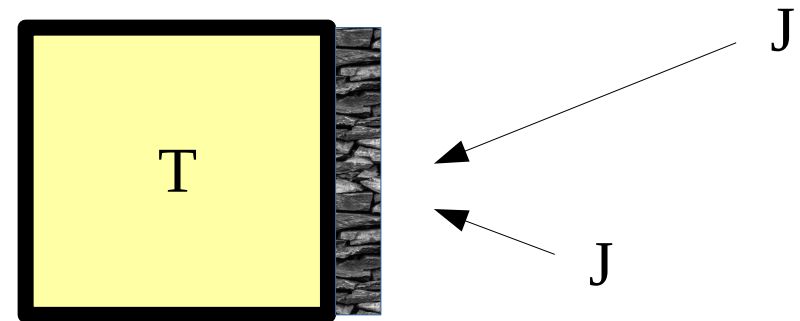
Функция источников:

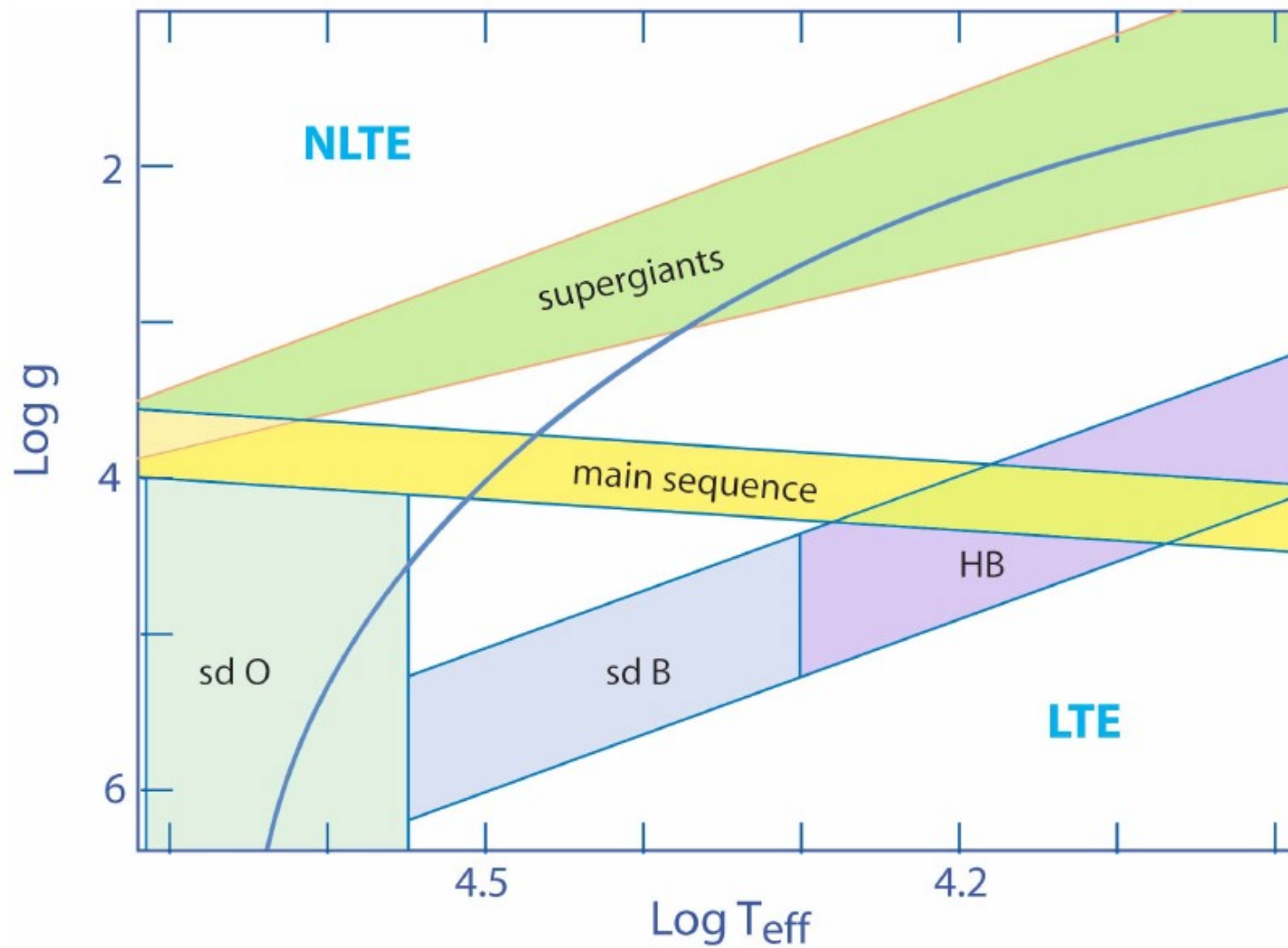
$$S_\nu = \frac{\eta_\nu}{\kappa_\nu} = \frac{\kappa_\nu^t B_\nu + \kappa_\nu^s J_\nu}{\kappa_\nu^t + \kappa_\nu^s} = B_\nu$$

Во внешних слоях, а также при
высоких температурах велико
влияние не локальных условий



Условия выполняются в
глубоких слоях атмосферы





Kudritzki 1978

	ПТР	ЛТР	не – ЛТР
Температура	Постоянная	переменная	Переменная
Поле излучения	постоянное $B(T)$	переменное	Переменное
Возбуждение атомов	формула Больцмана	формула Больцмана	??????
Ионизация атомов	формула Саха	формула Саха	??????
Скорости частиц	Распределение Максвелла	Распределение Максвелла	Распределение Максвелла (?)

Отклонение поля излучения в солнечной атмосфере от равновесного

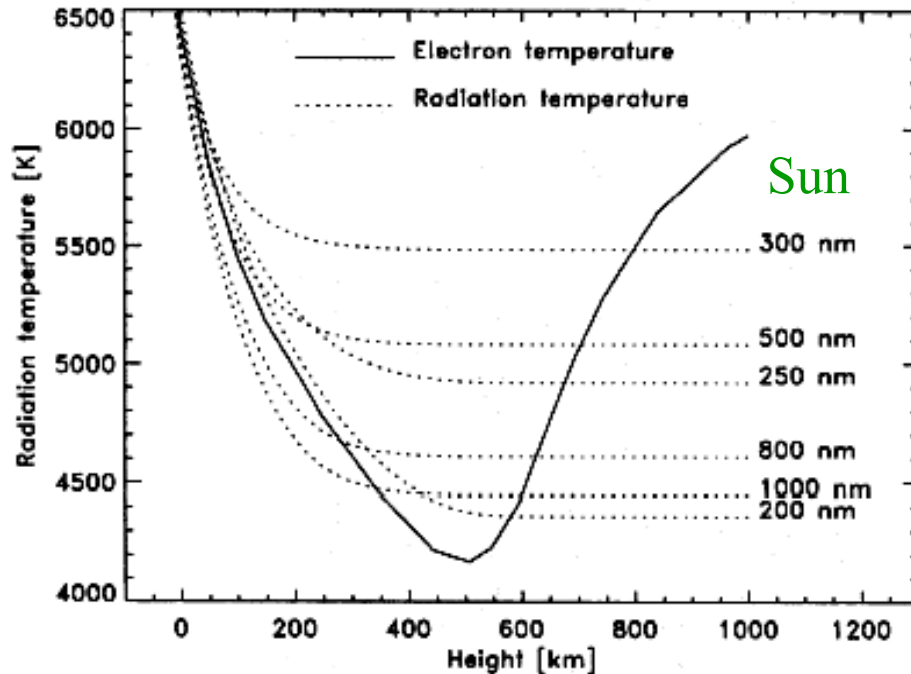
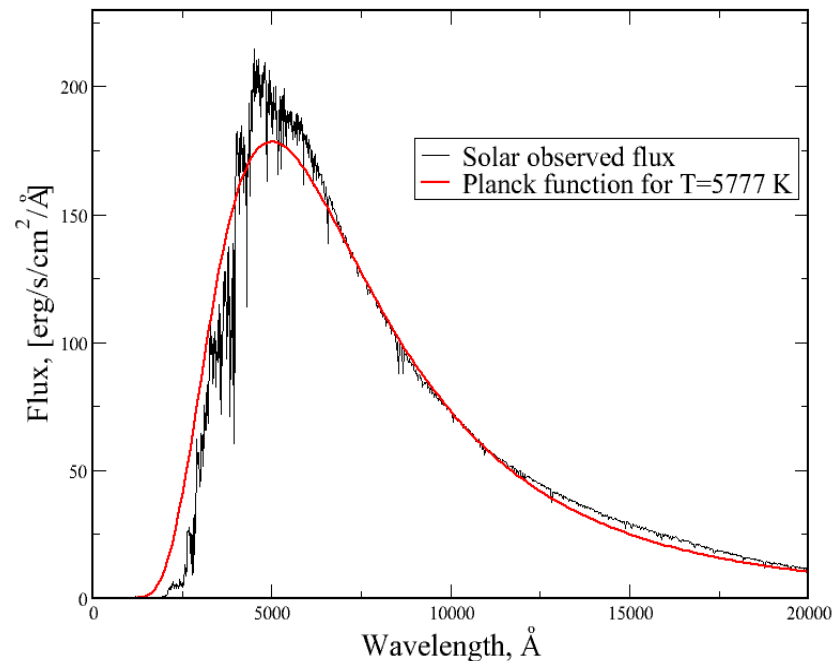
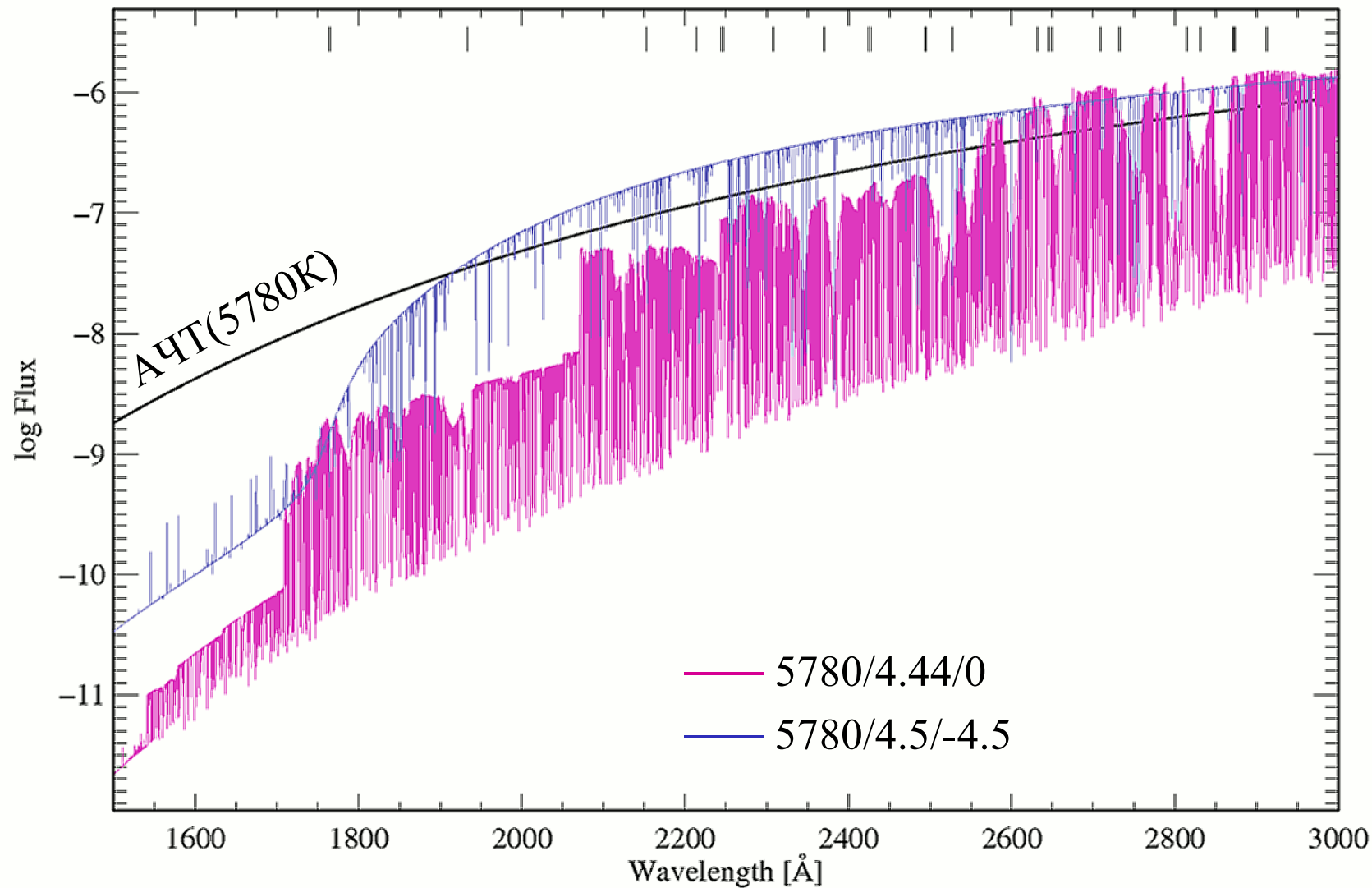


