

числу атомов этого типа:

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

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

стадиях ионизации, и соответствующее число свободных электронов, поставляемых плазме. Звездные атмосферы состоят из смеси элементов с сильно различающимися потенциалами ионизации. Вообще говоря, некоторые из составляющих могут быть нейтральными, тогда как другие однократно или многократно ионизованы. Обычно переход от одной из стадий ионизации к следующей происходит с ростом температуры довольно резко, и, как правило, та или иная составляющая существует практически целиком лишь в двух последовательных стадиях ионизации. Это представляет нам чувствительный метод для диагностики температурной структуры звездных атмосфер, так как отсюда следует, что отношение интенсивностей спектральных линий двух последовательных ионов (например, He I и He II или Ca I и Ca II) будет быстро меняющейся функцией температуры. Фактически именно это было той основой, на которой Саха [546], [547], Паннекук [495], Пейн [501] и Фаулер и Милн [222], [223] впервые дали объяснение спектральной последовательности. В нормальных звездных атмосферах водород является составляющей, далеко превосходящей по распространенности все остальные. Следующим по распространенности идет гелий, причем $N(\text{He})/N(\text{H}) \approx 0,1$. Содержание по отношению к водороду более тяжелых элементов гораздо ниже (относительно распространенностей элементов в атмосфере Солнца см., например, [252]). При типичных для солнечной атмосферы температурах (6000 K) водород практически нейтрален, и электроны поставляются главным образом «металлами», такими, как Na, Mg, Al, Si, Ca и Fe. При более высоких температурах, характерных для А-звезд (10 000 K), водород ионизуется и становится основным источником электронов. При очень высоких температурах, характерных для О-звезд и ранних В-звезд, ионизуется гелий, и он составляет заметную долю электронов.

СОХРАНЕНИЕ ЗАРЯДА И ЧИСЛА ЧАСТИЦ

При расчетах моделей звездных атмосфер газовое давление определяется из уравнения гидростатического равновесия. Поэтому если p_g и T заданы, то полная концентрация частиц N известна — она определяется соотношением

$$p_g = NkT = (N_{\text{атомы}} + N_{\text{ионы}} + n_e)kT = (N_N + n_e)kT. \quad (5.18)$$

Здесь N_N означает концентрацию «ядер», т.е. атомов и ионов всех типов. В уравнении (5.18) и в последующих формулах этого раздела

индекс $*$, означающий ЛТР, для упрощения обозначений опускается. Обозначим через α_k *относительное содержание* химического элемента k , определяемое равенством $N_k = \alpha_k N_N$, так что $\sum_k \alpha_k = 1$. Тогда равенство

$$N_k = \alpha_k (N - n_e) \quad (5.19)$$

выражает *условие сохранения числа частиц* (т.е. $\sum_k N_k = N_N$).

Потребуем, кроме того, чтобы плазма была электрически нейтральна. Тогда число свободных электронов равно суммарному заряду ионов и *условие сохранения заряда* записывается в виде

$$\begin{aligned} n_e &= \sum_k \sum_{j=1}^{J_k} j N_{jk} = \sum_k N_k \sum_{j=1}^{J_k} j f_{jk}(n_e, T) = \\ &= (N - n_e) \sum_k \alpha_k \sum_{j=1}^{J_k} j f_{jk}(n_e, T). \end{aligned} \quad (5.20)$$

Как отмечалось выше, если n_e и T известны, то N и f_{jk} можно вычислить непосредственно. Если же известны N и T , то n_e должно находиться из некоторого нелинейного уравнения. До появления электронных счетных машин эта проблема решалась с помощью построения таблиц $\lg p_g(T, \lg p_e)$ (здесь $p_e = n_e kT$), по которым для нахождения $p_e(T, \lg p_g)$ можно было выполнить интерполирование. Примеры таких таблиц даются в [11], стр. 30, и в [638], стр. 104. Мы изложим другой подход, в основе которого лежит идея, предложенная Л. Х. Ауэром. Этот метод больше подходит для машинных вычислений и по своему духу соответствует излагаемому в гл. 7 общему методу расчета моделей атмосфер. Но сначала рассмотрим один поучительный пример, который позволит составить представление о физической картине в предельных случаях.

