



MASARYKOVA UNIVERZITA
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
ÚSTAV TEORETICKÉ FYZIKY A ASTROFYZIKY



Rayleighův rozptyl v atmosférách horkých hvězd

Diplomová práce

Jakub Fišák

Vedoucí práce: prof. Mgr. Jiří Krtička, Ph.D.

Brno 2014

Bibliografický záznam

Autor:	Bc. Jakub Fišák Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita Ústav teoretické fyziky a astrofyziky
Název práce:	Rayleighův rozptyl v atmosférách horkých hvězd
Studijní program:	Fyzika
Studijní obor:	Teoretická fyzika a astrofyzika
Vedoucí práce:	prof. Mgr. Jiří Krtička, Ph.D.
Konzultant:	doc. Mgr. Dominik Munzar, Dr.
Akademický rok:	2014
Počet stran:	ix + 60
Klíčová slova:	hvězdy: chemicky pekuliární, hvězdy: atmosféry, Rayleighův rozptyl

Bibliographic Entry

Author: Bc. Jakub Fišák
Faculty of Science, Masaryk University
The Department of Theoretical Physics and Astrophysics

Title of Thesis: Rayleigh Scattering in Stellar Atmospheres

Degree Programme Physics

Field of Study: Theoretical Physics and Astrophysics

Supervisor: prof. Mgr. Jiří Krtička, Ph.D.

Consultant: doc. Mgr. Dominik Munzar, Dr.

Academic Year: 2014

Number of Pages: ix + 60

Keywords: stars: chemically peculiar, stars: atmospheres, Rayleigh scattering

Abstrakt

V diplomové práci se věnujeme studiu vlivu Rayleighova rozptylu na modely hvězdných atmosfér. Studujeme atmosféry hvězd spektrální třídy B v rozmezí teplot 15000 – 30000 K se slunečním chemickým složením a s nadbytkem helia, kde $N(\text{He})/N(\text{H})=10$. Pro hvězdy se slunečním chemickým složením je rozdíl v modelech se započítaným a bez započítaného Rayleighova rozptylu na jednou ionizovaném heliu na hranici měřitelnosti. V případě hvězd s nadbytkem helia je tento rozdíl výrazný. Změny toku záření pro hvězdu s nadbytkem helia jsou řádově desetkrát větší než změny zářivého toku pro hvězdy se slunečním chemickým složením a alespoň o dva řády větší než změny zářivého toku pro atmosféry se započítaným Rayleighovým rozptylem na neutrálním vodíku. Rayleighův rozptyl na jednou ionizovaném heliu je tak v případě hvězd s nadbytkem helia významným zdrojem opacity v atmosféře.

Abstract

In the thesis we study the influence of Rayleigh scattering in the stellar atmospheres. We study atmospheres of spectral class B-type stars with effective temperatures 15000 – 30000 K with solar chemical composition and with helium overabundance, where $N(\text{He})/N(\text{H})=10$. The difference between models with and without Rayleigh scattering for singly ionized helium is negligible. The difference is significant for helium overabundant atmospheres. The differences in radiative flux for helium overabundant atmospheres are by one order of magnitude higher than differences in radiative fluxes for solar chemical composition and at least two orders of magnitude higher than differences for atmospheres with neutral hydrogen Rayleigh scattering considered. Rayleigh scattering on singly ionized helium is significant opacity source in the stellar atmospheres with helium overabundance.



Masarykova univerzita
Přírodovědecká fakulta



ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

Student : Bc. Jakub Fišák, učo 357291
Studijní program : Fyzika
Studijní obor : Teoretická fyzika a astrofyzika

Ředitel Ústavu teoretické fyziky a astrofyziky PřF MU Vám ve smyslu Studijního a zkušebního řádu MU určuje diplomovou práci s tématem:

Rayleighův rozptyl v atmosférách horkých hvězd Rayleigh scattering in the stellar atmospheres

Zásady pro vypracování: Elastický rozptyl záření na vázaných stavech atomu vodíku může být důležitým zdrojem absorpce záření v atmosférách chladných hvězd. V atmosférách horkých hvězd je vodík převážně ionizovaný, tedy jeho vliv na opacitu prostřednictvím Rayleighova rozptylu je slabší. Na druhou stranu se ale v atmosférách některých chemicky pekuliárních hvězd mohou nacházet oblasti s nadbytkem jednou ionizovaného helia, které by již mohlo přispívat k opacitě prostřednictvím Rayleighova rozptylu. Cílem diplomové práce je teoreticky popsat Rayleighův rozptyl na základě kvantověmechanických výpočtů a pomocí modelů atmosfér určit jeho vliv na atmosféry horkých hvězd s normálním chemickým složením i na hvězdy s nadbytkem helia.

Po domluvě s vedoucím DP může být DP napsána v českém, slovenském a anglickém jazyce.

Vedoucí diplomové práce : prof. Mgr. Jiří Krtička, Ph.D.
Konzultant : doc. Mgr. Dominik Munzar, Dr.
Datum zadání diplomové práce : leden 2013
Datum odevzdání diplomové práce : dle harmonogramu ak. roku 2013/2014

V Brně leden 2013

von Unge
Rikard von Unge
ředitel ÚTFA

Zadání diplomové práce převzal dne:

11.02.2013

Podpis studenta

Fišák

Poděkování

Na tomto místě bych chtěl poděkovat prof. Jiřímu Krtičkovi a doc. Dominiku Munzarovi za čas, který věnovali konzultacím, hledáním chyb v textu a za všechny cenné informace, které jsem se během dvou let magisterského studia od nich dozvěděl.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svoji diplomovou práci vypracoval samostatně s využitím informačních zdrojů, které jsou v práci citovány.

Brno 16. května 2014

.....
Jakub Fišák

Obsah

Úvod	ix
1 Horké hvězdy	1
1.1 Definice horkých hvězd	1
1.2 Hvězdy spektrální třídy B	3
1.3 Chemicky pekuliární hvězdy	3
2 Modelování hvězdných atmosfér	6
2.1 Rovnice přenosu záření	7
2.2 Opacita a emisivita	11
2.2.1 Obsazení energiových hladin atomů	11
2.2.2 Základní procesy interakce fotonů s atomy	12
2.2.3 Výpočet opacity a emisivity	13
2.3 Modely atmosfér	14
2.4 Model TLUSTY	16
3 Teorie rozptylu	18
3.1 Účinný průřez rozptylu	18
3.2 Klasická teorie Rayleighova rozptylu	19
3.3 Kramersova-Heisenbergova formule	20
3.4 Elastický Rayleighův rozptyl	25
4 Výpočet účinného průřezu Rayleighova rozptylu	28
4.1 Neutrální vodík	28
4.2 Atomy podobné vodíku	30
4.3 Excitované stavy vodíku a ionizovaného helia	31
5 Rayleighův rozptyl v modelech hvězdných atmosfér	33
5.1 Implementace Rayleighova rozptylu na He II do zdrojového kódu	33
5.2 Modelování atmosfér a zpracování výstupu	35
5.3 Populace atomů vodíku a helia	36
5.4 Vliv Rayleighova rozptylu na modely atmosfér	38
5.4.1 Rozptyl na vodíku pro hvězdy se slunečním chemickým složením	38
5.4.2 Rozptyl na jednou ionizovaném heliu pro hvězdy se slunečním chemickým složením	38
5.4.3 Rozptyl na jednou ionizovaném heliu pro hvězdy s nadbytkem helia	40
Závěr	44

A	Výsledné grafy	45
A.1	Rozptyl na vodíku pro hvězdy se slunečním složením	45
A.2	Rozptyl na heliu pro hvězdy se slunečním složením	47
A.3	Rozptyl na heliu pro hvězdy s nadbytkem helia	48
B	Časově závislá poruchová teorie	49
C	Numerický model TLUSTY	53
C.1	Základní schéma vstupu	53
C.2	Základní schéma výstupu	56
	Seznam použité literatury	59

Úvod

Hvězdy hlavní posloupnosti jsou objekty, které plně hradí svůj zářivý výkon hořením vodíku v centru. Při studiu těchto hvězd je však velkou nevýhodou, že nemůžeme přímo pozorovat a získávat informace o jejich vnitřní struktuře. Světlo, které pozorujeme, přichází pouze z tenké vrstvy, kterou nazýváme atmosféra. Jedinou možností, jak studovat hvězdnou strukturu, je s pomocí modelů. Atmosféra hvězdy hlavní posloupnosti má sice hmotnost řádově jen $10^{-10} M_{\odot}$, ale její modelování je velmi důležité. Právě v atmosféře dochází k vytváření charakteristického spektra hvězdy, které se výrazně liší od Planckovy funkce. Díky modelu tak můžeme zjistit strukturu atmosféry a reálnost modelu lze ověřit srovnáním syntetického a naměřeného spektra.

Při studiu modelu atmosféry je nutné řešit rovnice popisující obsazení energetických hladin atomů, interakci záření s hmotou, hydrodynamiku látky a další. Obecně vyřešit tento problém je v dnešní době nemožné. Do modelu je nutné zahrnout velké množství dat a fyzikálních jevů. Využití vhodných fyzikálních aproximací a matematických metod pro urychlení řešení rovnic je proto nevyhnutelné. Přes to všechno trvá výpočet modelu, který se dobře shoduje se skutečností, řádově dny.

V této práci se zabýváme modelováním atmosfér hvězd hlavní posloupnosti spektrální třídy B. V modelech těchto hvězd není standardně započítáván rozptyl záření na vázaných elektronech. Zanedbání je spojeno s předpoklady, že vodík je převážně ionizovaný a abundance helia není tak velká, aby došlo k výraznému ovlivnění modelu. Výjimkou mohou být chemicky pekulární hvězdy s nadbytkem helia. Obsah jednou ionizovaného helia u těchto hvězd je větší než obsah neutrálního vodíku. V této práci vyšetříme jak vliv Rayleighova rozptylu na neutrálním vodíku, tak i na jednou ionizovaném heliu. Existují hvězdy, které mají v atmosférách oblasti s výrazně větší abundancí helia než vodíku. Koncentrace helia je v některých oblastech několiknásobně větší než koncentrace vodíku. Lze proto očekávat, že vliv Rayleighova rozptylu bude nejvýraznější právě v atmosférách těchto hvězd.

Práce je rozdělena do pěti kapitol. V první kapitole je uveden stručný popis horkých hvězd. Následuje nastínění problematiky modelování hvězdných atmosfér. Třetí kapitola je věnována teorii rozptylu. Jsou zde důkladně odvozeny vzorce, ze kterých je ve čtvrté kapitole přímo spočítán celkový účinný průřez Rayleighova rozptylu pro několik případů. Nakonec jsou zde uvedeny řádové odhady účinných průřezů rozptylu na atomech vodíku a jednou ionizovaného helia v excitovaných stavech. V závěrečné kapitole jsou shrnuty výsledky této práce.

Teorie odvození účinného průřezu je převzata z knihy, která používá soustavu SI, proto jsou příslušné vzorce ve stejné soustavě jednotek. Data spočítaná modelem jsou v soustavě CGS.

KAPITOLA 1

Horké hvězdy

Hvězdy fascinovaly lidstvo dlouho před samotným vznikem astronomie. Například Slunce – zlatý disk na denní obloze, který byl v některých kulturách považován dokonce za boha. Na noční obloze poseté hvězdami si lidé vytvářeli obrazce – souhvězdí, které často spojovali s příběhy. Některá souhvězdí, zejména ta spojená s řeckou mytologií, známe i dnes. Hvězdy se dříve užívaly také k orientaci v prostoru i čase. Mořeplavci nezabloudili na svých dlouhých cestách a staří Egyptané podle heliak-tického východu Siria poznali, že nastává období záplav. Od dob prvních civilizací pozorujících dění ve vesmíru prošla astronomie velkým pokrokem. V dnešní době Slunce považujeme za hvězdu hlavní posloupnosti a ostatní hvězdy za jemu podobné objekty, jen velmi vzdálené. Přesná definice hvězdy je následující: *Hvězdy jsou gravitačně vázané objekty ve vesmíru, v jejichž nitru probíhají nebo alespoň po nějakou dobu probíhaly termonukleární reakce.* Dříve se věřilo, že se hvězdy nachází na nebeské sféře a jsou neměnné. Později se však ukázalo, že hvězdy vznikají, vyvíjí se a zanikají. V dobách, kdy hvězdný vývoj ještě nebyl prozkoumán, se hvězdy dělily na rané a pozdní. Předpokládalo se, že hvězda při vstupu na hlavní posloupnost má vysokou efektivní teplotu a s postupujícím časem pomalu chladne. Tuto hypotézu však zvrátily modely hvězdného vývoje. V dnešní době dělíme hvězdy na *horké* a *chladné*, podle jejich efektivní teploty a fyzikálních charakteristik.

Tato kapitola je věnována popisu horkých hvězd, zvláště spektrální třídy B a chemicky pekulárních hvězd. Zdrojem informací jsou knihy [16], [8], [21] a [7].