Fig. 3. Dotted: Equivalent black body radiation temperatures at different wavelengths. Solid: VAL3-C electron temperature

- $h < 0: J_\nu = B_\nu(T)$
- $h = 0 - 300 \text{ km}$
 $J_\nu > B_\nu(T)$ для $\lambda \leq 5000 \text{ \AA}$
 $J_\nu < B_\nu(T)$ для $\lambda \geq 8000 \text{ \AA}$



Отклонение поля УФ излучения в солнечной атмосфере от равновесного



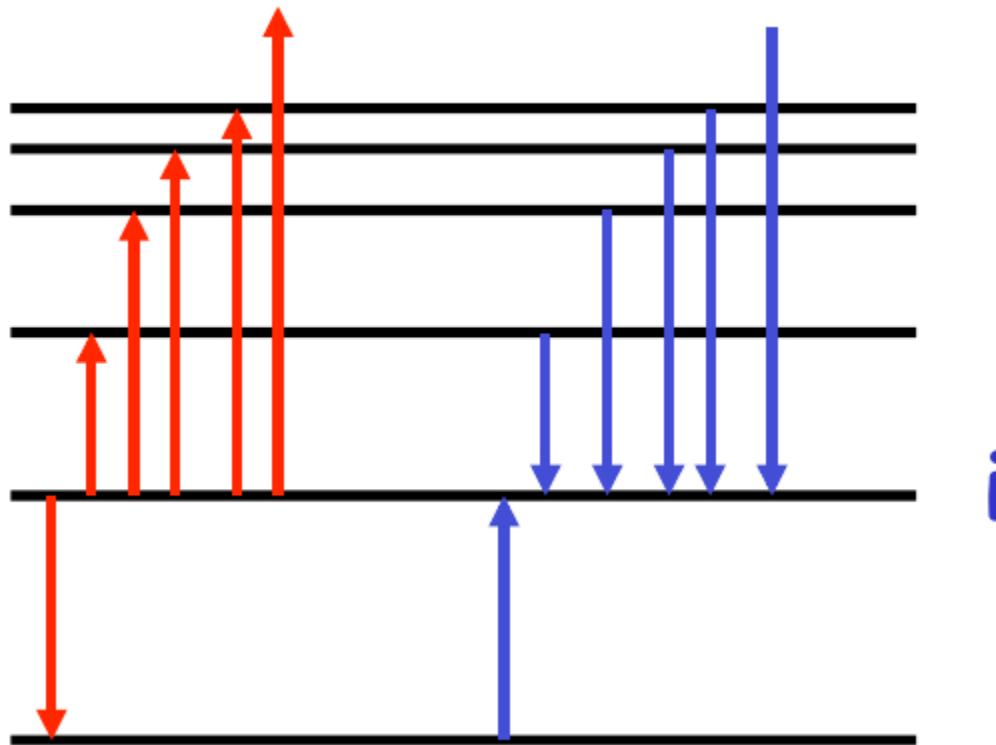
Элементарные процессы в атомах

- Статистическое равновесие (*стационарные атмосферы*)

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = 0 \longrightarrow \sum_{j \neq i} n_j (R_{ji} + C_{ji}) = n_i \sum_{j \neq i} (R_{ij} + C_{ij}) \quad i = 1, \dots, NL$$

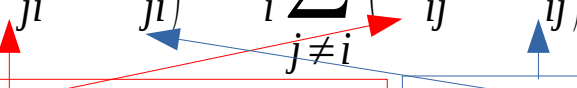
Опустошение уровня

Заселение уровня



Элементарные процессы в атомах

- Статистическое равновесие (*стационарные атмосферы*)

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = 0 \longrightarrow \sum_{j \neq i} n_j (R_{ji} + C_{ji}) = n_i \sum_{j \neq i} (R_{ij} + C_{ij}) \quad i = 1, \dots, NL$$


Радиативные процессы:

b-f
фотоионизация,
фоторекомбинация,
автоионизация, диэлектронная,
рекомбинация

b-b:
фотовозбуждение,
индуцированные переходы вниз,
спонтанный переход

Нелокальные
величины !

$$R_{ij}, R_{ji} \sim I_\nu$$

Ударные процессы:

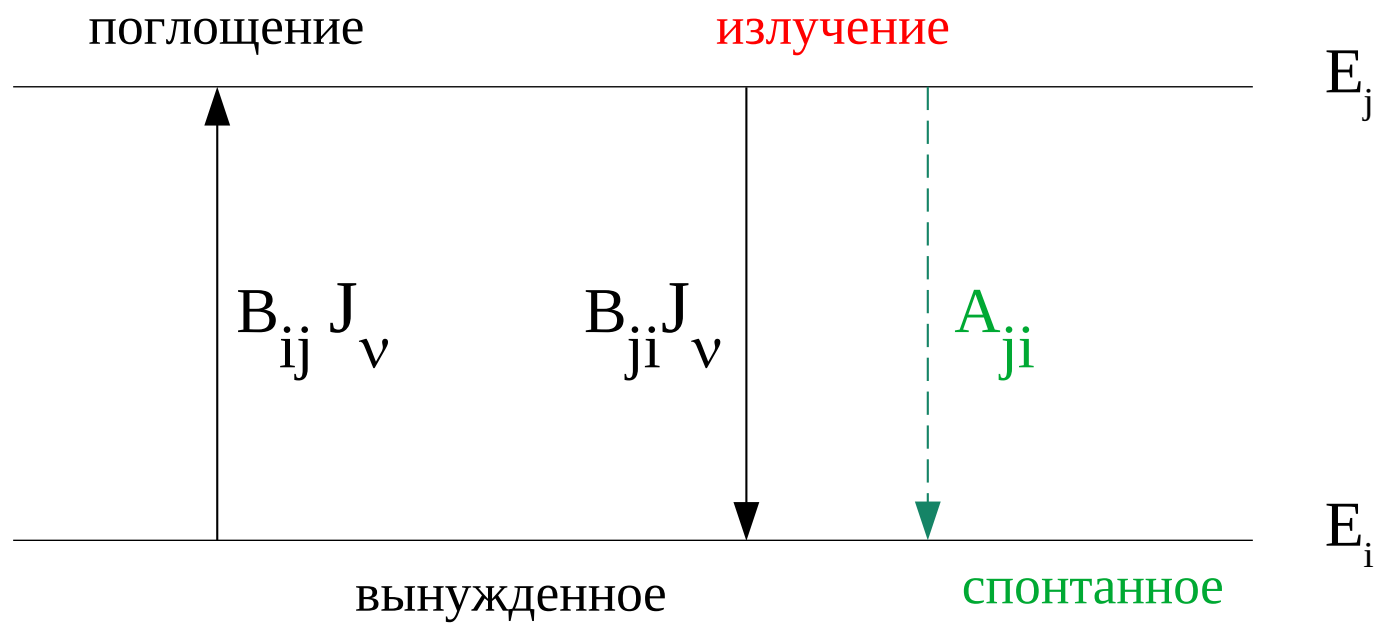
(e^- , H, молекулы)

ионизация, рекомбинация,
перезарядка

возбуждение, удары
второго рода

Локальные
величины !

Радиативные процессы (b-b)



Радиативные скорости

b - b переходы

поглощение

$$n_i R_{ij} = 4\pi n_i \int \frac{\sigma_{ij} J_\nu}{h\nu} d\nu = n_i B_{ij} \int \phi_\nu J_\nu d\nu = n_i B_{ij} J_\nu$$

Атомный коэффициент поглощения, $\sigma_{ij}(\nu) = \phi_\nu \sigma_{ij}^{tot}$

$$\sigma_{ij}^{tot} = B_{ij} \frac{h\nu}{4\pi}$$

↑
профиль коэффициента
поглощения

излучение

$$n_j R_{ji} = n_j B_{ji} J_\nu$$

вынужденное

$$n_j R_{ji} = n_j A_{ji}$$

спонтанное

$$n_j R_{ji} = n_j (A_{ji} + B_{ji} J_\nu)$$

полное

Радиативные скорости

b-f переходы

поглощение

$$n_i R_{ij} = 4\pi n_i \int_{\nu_0}^{\infty} \frac{\sigma_{ij}(\nu) J_\nu}{h\nu} d\nu$$

излучение

$$n_j R_{ji} = n_j \left(\frac{n_i}{n_j} \right) 4\pi \int_{\nu_0}^{\infty} \frac{\sigma_{ij}(\nu)}{h\nu} \left(\underbrace{\frac{2h\nu^3}{c^2}}_{\text{спонтанное}} + \underbrace{J_\nu}_{\text{вынужденное}} \right) e^{-h\nu/kT} d\nu$$

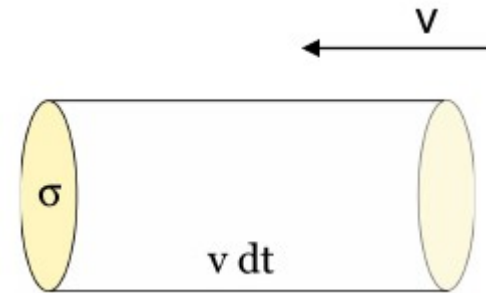
равновесное (Больцман)

спонтанное

вынужденное

Ударные скорости

Количество столкновений в ед.времени $\sim$
вероятности (сечение взаимодействия) σ , $v dt$