Предположим, что газ состоит только из водорода ($\chi_H = 13,6$ эВ) и одного металла «М» с единственным ионизованным состоянием, обладающим гораздо более низким потенциалом ионизации (скажем, $\chi_M = 4$ или 5 эВ) и с содержанием по отношению к водороду $\alpha_M \ll 1$. При высоких температурах, когда водород заметно ионизован, он будет поставлять большую часть электронов. При более низких температурах водород нейтрален и n_e определяется долей f_M

ионизованных атомов металла. Число частиц всех типов равно

$$N = n_H(1 + f_H) + \alpha_M n_H(1 + f_M), \quad (5.21)$$

а число электронов

$$n_e = n_p + n_{M^+} = n_H(f_H + \alpha_M f_M). \quad (5.22)$$

Поэтому

$$p_e/p_g = (f_H + \alpha_M f_M)/(1 + f_H + \alpha_M(1 + f_M)). \quad (5.23)$$

При достаточно высоких температурах $f_H \rightarrow 1$, и так как $\alpha_M \ll 1$, то $p_e/p_g \rightarrow 1/2$. При промежуточных температурах, когда $\alpha_M \ll f_H \ll 1$ и в то же время $f_M \approx 1$, имеем $p_e/p_g \approx f_H$. При низких температурах $f_H \rightarrow 0$, тогда как $f_M/f_H \gg 1$, и поэтому $p_e/p_g \rightarrow \alpha_M f_M$. Таким образом, видим, что при высоких температурах металлы практически несущественны при определении p_e/p_g , при низких же температурах они играют решающую роль. В частности, отметим, что у холодных звезд ρ_e пропорционально содержанию металлов. Это существенно, поскольку главным источником непрозрачности в холодных атмосферах является поглощение ионом H^- , а отношение $n(H^-)/n(H)$ пропорционально n_e . Поэтому у этих звезд содержание металлов определяет и непрозрачность.

Для газа из чистого водорода уравнения (5.16), (5.19) и (5.20) можно решить аналитически, что дает

$$n_e(H) = \tilde{\Phi}_H^{-1} [(N\tilde{\Phi}_H + 1)^{1/2} - 1]. \quad (5.24)$$

Отсюда видно, что при фиксированном T и низкой степени ионизации $n_e \sim N^{1/2}$.

Упражнение 5.1. Вывести формулу (5.24).

Если в описанном выше двухкомпонентном газе ионизован только металл ($f_H \ll \alpha_M$), то имеем

$$n_e(M) \approx \tilde{\Phi}_M^{-1} \left\{ [\alpha_M N \tilde{\Phi}_M + \frac{1}{4} (1 + 2\alpha_M)]^{1/2} - \frac{1}{2} (1 + \alpha_M) \right\}. \quad (5.25)$$

Если $\alpha_M \ll 1$ и $\chi_M \ll \chi_H$, из формул (5.24) и (5.25) мы получим довольно хорошую оценку n_e , если положим $n_e \approx n_e(H) + n_e(M)$.

РЕШЕНИЕ МЕТОДОМ ЛИНЕАРИЗАЦИИ

Обратимся теперь к вопросу об определении n_e по заданным значениям (N, T) с помощью итеративного метода линеаризации (обобщение метода Ньютона). Мы опишем этот метод довольно подробно, поскольку он является простым примером того подхода, который будет использован нами в более сложных случаях (например, при решении уравнений статистического равновесия и переноса излучения в отсутствие ЛТР). Единственным подлежащим решению уравнением (в отличие от неравновесного случая, где уравнений много, см. § 5.5) является уравнение (5.20), в котором $f_{jk}(n_e, T)$ дается выражением (5.17). Предположим, что имеется некоторая начальная оценка электронной концентрации n_e^0 . Предположим также, что использование n_e^0 для вычисления правой части в (5.20) дает концентрацию $n_e^1 \neq n_e^0$. Тогда ясно, что истинная концентрация отличается от n_e^0 , так что можно написать $n_e = n_e^0 + \delta n_e$, где δn_e надо выбрать таким образом, чтобы уравнение (5.20) удовлетворялось точно. Поскольку это уравнение нелинейное, точно определить δn_e нельзя, но в предположении, что $\delta n_e / n_e^0 \ll 1$, оценку δn_e можно получить, разложив все величины с точностью до членов первого порядка и разрешив уравнение относительно δn_e . Тогда будем иметь

$$n_e^0 + \delta n_e \approx [(N - n_e^0 - \delta n_e) \tilde{\Sigma}(n_e^0, T)] + (N - n_e^0) \left[\frac{\partial \tilde{\Sigma}(n_e, T)}{\partial n_e} \right] n_e^0 \delta n_e$$