1.1

Definice horkých hvězd

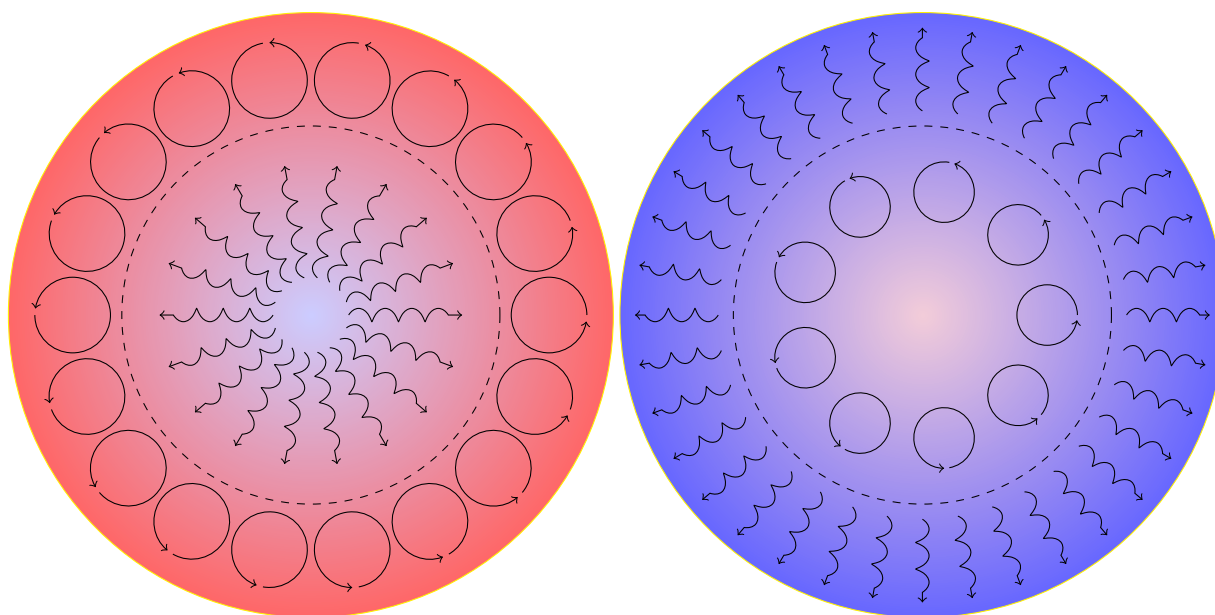
Samotné rozdělení na horké a chladné hvězdy lze provést do jisté míry volně. Nejvhodnější je ale zvolit nějakou klíčovou vlastnost, která nás u hvězd zajímá. Hraniční efektivní teplota je standardně stanovena na 7000 K. U chladných hvězd, kam patří i Slunce, můžeme pozorovat tzv. aktivitu slunečního typu: erupce, protuberance, sluneční skvrny, apod. Magnetické pole chladných hvězd je velmi proměnlivé, což lze pozorovat u Slunce. V obdobích slabé sluneční aktivity má magnetické pole zhruba dipólový charakter, zatímco v obdobích vysoké sluneční aktivity má složitý průběh. Z tohoto hlediska jsou atmosféry horkých hvězd klidné. Tento rozdíl je způsoben různým dominantním typem přenosu energie v atmosférách horkých a chladných hvězd, což popisuje obrázek 1.1. V atmosférách chladných hvězd dominuje přenos energie konvekcí, kdy dochází k cirkulaci hmoty. Pohybující se hmota je složena z nabitých částic, které generují magnetické pole a přispívají k procesům, které můžeme pozorovat v atmosféře Slunce. V atmosférách horkých hvězd dominuje přenos energie zářením. Atmosféry horkých hvězd jsou ale zajímavé z jiného hlediska, protože u některých z nich pozorujeme

silný hvězdný vítr hnaný zářením. Prostřednictvím tohoto procesu může hvězda ztratit značnou část své hmoty. U chladných hvězd hlavní posloupnosti také pozorujeme hvězdný vítr, ten však typicky neváne takovou rychlostí a ztráty hmoty jsou v poměru k horkým hvězdám zanedbatelné.

Horké hvězdy hlavní posloupnosti se typicky nacházejí v OB asociacích ve spirálních ramenech galaxie. Právě v těchto místech se nachází dostatečné množství mezihvězdné hmoty umožňující vznik tak hmotných hvězd. Mezi horké hvězdy řadíme velké množství objektů s rozdílnými hmotnostmi a stádii vývoje. Kromě zmíněných hvězd hlavní posloupnosti řadíme mezi horké hvězdy například Herbigovy Ae/Be hvězdy, obry a veleobry populace I, Wolfovy-Rayetovy hvězdy, jádra planetárních mlhovin, proměnné typu RR Lyrae, modré opozdilce a další.

	Horké hvězdy	Chladné hvězdy
Spektrální třídy	O, B, A, F	F, G, K, M
Rovníková rychlost rotace	~ 100 km/s	~ 10 km/s
Jevy v atmosféře	hvězdný vítr, okolohvězdné disky	protuberance, erupce, apod.
Doba pobytu na hlavní posloupnosti	$\sim 10^6 - 10^8$ let	$\sim 10^9 - 10^{10}$ let

Tabulka 1.1: Základní rozdíly v parametrech horkých a chladných hvězd.



Obrázek 1.1: Schématické znázornění dominantního způsobu přenosu energie ve hvězdách. Vlevo je přenos energie v chladných hvězdách, kdy v nitru hvězdy převládá přenos zářením a v atmosféře přenos konvekcí. Vpravo je znázorněn přenos energie pro horkou hvězdu, kdy v nitru dochází k přenosu energie konvekcí, zatímco v atmosféře zářením. Poměry velikostí neodpovídají skutečnosti.

Spektrální typ	T_{eff} [K]	M/M_{\odot}	L/L_{\odot}	R/R_{\odot}
O5	42000	60	400000	12
B0	30000	17.5	40000	7.4
B5	15200	5.9	730	3.9
B8	11400	3.8	140	3.0
A0	9790	2.9	48	2.4
A5	8180	2.0	12	1.7
F0	7300	1.6	5.7	1.5
F5	6650	1.4	3.0	1.3
G0	5940	1.05	1.4	1.1
G5	5560	0.92	0.73	0.92
K0	5150	0.79	0.46	0.85
K5	4410	0.67	0.18	0.72
M0	3840	0.51	0.070	0.60
M2	3520	0.4	0.034	0.50
M5	3170	0.21	0.0066	0.27

Tabulka 1.2: Parametry hvězd hlavní posloupnosti pro jednotlivé spektrální typy. Tabulka převzata z knihy [16]. T_{eff} – efektivní teplota, M – hmotnost hvězdy, L – zářivý výkon hvězdy, R – poloměr hvězdy.

1.2

Hvězdy spektrální třídy B

V předložené práci budeme modelovat atmosféry hvězd spektrální třídy B. Jejich fyzikální parametry (pro srovnání i parametry ostatních hvězd hlavní posloupnosti) jsou uvedeny v tabulce 1.2. Teplota v nitru těchto hvězd dosahuje 27 – 34 MK. Ve spektru se nachází výrazné čáry helia, se snižující se efektivní teplotou se zvyrazňují Balmerovy čáry vodíku.

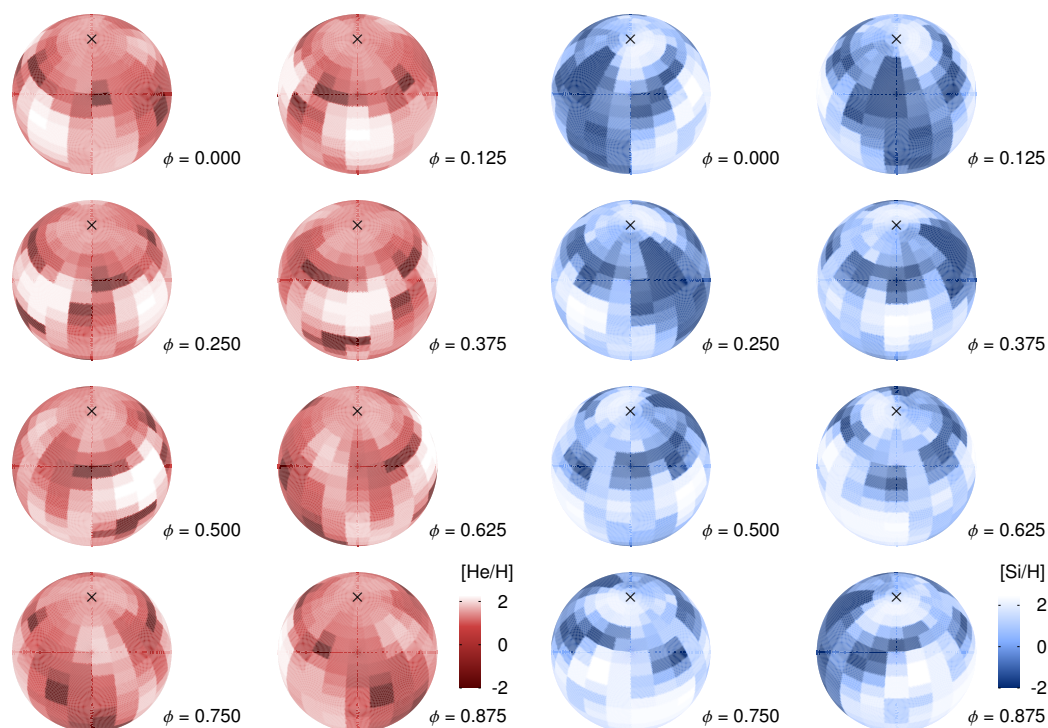
Mezi hvězdy spektrální třídy B spadají tzv. hvězdy typu Be. Jsou to hvězdy, v jejichž spektru měla některá z Balmerových čar alespoň jednou emisní profil. Tento profil je způsoben emitujícím okolohvězdným diskem, který se může rozkládat až do vzdálenosti několika poloměrů hvězdy. Vznik těchto disků není zatím uspokojivě vysvětlen a modelování hvězdných disků je jedním z aktuálních témat astronomie. Ve spektru některých hvězd spektrální třídy B pozorujeme profil typu P Cyg, který je způsoben hvězdným větrem. Profil typu P Cyg je složen z části absorpčního profilu v modré oblasti čáry a emisního profilu v červené oblasti čáry. Modelování hvězdného větru je další rozvíjející se oblastí astronomie.

Mezi hvězdy spektrální třídy B náleží například Rigel (β Ori), Benetnash (η UMa), Bellatrix (γ Ori), jasné hvězdy v Plejádách (Alcyone, Atlas, Electra, Maia, Merope, Taygeta, Pleione, Celaeno a Asterope).

1.3

Chemicky pekuliární hvězdy

Hvězdné atmosféry většiny hvězd v galaxii mají velmi podobné chemické složení, což lze poznat z jejich spekter. Ve skupině hvězd spektrální třídy A a částečně i třídy B se však nachází také hvězdy,



Obrázek 1.2: Rozložení helia (levý obrázek) a křemíku (pravý obrázek) ve viditelných vrstvách atmosféry pro různé rotační fáze hvězdy HD37776 převzatý z článku [9].

jejichž spektra se od standardních spekter výrazně odlišují. Příklad dvou takových spočítaných spekter a průběhů teplot je uveden na obrázku 1.3. Některé spektrální čáry jsou na danou efektivní teplotu neobvykle silné nebo naopak slabé. Spektrum těchto hvězd se v mnohých případech mění v čase. Vysvětlením je fakt, že se na povrchu vyskytují skvrny, tj. daný prvek je rozložen nerovnoměrně. Příklad je na obrázku 1.2. Takové hvězdy nazýváme chemicky pekuliárními. Chemicky pekuliární hvězdy můžeme rozdělit například do těchto skupin:

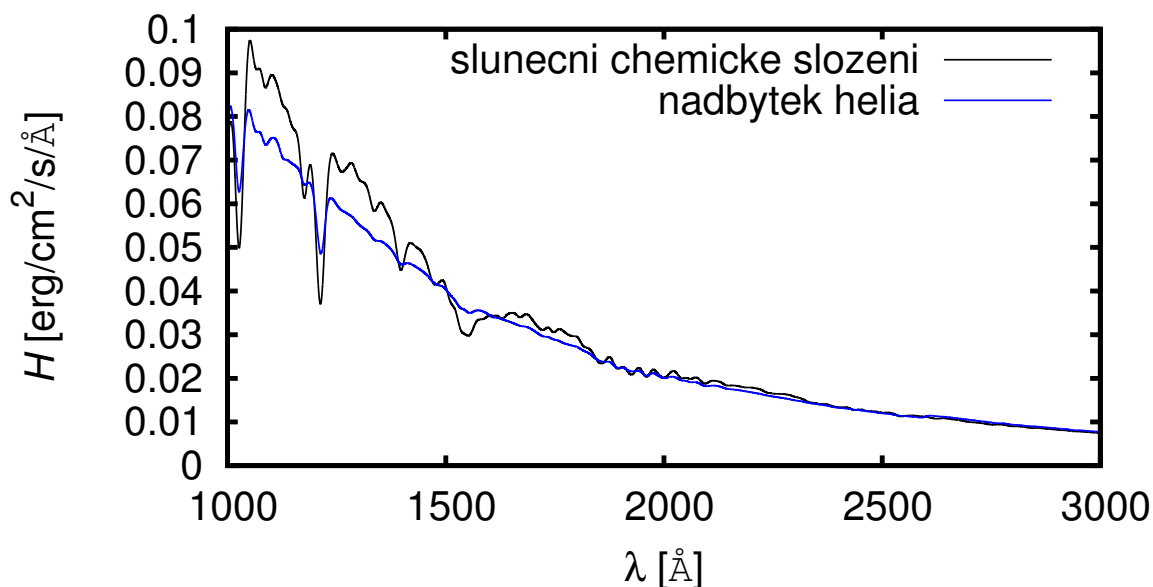
Am (Fm) hvězdy U těchto hvězd nepozorujeme magnetické pole, jejich efektivní teplota je v rozmezí $7 \text{ kK} < T_{\text{eff}} < 10 \text{ kK}$. Jsou typické nízkým obsahem vápníku a scandia.

Ap hvězdy Jsou to hvězdy hlavní posloupnosti se silným magnetickým polem. Železo je zde vysoce obsaženo (i stokrát větší obsah než na Slunci). Naopak obsah helia je zde velmi nízký.

HgMn hvězdy Hvězdy hlavní posloupnosti bez magnetického pole v rozmezí efektivních teplot $10 \text{ kK} < T_{\text{eff}} < 15 \text{ kK}$. V atmosféře se vyskytuje vysoké množství rtuti a manganu (10^6 a 10^4 větší obsah než je v atmosféře Slunce), vysoký obsah je rovněž u kovů vzácných zemin.

Hvězdy s abnormální abundancí helia Tento podtyp chemicky pekuliárních hvězd přísluší jako jediný hvězdám spektrální třídy B. Do této kategorie náleží hvězdy s nízkým obsahem helia s efektivními teplotami $14 \text{ kK} < T_{\text{eff}} < 20 \text{ kK}$. Některé hvězdy mají silné magnetické pole. Nemagnetické verze označujeme P-Ga (nebo fosforové hvězdy), jelikož obsahují velké abundance fosforu a galia. Další podtřídou jsou ^3He hvězdy. V těchto hvězdách je vysoký poměr ^3He vzhledem k ^4He .

Existují také hvězdy s nadbytkem helia. Helium v těchto hvězdách může mít několikanásobně větší abundanci než vodík. Efektivní teploty těchto hvězd jsou v rozmezí $15 \text{ kK} < T_{\text{eff}} < 30 \text{ kK}$.



Obrázek 1.3: Srovnání upravených spočítaných spekter (ze spočítaného vystupujícího záření byla spočítána konvoluce s Gaussovou funkcí, $\sigma = 10 \text{ \AA}$) hvězdy s nadbytkem helia a hvězdy se slunečním složením.

Z výše uvedené klasifikace chemicky pekuliárních hvězd vyplývá, že jejich výskyt je velmi závislý na fyzikálních podmínkách v atmosféře hvězdy. Ke vzniku chemických peculiarit výrazně přispívá *zářivá difuze* popsaná např. v [19]. Tento jev způsobuje hromadění některých látek v horních vrstvách atmosféry. Silné konvektivní proudění by nahromaděnou látku rozmíchávalo. Slabá konvektivní vrstva může být přítomna, což je popsáno například v [22] nebo [23]. Transportu látky může zabránit magnetické pole, které je vůči samotné hvězdě neměnné. Chemicky pekuliární hvězdy mají teplotu v rozmezí (7 – 30) kK. Ve hvězdách s nižšími povrchovými efektivními teplotami se nachází silná konvektivní zóna a povrch hvězd s většími efektivními teplotami je obrušován hvězdným větrem. Proto, mimo tento teplotní interval, chemicky pekuliární hvězdy nepozorujeme.