b-b

$$C_{ij} = n_{coll} \int_0^{\infty} \sigma_{ij}^{coll}(v) v f(v) dv$$

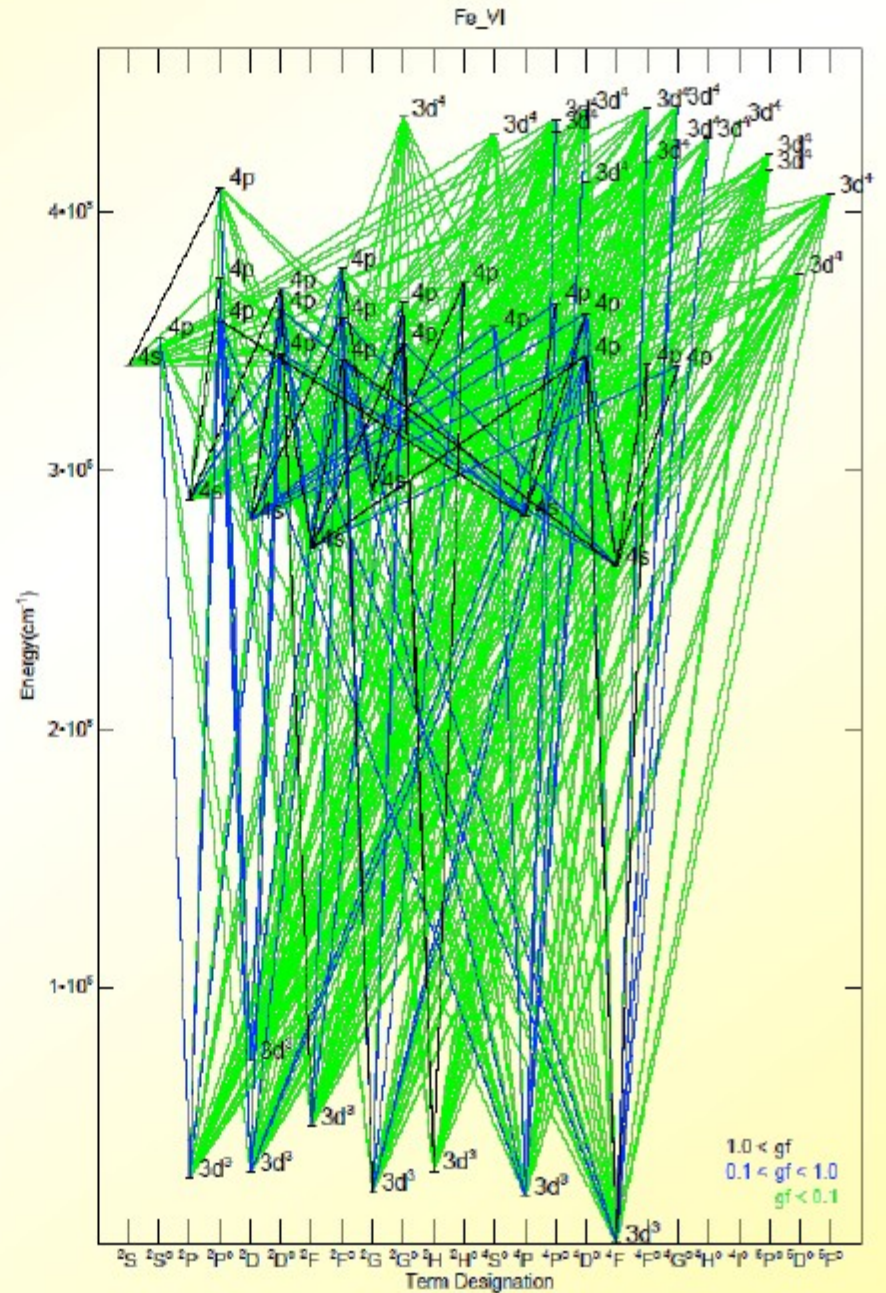
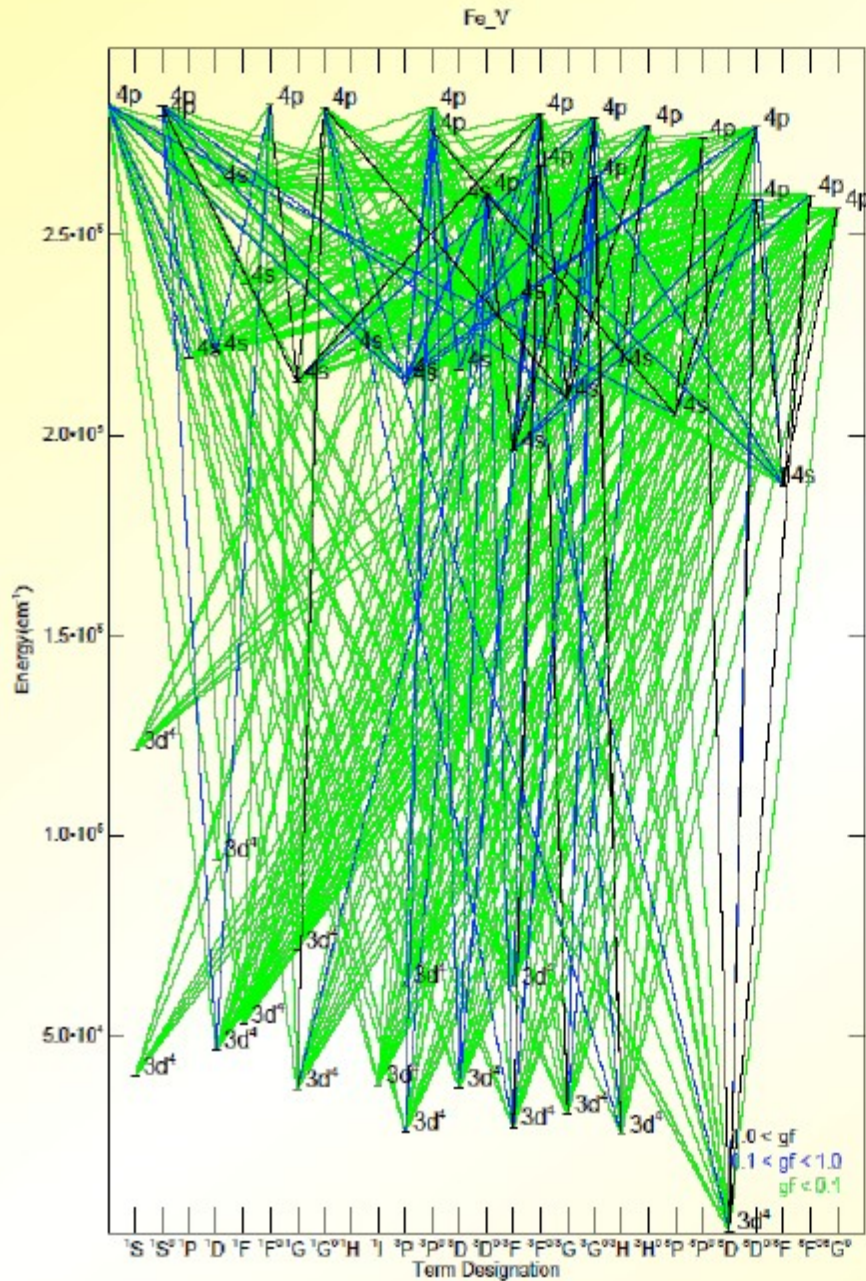
$$C_{ji} = g_i / g_j e^{E_{ji}/kT} C_{ij}$$

b-f

$$C_{ki} = C_{ik} n_e \frac{g_i}{g_1^+} \frac{1}{2} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} e^{E_i/kT}$$

collisional ionization (important
at high T)

complex atomic models for O-stars (Pauldrach et al., 2001)



Частный случай:

полное термодинамическое равновесие (ПТР)

- детальный баланс: $n_i R_{ij} = n_j R_{ji}$

- $J_v = B_v$

b-b: $n_i B_{ij} B_v = n_j (A_{ji} + B_{ji} B_v) \longrightarrow \frac{n_j}{n_i} = \frac{g_j}{g_i} e^{-hv/kT} = \left(\frac{n_j}{n_i} \right)$

формула Больцмана

b-f:
$$n_i 4\pi \int_{v_0}^{\infty} \frac{\sigma_{ij}(v)}{hv} B_v dv = n_j \left(\frac{n_i}{n_j} \right) 4\pi \int_{v_0}^{\infty} \frac{\sigma_{ij}(v)}{hv} \left(\frac{2hv^3}{c^2} + B_v \right) e^{-hv/kT} dv$$

$$\frac{n_i}{n_j} = N e \frac{g_i}{2g_j} \frac{h^3}{(2\pi mkT)^{3/2}} e^{\chi_i/kT} = \left(\frac{n_i}{n_j} \right)$$

формула Саха

Не-ЛТР:

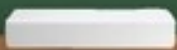
Населённости атомных уровней из системы уравнений статистического равновесия (СР) с учётом всех процессов, в которых участвуют атомы

Совместное решение уравнения переноса и СР:

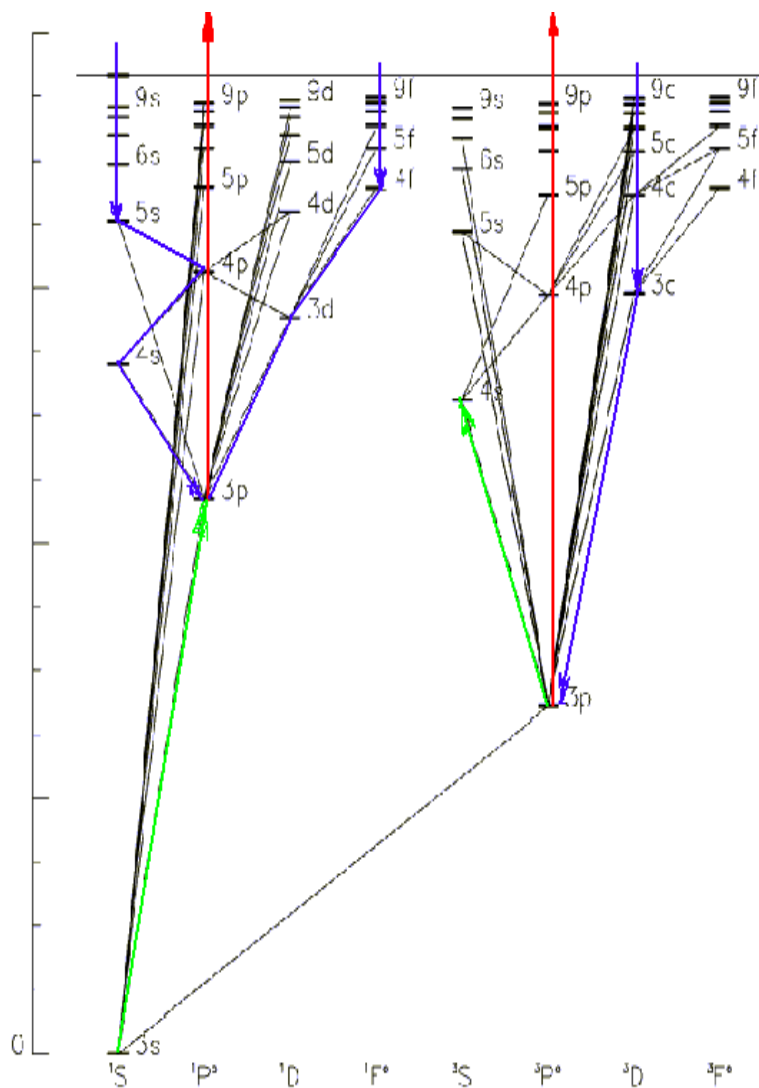
$$\left\{ \begin{array}{l} n_i \sum (R_{ij} + C_{ij}) = \sum n_j (R_{ji} + C_{ji}) \\ \frac{\mu dI_v(z, \mu)}{dz} = -\chi_v(z) I_v(z, \mu) + \eta_v(z) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} i = 1, \dots, NL \\ NL - \text{число уровней} \\ \text{в модели атома} \end{array}$$

- Трудоёмкие по сравнению с ЛТР расчёты
- Требуется большое количество атомных данных
- + Физически реалистичное приближение

***Механизмы отклонений
от ЛТР***



Механизмы отклонений от ЛТР



$b-f$ переходы

1. Сверхионизация уровней

при $J_v > B_v$ за порогом
ионизации

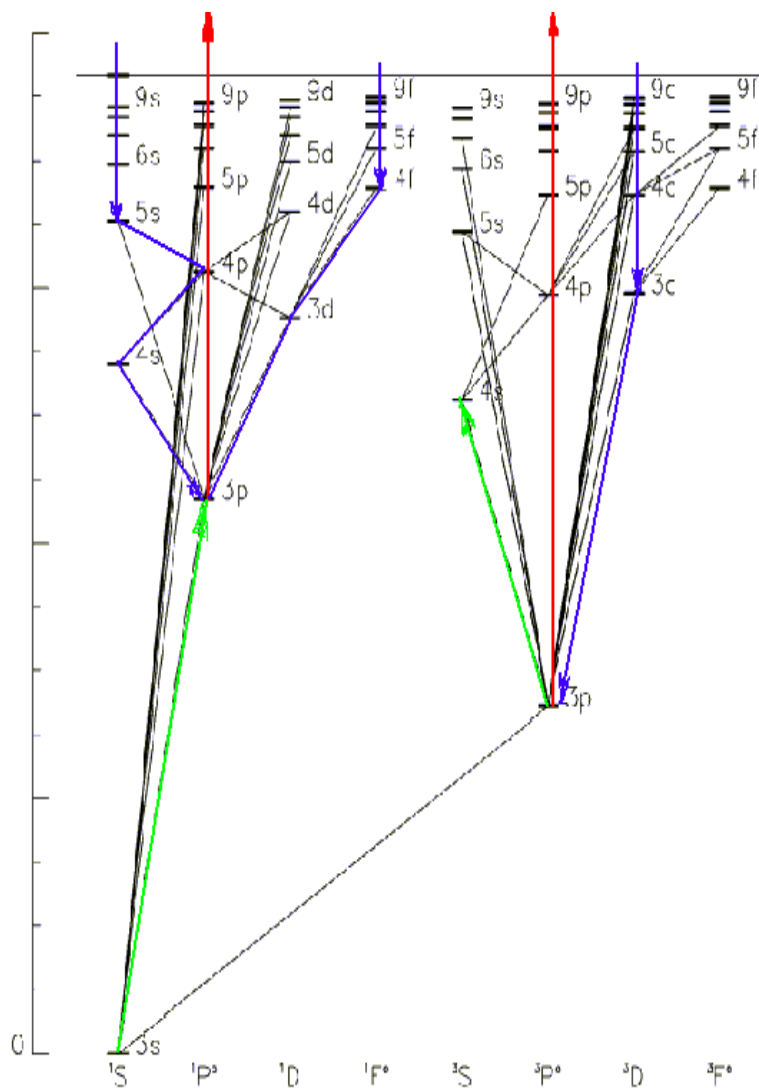
В СЛОЯХ С $\tau_{\text{thr}} < 1$

2. Сверхрекомбинация уровней

при $J_v < B_v$ за порогом
ионизации

В СЛОЯХ С $\tau_{\text{thr}} < 1$

Механизмы отклонений от ЛТР



b - b переходы

$$b_i = \frac{n_i}{n_i^{LTE}}$$

3. Радиативная накачка

возбужденных состояний ($j > i$)

