

## Глава 5

# Уравнения статистического равновесия

Звездные атмосферы — это области высокой температуры и низкой плотности. Поэтому газ в них состоит главным образом из отдельных атомов, ионов и свободных электронов. В атмосферах холодных звезд образуются также молекулы. Из-за низких плотностей вещество всегда ведет себя как идеальный газ. *Состояние* газа определено, когда известно распределение частиц по имеющимся связанным и свободным энергетическим уровням, т.е. когда известны *населенности* этих уровней. В этом случае имеется та информация, которая нужна для вычисления давления газа, его плотности, непрозрачности, излучательной способности вещества и т.д.

Чтобы найти населенности, нам придется иметь дело с явлениями возбуждения и ионизации каждой из химических составляющих газа. Один подход состоит в предположении, что можно применять равновесные соотношения статистической механики и термодинамики при локальных значениях температуры и плотности, т.е. исходить из *локального термодинамического равновесия* (ЛТР). Как мы убедимся, ЛТР обеспечивает чрезвычайно удобный метод расчета функций распределения частиц. Однако одно из основных свойств звездных атмосфер состоит в присутствии интенсивного поля излучения, характер которого очень сильно отличается от равновесного планковского распределения. Это поле излучения сильно взаимодействует с веществом посредством радиативных возбуждений и фотоионизаций (и обратных им процессов) и тем самым отчасти определяет значения населенностей уровней у атомов газа. Будет показано, что на самом деле состояние газа *определяется радиативными переходами*. В этом случае населенности уровней должны находиться из *уравнений статистического равновесия*, вид которых определяется всеми микропроцессами, вызывающими переходы с одного атомного уровня на другой.

Тот факт, что состояние вещества зависит от поля излучения, вводит в теорию звездных атмосфер принципиальную трудность, поскольку, как упоминалось в гл. 2, поле излучения в свою очередь зависит от населенностей уровней через посредством коэффициентов поглощения и излучения, влияющих на прохождение излучения че-

рез атмосферу. Таким образом, на самом деле требуется полностью *самосогласованное совместное решение уравнений статистического равновесия и переноса излучения*. Эта задача, вообще говоря, трудная, и ее решение составляет основное содержание гл. 7, 11 и 12 этой книги. Пока же мы просто покажем, что есть серьезные основания ожидать, что состояние вещества будет отклоняться от того, которое должно быть при ЛТР. Поэтому ЛТР является в лучшем случае вычислительным средством, ведущим к достижению цели [т.е. позволяющим до конца рассчитать модель атмосферы. — *Ред.*]. Если в том или ином частном случае населенности уровней, полученные из общего анализа, т.е. путем совместного решения уравнений статистического равновесия и переноса, окажутся согласующимися с тем, что дается ЛТР, то использование предположения об ЛТР является законным. Но для широкого круга задач (в частности, для задач об образовании линий) такого согласия, вообще говоря, нет (и в большинстве представляющих интерес случаев нельзя заранее точно предсказать, когда оно будет!).

### 5.1. Локальное термодинамическое равновесие

При термодинамическом равновесии состояние газа, т.е. распределение атомов по связанным и свободным состояниям, при посредстве обычных равновесных соотношений статистической механики однозначно определяется двумя термодинамическими переменными. (В качестве этих переменных мы выберем абсолютную температуру  $T$  и полную концентрацию частиц  $N$ .) Эти соотношения не будут выводиться в полном объеме в этой главе, поскольку их вывод легко найти в стандартных учебниках (см., например, [565], гл. 12, 14 и 15; [11], гл. 3). Они будут лишь приведены в том виде, который удобен для дальнейшего использования в этой книге. Предположение об ЛТР утверждает, что те же самые соотношения можно использовать для звездных атмосфер при *локальных* значениях  $T(r)$  и  $N(r)$ , несмотря на градиенты этих величин, существующие в атмосфере. Это простое предположение на самом деле является очень сильным, так как оно означает, что вышеупомянутые функции распределения предлагается рассчитывать без учета состояния физического ансамбля, в котором находится данный элемент вещества. Таким образом, считается несущественным, находится ли вещество внутри термодинамически равновесной полости, в атмосфере с сильным полем излучения или в струе, выбрасываемой

