Глава 4

Коэффициенты поглощения

В этой главе даются общие представления о квантовомеханическом расчете атомных коэффициентов поглощения. Автору хотелось бы дать такое изложение, которое было бы вполне замкнутым, но за недостатком места приходится предполагать, что основные принципы квантовой механики на уровне [392], гл. 2 — 8, все же известны.

4.1. Эйнштейновские соотношения для связанно-связанных переходов

Рассмотрим сначала поглощение и испускание излучения атомом при переходе между двумя связанными состояниями. Предположим, что нижнее состояние (i) имеет статистический вес g_i, а верхнее (j) — g_j. Существует три вида процессов такого рода. Их обычно описывают с помощью соответствующих коэффициентов, впервые введенных Эйнштейном [207].

Первый процесс — прямое *поглощение* излучения, приводящее к переходу вверх с уровня i на уровень j. Скорость, с которой этот процесс протекает, когда интенсивность излучения равна I_ν, можно следующим образом записать через *эйнштейновский коэффициент* B_{ij}:

$$n_i(\nu)R_{ij}d\omega/4\pi = n_i(\nu)B_{ij}I_\nu d\omega/4\pi. \tag{4.1}$$

Здесь $n_i(\nu)d\nu$ — число атомов в 1 см^3 на уровне i, которые способны поглощать излучение с частотами в интервале $(\nu, \nu + d\nu)$. Спектральная линия, соответствующая такому переходу, вообще говоря, не является бесконечно тонкой. Из-за возмущений, вызываемых окружающими атомами и ионами, а также из-за конечности времени жизни на верхнем уровне будет существовать некоторый разброс частот в линии, который будет описываться *профилем поглощения* ϕ_ν, нормированным так, что $\int\phi_\nu d\nu = 1$. Таким образом, если полное число атомов на уровне i равно n_i, то число тех атомов, которые способны поглощать на частоте ν, есть $n_i(\nu) = n_i\phi_\nu$. Совершая переходы с уровня i на уровень j, атомы поглощают фотоны с энергией $h\nu_{ij} = E_j - E_i$. Поэтому темп убывания *энергии* из падающего пучка излучения равен

$$a_\nu I_\nu = n_i(B_{ij}h\nu_{ij}/4\pi)\phi_\nu I_\nu, \tag{4.2}$$

где a_ν — макроскопический коэффициент поглощения (на единицу объема), не исправленный за вынужденное излучение (см. ниже).

Для атомов, возвращающихся с уровня j на уровень i, возможны два процесса. Первый из них — это спонтанный переход с излучением фотона. Если через A_{ji} обозначить *вероятность спонтанного излучения* за единицу времени, то скорость испускания энергии равна

$$\eta_\nu(\text{спонтанное}) = n_j(A_{ji}h\nu_{ij}/4\pi)\psi_\nu. \tag{4.3}$$

Здесь *профиль излучения* ψ_ν определяет долю атомов на верхнем уровне, который могут излучить фотоны с частотами из интервала $(\nu, \nu + d\nu)$. Другой возможный процесс, ведущий к возврату на исходный уровень, — это переход, *вызываемый полем излучения* (*вынужденное излучение*). Темп, с которым происходит такое излучение, считается пропорциональным интенсивности падающего излучения. Излучаемая энергия следующим образом записывается через эйнштейновский коэффициент B_{ji}:

$$\eta_\nu(\text{вынужденное}) = n_j(B_{ji}h\nu_{ij}/4\pi)\psi_\nu I_\nu. \tag{4.4}$$

Чтобы записать формулу (4.4), был использован тот факт, что профиль вынужденного излучения такой же, как и спонтанного излучения. Это можно показать из общих квантовомеханических соображений [197], §62. Следует отметить, что спонтанное излучение происходит *изотропно*. Вынужденное излучение пропорционально I_ν и имеет то же угловое распределение, что и I_ν. Поэтому вынужденное излучение иногда рассматривают как *отрицательное поглощение*, хотя это и не вполне корректно, так как, вообще говоря, ψ_ν не совпадает с ϕ_ν.