в слоях с $\tau_{core} > 1$, $\tau_{wing} < 1$.

$$b_j > b_i$$

4. Опустошение верхнего уровня спонтанными переходами

в слоях с $\tau_{core} < 1$

$$b_j < b_i$$

Механизмы отклонений от ЛТР

Атомы с $N_r \ll N_{el}$ наиболее подвержены отклонениям от равновесного заселения уровней:

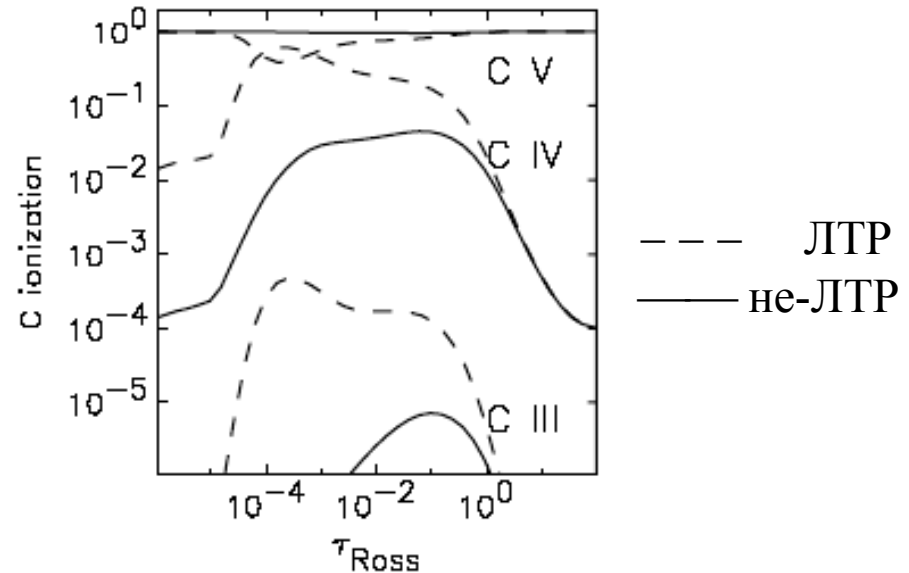
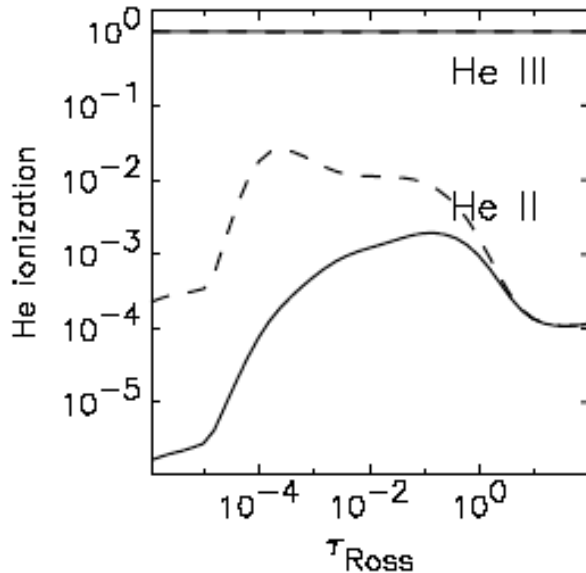
- **сверхионизация** низковозбужденных уровней (λ_{thr} в у.-ф.)
при $\tau_{thr} < 1$;
- **сверхрекомбинация** высоковозбужденных уровней (λ_{thr} в и.-к.)
+ **опустошение верхних уровней** при спонтанных переходах

Атомы с $N_r \cong N_{el}$: полная концентрация, N_r – равновесная, но населенности возбужденных уровней могут быть неравновесными в области формирования линий:

- **радиативная накачка** возбужденных состояний;
- **опустошение верхних уровней** при спонтанных переходах.

Ионизационное равновесие He и C в атмосфере звезды 50000/4.0/0

Lanz & Hubeny 2003

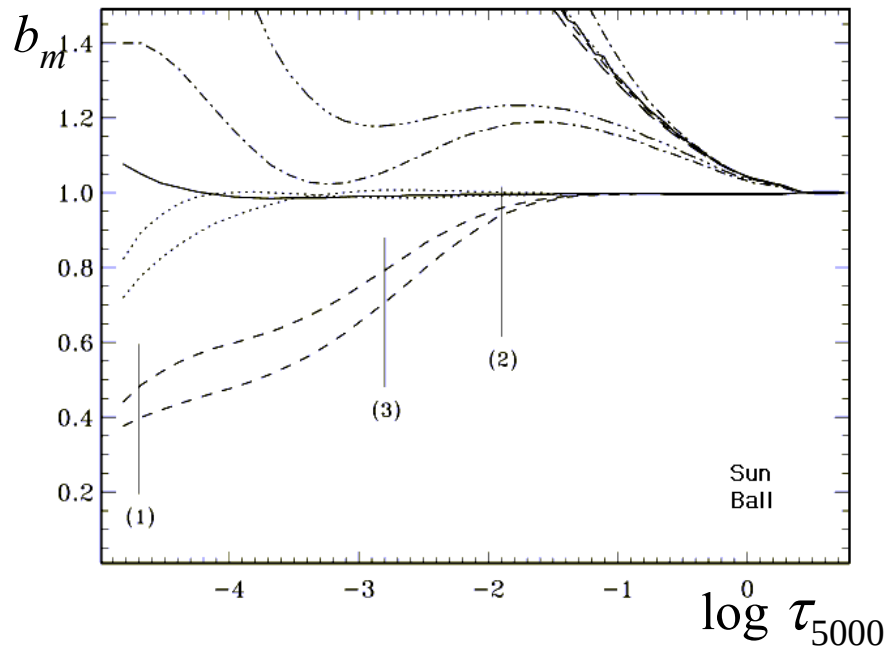


He III и C V доминирующие стадии ионизации для своих элементов

Сверхионизация всех более низких стадий ионизации

Статистическое равновесие атомов: зависимость от звездных параметров

Mashonkina et al. 1999

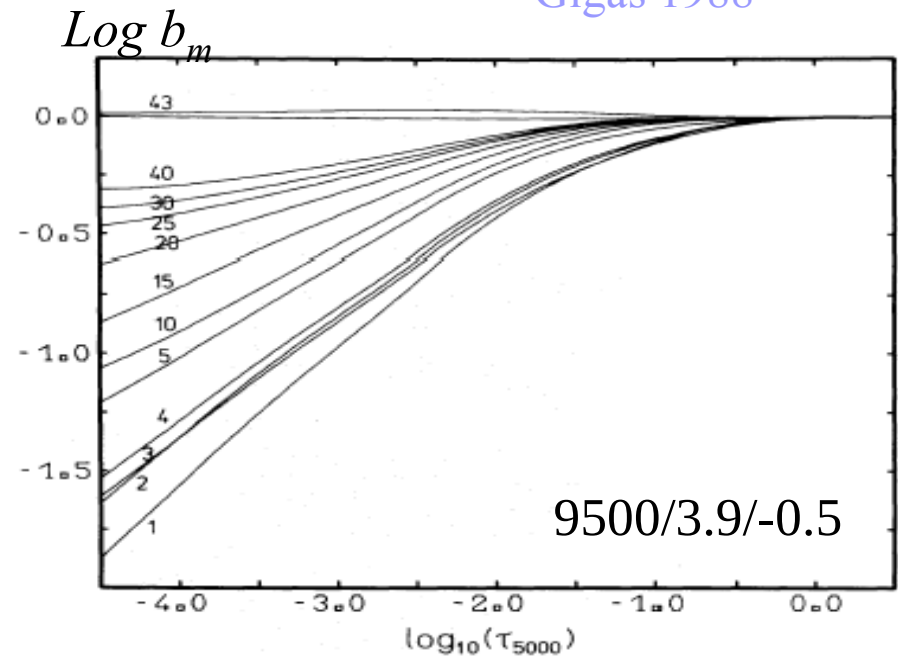


BaII: Sun

$$N_{\text{NLTE}}(\text{BaII}) = N_{\text{LTE}}(\text{BaII})$$

НО $b_i \neq 1$

Gigas 1988



BaII: Vega

$$b_i < 1$$

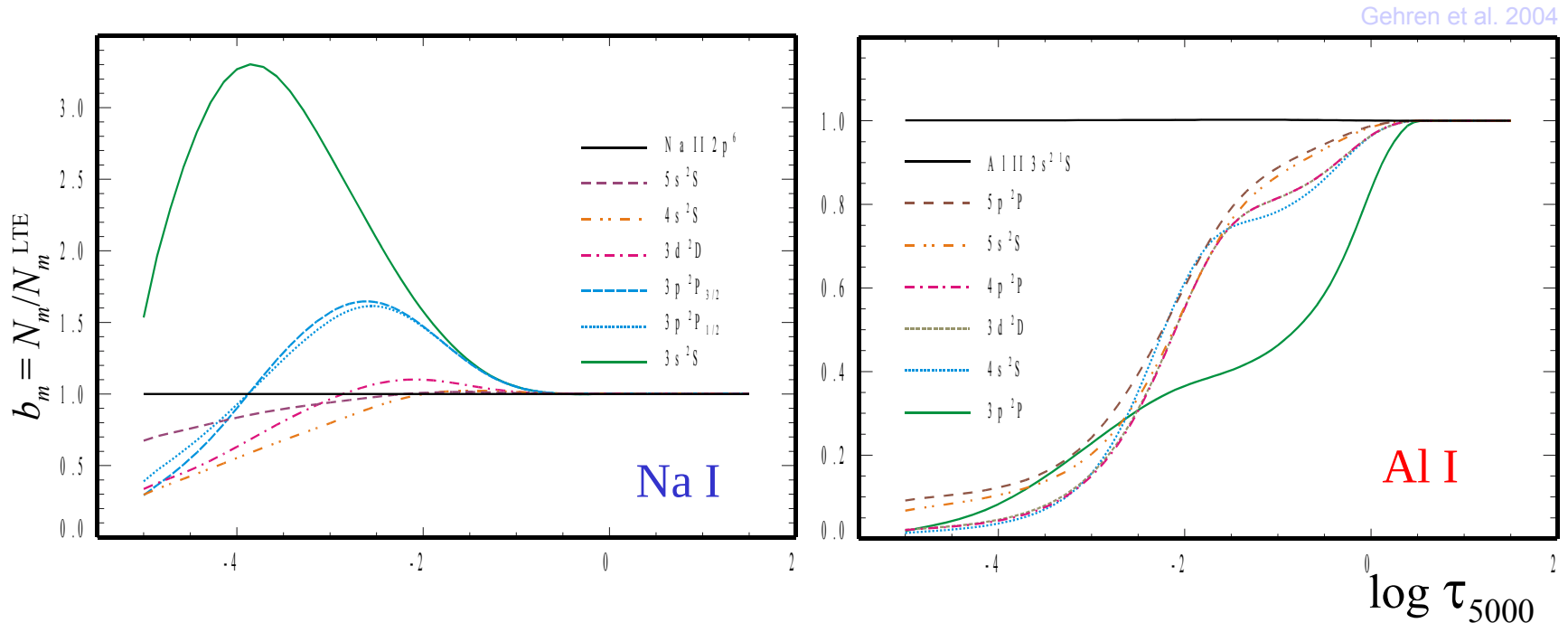
$$N_{\text{NLTE}}(\text{BaII}) < N_{\text{LTE}}(\text{BaII})$$

сверхионизация

Результаты: статистическое равновесие атомов

$$b_m = n_m (\text{NLTE}) / n_m (\text{LTE})$$

отдельных уровней Na I и Al I в солнечной атмосфере



Na I: $b_{1,2} > 1$, $N_{\text{NLTE}}(\text{Na I}) > N_{\text{LTE}}(\text{Na I})$ **сверхрекомбинация**

Al I: $b_i < 1$, $N_{\text{NLTE}}(\text{Al I}) < N_{\text{LTE}}(\text{Al I})$ **сверхионизация**

$E_{\text{ion}}(\text{Na I}) = 5.1$ эВ,

$E_{\text{ion}}(\text{Al I}) = 6.0$ эВ.