KAPITOLA 2

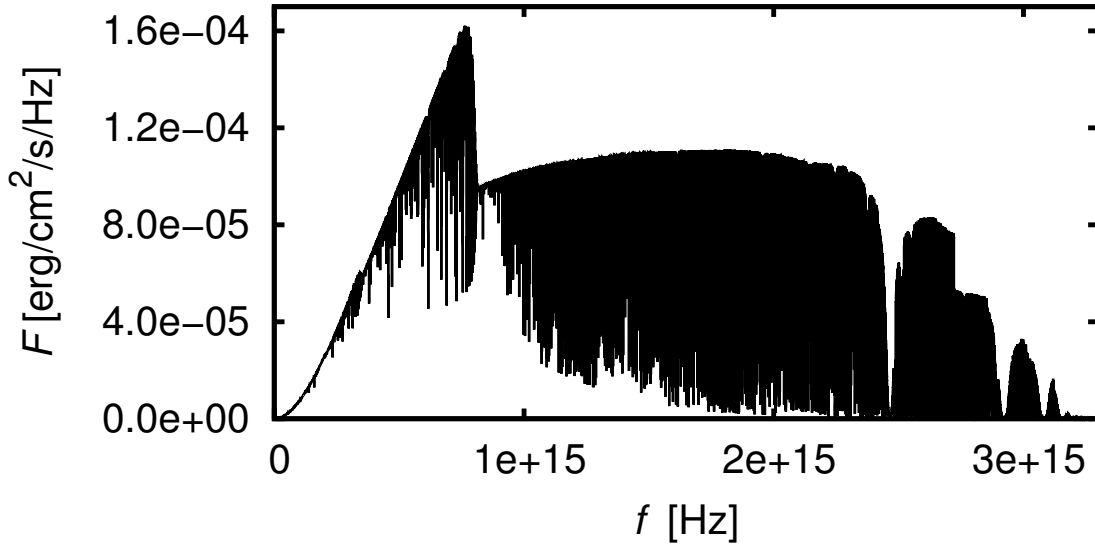
Modelování hvězdných atmosfér

Atmosféra je oblast hvězdy, ze které přichází záření. Její celková hmotnost je řádově $10^{-10} M_{\odot}$. Atmosféra začíná v oblastech, kde je značně vysoká teplota, hustota látky a všechny atomy jsou téměř ionizovány. Tyto fyzikální podmínky se však s rostoucí výškou výrazně mění. Teplota i hustota typicky klesají, poměr počtu ionizovaných atomů vzhledem k neutrálním atomům roste a interakce vázaných elektronů s fotony začíná být dominantní. Uvnitř hvězdy odpovídá spektrum Planckově funkci. Právě v atmosféře se začnou tvořit různé spektrální čáry a skoky, které jsou zdrojem rozsáhlých informací o hvězdě. Bez atmosféry bychom se nedozvěděli o chemickém složení hvězd¹, radiální rychlosti hvězdy, zda je na hvězdě přítomno magnetického pole, atd. Ze spektra však nelze přímo zjistit teplotní strukturu, hustotu plazmatu, vliv různých fyzikálních procesů na formování spektra, apod. Právě proto musíme vypracovávat modely, jejichž výstupem je struktura atmosféry a hlavně syntetické spektrum, ze kterého se lze přesvědčit o správnosti modelu. Příklad spočítaného vystupujícího záření je uveden v grafu 2.1. Modely atmosfér jsou tak jediné prostředky, které nám umožní se o samotných hvězdách dozvědět mnohem více informací než jen ze samotného spektra.

Obecně je vytváření modelu atmosféry 4D problém. Takové modely jsou velmi náročné na výpočetní čas, a proto musíme přistupovat ke zjednodušením. Dimenzi problému zredukujeme pomocí vhodné geometrické aproximace. Pro horké hvězdy hlavní posloupnosti se používá planparalelní aproximace. Fyzikální veličiny se mění jen v jednom směru (nejčastěji se volí směr z). V horizontálním směru je gradient všech fyzikálních veličin nulový. Pokud se velikost atmosféry nedá vzhledem k poloměru samotné hvězdy zanedbat, volíme sféricky symetrický model. Další kategorií aproximací se týká použití předpokladu termodynamické rovnováhy. Existují dva velmi často používané modely. V prvním se předpokládá platnost lokální termodynamické rovnováhy (LTE). Obsazení energetických hladin je v tomto případě popsáno Sahovým-Boltzmanovým rozdělením. Druhou častou aproximací je NLTE, které tento předpoklad nemá a rozdělení energetických hladin počítá pomocí statistické rovnováhy. Obě dvě aproximace předpokládají Maxwellovo-Boltzmanovo rozdělení rychlostí elektronů. NLTE modely jsou přesnější než LTE modely. Existuje ještě aproximace šedé atmosféry, ve které se předpokládá, že opacita nezávisí na frekvenci. Výsledky těchto modelů se používají jako výchozí pro reálnější modely.

Cílem této kapitoly je stručně nastínit problematiku modelování hvězdných atmosfér. Začneme rovnicí přenosu záření. Pro vyřešení rovnice přenosu záření musíme znát opacitu a emisivitu, výpočtu těchto veličin je věnována druhá část. V další části budou obecně popsány modely atmosfér a v poslední části se zaměříme na model TLUSTY, se kterým byly provedeny v předložené práci výpočty všech modelů atmosfér. Zdrojem informací v této kapitole (rovnice přenosu záření, opacita a emisivita) je kniha od Mihalase [20] o hvězdných atmosférách. Úvod je částečně napsán podle [10].

¹Například helium bylo objeveno dříve v atmosféře Slunce než na Zemi.



Obrázek 2.1: Spočítané spektrum pro efektivní teplotu 15 kK a $\log(g) = 4$ modelem TLUSTY.

V části o modelech atmosfér jsou brány informace také z knihy [16], konkrétní informace o modelu TLUSTY přímo z návodu k tomuto modelu [5].

2.1

Rovnice přenosu záření

Problém, který řešíme prostřednictvím rovnice přenosu záření (RTE) je následující (viz schéma 2.2). Uvažme paprsek o specifické intenzitě I procházející optickým prostředím s opacitou χ a emisivitou η . Spočítáme energii v intervalu frekvencí $d\nu$ procházející v časovém intervalu dt přes objemový element dV o délce ds a průřezu dS , jehož normála je orientována ve směru paprsku pohybujícím se ve směru \mathbf{n} do pozorovaného úhlu $d\Omega$. Rozdíl mezi energií paprsku v bodě $\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}$ v čase $t + \Delta t$ a příchozího paprsku \mathbf{r} , t musí být roven části energie vytvořené emisí fotonů materiálem v daném objemu mínus část energie, která je v daném objemu absorbovaná, a tedy

$$[I(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t + \Delta t) - I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)] dS d\Omega d\nu dt = [\eta(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) - \chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)] d\mathbf{r} dS d\Omega d\nu dt,$$

pro malé rozdíly $\Delta\mathbf{r}$ a Δt můžeme napsat

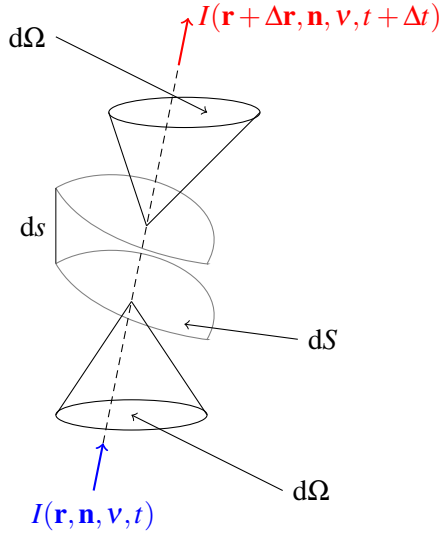
$$I(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t + \Delta t) = I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) + \left[\frac{\partial I}{\partial t} \Delta t + \sum_i \frac{\partial I}{\partial x_i} \Delta x_i \right]$$

zřejmě platí $\Delta s = c\Delta t$, pro derivaci souřadnic podle intenzity můžeme psát

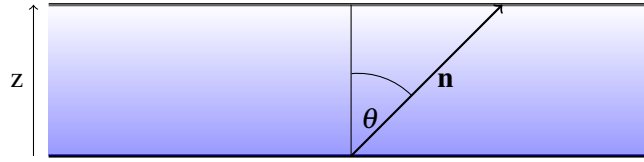
$$\sum_i \frac{\partial I}{\partial x_i} \Delta x_i = \sum_i \frac{\partial s}{\partial x_i} \frac{\partial I}{\partial s} \frac{\partial x_i}{\partial s} \Delta s = \frac{\partial I}{\partial s} \Delta s,$$

nakonec můžeme formálně přepsat $\Delta s \rightarrow ds$

$$\left[\frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{\partial I}{\partial s} \right] ds dS d\Omega d\nu dt = [\eta - \chi I] ds dS d\Omega d\nu dt, \quad (2.1)$$



Obrázek 2.2: Schéma odvození rovnice přenosu záření. Přicházející paprsek o intenzitě $I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)$ interaguje s hmotou na dráze ds , a vystupující paprsek má pak intenzitu $I(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t + \Delta t)$, kterou se snažíme spočítat pomocí RTE. Obrázek převzat a upraven z [20].



Obrázek 2.3: Schéma planparalelní atmosféry. Rovnici přenosu záření počítáme ve směru znázorněném vektorem \mathbf{n} , který s normálovým vektorem svírá úhel θ .

tato rovnice musí platit pro libovolné elementy ds , dS , $d\Omega$, $d\nu$ a dt , potom dostaneme rovnici přenosu záření

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)}{\partial t} + \frac{\partial I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)}{\partial s} = \eta(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) - \chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t). \quad (2.2)$$

Tuto rovnici lze rovněž zapsat jako

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

V modelech budeme počítat RTE pro statickou atmosféru

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla)I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) = \eta(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t) - \chi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t)I(\mathbf{r}, \mathbf{n}, \nu, t). \quad (2.3)$$

Pokud je tloušťka atmosféry zanedbatelná oproti poloměru hvězdy, můžeme při výpočtech modelů počítat s *planparalelní* aproximací. Veškeré fyzikální veličiny zde závisí pouze na vertikální souřadnici z , což je zřejmé z obrázku 2.3. Rovnice přenosu záření v planparalelní aproximaci a stacionárním případě

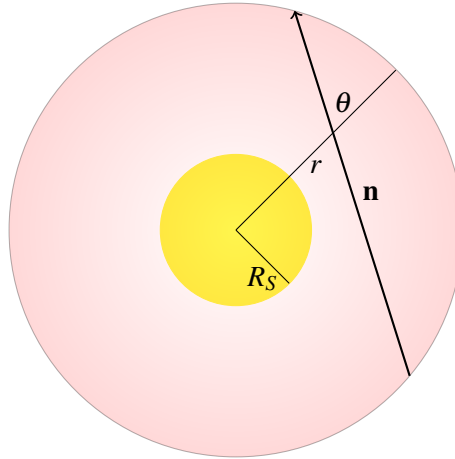
$$\mu \frac{\partial I(z, \mu, \nu)}{\partial z} = \eta(z, \mu, \nu) - \chi(z, \mu, \nu)I(z, \mu, \nu), \quad (2.4)$$

kde $\mu = \cos(\theta)$. Tuto rovnici podělíme extinkčním koeficientem

$$\frac{\mu}{\chi(z, \mu, \nu)} \frac{\partial I(z, \mu, \nu)}{\partial z} = \frac{\eta(z, \mu, \nu)}{\chi(z, \mu, \nu)} - I(z, \mu, \nu).$$

Definujeme *optickou hloubku* vztahem

$$d\tau = -\chi(z, \mu, \nu)dz, \quad (2.5)$$



Obrázek 2.4: Schéma atmosféry za předpokladu sférické symetrie. Poloměr hvězdy bez atmosféry je R_s . RTE počítáme ve směru vektoru \mathbf{n} , který svírá s radiálním vektorem úhel θ .

což je jen přeškalování vzdálenosti v atmosféře. Fotony k nám přilétají především z části atmosféry o optické hloubce $\tau \approx 1$. Pro $\tau < 1$ mluvíme o opticky tenkém prostředí a pro $\tau > 1$ o opticky tlustém prostředí. Dále můžeme definovat zdrojovou funkci

$$S(z, \mu, \nu) = \frac{\eta(z, \mu, \nu)}{\chi(z, \mu, \nu)}, \quad (2.6)$$

RTE potom můžeme zapsat v jednoduchém tvaru

$$\mu \frac{\partial I(\tau, \mu, \nu)}{\partial \tau} = I(\tau, \mu, \nu) - S(\tau, \mu, \nu). \quad (2.7)$$

V případě rozsáhlých atmosfér vyskytujících se u obrů a veleobrů není planparalelní aproximace dostačující, a je tedy nutné zvolit sférickou aproximaci. Základní schéma je znázorněno na obrázku 2.4. RTE (2.7) obsahuje gradient, jehož souřadnicová reprezentace je pro tento případ

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta}, \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) = \left(\frac{\partial f}{\partial r}, -\frac{\sqrt{1-\mu^2}}{r} \frac{\partial f}{\partial \mu}, 0 \right),$$

samotnou rovnici přenosu záření můžeme v této aproximaci psát

$$\mu \frac{\partial I(r, \mu, \nu)}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial I(r, \mu, \nu)}{\partial \mu} = \eta(r, \mu, \nu) - \chi(r, \mu, \nu) I(r, \mu, \nu), \quad (2.8)$$

kde opět $\mu = \cos(\theta)$. Pro rovnici přenosu záření lze spočítat tzv. *formální řešení*. RTE pro případ statické atmosféry v planparalelním přiblížení je ve tvaru

$$\mu \frac{\partial I(\tau, \mu, \nu)}{\partial \tau} = I(\tau, \mu, \nu) - S(\tau, \mu, \nu), \quad (2.9)$$

vynásobíme integračním faktorem $\exp(-\tau/\mu)/\mu$. Dále víme, že platí

$$\frac{d}{d\tau} \left[I(\tau, \mu, \nu) \exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right) \right] = \frac{dI(\tau, \mu, \nu)}{d\tau} \exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right) - I(\tau, \mu, \nu) \frac{\exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right)}{\mu},$$

pravá strana této rovnice odpovídá právě dvěma členům RTE po vynásobení integračním faktorem, rovnici můžeme zapsat ve tvaru

$$\frac{d}{d\tau} \left[I(\tau, \mu, \nu) \exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right) \right] = -S(\tau, \mu, \nu) \frac{\exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right)}{\mu},$$

tuto rovnici stačí jen integrovat od τ_1 do τ_2

$$I(\tau_2, \mu, \nu) \exp\left(-\frac{\tau_2}{\mu}\right) - I(\tau_1, \mu, \nu) \exp\left(-\frac{\tau_1}{\mu}\right) = - \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tilde{\tau} S(\tilde{\tau}, \mu, \nu) \frac{\exp\left(-\frac{\tilde{\tau}}{\mu}\right)}{\mu},$$

obecné formální řešení RTE pak můžeme napsat ve tvaru

$$I(\tau_1, \mu, \nu) = I(\tau_2, \mu, \nu) \exp\left(-\frac{\tau_2 - \tau_1}{\mu}\right) + \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tilde{\tau} S(\tilde{\tau}, \mu, \nu) \frac{\exp\left(-\frac{\tilde{\tau} - \tau_1}{\mu}\right)}{\mu}. \quad (2.10)$$