двигателем космического корабля, несмотря на очевидное несходство этих случаев! При ЛТР мы имеем дело с чисто *локальной* теорией, которая никак не учитывает взаимное влияние состояния одного элемента газа на состояние другого, скажем, за счет обмена излучением (за исключением того влияния, которое может быть вызвано некоторыми глобальными условиями, наложенными на атмосферу, например, гидростатическим или лучистым равновесием). Более того, при ЛТР абсолютная температура  $T$  является универсальной в следующем смысле. *Одно и то же* значение  $T$  применимо при расчете функций распределения скоростей атомов, ионов и электронов, распределения атомов и ионов по уровням (формулы Больцмана и Саха) и распределения теплового излучения по частотам (функция Планка). Короче говоря, из предположения об ЛТР следуют весьма далеко идущие выводы. Именно поэтому оно столь эффективно уменьшает сложность уравнений, и в то же время столь трудно поддается физическому обоснованию и столь часто оказывается ошибочным.

#### МАКСВЕЛЛОВСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТЕЙ

При термодинамическом равновесии с температурой  $T$  вероятность того, что частица массы  $m$  имеет скорость в интервале  $(\mathbf{v}, \mathbf{v} + d\mathbf{v})$ , дается *распределением скоростей Максвелла*

$$f(\mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z = \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp[-m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)/2kT] dv_x dv_y dv_z. \quad (5.1)$$

Вероятность того, что полная скорость лежит в интервале  $(v, v + dv)$ , равна

$$f(v)dv = \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp(-mv^2/2kT) 4\pi v^2 dv. \quad (5.2)$$

Эти распределения можно охарактеризовать *наиболее вероятной скоростью*

$$v_0 = (2kT/m)^{1/2} = 12,85(T/10^4 A)^{1/2} \text{ км/с}, \quad (5.3)$$

где  $A$  — атомный вес частицы. Родственными параметрами являются среднеквадратичная скорость  $\langle v^2 \rangle^{1/2} = (3kT/m)^{1/2}$  и среднеквадратичная скорость любой компоненты (например, компоненты по лучу зрения)  $\langle v_x^2 \rangle^{1/2} = (kT/m)^{1/2}$ .

## ФОРМУЛА ВОЗБУЖДЕНИЯ БОЛЬЦМАНА

При термодинамическом равновесии с температурой  $T$  атомы распределены по своим связанным состояниям в соответствии с формулой возбуждения Больцмана. Пусть  $n_{ijk}$  — концентрация атомов на возбужденном уровне  $i$  стадии ионизации  $j$  химического элемента  $k$ . Пусть  $j = 0$  обозначает нейтральные атомы,  $j = 1$  — однократно ионизованные и т.п. Энергия возбуждения  $\chi_{ijk}$  отсчитывается от основного состояния атома. Пусть  $g_{ijk}$  — статистический вес, приписываемый уровню для учета числа вырожденных подуровней (например,  $2J + 1$  состояний с разными  $m$  в отсутствие магнитного поля). Тогда, согласно формуле Больцмана, населенность любого возбужденного уровня равна

$$(n_{ijk}/n_{0jk})^* = (g_{ijk}/g_{0jk})\exp(-\chi_{ijk}/kT), \quad (5.4)$$

где нижний индекс 0 означает основной уровень, а верхний индекс \* указывает на наличие ЛТР. Для любых двух возбужденных уровней  $l$  и  $m$

$$\begin{aligned} (n_{mjk}/n_{ljk})^* &= (g_{mjk}/g_{ljk})\exp[-(\chi_{mjk} - \chi_{ljk})/kT] = \\ &= (g_{mjk}/g_{ljk})\exp(-h\nu_{lm}/kT), \end{aligned} \quad (5.5)$$