Коэффициенты A_{ji}, B_{ji} и B_{ij} связаны между собой простыми соотношениями. Это можно показать, подсчитав число актов поглощения и излучения при термодинамическом равновесии (ТР). При строгом ТР поле излучения изотропно и $I_\nu \equiv B_\nu$, где B_ν — функция Планка. Кроме того, при ТР населенности уровней i и j связаны формулой Больцмана [см. формулу (5.5)]

$$\left(\frac{n_j}{n_i}\right)^* = \frac{g_j}{g_i}\exp(-h\nu_{ij}/kT). \tag{4.5}$$

При ТР имеем также $\psi_\nu = \psi_\nu^* = \phi_\nu$ [см. формулу (2.14)]. Далее, при строгом ТР любой переход вверх в интервале $(\nu, \nu + d\nu)$ должен в точности уравновешиваться переходом вниз с излучением в этом же интервале (детальный баланс). Поэтому число прямых и обратных процессов в одном и том же интервале частот должно быть равно:

$$n_i^* B_{ij} B_\nu = n_j^* A_{ji} + n_j^* B_{ji} B_\nu. \tag{4.6}$$

Разрешая это уравнение относительно B_ν, находим

$$B_\nu = \frac{n_j^* A_{ji}}{n_i^* B_{ij} - n_j^* B_{ji}} = \frac{A_{ji}}{B_{ij}} \left[\frac{g_i B_{ij}}{g_j B_{ji}} \exp(h\nu_{ij}/kT) - 1 \right]^{-1}. \tag{4.7}$$

Но из статистической физики известно, что точное выражение для функции Планка имеет вид $B_\nu = (2h\nu^3/c^2)[\exp(h\nu/kT) - 1]^{-1}$. Чтобы согласовать это выражение с (4.7), мы должны заключить, что

$$A_{ji} \equiv (2h\nu^3/c^2) B_{ji} \tag{4.8}$$

и

$$g_i B_{ij} \equiv g_j B_{ji}. \tag{4.9}$$

Эти соотношения не раз будут использованы в дальнейшем.

Следует подчеркнуть, что хотя *соотношения Эйнштейна* (4.8) и (4.9) для простоты выводились из рассмотрения термодинамического равновесия, эйнштейновские коэффициенты в действительности определяются *свойствами самого атома* и не должны поэтому зависеть от вида поля излучения. Поэтому приходим к заключению, что соотношения (4.8) и (4.9) справедливы всегда. Интересно отметить, что в свое время соображения, аналогичные указанным выше, привели к осознанию того, что в природе должен существовать процесс вынужденного излучения — факт, интуитивно не очевидный с первого взгляда.

Упражнение 4.1. Показать, что для планковского поля излучения при типичной температуре звездной атмосферы ($\sim 10^4$ К) в ультрафиолете, где $h\nu/kT \gg 1$, спонтанное излучение происходит гораздо чаще вынужденного, а в далекой инфракрасной и радиообластях, где $h\nu/kT \ll 1$, справедливо обратное.

Изложенное выше описание на языке микропроцессов можно непосредственно перенести на уравнение переноса. Если происходят только связанно-связанные переходы, то соответствующее уравнение переноса имеет вид

$$\mu\frac{\partial I_\nu}{\partial z} = [n_jA_{ji}\psi_\nu - (n_iB_{ij}\phi_\nu - n_jB_{ji}\psi_\nu)I_\nu](h\nu_{ij}/4\pi). \tag{4.10}$$

Здесь мы, как это обычно принято делать, собрали вместе все члены, содержащие I_ν. Это позволяет ввести *коэффициент поглощения в линии, исправленный за вынужденное излучение*:

$$\chi_l(\nu) = \frac{n_iB_{ij}h\nu_{ij}}{4\pi}\phi_\nu\left(1 - \frac{n_jB_{ji}\psi_\nu}{n_iB_{ij}\phi_\nu}\right) = \\ = \frac{n_iB_{ij}h\nu_{ij}}{4\pi}\phi_\nu\left(1 - \frac{n_jg_i\psi_\nu}{n_ig_j\phi_\nu}\right) \tag{4.11}$$

и *функцию источников в линии*:

$$S_l = \frac{n_jA_{ji}\psi_\nu}{n_iB_{ij}\phi_\nu - n_jB_{ji}\psi_\nu} = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2}\left(\frac{n_ig_j\phi_\nu}{n_jg_i\psi_\nu} - 1\right)^{-1}. \tag{4.12}$$

Уравнение переноса приводится тогда к стандартной форме (2.36).