Pro případ *polonekonečné atmosféry*, kdy $\tau_1 = 0$ a $\tau_2 \rightarrow \infty$, je řešení ve tvaru

$$I(0, \mu, \nu) = \int_0^{\infty} d\tilde{\tau} S(\tilde{\tau}, \mu, \nu) \frac{\exp\left(-\frac{\tilde{\tau}}{\mu}\right)}{\mu}, \quad (2.11)$$

což pro optickou hloubku τ můžeme přepsat ve tvaru

$$I(\tau, \mu, \nu) = \begin{cases} \int_0^{\infty} d\tilde{\tau} S(\tilde{\tau}, \mu, \nu) \frac{\exp\left(-\frac{\tilde{\tau} - \tau}{\mu}\right)}{\mu}, & \mu \geq 0, \\ \int_0^{\tau} d\tilde{\tau} S(\tilde{\tau}, \mu, \nu) \frac{\exp\left(-\frac{\tilde{\tau}}{\mu}\right)}{-\mu}, & \mu < 0, \end{cases} \quad (2.12)$$

po integraci těchto rovnic přes μ za předpokladu, že zdrojová funkce je úhlově nezávislá, dostaneme

$$J(\nu, \tau) = \int_0^{\infty} d\tilde{\tau} S(\nu, \tilde{\tau}) E_1(|\tilde{\tau} - \tau|),$$

kde

$$E_n(x) = \int_1^{\infty} d\tilde{\tau} \tilde{\tau}^{-n} \exp(-x\tilde{\tau})$$

je *exponenciální integrační funkce*. Definujeme Λ operátor

$$\Lambda[f(\tilde{\tau})] = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} d\tilde{\tau} f(\tilde{\tau}) E_1(|\tilde{\tau} - \tau|).$$

Formální řešení RTE pro polonekonečnou atmosféru pak můžeme napsat ve tvaru

$$J(\nu, \tau) = \Lambda[S(\tau, \nu)]. \quad (2.13)$$

Definujeme *Eddingtonův tok*, který je v planparalelní aproximaci dán podle [20] vztahem

$$H(z, \nu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu I(z, \mu, \nu) \mu. \quad (2.14)$$

Nakonec definujeme *efektivní teplotu*, charakterizující celkový tok záření hvězdy. Definiční vztah je ve tvaru

$$\int_0^{\infty} dv H(v) = \int_0^{\infty} dv B(v, T_{\text{eff}}), \quad (2.15)$$

kde $B(v, T_{\text{eff}})$ je Planckova funkce a $H(v)$ tok záření z hvězdy.

2.2

Opacita a emisivita

V rovnici přenosu záření (2.9) se vyskytují veličiny opacita χ a emisivita η . Znalost prostorové závislosti obou veličin je klíčová pro vyřešení této rovnice. Opacita je veličina popisující průhlednost prostředí pro záření a silně závisí na frekvenci. Převrácená hodnota opacity je rovna střední volné dráze fotonu v příslušném hloubkovém bodě. Tato veličina je dána interakcí fotonů, tj. elektromagnetického záření s neutrálními a ionizovanými atomy a volnými elektrony. Emisivita popisuje příspěvek daného prostředí k intenzitě záření.

2.2.1

Obsazení energiových hladin atomů

Nejdůležitějším prvkem pro výpočet opacity a emisivity je znalost populací atomů a iontů v základních i excitovaných stavech. Zde popíšeme jejich výpočet za předpokladu termodynamické rovnováhy a následně výpočet pomocí rovnic statistické rovnováhy.

Obsazení energiových hladin v termodynamické rovnováze (LTE)

Populace excitovaných atomů je v termodynamické rovnováze popsána *Sahovým – Boltzmannovým* rozdělením. Podíl počtu j -krát ionizovaných atomů k ve stavu s indexem m v excitovaném stavu i vzhledem k počtu příslušných iontů v excitovaném stavu i je dán

Boltzmannovou excitační formulí

$$\frac{n_{mjk}^*}{n_{ljk}^*} = \frac{g_{mjk}}{g_{ljk}} \exp\left(-\frac{\chi_{mjk} - \chi_{ljk}}{k_B T}\right), \quad (2.16)$$

kde g_{mjk} , g_{ljk} označuje statistickou váhu příslušného excitovaného stavu, χ_{mjk} , χ_{ljk} excitační energii a symbol * označuje fyzikální veličinu v termodynamické rovnováze. V případě ionizační rovnováhy chceme znát počet atomů v excitovaném stavu vzhledem k celkovému počtu iontů j , který je roven

$$N_{jk}^* = \sum_i n_{ijk}^* = \frac{n_{0jk}^*}{g_{0jk}} \sum_i g_{ijk} \exp\left(-\frac{\chi_i}{k_B T}\right) = \frac{n_{0jk}^*}{g_{0jk}} U_{jk}(T),$$

kde $U_{jk}(T)$ je partiční funkce příslušného iontu. Boltzmannovu rovnici pak můžeme zapsat ve tvaru

$$\frac{n_{ijk}^*}{N_{jk}^*} = \frac{g_{ijk}}{U_{jk}(T)} \exp\left(-\frac{\chi_{ijk}}{k_B T}\right). \quad (2.17)$$

Poměr počtu j -krát ionizovaných prvků vzhledem k celkovému počtu částic N_k popisuje Sahovo rozdělení

$$\frac{N_{jk}^*}{N_k^*} = \frac{\prod_{l=j}^{J_k-1} [n_e \tilde{\Phi}_{lk}(T)]}{\sum_{m=0}^{J_k} \prod_{l=m}^{J_k-1} [n_e \tilde{\Phi}_{lk}(T)]}, \quad (2.18)$$

kde J_k označuje nejvyšší stupeň ionizace daného prvku, funkce Φ je definována pomocí partičních funkcí

$$\Phi_{jk}(T) = \frac{U_{jk}(T)}{U_{j+1,k}(T)} C_l T^{-3/2} \exp\left(-\frac{\chi_{1jk}}{k_B T}\right),$$

ve které C_l je konstanta, n_e je koncentrace volných elektronů a χ_{1jk} je ionizační potenciál prvku s indexem k a ionizací j .

Výpočet obsazení z rovnic statistické rovnováhy (NLTE) Rovnice statické rovnováhy v případě stacionárního prostředí jsou ve tvaru

$$\sum_{j,i \neq j} (n_j P_{ji} - n_i P_{ij}) = 0, \quad (2.19)$$

kde P_{ij} je četnost přechodů, kterou lze napsat ve tvaru

$$P_{ij} = C_{ij} + R_{ij},$$

kde C_{ij} označuje četnost srážkových přechodů a R_{ij} četnost zářivých přechodů. Rovnice statistické rovnováhy tvoří lineárně nezávislý systém n rovnic o n neznámých. Pro jejich vyřešení musíme jednu z nich nahradit jednou z následujících rovnic:

- rovnice pro počet částic,
- zachování náboje,
- abundanční rovnice.

Přestože rovnice statistické rovnováhy vypadají výrazně jednodušeji než rovnice popisující Sahaovo a Boltzmannovo rozdělení, trvá vyřešení modelu atmosféry s výpočty populací pomocí těchto rovnic výrazně delší dobu.

2.2.2

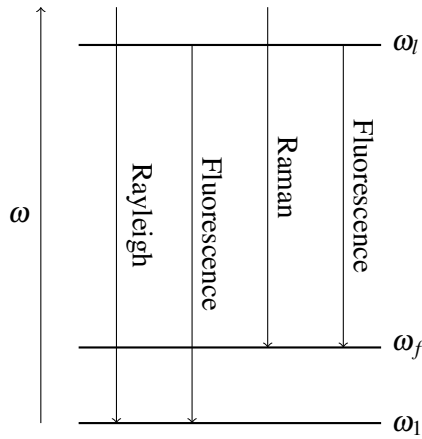
Základní procesy interakce fotonů s atomy

Jednotlivé procesy ovlivňují výsledný vzhled spektra hvězdy. Jejich rozdělení je následující:

Excitace a deexcitace Excitace nastává v případě, je-li energie fotonu rovna rozdílu energií mezi dvěma vázanými energiovými hladinami atomu. Opačný proces se nazývá deexcitace. V případě srážkové deexcitace se původní energie fotonu přemění na tepelnou energii plazmatu. Příkladem jsou čáry železa v ultrafialové oblasti spektra. Těchto přechodů existuje velké množství a v případě horkých hvězd způsobují zahřátí atmosféry a následnou redistribuci části toku záření z krátkovlnné oblasti do oblasti dlouhovlnné. Čáry železa vytvářejí pro UV záření „deku“, proto se tento proces nazývá *pokryvkový jev*.

Rozptyl O rozptylu záření na soustavách s vázanými elektrony mluvíme tehdy, následuje-li bezprostředně po excitaci elektronu fotonem jeho deexcitace a vyzáření jiného fotonu. Obrázek 2.5 znázorňuje jednotlivé druhy rozptylových procesů. Rozptyl může probíhat také na volných elektronech. V tomto případě mluvíme o Thomsonově nebo Comptonově rozptylu. Základní druhy rozptylových procesů jsou:

- Rayleigh – pokud po excitaci na vyšší energiovou hladinu elektron okamžitě přejde zpět na původní hladinu mluvíme o elastickém Rayleighově rozptylu.
- Raman – elektron při deexcitaci přejde na jinou excitovanou hladinu



Obrázek 2.5: Jednotlivé druhy rozptylových procesů na vázaných elektronech. Fotony v přicházejícím paprsku mají frekvenci ω blízké rezonanci s atomovým přechodem a čtyřmi druhy rozptylových mechanismů. Obrázek převzat a upraven z [18].

- Thomson – elastický rozptyl na volných elektronech
- Compton – neelastický rozptyl na volných elektronech

Teorii rozptylu a výpočtu účinného průřezu pro Rayleighův rozptyl jsou věnovány kapitoly 3 a 4.

Ionizace & rekombinace Má-li foton dostatečnou energii, může vázanému elektronu předat takové množství energie, že se elektron po interakci stane volným. Rekombinace je inverzním procesem k ionizaci.

2.2.3

Výpočet opacity a emisivity

Opacita se při daných populacích a teplotě spočítá pomocí vztahu (7-1) v [20]

$$\chi(\nu) = \sum_i \sum_{j>i} \left[n_i - \frac{g_i}{g_j} n_j \right] \alpha_{ij}(\nu) + \sum_i \left[n_i - n_i^* \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) \alpha_{ik}(\nu) \right] + \sum_K n_e n_K \alpha_{KK}(\nu, T) \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) \right] + n_e \sigma_e + \text{další členy.} \quad (2.20)$$

První člen přísluší vázaně-vázaným, druhý vázaně-volným, třetí volně-volným přechodům a čtvrtý Thomsonově rozptylu. Při výpočtu opacity můžeme přidat i další členy např. pro Rayleighův nebo Ramanův rozptyl, apod. n_j označuje koncentraci příslušných iontů, α_{ij} Einsteinův koeficient mezi hladinami i a j , g_j statistickou váhu energetické hladiny, n_e koncentraci volných elektronů, σ_e účinný průřez Thomsonova rozptylu a symbolem * označujeme fyzikální veličinu v termodynamické rovnováze.

Emisivita je dána vztahem [20] z (7-2)

$$\eta(\nu) = \frac{4\pi h \nu^3}{c^2} \left[\sum_i \sum_{j>i} n_j \frac{g_i}{g_j} \alpha_{ij}(\nu) + \sum_i n_i^* \alpha_{ik}(\nu) \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) + \sum_k n_e n_k \alpha_{kk}(\nu, T) \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) \right] + n_e \sigma_e. \quad (2.21)$$

Jednotlivé členy opět popisují vázaně-vázané, vázaně-volné a volně-volné přechody. Veličiny označené hvězdičkou platí pro rovnovážný stav.

V případě LTE modelů atmosfér pro opacitu můžeme psát

$$\chi^*(\nu) = \sum_i \sum_{j>i} \left[n_i^* \alpha_{ij}(\nu) + \sum_i n_i^* \alpha_{ik}(\nu) + \sum_k n_e n_k \alpha_{kk}(\nu, T) \right] \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) \right) + n_e \sigma_e + \text{další členy}, \quad (2.22)$$

a v případě emisivity

$$\eta^*(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) \left[\sum_{j>i} n_j n_i^* \alpha_{ij}(\nu) + \sum_i n_i^* \alpha_{ik}(\nu) + \sum_k n_e n_k \alpha_{kk}(\nu, T) \right] + n_e \sigma_e. \quad (2.23)$$

2.3

Modely atmosfér

Model atmosféry je program pro výpočet fyzikální struktury atmosféry (T , ρ , atd.), vystupujícího záření, apod. Existuje několik velmi často používaných modelů pro výpočet atmosfér:

- statické modely atmosfér
 - ATLAS – LTE, započítání vázaně-vázaných přechodů (line blanketing)
 - TLUSTY – NLTE, line blanketing
výpočet statických modelů okolohvězdných disků i akrečních disků černých děr
 - SYNSPEC – přesnější výpočet syntetického spektra z modelu TLUSTY, spektrum možné srovnávat s naměřeným spektrem
- dynamické modely atmosfér
 - PoWR – expandující atmosféra, NLTE, line blanketing, β zákon
 - FASTWIND

Jak je napsáno v úvodu této kapitoly, obecně je výpočet modelu atmosféry velmi náročný na výpočetní čas. V modelech atmosfér používáme následující zjednodušení:

Planparalelní aproximace – horizontálně homogenní atmosféra viz 2.1

Hydrostatická rovnováha – atmosféra se v čase nemění

Základní rovnice popisující pohyb tekutin je *Eulerova rovnice*, která se ve statickém případě zjednoduší na *rovnici hydrostatické rovnováhy*

$$\nabla p = \rho \mathbf{g}, \quad (2.24)$$

kde p je tlak, ρ hustota látky a \mathbf{g} gravitační zrychlení.