где  $h\nu_{lm}$  — энергия фотона, равная разности энергий уровней. При расчетах ионизационного равновесия обычно требуется найти *полное* число атомов в некотором конкретном состоянии ионизации, которое можно записать в виде

$$\begin{aligned} N_{jk}^* &= \sum_i n_{ijk}^* = n_{0jk}^*/g_{0jk} \sum_i g_{ijk} \exp(-\chi_{ijk}/kT) = \\ &= (n_{0jk}^*/g_{0jk}) U_{jk}(T), \end{aligned} \quad (5.6)$$

где

$$U_{jk}(T) \equiv \sum_i g_{ijk} \exp(-\chi_{ijk}/kT) \quad (5.7)$$

называется *суммой по состояниям*. При классическом анализе спектров с помощью кривых роста (см. § 10.3 и 10.4) формулу (5.4) принято использовать в виде

$$(n_{ijk}/N_{jk})^* = g_{ijk} \exp(-\chi_{ijk}/kT)/U_{jk}(T). \quad (5.8)$$

Получение сумм по состояниям требует громоздких расчетов, а

для некоторых атомов и ионов (например, для редких земель) сведения о структуре термов настолько неполны, что нам не хватает необходимых данных. Имеются таблицы сумм по состояниям [11], стр. 115 — 117, и их удобные аналитические представления с помощью приближенных формул [103], [220]. Часто хорошей оценкой служит просто значение  $g_{0jk}$  или сумма по нескольким нижним состояниям. Отметим, что формально, согласно формуле (5.7), сумма по состояниям расходится, если суммирование распространяется на все связанные состояния (число которых бесконечно), так как все члены суммы не меньше  $\exp(-\chi_{ijk}/kT)$  (где  $\chi_{ijk}$  — энергия ионизации), а эта величина не равна нулю. Физически этой проблемы, однако, не существует, так как на самом деле самые верхние состояния не могут оставаться связанными, поскольку они испытывают сильные возмущения под действием окружающих атомов и ионов. Чтобы оценить этот эффект, можно принять, что связанными являются только те состояния, которые содержатся в пределах среднего объема, приходящегося на один ион. При концентрации частиц  $N$  среднее расстояние между атомами равно  $r_0 = (3/4\pi N)^{1/3}$ . Для водородоподобного иона с зарядом  $Z$  радиус атома, находящегося на уровне с главным квантовым числом  $n$ , равен  $r_n = n^2 a_0 / Z$ , где  $a_0 = 5,3 \cdot 10^{-9}$  см — боровский радиус. Если положить  $r_n = r_0$  и выбрать в качестве типичного значения  $N \approx 10^{15}$ , то найдем, что  $n \approx 30Z^{1/2}$ , так что сумма явно конечна. Более точный расчет (см. §9.4) показывает, что в плазме с концентрацией заряженных частиц  $n_e$  и температурой  $T$  у ионов с зарядом  $Z$  потенциал ионизации уменьшается на величину  $\Delta\chi \approx 3 \cdot 10^{-8} Z n_e^{1/2} T^{-1/2}$  эВ. Для водородоподобных энергетических уровней это дает  $n_{\max}^2 \approx 4 \cdot 10^8 Z n_e^{-1/2} T^{1/2}$ , или  $n_{\max} \approx 60Z^{1/2}$  при  $n_e \sim 10^{14}$  и  $T \sim 10^4$ .

#### ФОРМУЛА ИОНИЗАЦИИ САХА

Над дискретными связанными состояниями атома имеется *континуум* состояний, в которых электрон не связан и имеет отличную от нуля кинетическую энергию. Энергия, на которой начинается континуум, отсчитанная от основного состояния, называется *энергией ионизации*  $\chi_i$ . Относительные числа атомов и ионов, находящихся в последовательных стадиях ионизации, можно рассчитать по *формуле ионизации Саха*, которую мы получим, распространив формулу Больцмана на свободные состояния.