Во многих случаях, представляющих астрофизический интерес, справедливо упрощающее приближение *полного перераспределения*. В этом случае $\psi_\nu \equiv \phi_\nu$, и формулы (4.11) и (4.12) принимает вид

$$\chi_l(\nu) = \frac{n_iB_{ij}h\nu_{ij}}{4\pi}\phi_\nu\left(1 - \frac{n_jg_i}{n_ig_j}\right) \tag{4.13}$$

и

$$S_l = (2h\nu_{ij}^3/c^2)[n_ig_j/n_jg_i - 1]^{-1}. \tag{4.14}$$

Эти выражения будут использоваться на протяжении большей части этой книги. Исключение составляет гл. 13, в которой между ψ_ν и ϕ_ν будет проводиться различие. При ЛТР применима формула Больцмана. Поэтому $n_j/n_i = (n_j/n_i)^* = (g_j/g_i)\exp(-h\nu_{ij}/kT)$, и коэффициент поглощения принимает вид

$$\chi_l^*(\nu) = \frac{n_iB_{ij}h\nu_{ij}}{4\pi}\phi_\nu[1 - \exp(-h\nu_{ij}/kT)]. \tag{4.15}$$

Множитель $[1 - \exp(-h\nu_{ij}/kT)]$ называют обычно *поправкой за вынужденное излучение*. Однако, как ясно из формул (4.11) и (4.13), *это выражение для поправочного множителя справедливо только при ЛТР.* Аналогичным образом функция источников при ЛТР принимает вид

$$S_l^* = (2h\nu_{ij}^3/c^2)[\exp(h\nu_{ij}/kT) - 1]^{-1} \equiv B_\nu, \tag{4.16}$$

как и следовало ожидать на основании соотношения Кирхгофа — Планка [формула (2.5)].

Выражение (4.14) неявно содержит в себе решение уравнений статистического равновесия (см. гл. 5), поскольку в него входит отношение населенностей рассматриваемых уровней. Это отношение удается выразить через одну термодинамическую переменную T только в случае ЛТР. В общем же случае оно будет зависеть от температуры, плотности и *поля излучения* (на частотах *всех* переходов атома). Поэтому выражение (4.14) мы будем называть *неявной формой* функции источников. Альтернативный подход состоит в том, чтобы явно, *в аналитической форме*, подставить в функцию источников решение уравнений статистического равновесия. Получающийся результат мы будем называть *явной формой* функции источников. Как будет показано в гл. 7 и 11 — 14, эта последняя форма гораздо эффективнее и удобнее.

4.2. Вычисление вероятностей переходов

Обратимся теперь к вычислению эйнштейновских коэффициентов. Точнее говоря, выведем лишь выражение для вероятности поглощения B_{ij}, так как коэффициенты B_{ji} и A_{ji} можно найти по B_{ij} при помощи соотношений (4.8) и (4.9). Этот расчет можно произвести на трех последовательно более высоких уровнях приближения, состоящих в следующем.

1) Классический атом и классическое электромагнитное поле. Электрон считается затухающим гармоническим осциллятором, возбуждаемым электромагнитным полем. Для коэффициента поглощения получается *универсальное* значение, которое имеет правильную размерность и для сильных линий оказывается достаточно точным. Для слабых линий оно может давать ошибки на несколько порядков.

2) Квантовомеханический атом и классическое электромагнитное поле. Здесь можно получить правильные выражения для B_{ij} и B_{ji}, величина же A_{ji} в этой теории вообще не появляется (хотя она все же верно определяется при помощи соотношений Эйнштейна).

3) Квантовомеханический атом и квантованное электромагнитное поле. Здесь для всех трех коэффициентов правильные результаты получаются автоматически, так что эта теория является действительно полной.

В этом параграфе расчет сначала выполняется методом (1) потому, что это интересно как в историческом отношении, так и для