Zářivá rovnováha – Množství energie, které do atmosféry vstoupí na spodní hranici je vyzařováno do volného prostoru. V atmosférách horkých hvězd tedy dochází pouze k přenosu energie. V časově nezávislém případě se může změnit frekvenční rozdělení záření anebo rozdělení energie mezi zářivé a nezářivé způsoby přenosu, ale celkový tok energie musí být zachován. Tento požadavek vyjadřuje rovnice zářivé energie. V integrálním tvaru, v nepřítomnosti konvekce:

$$4\pi \int_0^\infty d\nu (\chi(\mathbf{r}, \nu) J(\mathbf{r}, \nu) - \eta(\mathbf{r}, \nu)) = 0, \quad (2.25)$$

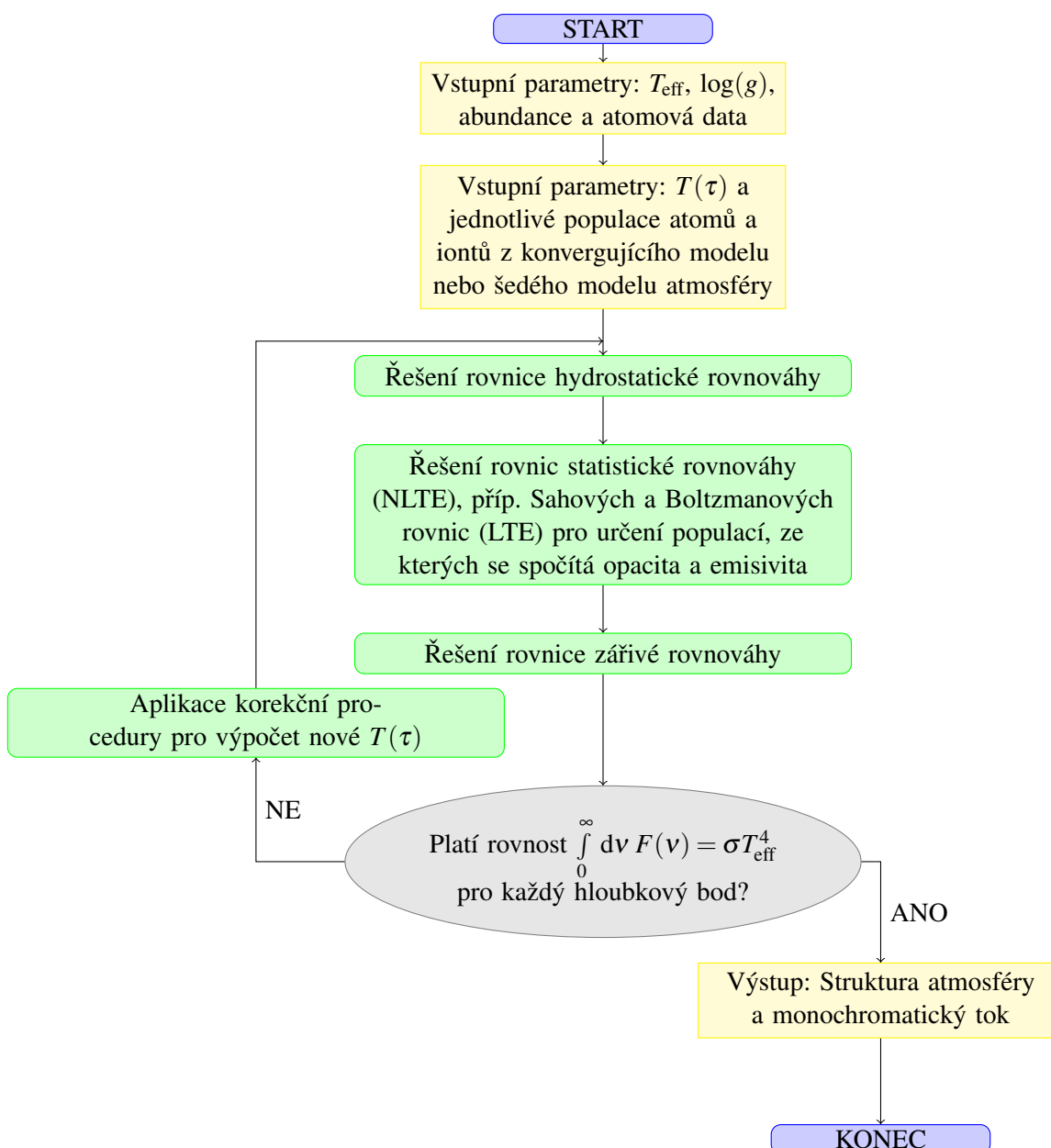
a v diferenciálním tvaru

$$\nabla \cdot \mathcal{F} = 0, \quad (2.26)$$

ve hvězdných atmosférách se počítá s oběma rovnicemi, rovnice zářivé rovnováhy v diferenciálním tvaru dává menší numerické chyby, ale v malých optických hloubkách diverguje. Proto je nutné rovněž počítat s RZR v integrálním tvaru. Je nutné vhodně zvolit optickou hloubku, ve které se přejde od jedné rovnice ke druhé.

NLTE/LTE aproximace – způsob výpočtu obsazení energetických hladin atomů (viz část 2.2.1)

Základní schéma řešení modelů hvězdných atmosfér je na obrázku 2.6.



Obrázek 2.6: Základní schéma výpočtu modelu atmosféry. Obrázek převzat a upraven z [16].

2.4

Model TLUSTY

Numerický model TLUSTY [4] je napsaný ve Fortranu 77. Počítá strukturu atmosfér horkých hvězd a okolohvězdných disků. Autory tohoto modelu jsou Ivan Hubený a Thierry Lanz. Pro výpočty je předpočítána síť modelů pro hvězdy spektrální třídy O [13] a B [14]. K modelu je vydána příručka [5] ze které zde budou převzaty ty nejdůležitější informace. K programu TLUSTY jsou na domovské stránce modelu [5] ke stažení atomová data, jejichž zavedení do modelu je popsáno v článku [15].

Modely je možné počítat bez vstupního modelu atmosféry. V prvním kroku se spočítá šedý model ve kterém je často nutné explicitně specifikovat hodnoty parametrů kvůli konvergenci. Ve druhém kroku je možné počítat LTE model a nakonec NLTE model. Pro modelování atmosfér O a B hvězd, můžeme použít již zmíněné sítě modelů ([13],[14]). Ty jsou vypočítány pro hvězdy s normálním chemickým složením. Pro modelování atmosfér chemicky pekulárních hvězd bývá často nutné předem spočítat šedý model atmosféry. Pomocí programu SYNSPEC pak lze z těchto modelů dostat syntetické spektrum, které lze srovnat s napozorovanými spektry hvězd.

Základní numerické metody, které využívá model TLUSTY, jsou uvedeny v článku [4]. V každém iteračním kroku se rovnice počítají pomocí *metody linearizace*. Definujeme vektor neznámých Ψ podle [4], vztah (2.1)

$$\Psi_d = \{J_1, \dots, J_{\text{NFREQ}}, N, T, n_e, n_1, \dots, n_{\text{NLEVEL}}\},$$

kde d označuje hloubkový bod, J_i střední intenzitu, n_i populace atomů, NFREQ počet frekvenčních bodů a NLEVEL počet započítaných energetických hladin v modelu. Potom tento vektor přepíšeme ve tvaru (viz (2.2) z [4])

$$\psi_d = \psi_d^0 + \delta\psi_d,$$

kde ψ_d^0 jsou aktuální odhady veličin pro optický hloubkový bod d a $\delta\psi_d$ je odchylka od tohoto odhadu. Výsledný systém rovnic je podle [4] ve tvaru

$$A_d \delta\psi_{d-1} + B_d \delta\psi_d + C_d \delta\psi_{d+1} = L_d, \quad (2.27)$$

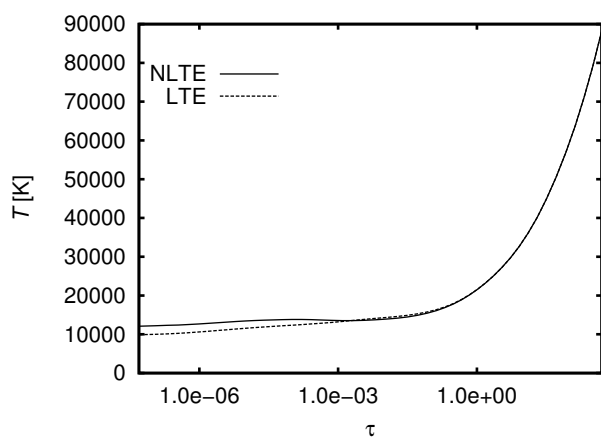
kde A , B a C jsou matice o rozměru $\bar{N} \times \bar{N}$, kde \bar{N} je celkový počet fyzikálních proměnných a L je chyba v rovnicích. Je to soustava \bar{N} lineárních rovnic, které se může řešit například klasickou Gaussovou metodou eliminace. Pro vyřešení je nutné znát počáteční odhad jednotlivých veličin, které se vezmou buď z předchozího konvergujícího LTE, anebo šedého modelu.

Mezi dvěma kompletními linearizacemi probíhá proces *formálního řešení*. Během tohoto kroku proběhne několik urychlených Λ iterací. Formální řešení RTE je dáno pomocí vztahu (2.13). $n + 1$ iterace je dána vztahem

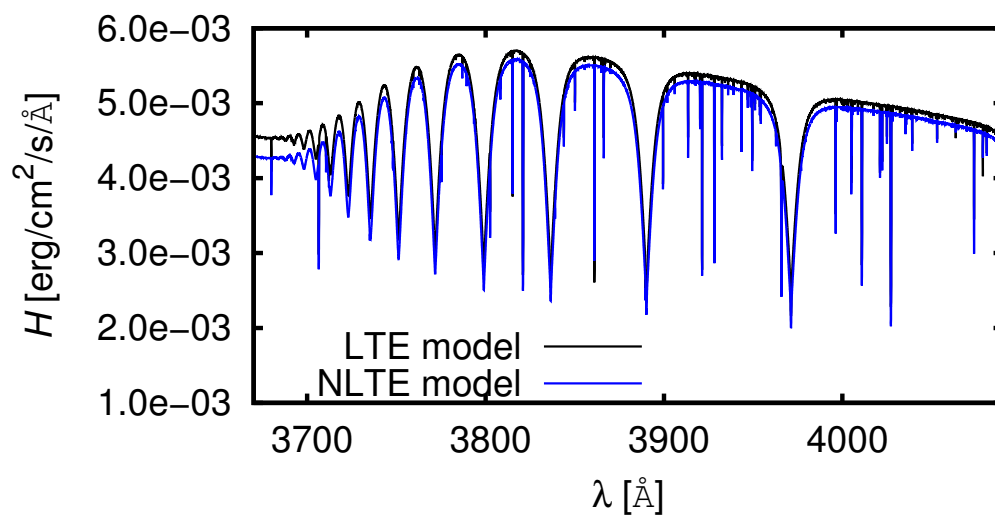
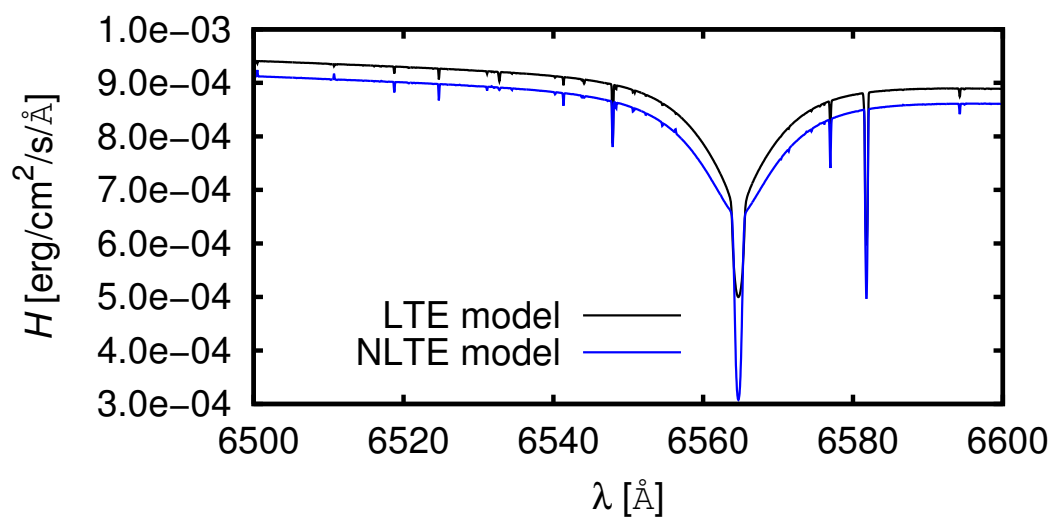
$$J^{(n+1)}(\mathbf{v}) = \Lambda^* \left[S^{(n+1)}(\boldsymbol{\tau}) \right] + \left\{ \Lambda \left[S^{(n)}(\boldsymbol{\tau}) \right] - \Lambda^* \left[S^{(n)}(\boldsymbol{\tau}) \right] \right\}, \quad (2.28)$$

kde člen $\Lambda^* \left[S^{(n+1)}(\boldsymbol{\tau}) \right]$ si můžeme libovolně zvolit, nejlepší volba je matice v diagonálním tvaru. Standardně probíhají tři iterace ve formálním řešení.

Na závěr ještě uvedeme příklad modelu atmosfér a srovnání LTE a NLTE. V grafu 2.7 je vyneseno průběh teploty pro LTE a NLTE model. V opticky tenkých vrstvách se průběhy obou funkcí liší. NLTE není, narozdíl od LTE, monotónní funkcí Rosselandovy optické hloubky. V grafu je pěkně viditelný NLTE efekt. V opticky tlustých prostředích jsou již obě funkce totožné. LTE aproximace je přesná, pokud převažují srážkové procesy nad zářivými nebo pokud je střední intenzita záření rovna Planckově funkci. Právě proto se průběhy teplot se zvyšující optickou hloubkou začnou shodovat. V grafech 2.8 je srovnání částí spočítaných spekter.



Obrázek 2.7: Srovnání průběhu teploty pro LTE a NLTE modely v závislosti na optické hloubce spočítaný modelem TLUSTY. Parametry: $T_{\text{eff}}=20$ kK, sluneční chemické složení, $\log(g) = 4$.



Obrázek 2.8: Srovnání dvou částí spekter pro LTE a NLTE model spočítané programem TLUSTY. Horní graf: čára $H\alpha$. Spodní graf: Balmerovo kontinuum, Balmerův skok. Parametry: $T_{\text{eff}}=20$ kK, sluneční chemické složení, $\log(g) = 4$.