Рассмотрим процесс, при котором атом  $k$ -го элемента ионизуется из своего основного состояния с образованием иона на основном

уровне плюс свободный электрон в континууме, движущийся со скоростью  $v$ . Энергия, необходимая для протекания этого процесса, равна  $\chi_{I,0,k} + mv^2/2$  (где использованы обозначения, подобные тем, которые применялись при обсуждении формулы Больцмана). Статистический вес начального состояния есть  $g_{0,0,k}$ . Статистический вес конечного состояния (ион + электрон) можно записать в виде  $g(v) = g_{0,1,k} \times g_{\text{электрон}}$ . Если через  $n_{0,1,k}(v)$  обозначить число ионов на основном уровне, около которых имеется свободный электрон со скоростью, лежащей в интервале  $(v, v + dv)$ , можно применить формулу (5.4), что позволяет написать

$$[n_{0,1,k}(v)/n_{0,0,k}]^* = (g(v)/g_{0,0,k}) \exp\left[-(\chi_{I,0,k} + \frac{1}{2}mv^2)/kT\right]. \quad (5.9)$$

Величину  $g_{\text{электрон}}$  мы отождествляем с числом ячеек фазового пространства, которые свободный электрон может занимать. Согласно квантовой статистике, оно равно

$$g_{\text{электрон}} = 2(dx dy dz dp_x dp_y dp_z)/h^3,$$

где множитель 2 учитывает две возможные ориентации спина электрона. Возьмем такой элемент пространственного объема, который содержал бы в точности один свободный электрон, и подставим  $dx dy dz = n_e^{-1}$ . Элемент объема в пространстве импульсов запишем через скорость электрона:

$$dp_x dp_y dp_z = 4\pi p^2 dp = 4\pi m^3 v^2 dv.$$

Тогда формула (5.9) примет вид

$$\begin{aligned} [n_{0,1,k}(v)/n_{0,0,k}]^* &= \\ &= 8\pi m^3 h^{-3} (g_{0,1,k}/g_{0,0,k}) n_e^{-1} \times \exp\left[-(\chi_{I,0,k} + \frac{1}{2}mv^2)/kT\right] v^2 dv. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Далее, суммируя по всем конечным состояниям, т.е. интегрируя по распределению скоростей электронов, получаем

$$\begin{aligned} (n_{0,1,k} n_e / n_{0,0,k})^* &= \\ &= 8\pi m^3 h^{-3} (g_{0,1,k}/g_{0,0,k}) (2kT/m)^{3/2} \times \\ &\quad \times \exp(-\chi_{I,0,k}/kT) \int_0^{\infty} e^{-x^2} x^2 dx, \end{aligned} \quad (5.11)$$

или, если вычислить интеграл,

$$n_{0,0,k}^* = n_{0,1,k}^* n_e^* \frac{1}{2} (h^2/2\pi m k T)^{3/2} (g_{0,0,k}/g_{0,1,k}) \exp(\chi_{I,0,k}/kT). \quad (5.12)$$

Это и есть формула Саха в ее основной форме. Отметим, что при

выводе нигде не использовалось условие, что первоначально «атом» нейтрален. Поэтому формулу (5.12) можно обобщить так, что она будет применима к двум любым последовательным стадиям ионизации:

$$n_{0jk}^* = n_{0,j+1,k}^* n_e^* \frac{1}{2} (h^2/2\pi mkT)^{3/2} (g_{0jk}/g_{0,j+1,k}) \exp(\chi_{Ijk}/kT). \quad (5.13)$$

Если далее воспользоваться формулой Больцмана (5.4), мы получим выражение для населенности любого состояния  $j$  в функции температуры, электронной концентрации и населенности основного состояния иона  $j + 1$ , а именно

$$\begin{aligned} n_{ijk}^* &= n_{0,j+1,k} n_e (g_{ijk}/g_{0,j+1,k}) C_I T^{-3/2} \times \\ &\times \exp[(\chi_{Ijk} - \chi_{ijk})/kT] \equiv \\ &\equiv n_{0,j+1,k} n_e \Phi_{ijk}(T). \end{aligned} \quad (5.14)$$

Для того формализма, который будет нами применяться, выражение (5.14) является наиболее удобным видом формулы Саха. Оно будет использоваться в качестве *определения* ЛТР-населенностей в общих уравнениях статистического равновесия, не предполагающих заранее существования ЛТР (по этой причине индекс \* у  $n_{0,j+1,k}$  и  $n_e$  опущен). Значение константы в системе СГС равно  $C_I = 2,07 \cdot 10^{-16}$ .