или

$$(5.26)$$

$$\delta n_e \approx [(N - n_e^0) \tilde{\Sigma} - n_e^0] \left[1 + \tilde{\Sigma} - (N - n_e^0) \frac{\partial \tilde{\Sigma}}{\partial n_e} \right]^{-1},$$

$$(5.27)$$

где

$$\tilde{\Sigma}(n_e, T) = \sum_k \alpha_k S_k^{-1}(n_e, T) \sum_{j=1}^{J_k} j P_{jk}(n_e, T).$$

$$(5.28)$$

Заметим, что функции $P(n_e, T)$ и $S(n_e, T)$ можно записать в виде

$$P_{jk}(n_e, T) = \prod_{l=j}^{J_k-1} [n_e \tilde{\Phi}_{lk}(T)] = n_e^{(J_k-l)} \prod_{jk} (T)$$

$$(5.29)$$

и

$$S_k(n_e, T) = \sum_{j=0}^{J_k} P_{jk}(n_e, T) = \sum_{j=0}^{J_k} n_e^{(J_k-j)} \Pi_{jk}(T). \quad (5.30)$$

Значение δn_e , даваемое выражением (5.27), не является точным, поэтому мы осуществляем *итерацию* этой процедуры: берем новую оценку n_e^0 (новое) = n_e^0 (старое) + δn_e , с ней перевычисляем $\tilde{\Sigma}$ и $\partial \tilde{\Sigma} / \partial n_e$ и находим новое значение δn_e .

Сходимость этой процедуры *квадратичная* (если первоначальная оценка лежит в пределах области сходимости), так что если первая относительная погрешность $\delta n_e / n_e$ равна ε , то последующие итерации будут давать поправки порядка ε^2 , ε^4 , ε^8 и т.п., откуда следует, что можно быстро получить результат с желаемой точностью. Стоит также заметить, что производную $\partial \tilde{\Sigma} / \partial n_e$ можно вычислить аналитически:

$$\frac{\partial \tilde{\Sigma}}{\partial n_e} = \sum_k \alpha_k \left[S_k^{-1} \sum_j j \frac{\partial P_{jk}}{\partial n_e} - S_k^{-2} \frac{\partial S_k}{\partial n_e} \sum_j j P_{jk} \right], \quad (5.31)$$

причем производные $\partial P_{jk} / \partial n_e$ и $\partial S_k / \partial n_e$ непосредственно получают-ся из формул (5.29) и (5.30) и по подстановке в (5.31) приводят к компактному выражению для $\partial \tilde{\Sigma} / \partial n_e$. Вообще же производные, появляющиеся в процедурах линеаризации, можно приближенно находить численно. Однако мы обычно будем иметь возможность получать производные аналитически, и опыт показал, что за счет этого процесс вычислений делается более управляемым.

Наконец, получив удовлетворительное значение n_e , а попутно и f_{jk} , по формуле (5.15) можно рассчитать населенность любого уровня:

$$\begin{aligned} n_{ijk} &= N_{j+1,k} n_e \tilde{\Phi}_{ijk}(T) = \\ &= \alpha_k (N - n_e) n_e f_{j+1,k}(n_e, T) \tilde{\Phi}_{ijk}(T), \end{aligned} \quad (5.32)$$

чем и завершается расчет уравнения состояния при ЛТР.