KAPITOLA 3

Teorie rozptylu

V astrofyzice je rozptyl záření častým jevem. V mezihvězdném prostředí se setkáváme s extinkcí, což je snížení zářivého toku ve směru přicházejícího záření vlivem interakce fotonů s hmotou. Extinkce může být způsobena neutrálními atomy, volnými elektrony ale především prachovými částicemi. Rozptyl na mezihvězdné látce může být v některých případech přínosný, na pořizovaná spektra hvězd a fotometrické veličiny však působí rušivě. Bez mezihvězdné extinkce by bylo jádro naší galaxie výrazně jasnější. K rozptylovým procesům dochází i ve hvězdách. V nitrech dominuje rozptyl na volných elektronech, neboť téměř všechny atomy jsou zde plně ionizované. Ve hvězdné atmosféře dochází s rostoucí výškou typicky k poklesu teploty plazmatu a zvyšuje se populace neutrálních atomů. Začíná se uplatňovat i Rayleighův rozptyl. V největší míře dochází k Rayleighově rozptylu v atmosférách chladných hvězd. Ve spektrech některých hvězd je pozorovatelný efekt Ramanova rozptylu, viz [10].

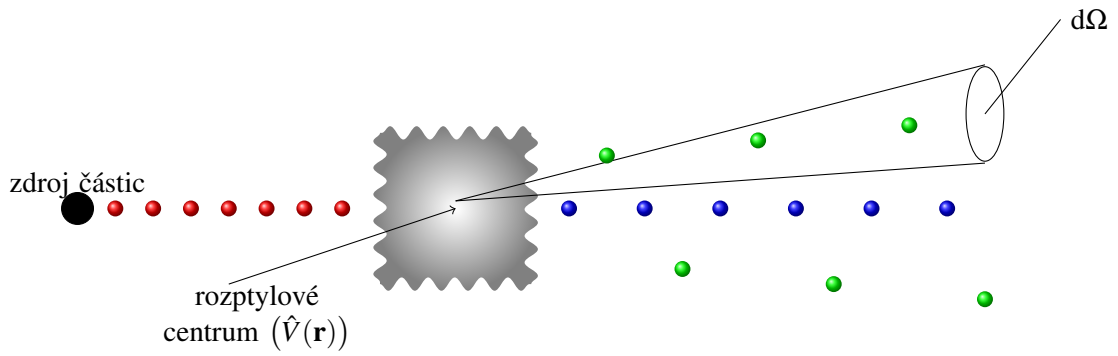
S rozptylem se setkáváme také v atmosféře Země, například modré zbarvení oblohy je způsobeno převážně Rayleighovým rozptylem na molekulách vzduchu, jehož účinný průřez je úměrný λ^{-4} , proto se červená složka rozptyluje méně než modrá. Rayleighův rozptyl se uplatňuje pokud je velikost rozptylových center řádově menší než vlnová délka záření (viz [2]). Pro větší rozměry rozptylových center se začne uplatňovat tzv. Mieův rozptyl, jehož účinný průřez je úměrný jen λ^{-1} , dlouhovlnná složka se projeví mnohem více a my vidíme bílé rozptýlené světlo. Tento jev nastává v oblacích, mlze, apod.

Cílem této kapitoly je odvození výrazu pro účinný průřez elastického Rayleighova rozptylu. Začneme obecnou formulací problematiky rozptylu a definujeme samotný účinný průřez, po krátké ukázce klasického výpočtu ve třetí části odvodíme *Kramersovu-Heisenbergovu formuli* pro diferenciální účinný průřez rozptylu elektromagnetického záření na atomech. Postup je převzat z knihy [18]. Kramersova-Heisenbergova formule je platná pro libovolný rozptylový proces na vázaných elektronech, proto tento vzorec v další části upravíme právě pro Rayleighův rozptyl. Z obecného vzorce popisující účinný průřez Rayleighova rozptylu v následující kapitole budeme počítat účinné průřezy pro konkrétní případy.

3.1

Účinný průřez rozptylu

Na základě měření rozptylu lze zjistit mnoho zajímavých informací o struktuře látky, případně i samotné chemické složení. Experiment probíhá následovně: částice jsou pravidelně vystřelovány ze zdroje a probíhá měření počtu detekovaných částic za jednotku času na jednotkový prostorový úhel

Obrázek 3.1: Základní schéma rozptylu částic v potenciálu $\hat{V}(\mathbf{r})$.

v závislosti na úhlu, o který se vychýlí, což je znázorněno na obrázku 3.1. Diferenciální účinný průřez $d\sigma/d\Omega$ je podle [24] definován takto

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{počet částic rozptýlených za jednotku času do } d\Omega}{\text{počet přilétávajících částic za jednotku času na jednotku plochy}}. \quad (3.1)$$

Integrací přes $d\Omega$ dostaneme celkový účinný průřez, což je poměr počtu rozptýlených částic za jednotku času vzhledem k celkovému počtu přilétávajících částic na jednotkové ploše během jednotkového časového intervalu, $[\sigma] = m^2$. Účinný průřez můžeme definovat ekvivalentně podle [2] jako

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{celková energie rozptýlená za sekundu do } d\Omega}{\text{energie dopadající na jednotku plochy za sekundu}}. \quad (3.2)$$

Potom lze v případě elastického rozptylu fotonů psát

$$\sigma = \frac{\frac{\hbar\omega}{\tau}}{\frac{cn\hbar\omega}{V}} = \frac{V}{cn\tau}, \quad (3.3)$$

kde τ je charakteristická doba, jejíž převrácená hodnota udává pravděpodobnost rozptylu za jednotku času. Výraz cn/V udává počet fotonů, který projde jednotkovou plochou kolmou ke směru jejich šíření za jednotku času (V – objem, n – počet částic v daném objemu).

3.2

Klasická teorie Rayleighova rozptylu

Před samotným odvozením pomocí kvantové mechaniky se podíváme na rozptyl ještě z pohledu klasické fyziky. Touto problematikou se zabýval Lord Rayleigh, vlastním jménem John William Strutt (1842 – 1919) viz [26]. Počítal s rozptylem na molekulách vzduchu a výsledek své práce uveřejnil v knize *O záři oblohy, její polarizaci a barvě*, která vyšla v roce 1871.

V klasickém případě podle [2] (str. 431 – 435) považujeme atom za elektrický dipól, na který dopadá elektromagnetická vlna o elektrické intenzitě $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(i\omega t)$. Základní rovnice pro tlumený oscilátor v elektrickém poli je

$$m\ddot{\mathbf{x}} + m\gamma\dot{\mathbf{x}} + m\omega_0^2\mathbf{x} = e\mathbf{E}_0 \exp(i\omega t), \quad (3.4)$$

kde e je náboj elektronu, ω_0 vlastní kruhová frekvence a m hmotnost elektronu. Pro výchylku nucených kmitů dostaneme

$$\mathbf{x} = \frac{e\mathbf{E}_0 \exp(i\omega t)}{m(\omega_0^2 - \omega^2) + im\gamma} = \frac{e\mathbf{E}_0(\omega_0^2 - \omega^2) \exp(i\omega t)}{m(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + m\gamma^2} - i \frac{e\mathbf{E}_0\gamma \exp(i\omega t)}{m(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + m\gamma^2}. \quad (3.5)$$

celkový rozptýlený výkon vyzářený do všech směrů je obecně roven podle [6]

$$P = \frac{1}{12\pi} \frac{e^2 \omega^4}{\epsilon_0 c^3} |\ddot{\mathbf{x}}|^2.$$

Uvážíme-li jako budící člen na pravé straně (3.4) ve tvaru elektromagnetické vlny a zanedbáme-li tlumení ($\gamma \approx 0$), dostaneme po dosazení do posledního vztahu výraz

$$P = \frac{4\pi e^4 \epsilon_0 \mathbf{E}_0^2}{3m_e^2 c^3} \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2}.$$

Dopadající energie za jednotku času na jednotku plochy je rovna

$$P = \frac{\epsilon_0 c \mathbf{E}_0^2}{2},$$

potom podle definice celkového účinného průřezu (3.2) můžeme napsat

$$\sigma = \frac{8\pi e^4}{3m_e^2 c^4} \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2}. \quad (3.6)$$

Výraz $(\omega^2 - \omega_0^2)^{-2}$ lze rozložit na parciální zlomky:

$$\frac{1}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2} = \frac{1}{4\omega_0^4} \left(\frac{1}{1 - \frac{\omega}{\omega_0}} + \frac{1}{1 + \frac{\omega}{\omega_0}} \right)^2.$$

Tento výraz je možné pomocí vzorce

$$\frac{1}{1 \pm \frac{\omega}{\omega_n}} = 1 \mp \frac{\omega}{\omega_n} + \frac{\omega^2}{\omega_n^2} \mp \dots, \quad (3.7)$$

zapsat jako nekonečnou řadu. Liché členy této řady se vyruší, dostaneme

$$\sigma = \frac{8\pi e^4}{3m_e^2 c^4} \frac{\omega^4}{\omega_0^4} \left[1 + \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 + \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^4 + \dots \right]^2, \quad (3.8)$$

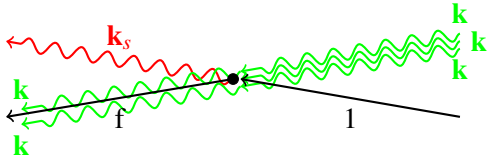
předpokládáme-li ω malé oproti ω_0 , můžeme členy s vyššími mocninami v závorce zanedbat, potom dostaneme známou závislost účinného průřezu na frekvenci $\sigma \sim \omega^4$.

3.3

Kramersova-Heisenbergova formule

V této části odvodíme výrazy pro diferenciální a celkový účinný průřez pro Rayleighův rozptyl elektromagnetického záření na atomu. Četnost přechodů („transition rate“) spočítáme s využitím časově závislé poruchové teorie s rozvojem do druhého řádu:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{\mathcal{H}}_1 | i \rangle + \sum_{\mathcal{L}} \frac{\langle f | \hat{\mathcal{H}}_1 | \mathcal{L} \rangle \langle \mathcal{L} | \hat{\mathcal{H}}_1 | i \rangle}{E_{\mathcal{L}} - E_i} \right|^2 \delta(E_f - E_i),$$

Obrázek 3.2: Znáznornění rozptylu svazku n fotonů na atomu.

kde $|i\rangle$ označuje počáteční stav, $|\mathcal{L}\rangle$ mezistav a $|f\rangle$ konečný stav systému. Odvození tohoto vzorce je uvedeno v příloze B. Předpokládáme přicházející paprsek o n fotonech. Pro určení celkové četnosti je nutné sečíst přes všechny atomové stavy $|f\rangle$ a fotonové stavy \mathbf{k}_s . Rovněž platí $E_f = E_s + E_f$. Pravděpodobnost přechodu za jednotku času z počátečního stavu do některého z konečných stavů s kruhovou frekvencí ω_s

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_f \sum_{\mathbf{k}_s} \left| \langle f | \hat{\mathcal{H}}_I | i \rangle + \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathcal{L}} \frac{\langle f | \hat{\mathcal{H}}_I | \mathcal{L} \rangle \langle \mathcal{L} | \hat{\mathcal{H}}_I | i \rangle}{n\omega - \omega_{\mathcal{L}}} \right|^2 \delta(\omega - \omega_s - \omega_f), \quad (3.9)$$

kde $|i\rangle$ označuje počáteční stav s kruhovou frekvencí ω , $|\mathcal{L}\rangle$ mezistav s kruhovou frekvencí $\omega_{\mathcal{L}}$ a $|f\rangle$ konečný stav systému s kruhovou frekvencí $\omega_s - \omega_f$. Interakční hamiltonián má podle [18] v elektrické dipólové aproximaci tvar

$$\hat{\mathcal{H}}_I = \hat{\mathcal{H}}_{ED} + \hat{\mathcal{H}}_{EQ} + \hat{\mathcal{H}}_{MD} + \hat{\mathcal{H}}_{NL}, \quad (3.10)$$

jednotlivé složky hamiltoniánu $\hat{\mathcal{H}}_I$ jsou:

1. elektrická dipólová složka

$$\hat{\mathcal{H}}_{ED} = e\mathbf{D}\hat{\mathbf{E}}_T(\mathbf{r} = \mathbf{0}),$$

2. elektrická kvadrupólová složka

$$\hat{\mathcal{H}}_{EQ} = \frac{1}{2}e \sum_j (\mathbf{r}_j \cdot \nabla) (\mathbf{r}_j \cdot \hat{\mathbf{E}}_T(\mathbf{r} = \mathbf{0})),$$

3. magnetická dipólová složka

$$\hat{\mathcal{H}}_{MD} = + \frac{e}{2m} \hat{\mathbf{M}}\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r} = \mathbf{0}),$$

4. nelineární složka

$$\hat{\mathcal{H}}_{NL} = \frac{e^2}{8m} \sum_j (\mathbf{r}_j \times \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r} = \mathbf{0}))^2.$$

V těchto výrazech jsme zavedli veličiny

$$\mathbf{D} = \sum_j \mathbf{r}_j,$$

\mathbf{r}_j je polohový vektor j -tého elektronu a $\hat{\mathbf{M}}$:

$$\hat{\mathbf{M}} = \sum_j \mathbf{r}_j \times \hat{\mathbf{p}}_j.$$

Zde $\hat{\mathbf{p}}_j$ je operátor hybnosti j -tého elektronu a $\hat{\mathbf{E}}_T$ značí příčnou složku elektrického pole (složka vektorové pole, jejíž divergence je nulová) a $\hat{\mathbf{B}}$ značí operátor magnetické indukce. Pro další výpočty provedeme řádový odhad velikosti členů Hamiltoniánu podle [18] (str. 171, (5.47)). Zvolíme $\|\mathbf{r}\| \sim a_0$, $\|\mathbf{M}\| \sim \hbar$, kde a_0 je Bohrov poloměr a máme

$$\hat{\mathcal{H}}_{ED} \sim E_T(\mathbf{r} = \mathbf{0}) \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me} \sim 10^{-30} E_T(\mathbf{r} = \mathbf{0}),$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{EQ}} &\sim E_{\text{T}}(\mathbf{r}=\mathbf{0})\frac{3e\hbar}{16mc} \sim 10^{-32}E_{\text{T}}(\mathbf{r}=\mathbf{0}), \\ \mathcal{H}_{\text{MD}} &\sim B(\mathbf{r}=\mathbf{0})\frac{e\hbar}{2m} \sim E_{\text{T}}(\mathbf{r}=\mathbf{0})\frac{e\hbar}{2mc} \sim 10^{-32}E_{\text{T}}(\mathbf{r}=\mathbf{0}).\end{aligned}$$

členy \mathcal{H}_{EQ} a \mathcal{H}_{MD} jsou o dva řády menší než člen \mathcal{H}_{ED} , a proto je v následujících výpočtech budeme zanedbávat. V dalších výpočtech bude $\hat{\mathbf{E}}_{\text{T}} = \hat{\mathbf{E}}$. Výsledný tvar interakčního Hamiltoniánu, který dosadíme do (3.9), tedy je

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = e\mathbf{D}\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}=\mathbf{0}) + \frac{e^2}{8m} \sum_j (\mathbf{r}_j \times \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}=\mathbf{0}))^2, \quad (3.11)$$

Pro následující výpočty je výhodnější vyjádřit Hamiltonián pomocí druhého kvantování, tj. fotonových kreačních a anihilačních operátorů. Operátor $\hat{\mathbf{E}}$ lze rozepsat takto (viz [18]):

$$\hat{\mathbf{E}} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{E}}_{\mathbf{k}}(t, \mathbf{r}) = i \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_0 V}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left[\hat{a}_{\mathbf{k}} \exp(-i\omega_{\mathbf{k}}t + i\mathbf{k}\mathbf{r}) - \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \exp(i\omega_{\mathbf{k}}t - i\mathbf{k}\mathbf{r}) \right], \quad (3.12)$$

a operátor $\hat{\mathbf{B}}$ takto (viz [18])

$$\hat{\mathbf{B}} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{B}}_{\mathbf{k}}(t, \mathbf{r}) = i \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_0 V}} \mathbf{k} \times \varepsilon_{\mathbf{k}} \left[\hat{a}_{\mathbf{k}} \exp(-i\omega_{\mathbf{k}}t + i\mathbf{k}\mathbf{r}) - \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \exp(i\omega_{\mathbf{k}}t - i\mathbf{k}\mathbf{r}) \right], \quad (3.13)$$

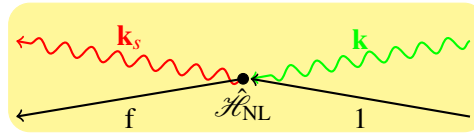
kde $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ je anihilační operátor, $\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger$ kreační operátor a $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ polarizační vektor fotonu s vlnovým vektorem \mathbf{k} a kruhovou frekvencí $\omega_{\mathbf{k}}$. Ze všech členů dané sumy se při rozptylu uplatní právě jeden člen s daným \mathbf{k} , což je naznačeno na obrázku 3.2.