Почему эффекты противоположны?

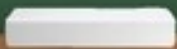
Не только величина, но и знак не-ЛТР эффектов зависят от атомной структуры и атомных параметров

Ionization edges and threshold photoionization cross-sections:

Ion	Level	λ_0 [nm]	a_0 [MBarn]
H I	$n = 2$	364.7	15.84
Mg I	3s 1S	162.1	1.18
	3p $^3P^o$	251.4	20.00
	3p $^1P^o$	375.7	11.95
Al I	3p $^2P^o$	207.1	65.00
Si I	3p 3P	152.1	39.16
	3d $^1D^o$	168.2	34.49
	4s $^1S^o$	198.6	33.56
Fe I	a 5D	156.9	4.06
Na I	3s 1S	241.5	0.09
K I	4s 1S	286.0	0.01

Fe I has a large number of additional *bf* absorption edges between 200 and 300 nm

***Отклонение от ЛТР в
спектральных линиях***



$$F_\nu(0) = 2\pi \int_0^\infty S_\nu(t) E_2(t) dt \quad S_\nu = \frac{\eta_\nu}{\kappa_\nu}$$

$$\kappa_\nu^l = n_i f_{ij} \frac{\pi e^2}{mc} \phi_\nu \left(1 - \frac{g_i}{g_j} \frac{n_j}{n_i} \frac{\psi_\nu}{\phi_\nu} \right) \quad b_i = \frac{n_i}{n_i^{LTE}}$$

$$1) \quad \kappa_\nu^l \sim n_i \left(1 - \frac{g_i}{g_j} \frac{n_j}{n_i} \right) \sim b_i \left(1 - \frac{b_j}{b_i} e^{-h\nu/kT} \right)$$

- для $h\nu/kT > 1$ $\kappa_\nu^l \sim b_i$ $\lambda[\text{\AA}] < 144000/T[10^3 K]$

$b_i < 1$ ослабление по сравнению с ЛТР

$b_i > 1$ усиление по сравнению с ЛТР

- если $h\nu/kT \ll 1$ $\kappa_\nu^l \sim b_i \left(1 - \frac{b_j}{b_i} \right)$
ослабление может перейти в эмиссию, если $b_j > b_i$!

$$2) \quad S_{\nu}^l = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2} \frac{1}{\frac{n_i}{n_j} \frac{g_j}{g_i} - 1} = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2} \frac{1}{\frac{b_i}{b_j} (e^{-h\nu/kT} - \frac{b_j}{b_i})}$$

Оптический диапазон

- для $h\nu/kT > 1$ $S_{\nu}^l \sim B_{\nu}(T) \frac{b_j}{b_i}$

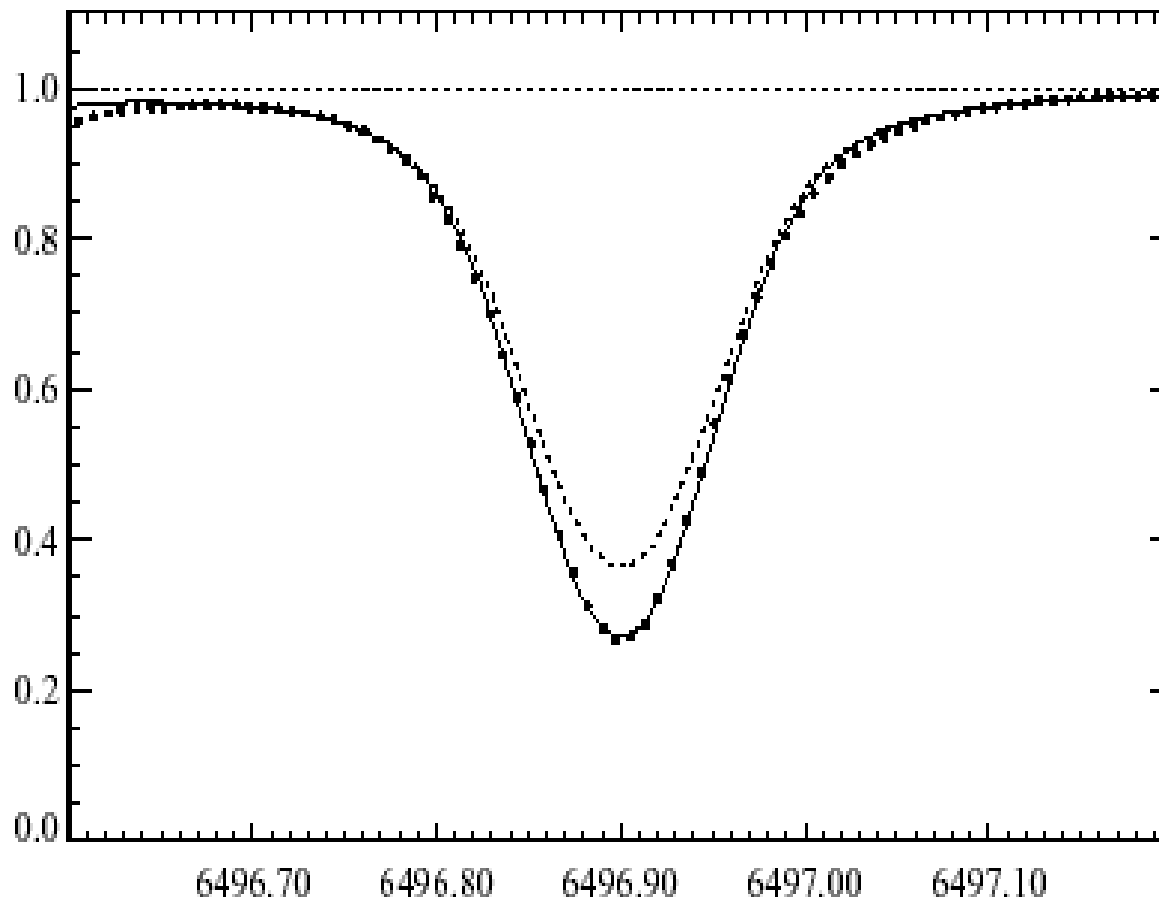
$$b_j > b_i \rightarrow S_{\nu}^l > B_{\nu}(T) \rightarrow \text{ослабление по сравнению с ЛТР}$$

$$b_j < b_i \rightarrow S_{\nu}^l < B_{\nu}(T) \rightarrow \text{усиление по сравнению с ЛТР}$$

$$b_j = b_i \rightarrow S_{\nu}^l \approx B_{\nu}(T) \rightarrow \text{одинаково по сравнению с ЛТР}$$

***Примеры неЛТР профилей
спектральных линий***

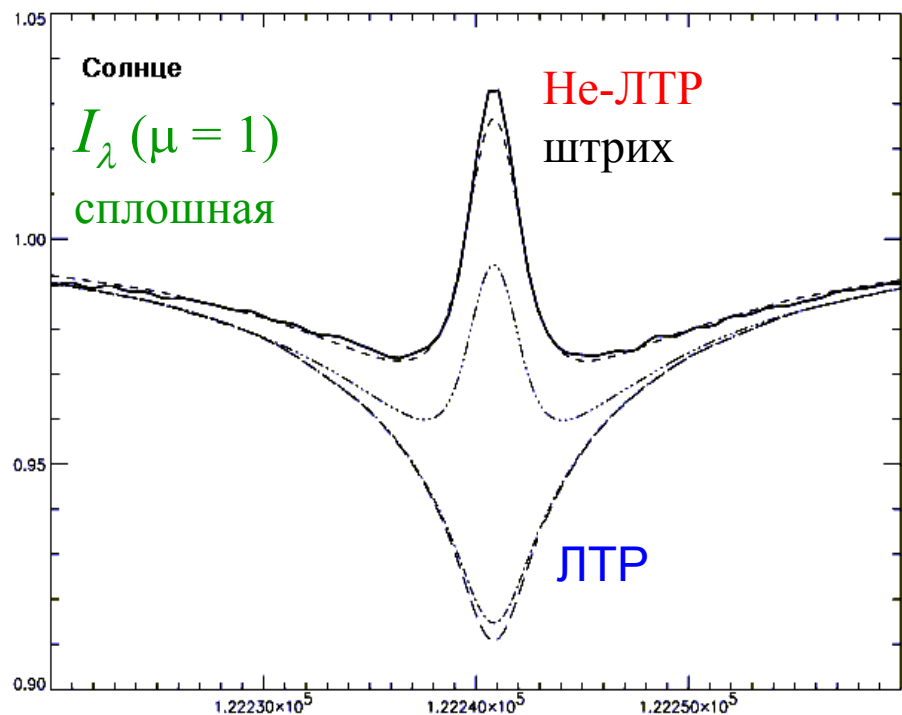
Ва II 6496 в солнечном спектре (точки),
He-ЛТР – сплошная кривая, ЛТР – пунктир.
(*Mashonkina&Gehren 2000*)



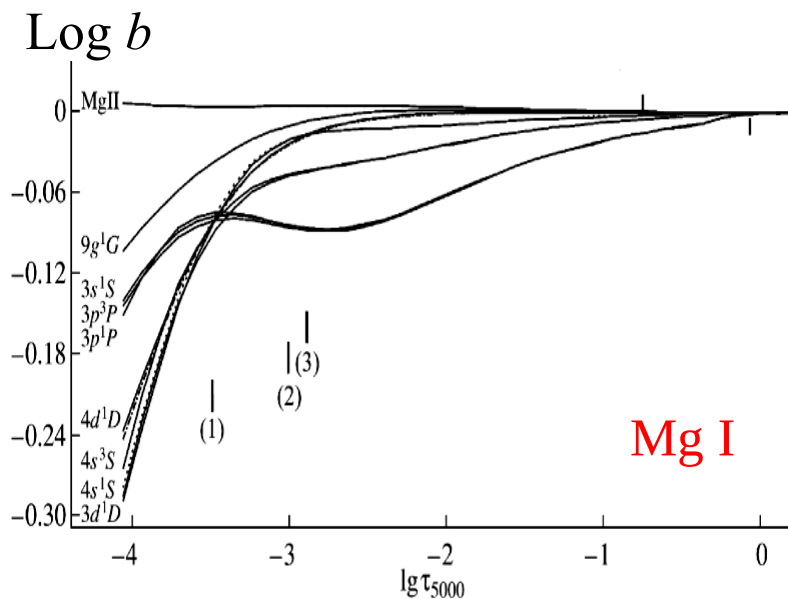
$b_j < b_i \rightarrow$ усиление по сравнению с ЛТР

Mg I 12 μm (6g - 7h) у Солнца – с эмиссионным ядром.

В рамках ЛТР теоретический профиль линии – абсорбционный !