Воспользовавшись формулой (5.6), можем переписать (5.14) в виде

$$\begin{aligned} n_{ijk}^* &= N_{j+1,k}^* n_e [(g_{0,j+1,k}/U_{j+1,k}(T)] \Phi_{ijk}(T) \equiv \\ &\equiv N_{j+1,k}^* n_e \tilde{\Phi}_{ijk}(T). \end{aligned} \quad (5.15)$$

Далее, суммируя по всем связанным состояниям более низкой стадии ионизации и пользуясь еще раз формулой (5.6), получаем выражение для отношения полных чисел атомов в последовательных стадиях ионизации:

$$\begin{aligned} (N_{jk}/N_{j+1,k})^* &= n_e [U_{jk}(T)/U_{j+1,k}(T)] C_I T^{-3/2} \times \\ &\times \exp(\chi_{Ijk}/kT) \equiv n_e \tilde{\Phi}_{jk}(T). \end{aligned} \quad (5.16)$$

Применяя несколько раз формулу (5.16) к последовательным стадиям ионизации, можно получить выражение для доли атомов химического элемента  $k$  в стадии ионизации  $j$  по отношению к полному

числу атомов этого типа:

$$\begin{aligned}
 f_{jk}(n_e, T) &\equiv (N_{jk}/N_k)^* = \\
 &= \frac{(N_{J_k-1,k}/N_{J_k k})^* \dots (N_{jk}/N_{j+1,k})^*}{1 + (N_{J_k-1,k}/N_{J_k k})^* + (N_{J_k-1,k}/N_{J_k k})^* (N_{J_k-2,k}/N_{J_k-1,k})^* + \dots + \\
 &\quad + (N_{J_k-1,k}/N_{J_k k})^* \dots (N_{0k}/N_{1k})^*} = \\
 &= \prod_{l=j}^{J_k-1} [n_e \tilde{\Phi}_{lk}(T)] / \sum_{m=0}^{J_k} \prod_{l=m}^{J_k-1} [n_e \tilde{\Phi}_{lk}(T)] \equiv \\
 &\equiv P_{jk}(n_e, T) / S_k(n_e, T), \quad j = 1, \dots, J_k, \quad (5.17)
 \end{aligned}$$

где  $J_k$  — номер последней стадии ионизации рассматриваемого элемента  $k$ . Заметим, что здесь предполагается, что сомножители с  $l = J_k$  (которые формально равны нулю) и в числителе, и в знаменателе заменены на единицу.

Рассмотрение полученных результатов показывает, что если  $(n_e, T)$  известны, то для любого химического элемента  $k$  по формуле (5.17) можно определить долю его атомов, находящихся в любой заданной стадии ионизации, а по формуле (5.15) — долю атомов, находящихся на любом конкретном возбужденном уровне. Если, кроме того, известна полная концентрация атомов этого элемента, то можно получить абсолютные населенности уровней  $n_{ijk}$ . На практике эта процедура удобна при расчетах линейчатых спектров в предположении ЛТР, когда модель атмосферы, определяющая  $n_e(z)$  и  $T(z)$ , задана. Однако при расчете самой модели величина  $n_e(z)$  обычно не известна, а известна полная концентрация частиц  $N(z)$ . Поэтому следует определить  $n_e$ , а это означает, как следует из формулы (5.17), что должна быть решена нелинейная система уравнений. Рассмотрим поэтому методы решения этой нелинейной задачи.

## 5.2. Уравнение состояния вещества, испытывающего ионизацию, в предположении ЛТР

Формулы Больцмана и Саха позволяют рассчитать долю любой химической составляющей вещества, находящуюся в различных