Pro výpočet do stavu systému zahrneme i stav fotonů, stavový vektor pak bude ve tvaru $|n_{\mathbf{k}}, n_{\mathbf{k}_s}, i\rangle$, kde $n_{\mathbf{k}}$ je počet fotonů v přicházejícím paprsku, $n_{\mathbf{k}_s}$ označuje počet rozptýlených fotonů a i stav atomu. Stav atomu na začátku označme 1, po rozptylovém procesu přejde atom do stavu, který označíme f . Potom můžeme (3.9) napsat ve tvaru

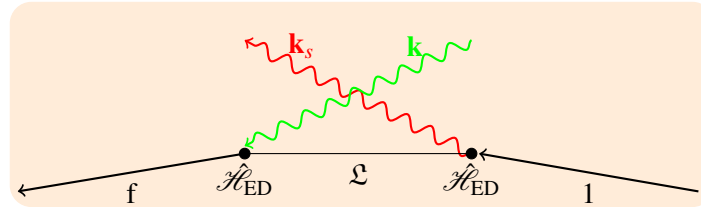
$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_f \sum_{\mathbf{k}_s} \left| \langle n-1, 1, f | \hat{\mathcal{H}}_1 | n, 0, 1 \rangle + \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathcal{L}} \frac{\langle n-1, 1, f | \hat{\mathcal{H}}_1 | \mathcal{L} \rangle \langle \mathcal{L} | \hat{\mathcal{H}}_1 | n, 0, 1 \rangle}{n\omega - \omega_{\mathcal{L}}} \right|^2 \delta(\omega - \omega_s - \omega_f). \quad (3.14)$$

První maticový prvek (3.14) bude nenulový jen při současném působení operátorů $\hat{a}_{\mathbf{k}_s}^\dagger$, $\hat{a}_{\mathbf{k}}$. Proto se zde uplatní jen nelineární složka Hamiltoniánu (3.11). Tomu odpovídá proces znázorněný na diagramu 3.3. Ve druhém případě se uplatní zase jen elektrická dipólová složka \mathcal{H}_{ED} v (3.11). Rozptylové procesy druhého řádu mohou být dvojího druhu, viz 3.4 a 3.5, proto

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar} \sum_{\mathcal{L}} \frac{\langle n-1, 1, f | \hat{\mathcal{H}}_1 | \mathcal{L} \rangle \langle \mathcal{L} | \hat{\mathcal{H}}_1 | n, 0, 1 \rangle}{n\omega - \omega_{\mathcal{L}}} = \\ \frac{1}{\hbar} \sum_j \left\{ \frac{\langle n-1, 1, f | \hat{\mathcal{H}}_{\text{ED}} | n-1, 0, j \rangle \langle n-1, 0, j | \hat{\mathcal{H}}_{\text{ED}} | n, 0, 1 \rangle}{\omega - \omega_j} + \right. \\ \left. \frac{\langle n-1, 1, f | \hat{\mathcal{H}}_{\text{ED}} | n, 1, j \rangle \langle n, 1, j | \hat{\mathcal{H}}_{\text{ED}} | n, 0, 1 \rangle}{-\omega_s - \omega_j} \right\}. \quad (3.15)\end{aligned}$$



Obrázek 3.3: Znáznornění rozptylového procesu prvního řádu.

Obrázek 3.4: Rozptylový proces druhého řádu: nejprve je atom ve stavu $|1\rangle$, je excitován fotonem o vlnovém vektoru \mathbf{k} do mezistavu \mathcal{L} , v zápětí je vyzářen foton o vlnovém vektoru \mathbf{k}_s , a atom přejde do stavu $|f\rangle$.Obrázek 3.5: Rozptylový proces druhého řádu: nejprve je atom ve stavu $|1\rangle$, vyzáří foton o vlnovém vektoru \mathbf{k}_s , a přejde do mezistavu, v zápětí pohltí jiný foton, který má vlnový vektor \mathbf{k} , a přejde do konečného stavu $|f\rangle$.

Výraz (3.14) přejde na

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} = & \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_f \sum_{\mathbf{k}_s} \left| \langle n-1, 1, f | \hat{\mathcal{H}}_{\text{NL}} | n, 0, 1 \rangle + \right. \\ & \frac{1}{\hbar} \sum_j \frac{\langle n-1, 1, f | \hat{\mathcal{H}}_{\text{ED}} | n-1, 0, j \rangle \langle n-1, 0, j | \hat{\mathcal{H}}_{\text{ED}} | n, 0, 1 \rangle + \\ & \left. \frac{1}{\hbar} \sum_j \frac{\langle n-1, 1, f | \hat{\mathcal{H}}_{\text{ED}} | n, 1, j \rangle \langle n, 1, j | \hat{\mathcal{H}}_{\text{ED}} | n, 0, 1 \rangle}{-\omega_s - \omega_j} \right|^2 \delta(\omega - \omega_s - \omega_f). \quad (3.16) \end{aligned}$$

V této fázi stačí dosadit do (3.16) Hamiltonián (3.11), kde jsou příslušné veličiny vyjádřeny pomocí (3.12) a (3.13). Ukazuje se, že velikost prvního maticového prvku v (3.16) je zanedbatelná oproti dvěma zbývajícím členům. Je to patrné z níže popsaného řádového odhadu těchto členů. První maticový prvek v absolutní hodnotě je přibližně roven

$$\frac{e^2}{8m} a_0^2 \langle \hat{\mathbf{B}} \rangle^2,$$

druhý a třetí člen v absolutní hodnotě je přibližně roven

$$\frac{e^2 a_0^2 \langle \hat{\mathbf{E}} \rangle^2}{\hbar(\omega - \omega_j)},$$

resp.

$$\frac{e^2 a_0^2 \langle \hat{\mathbf{E}} \rangle^2}{\hbar(-\omega_s - \omega_j)}.$$

Ve vakuu platí $\langle \hat{\mathbf{B}} \rangle = \langle \hat{\mathbf{E}} \rangle / c$. Potom poměr mezi prvním a druhým, resp. třetím výrazem je přibližně $\hbar(\omega - \omega_j)/(8mc^2)$, resp. $\hbar(-\omega_s - \omega_j)/(8mc^2)$. Hodnoty čitatele jsou v řádu eV, hodnoty jmenovatele jsou řádově 10^6 eV, a vidíme tak, že první výraz v absolutní hodnotě je vůči druhému a třetímu zanedbatelný.

Ve druhém výrazu v absolutní hodnotě (3.16) reprezentuje pravý maticový prvek anihilaci fotonu a levý kreaci rozptýleného fotonu na pravé straně, po dosažení

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \sum_j \frac{\langle n-1, 1, f | \mathcal{H}_{ED} | n-1, 0, j \rangle \langle n-1, 0, j | \mathcal{H}_{ED} | n, 0, 1 \rangle}{\omega - \omega_j} = \\ \sum_j \frac{(ie)^2 \sqrt{\omega \omega_s}}{2\epsilon_0 V} \frac{1}{\omega - \omega_j} \langle n-1, 1, f | \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D} [\hat{a}_{\mathbf{k}_s} \exp(i\mathbf{k}_s \mathbf{r}) + \hat{a}_{\mathbf{k}_s}^\dagger \exp(-i\mathbf{k}_s \mathbf{r})] | n-1, 0, j \rangle \times \\ \langle n-1, 0, j | \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} \mathbf{D} [\hat{a}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \mathbf{r}) + \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \exp(-i\mathbf{k} \mathbf{r})] | n, 0, 1 \rangle \exp[i(-\omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}_s})t]. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Kreační a anihilační operátory působí na fotonové stavy podle známých pravidel

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle,$$

a

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

Výraz na pravé straně (3.17) tak přejde na

$$\sum_j \frac{(ie)^2 \sqrt{n} \sqrt{\omega \omega_s}}{2\epsilon_0 V} \frac{\langle n-1, 1, f | \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D} | n-1, 1, j \rangle \langle n-1, 0, j | \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} \mathbf{D} | n-1, 0, 1 \rangle}{\omega_j - \omega} \exp[i(-\omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}_s})t]. \quad (3.18)$$

Analogicky lze vyjádřit třetí výraz v absolutní hodnotě na pravé straně (3.16), kde pravý maticový prvek reprezentuje kreaci rozptýleného fotonu a levý jeho anihilaci. Výsledek je

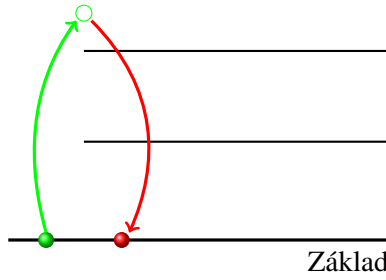
$$\sum_j \frac{(ie)^2 \sqrt{n} \sqrt{\omega \omega_s}}{2\epsilon_0 V} \frac{\langle n-1, 1, f | \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} \mathbf{D} | n-1, 1, j \rangle \langle n, 1, j | \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D} | n, 1, 1 \rangle}{\omega_j + \omega_s} \exp[i(-\omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}_s})t]. \quad (3.19)$$

Výrazy (3.18) a (3.19) můžeme dosadit zpět do (3.16) a dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_f \sum_{\mathbf{k}_s} \left| \sum_j \frac{(ie)^2 \sqrt{n} \sqrt{\omega \omega_s}}{2\epsilon_0 V} \frac{\langle n-1, 1, f | \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D} | n-1, 1, j \rangle \langle n-1, 0, j | \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} \mathbf{D} | n-1, 0, 1 \rangle}{\omega_j - \omega} \right. + \\ \left. \sum_j \frac{(ie)^2 \sqrt{n} \sqrt{\omega \omega_s}}{2\epsilon_0 V} \frac{\langle n-1, 1, f | \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} \mathbf{D} | n-1, 1, j \rangle \langle n, 1, j | \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D} | n, 1, 1 \rangle}{\omega_s + \omega_j} \right|^2 \delta(\omega - \omega_s - \omega_f) = \\ \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_f \sum_{\mathbf{k}_s} \frac{\pi e^4 \omega \omega_s n}{2\epsilon_0^2 V^2} \left| \sum_j \left(\frac{\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D}_{fj} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} \mathbf{D}_{j1}}{\omega_j - \omega} + \frac{\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} \mathbf{D}_{fj} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D}_{j1}}{\omega_j + \omega_s} \right) \right|^2 \delta(\omega - \omega_s - \omega_f), \end{aligned} \quad (3.20)$$

kde jsme zavedli následující označení pro maticové prvky D

$$\mathbf{D}_{AB} = \langle A | \mathbf{D} | B \rangle, \quad (3.21)$$



Obrázek 3.6: Znáznornění procesu elastického Rayleighova rozptylu. Elektron přejde na vyšší, avšak nestabilní energetickou hladinu atomu, ve velmi malém časovém okamžiku dojde k přechodu zpět a vyzáření fotonu o stejné vlnové délce, avšak náhodným směrem.

A a B označují atomové stavy. Výsledný vzorec (3.20) můžeme dosadit do výrazu pro účinný průřez (3.3). V dalším kroku přejdeme v proměnné \mathbf{k}_s od sumace k integraci

$$\sum_{\mathbf{k}_s} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int dk_s k_s^2 \int d\Omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\omega_s \frac{\omega_s^2}{c^3} \int d\Omega.$$

Celkový účinný průřez je pak roven

$$\sigma = \frac{e^4 \omega}{16c^4 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \sum_f \int d\omega_s \omega_s^3 \delta(\omega - \omega_s - \omega_f) \int d\Omega \left| \sum_j \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D}_{fj} \epsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{D}_{j1}}{\omega_j - \omega} + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{D}_{fj} \epsilon_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D}_{j1}}{\omega_j + \omega_s} \right) \right|^2 =$$

$$\frac{e^4 \omega}{16c^4 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \int d\Omega \sum_f (\omega - \omega_f)^3 \left| \sum_j \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D}_{fj} \epsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{D}_{j1}}{\omega_j - \omega} + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{D}_{fj} \epsilon_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D}_{j1}}{\omega_j + \omega - \omega_f} \right) \right|^2. \quad (3.22)$$

S využitím vztahu

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega},$$

určíme diferenciální účinný průřez:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4 \omega}{16c^4 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \sum_f^{\omega_f < \omega} (\omega - \omega_f)^3 \left| \sum_j \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D}_{fj} \epsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{D}_{j1}}{\omega_j - \omega} + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{D}_{fj} \epsilon_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D}_{j1}}{\omega_j + \omega - \omega_f} \right) \right|^2. \quad (3.23)$$

Toto je hledaná *Kramersova-Heisenbergova formule*.