Carlsson et al. 1992; Zhao et al. (1998)



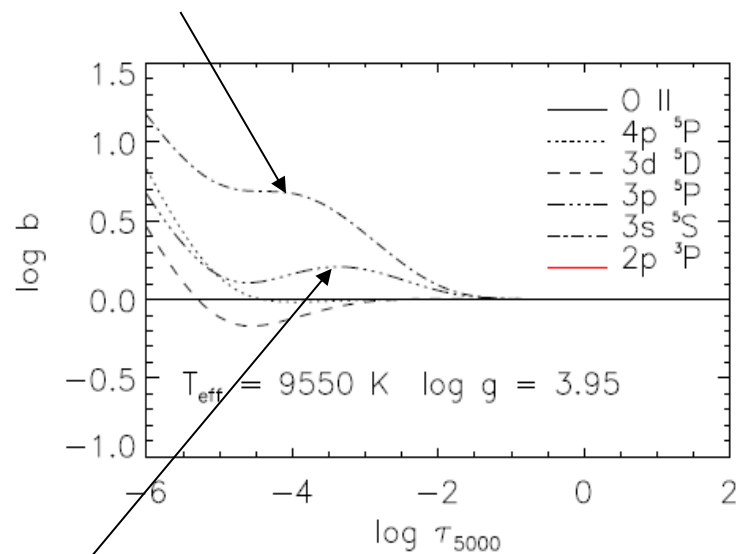
сверхионизация:

$$b_i < 1; \quad b_i < b_j$$

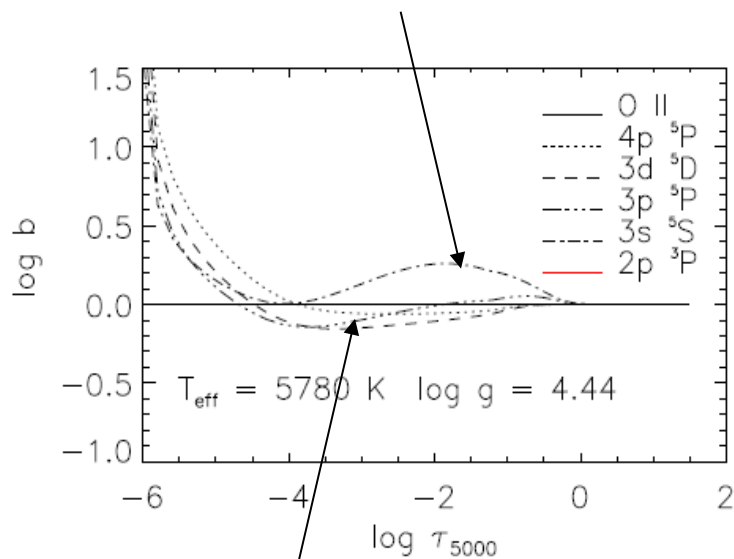
- He-ЛТР: $b(7h) > b(6g) \rightarrow$ ЭМИССИЯ в ядре

Отклонения от ЛТР для уровней O I

Нижний уровень 7771-5 Å



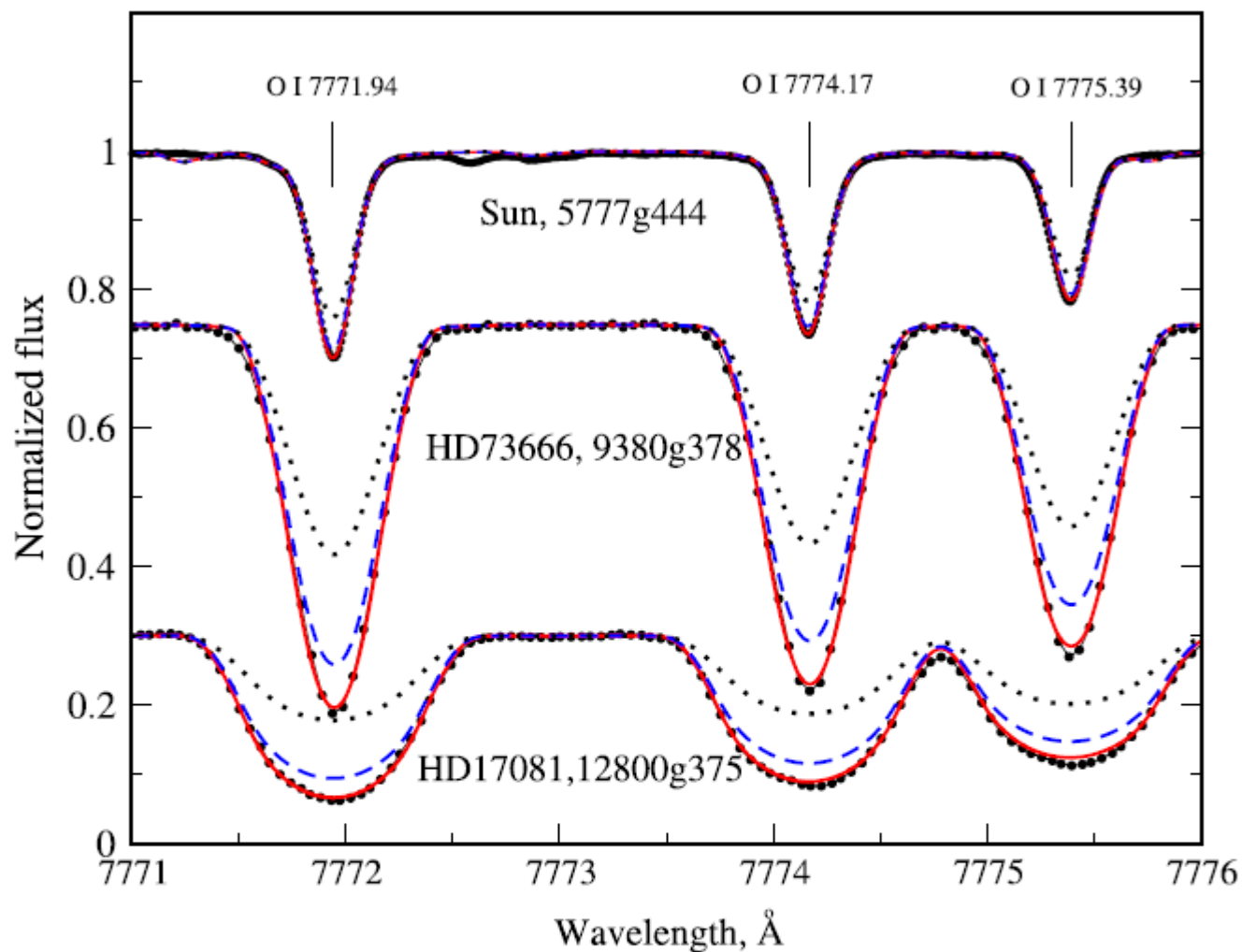
Нижний уровень 7771-5 Å



Верхний уровень 7771-5 Å

Верхний уровень 7771-5 Å

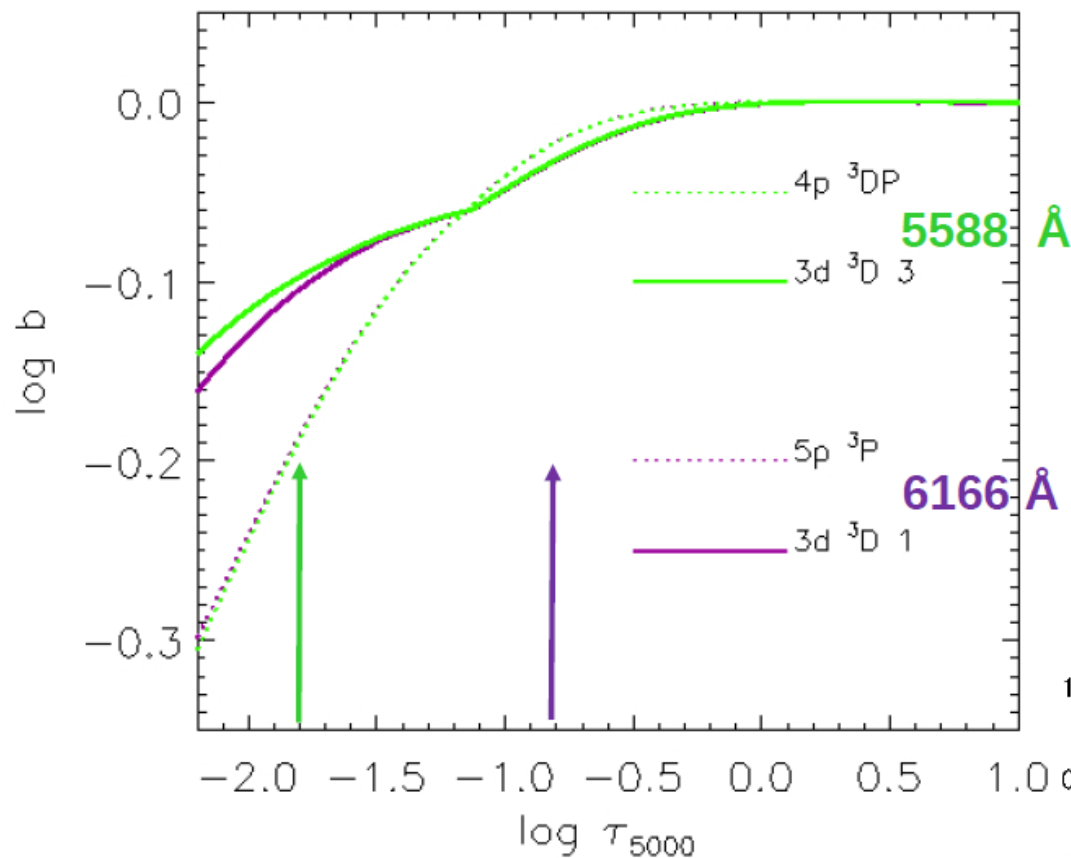
Figure 2: b-factors for oxygen levels in the atmospheres of Vega (left) and the Sun (right).



Ryabchikova &
Mashonkina, 2014,
Phys.Scripta, 89, k4007

Figure 3. The theoretical and observed (full circles) profiles of the O I IR-triplet lines in the Sun (5777/4.44), HD 73 666 (9380/3.78), and HD 17 081 (12800/3.75). The dotted, dashed blue and full red curves correspond to the theoretical LTE, NLTE with [25], and NLTE with [26] electron impact cross-sections, respectively.