Описанная выше процедура имеет более общее значение, чем это указывалось до сих пор. Мы принимаем, что N и T заданы. Но эти величины определяются условиями гидростатического равновесия и баланса энергии и в общем случае известны на любом кон-

кретном этапе расчета модели лишь приближенно. Как будет показано в гл. 7, процедуру линеаризации можно применить ко всем входящим в расчет переменным, а потому нам понадобится оценить, как населенности уровней реагируют на возмущения δN и δT . Варьируя уравнение (5.20), получаем

$$n_e + \delta n_e = (N + \delta N - n_e - \delta n_e) \tilde{\Sigma} + \\ + (N - n_e) \left[\frac{\partial \Sigma}{\partial n_e} \delta n_e + \frac{\partial \tilde{\Sigma}}{\partial T} \delta T \right], \quad (5.33)$$

или, если принять, что n_e есть решение уравнения (5.20) при текущих значениях (N, T) ,

$$\delta n_e = \left[1 + \tilde{\Sigma} - (N - n_e) \frac{\partial \tilde{\Sigma}}{\partial n_e} \right]^{-1} \left[\tilde{\Sigma} \delta N + \right. \\ \left. + (N - n_e) \frac{\partial \tilde{\Sigma}}{\partial T} \delta T \right] = \left(\frac{\partial n_e}{\partial N} \right)_T \delta N + \left(\frac{\partial n_e}{\partial T} \right)_N \delta T, \quad (5.34)$$

причем $\partial \tilde{\Sigma} / \partial T$ здесь также можно найти аналитически. Далее, из формулы (5.32) для δn_{ijk} можно получить выражение вида $\delta n_{ijk} = \Delta_1 \delta N + \Delta_2 \delta T + \Delta_3 \delta n_e$, которое с помощью (5.34) можно упростить, приведя его к форме

$$\delta n_{ijk} = \left(\frac{\partial n_{ijk}}{\partial N} \right)_T \delta N + \left(\frac{\partial n_{ijk}}{\partial T} \right)_N \delta T. \quad (5.35)$$

Упражнение 5.2. Получить выражения для коэффициентов в формуле (5.35) через P_{jk} , S_k и Φ_{ijk} и их производные.

Формулы (5.34) и (5.35) дают информацию, которая понадобится нам в § 7.2 для выяснения того, как реагируют коэффициенты поглощения и излучения ($\delta \chi$, $\delta \eta$) на изменения в структуре модели (δN , δT).

Упражнение 5.3. Показать, что δN_{jk} для последней стадии ионизации элемента k имеет особенно простой вид, так как f_{jk} содержит только S_k . Далее показать, что выражения для δN_{jk} для ионов более низких стадий ионизации могут находиться по формуле (5.16) рекуррентно и что эти выражения в комбинации с формулой (5.15)

приводят к простым выражениям для δn_{jk} , имеющим ту же форму, что и в (5.35).

5.3. Микроскопические условия, необходимые для существования ЛТР

Прежде чем обсуждать уравнения статистического равновесия, стоит качественно рассмотреть, какие микроусловия требуются для существования ЛТР. Интересный анализ этих условий можно найти у К. Х. Бёма [261], гл. 3. Мы сейчас кратко изложим и обсудим как этот анализ, так и другой относящийся к этому вопросу материал.

ДЕТАЛЬНЫЙ БАЛАНС

При термодинамическом равновесии скорость протекания любого процесса в точности равна скорости протекания обратного ему процесса, т.е. для каждого процесса имеет место *детальный баланс*. Это очень жесткое требование. Рассмотрение детального баланса оказывается очень полезным для получения соотношений между коэффициентами вероятностей различных процессов (напомним, что этот метод уже использовался в гл. 4). Процессы, вызывающие переходы из одного состояния в другое (связанное или свободное), можно разбить на два широких класса — радиативные и процессы столкновений. Процессы столкновений — это те процессы, за счет которых, согласно статистической физике, устанавливается равновесие. Можно утверждать, что для них будет существовать детальный баланс, *если только распределение скоростей сталкивающихся частиц равновесное* (т.е. максвелловское). Ниже будет показано, что для звездных атмосфер можно ожидать выполнения этого условия. Более того, близкое утверждение можно сделать и о процессах, которые хотя и сопровождаются излучением фотона, но по своему характеру все же являются процессами столкновений (например, свободно-связанные переходы, т.е. фоторекомбинация, и свободно-свободное излучение). При расчете скоростей протекания этих процессов, если это удобно, можно пользоваться соотношениями, основанными на выполнении детального баланса. В противоположность этому радиативные процессы (например, фотовозбуждения, фотоионизации) непосредственно зависят от характера поля излучения и будут находиться в детальном балансе, *только если* интенсивность излучения изотропна и имеет планков-