Отклонения от ЛТР для Ca I, Ca II



$$b_i = n_{\text{non-LTE } i} / n_{\text{LTE } i}$$

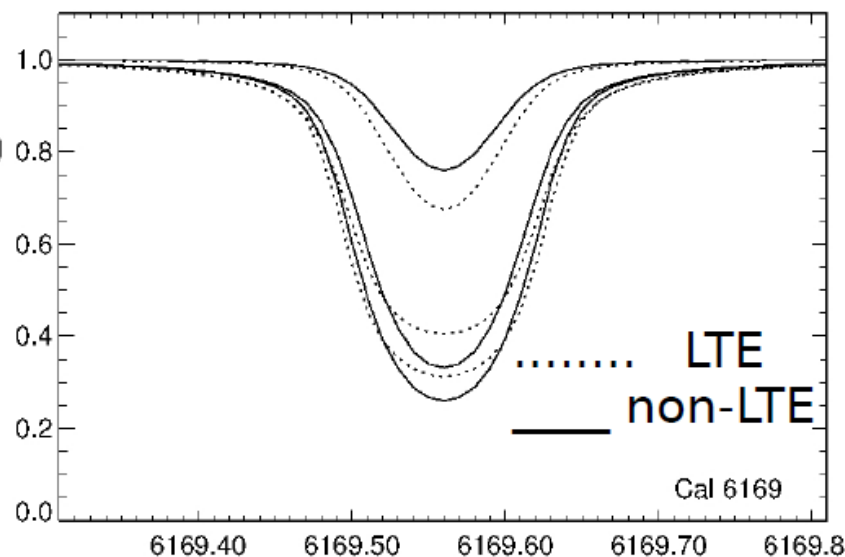
HD 32115

$T_{\text{eff}} = 7250 \text{ K}$, $\log g = 4.20$

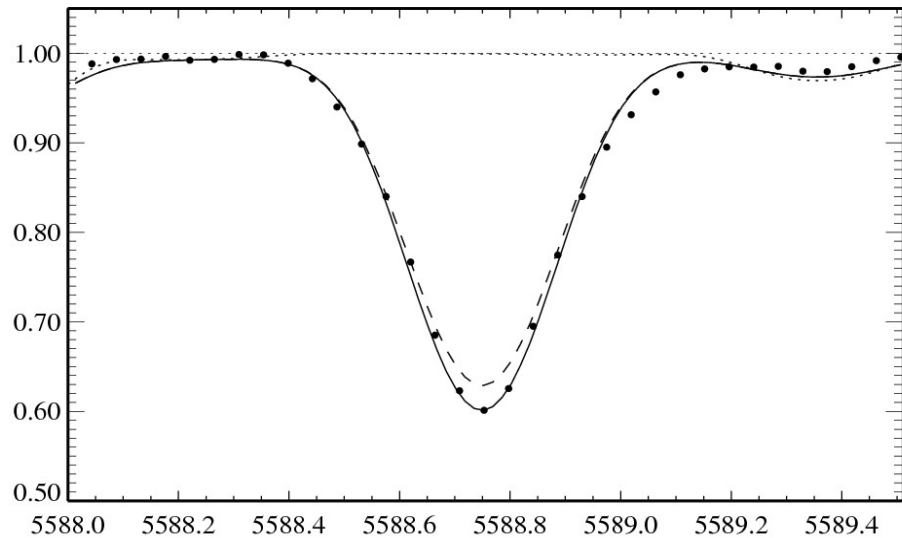
$$S_v \sim B_v b_u / b_l$$

$$\chi_v \sim b_l$$

При не-ЛТР возможно как усиление, так и ослабление линий

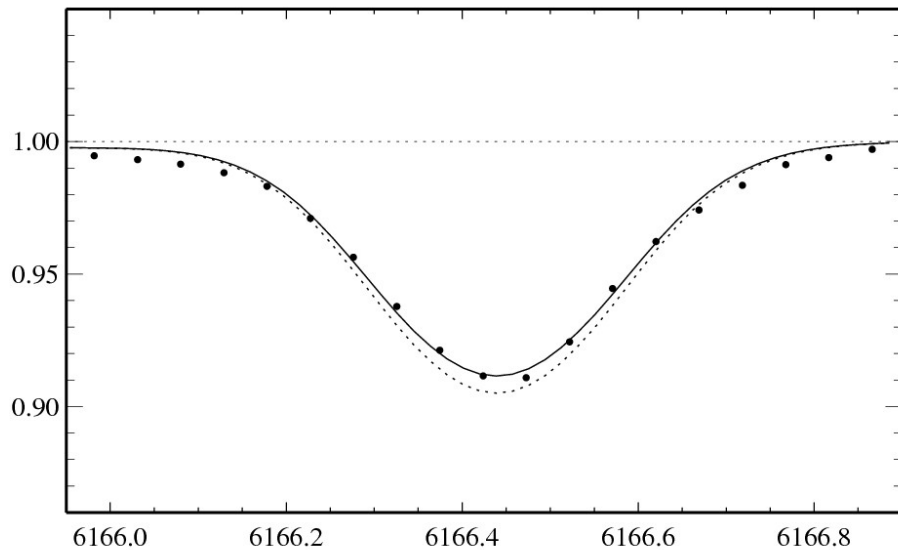


Примеры не-ЛТР поправок разных знаков для линий Ca I



— non-LTE
- - - LTE
••• observations

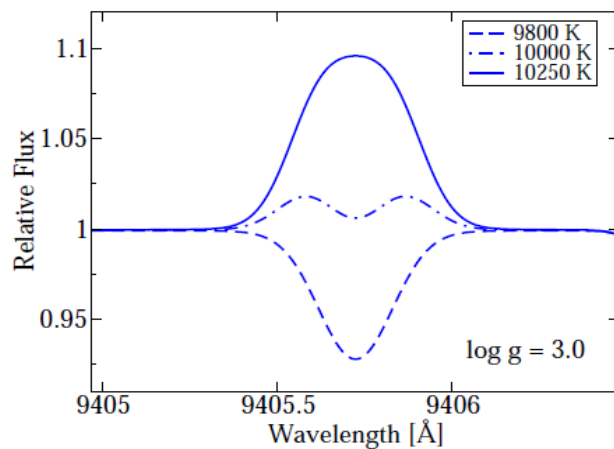
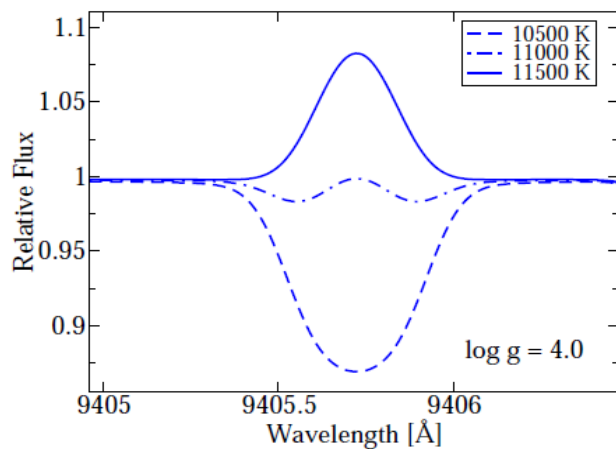
$$\Delta_{\text{non-LTE}} < 0$$



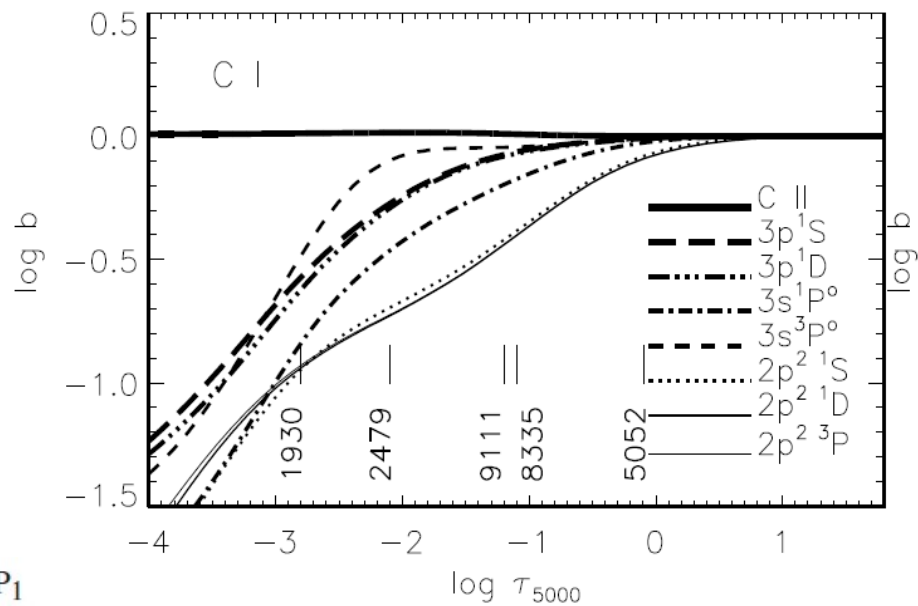
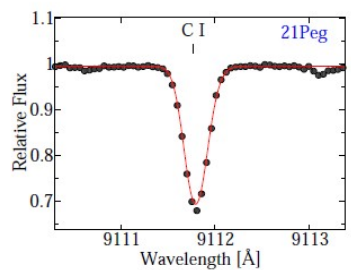
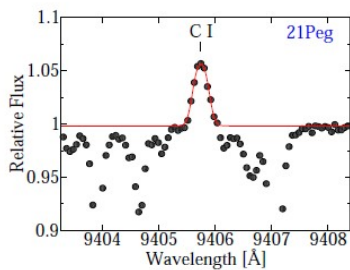
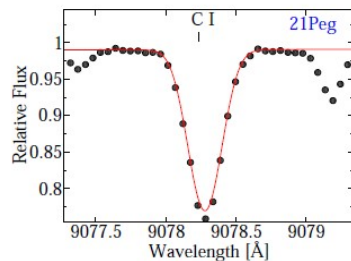
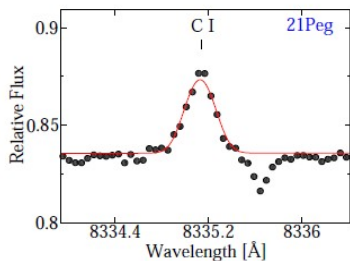
$$\Delta_{\text{non-LTE}} > 0$$

HD 32115
T = 7250 K, log(g) = 4.20

The interpretation of C I emission lines

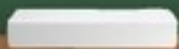


S. A. Alexeeva, T. A. Ryabchikova and L. I. Mashonkina

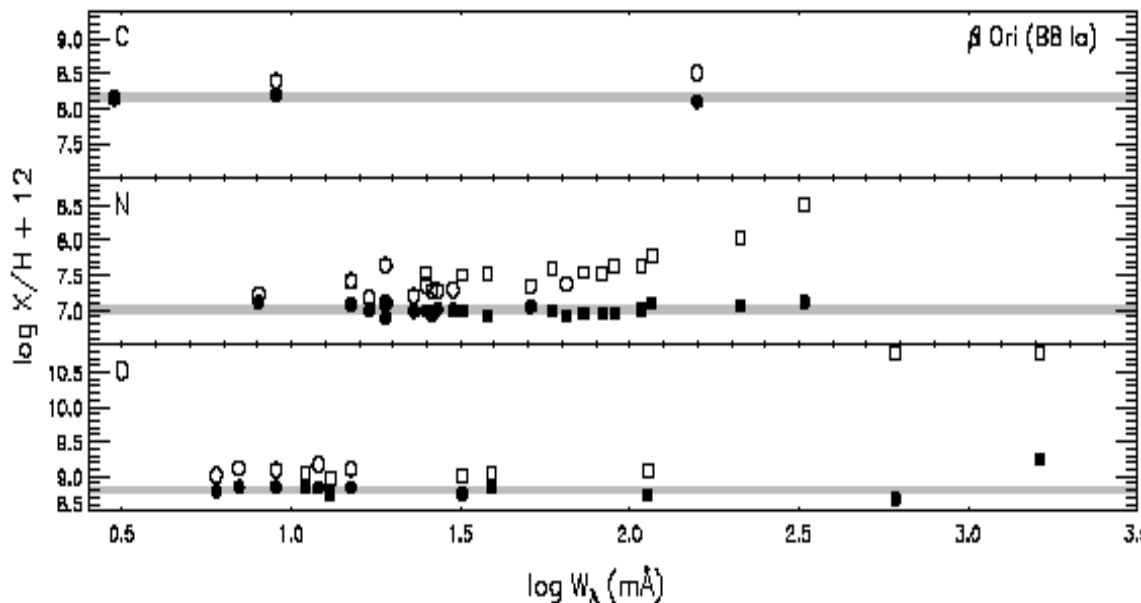


8335.14	$3s\ ^1P_1^o - 3p\ ^1S_0$	9078.28	$3s\ ^3P_1^o - 3p\ ^3P_1$
9405.73	$3s\ ^1P_1^o - 3p\ ^1D_2$	9111.80	$3s\ ^3P_2^o - 3p\ ^3P_1$

*Влияние неЛТР на
содержания химических
элементов
и на модель атмосферы*



Влияние отклонений от ЛТР на определение содержания химических элементов



Содержания C, N, O
у $\beta \text{ Ori}$:

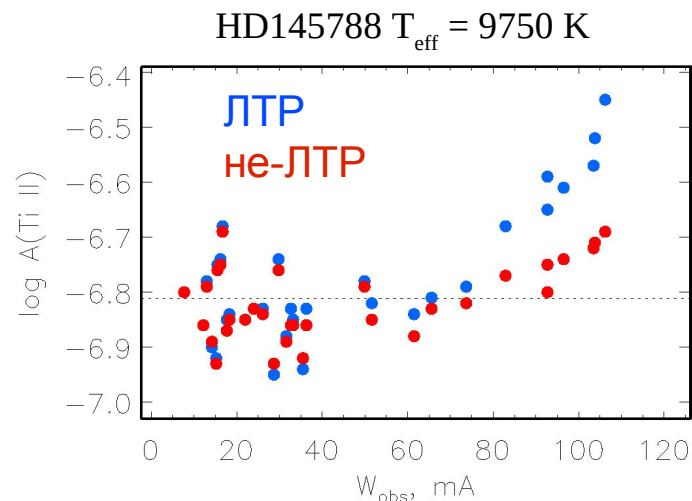
$T_{\text{eff}} = 12000 \text{ K}$;

$\log g = 1.75$;

$[\text{Fe}/\text{H}] = 0$.

Przybilla et al. 2003

ЛТР – светлые символы,
Не-ЛТР – черные символы,
Серая полоса – среднее значение и ошибка
N I и O I линии: $\Delta_{\text{NLTE}} > 1.5 \text{ dex}$



Влияние атомных параметров: C I

electron-impact excitation rates

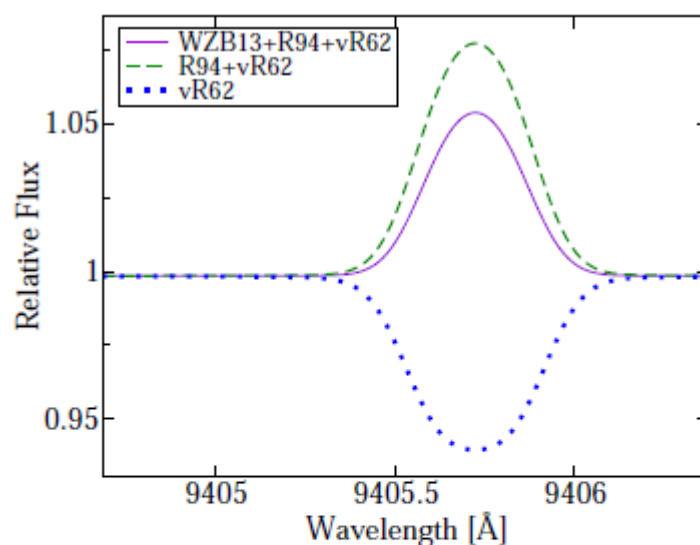
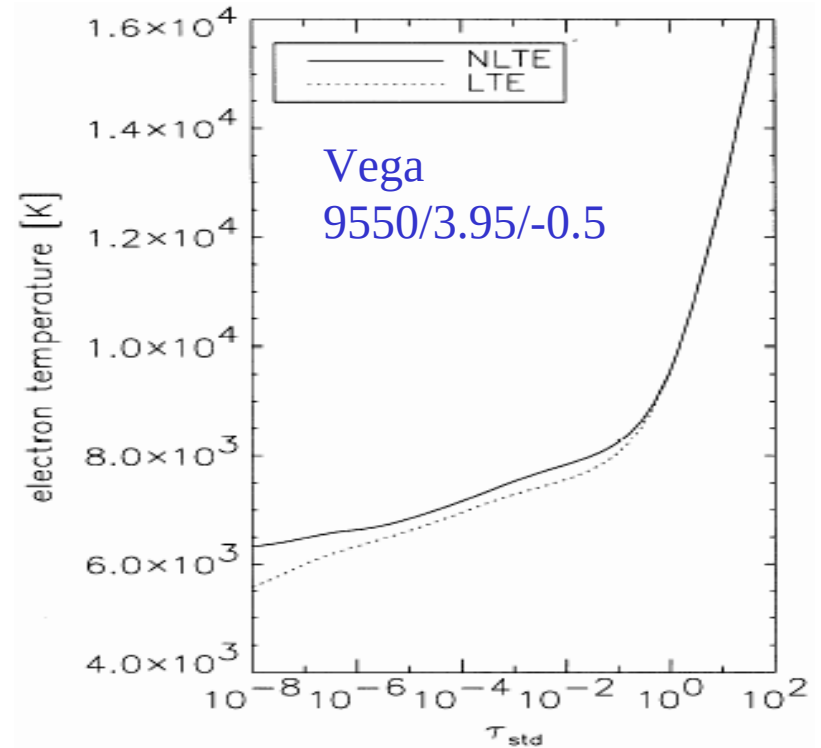
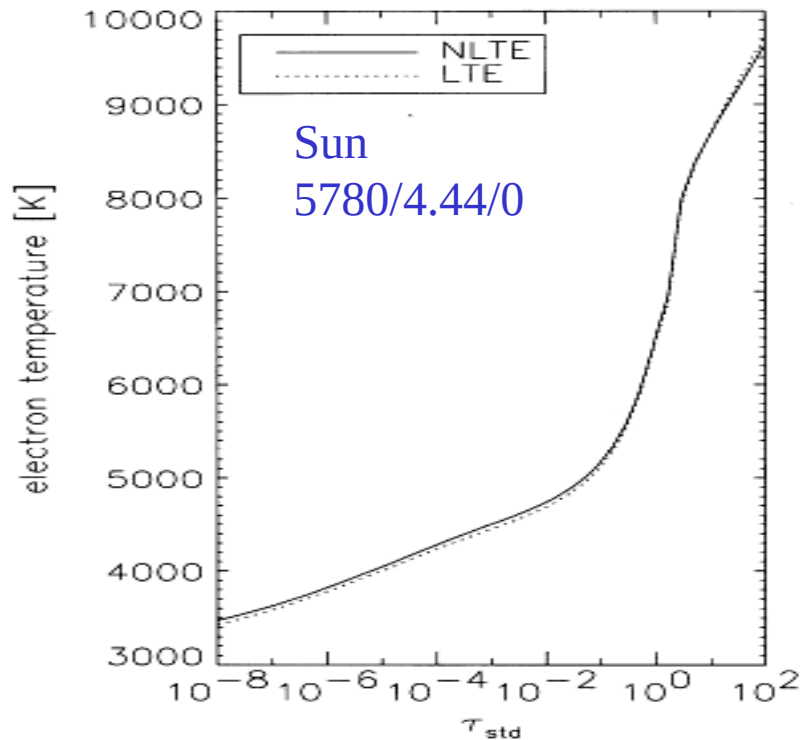


Figure 8. NLTE line profiles of C I 9405 Å in the model 10400/3.5/0 from calculations with collisional data of Wang et al. (2013) where available, Reid (1994), and van Regemorter (1962) (continuous curve, WZB13+R94+vR62), collisional data from Reid (1994) for 537 transitions and formula of van Regemorter (1962) for the remaining ones (dashed curve, R94+vR62), and using formula of van Regemorter (1962) only (dotted curve, vR62). Everywhere, $\log \epsilon_C = 8.43$. The theoretical spectra are convolved with an instrumental profile of $R = 65\,000$.

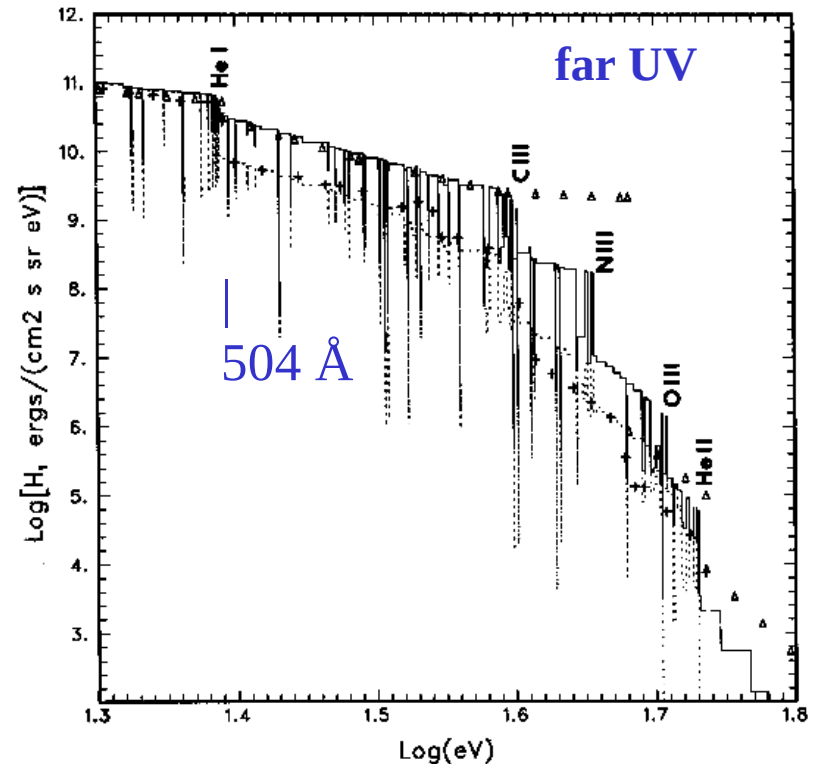
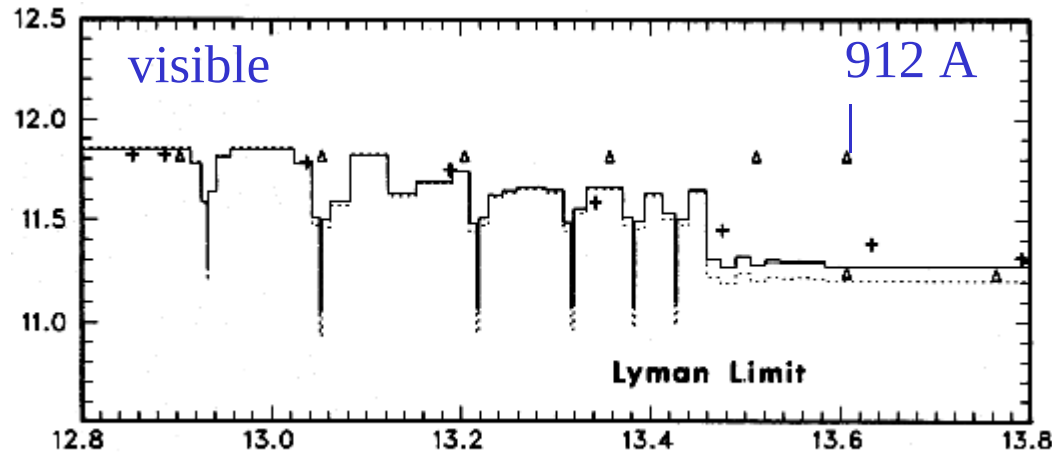
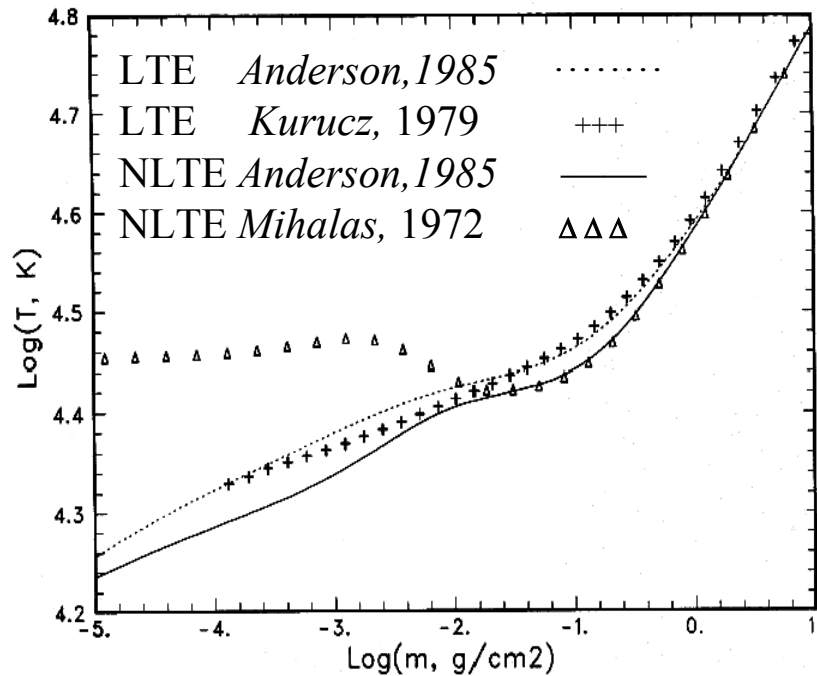
He-ЛТР модели атмосфер



- Отклонения от ЛТР малы для солнечной атмосферы, поскольку доминирующий источник непрозрачности – H^- .
- Эффект растет с ростом температуры.

Hauschildt et al. 1999, программа PHOENIX

He-ЛТР $\leftrightarrow$ ЛТР: 35000/4.0



- Непрерывный спектр:
практически нет не-ЛТР
эффектов при $\lambda > 912 \text{ \AA}$.
Важно учитывать для
далекого
УФ, где непрозрачность
обусловлена He и металлами