3.4

Elastický Rayleighův rozptyl

Kramersova-Heisenbergova formule se v případě elastického Rayleighova rozptylu (schématické znázornění na obrázku 3.6) ještě zjednoduší, protože platí $\omega_f = 0$ a také $|f\rangle = |1\rangle$, potom

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4 \omega^4}{16c^4 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \left| \sum_j \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D}_{1j} \epsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{D}_{j1}}{\omega_j - \omega} + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} \mathbf{D}_{1j} \epsilon_{\mathbf{k}_s} \mathbf{D}_{j1}}{\omega_j + \omega} \right) \right|^2. \quad (3.24)$$

Pro další úpravu vzorce použijeme *Wignerův-Eckartův teorém* (7.326) z [25], který má pro vektorový operátor tvar

$$\langle n', j', m' | \hat{A}_q | n, j, m \rangle = \langle j, 1; m, q | j', m' \rangle \langle n', j' || A || n, j \rangle. \quad (3.25)$$

Vektor $|n, j, m\rangle$ nyní značí pouze atomový stav, n je hlavní kvantové číslo, j vedlejší kvantové číslo a m magnetické číslo. Veličina q značí vektorovou složku operátoru A . První člen na pravé straně

rovnice (3.25) je *Clebschův-Gordonův koeficient*, druhý *redukovaný maticový prvek*, označení $\langle\langle A \rangle\rangle$ je k odlišení od maticových prvků $\langle A \rangle$. Clebschovy-Gordonovy koeficienty závisí na hodnotách magnetických kvantových čísel. Redukovaný maticový prvek je faktor, který zase na hodnotách magnetických kvantových čísel nezávisí. Maticový prvek \mathbf{D}_{1j} pak můžeme přepsat ve tvaru

$$\langle 1, 0, 0 | r_q | n, 1, m \rangle = \langle 1, 1; m, q | 0, 0 \rangle \langle 1, 0 | r | n, 1 \rangle,$$

a zřejmě také

$$\langle n, 1, m | r_q | 1, 0, 0 \rangle = \langle 0, 1; 0, q | 1, m \rangle \langle n, 1 | r | 1, 0 \rangle.$$

Protože platí

$$\langle 100 | \mathbf{r} | n p m \rangle = \langle n p m | \mathbf{r} | 100 \rangle,$$

potom podle Wignerova-Eckartova teorému

$$\langle 1, 1; m, q | 0, 0 \rangle \langle 1, 0 | r | n, 1 \rangle = \langle 0, 1; 0, q | 1, m \rangle \langle n, 1 | r | 1, 0 \rangle.$$

Maticový prvek \mathbf{D}_{AB} je definován jako součet všech polohových vektorů elektronů. V následujícím postupu se omezíme pouze na jednoelektronový popis. Pomocí Wignerova-Eckartova teorému můžeme rovnici (3.24) upravit:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4 \omega^4}{16c^4 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \left| \sum_n (\epsilon_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}_s}) \langle 0, 1; 0, q | 1, m \rangle^2 \langle n, 1 | r | 1, 0 \rangle^2 \left(\frac{1}{\omega_n - \omega} + \frac{1}{\omega_n + \omega} \right) \right|^2. \quad (3.26)$$

Z výběrových pravidel (viz (7.134) v [25]) pro Clebschovy-Gordonovy koeficienty v této rovnici vyplývá, že jsou nenulové, pokud $q + 0 = m$. Podle vztahů (7.153) a (7.158) v [25] platí

$$\langle 0, 1; 0, m | 1, m \rangle = \langle 1, 0; m, 0 | 1, m \rangle = 1.$$

Pro výpočet celkového účinného průřezu výraz (3.26) integrujeme přes prostorový úhel a sečteme přes všechny polarizační stavy ϵ :

$$\sum_{\epsilon} \int d\Omega |\epsilon \epsilon_s|^2 = 2 \int d\Omega \cos^2 \Theta = \frac{8\pi}{3}.$$

A nakonec ještě zlomky s kruhovými frekvencemi upravíme následujícím způsobem

$$\frac{1}{\omega_n - \omega} + \frac{1}{\omega_n + \omega} = \frac{1}{\omega_n} \left(\frac{1}{1 - \frac{\omega}{\omega_n}} + \frac{1}{1 + \frac{\omega}{\omega_n}} \right).$$

Příslušné zlomky lze rozvést v řadu podle vzorce (3.7), po sečtení zůstanou jen členy se sudými mocninami

$$\sigma(\omega) = \frac{2e^4 \omega^4}{3c^4 \pi \epsilon_0^2 \hbar^2} \left| \sum_n \frac{\langle n, 1 | r | 1, 0 \rangle^2}{\omega_n} \left(1 + \frac{\omega^2}{\omega_n^2} + \frac{\omega^4}{\omega_n^4} + \dots \right) \right|^2.$$

Nyní zavedeme bezrozměrné úhlové frekvence

$$\tilde{\omega}_n = \frac{\omega_n}{\omega_{\varphi}},$$

a bezrozměrný polohový vektor r

$$\tilde{r} = \frac{r}{a_0},$$

kde

$$\omega_{\mathcal{L}} = -\frac{e^4 m}{32\hbar^3 \varepsilon_0^2 \pi^2},$$

je kruhová frekvence hrany Lymanovy série a

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2},$$

je Bohrov poloměr. Po dosazení dostaneme:

$$\sigma(\omega) = \sigma_e \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^4 \left| \sum_n \frac{\langle n, 1 | \tilde{r} | 1, 0 \rangle^2}{\tilde{\omega}_n} \left(1 + \frac{1}{\tilde{\omega}_n^2} \frac{\omega^2}{\omega_{\mathcal{L}}^2} + \frac{1}{\tilde{\omega}_n^4} \frac{\omega^4}{\omega_{\mathcal{L}}^4} + \dots \right) \right|^2, \quad (3.27)$$

kde σ_e je účinný průřez Thomsonova rozptylu:

$$\sigma_e = \frac{e^4}{6\varepsilon_0^2 c^4 m^2 \pi}.$$

KAPITOLA 4

Výpočet účinného průřezu Rayleighova rozptylu

Tato kapitola je věnována vlastnímu výpočtu celkového účinného průřezu pro jednotlivé druhy atomů. Výsledný vliv atomů na opacitu atmosféry prostřednictvím Rayleighova rozptylu bude diskutován v části 5.3. Nejprve se zaměříme na neutrální vodík, část postupu bude podle [17] a vyjádříme celkový účinný průřez jako funkci frekvence. Ve druhé části odvodíme výraz pro účinný průřez pro atomy podobné vodíku, tedy i jednou ionizované helium. Rayleighův rozptyl probíhá i na atomech v excitovaných stavech. Takové atomy mají větší účinný průřez, protože rozsah orbitalu s větší energií je větší.

Výsledné účinné průřezy jsou v této kapitole uvedeny ve formátu

$$\frac{\sigma(f)}{\text{cm}^2} = \frac{a}{\text{s}^4 \text{cm}^2} \frac{f^4}{\text{Hz}^4} + \frac{b}{\text{s}^6 \text{cm}^2} \frac{f^6}{\text{Hz}^6} + \frac{c}{\text{s}^8 \text{cm}^2} \frac{f^8}{\text{Hz}^8}. \quad (4.1)$$

4.1

Neutrální vodík

Vztah pro účinný průřez (3.27) je obecně vyjádřený pro libovolné atomové stavy $|1s\rangle$ a $|np\rangle$. V této části explicitně vyjádříme maticové prvky pro jednotlivé druhy atomů a spočítáme celkový účinný průřez. Z řešení Schrödingerovy rovnice pro vodík je zřejmé, že dostaneme řešení pro vázané stavy, pro které je energie záporná a kontinuální stavy, jejichž energie je nezáporná. Pro bezrozměrné kruhové frekvence vázaných stavů platí $\tilde{\omega}_{np} = 1 - n^{-2}$, pro bezrozměrné kruhové frekvence volných stavů $\tilde{\omega}_{n'p} = 1 + (n')^{-2}$. Účinný průřez pak můžeme napsat ve tvaru

$$\sigma(\omega) = \sigma_e \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^4 \left| \sum_j \left(\sum_n \frac{\langle np || \tilde{r} || 1s \rangle^2}{\tilde{\omega}_{np}^{2j+1}} + \int_0^\infty dn' \frac{\langle n'p || \tilde{r} || 1s \rangle^2}{\tilde{\omega}_{n'p}^{2j+1}} \right) \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^{2j} \right|^2. \quad (4.2)$$

Maticové prvky jsou v případě vázaných stavů rovny (viz [11] vztah (52.4))

$$\langle np || \tilde{r} || 1s \rangle = \left[\frac{2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}}{3(n+1)^{2n+5}} \right]^{\frac{1}{2}},$$

a v případě stavů kontinua podle [17]

$$\langle n'p || \tilde{r} || 1s \rangle = \left[\frac{2^8 (n')^7 \exp(-4n' / \tan(1/n'))}{3 [(n')^2 + 1]^5 [1 - \exp(-2\pi n')]} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Ve výrazu zavedeme koeficienty a_j , b_j a c_j

$$\sigma(\omega) = \sigma_e \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^4 \left| \sum_{j=0}^{\infty} a_j \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^{2j} + b_j \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^{2j} \right|^2 = \sigma_e \sum_{j=0}^{\infty} c_j \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^{4+2j}, \quad (4.3)$$

kde

$$a_j = \sum_{n=2}^{\infty} \langle np || \tilde{r} || 1s \rangle^2 \left(1 - \frac{1}{n^2} \right)^{-2j-1} = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}}{3(n+1)^{2n+5}} \left(1 - \frac{1}{n^2} \right)^{-2j-1}, \quad (4.4)$$

$$b_j = \int dn' \langle n'p || \tilde{r} || 1s \rangle^2 \left(1 + \frac{1}{(n')^2} \right)^{-2j-1} = \int_0^{\infty} dn' \frac{2^8 (n')^7 \exp(-4n' / \tan(1/n'))}{3 [(n')^2 + 1]^5 [1 - \exp(-2\pi n')]} \left(1 + \frac{1}{(n')^2} \right)^{-2j-1}. \quad (4.5)$$

Hodnoty koeficientů jsou uvedeny v tabulce 4.1. Pro první tři členy této řady můžeme psát

$$\sigma(\omega) = \sigma_e \left[(a_0 + b_0)^2 \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^4 + 2(a_0 + b_0)(a_1 + b_1) \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^6 + (2(a_0 + b_0)(a_2 + b_2) + (a_1 + b_1)^2) \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^8 + \dots \right]. \quad (4.6)$$

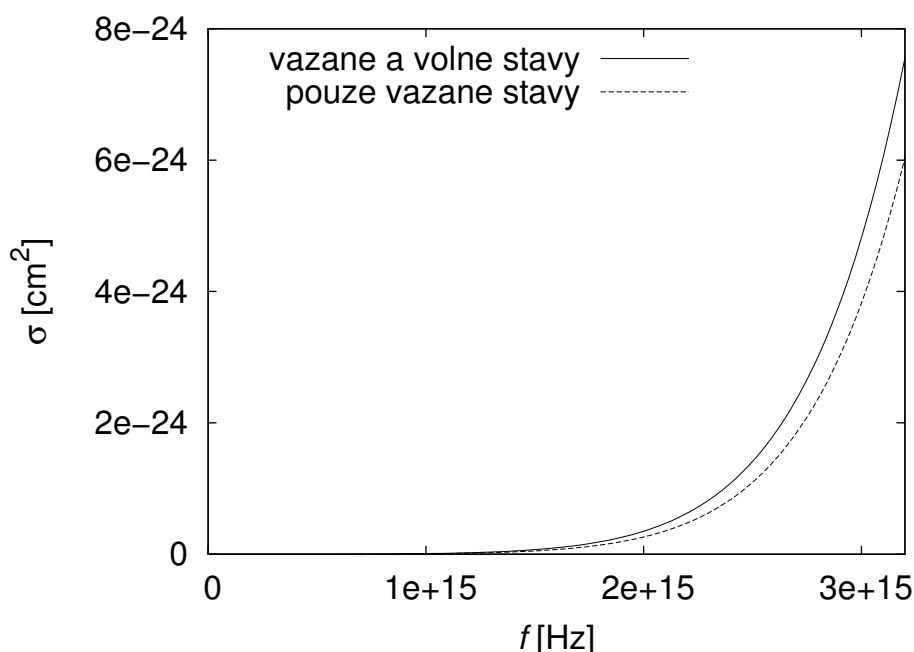
Účinný průřez pro vodík vyjádřený ve formátu podle (4.1) je roven

$$\sigma(f) = 7.18355 \times 10^{-87} f^4 + 1.96052 \times 10^{-117} f^6 + 4.27101 \times 10^{-148} f^8. \quad (4.7)$$

Jen pro zajímavost se podívejme na účinný průřez, který bychom dostali, pokud bychom neuvažovali stavy kontinua, ten by byl ve tvaru (4.1)

$$\sigma(f) = 4.760 \times 10^{-87} f^4 + 1.4645 \times 10^{-117} f^6 + 3.606 \times 10^{-148} f^8. \quad (4.8)$$

Srovnání těchto dvou funkcí je v grafu 4.1. Účinný průřez se započítanými stavy kontinua je větší než celkový účinný průřez bez započítaných stavů kontinua.



Obrázek 4.1: Závislost účinného průřezu Rayleighova rozptylu na frekvenci bez uvážení a s uvážením stavů kontinua.

n	a_j	b_j	c_j	n	a_j	b_j	c_j
0	0.915	1.265	0.209	5	13.582	0.057	81.101
1	1.524	0.136	3.737	6	23.899	0.049	161.896
2	2.588	0.101	8.812	7	42.190	0.044	319.001
3	4.458	0.080	19.151	8	74.641	0.039	622.229
4	7.755	0.066	39.919	9	132.251	0.036	132.251

Tabulka 4.1: Hodnoty koeficientů a_j , b_j a c_j definované rovnicí (4.3) určené jako výsledek sumace/integrace. Hodnoty koeficientů b_j a c_j převzaty z [17].

4.2

Atomy podobné vodíku

Zobecnění pro případ atomů podobným vodíku provedeme na základě vlastností vlnových funkcí a vázaných energií atomů podobných vodíku. Stačí si uvědomit, že se podle [12] radiální vlnové funkce pro atom o Z protonech pouze přeškáluje na Zr , normovací faktor se zvětší Z^3 -krát a absolutní hodnoty energie příslušných energetických hladin se zvětší Z^2 krát.

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!}} \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right) \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l F\left(l+1-n, 2l+2, \frac{2Zr}{na_0}\right), \quad (4.9)$$

kde $F(\alpha, \beta, \gamma)$ je hypergeometrická funkce. Pro maticový prvek mezi stavy $1s$ a $2p$ můžeme napsat

$$\langle n\text{pm}|z|1s0\rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^\infty dr r^2 Z^{3/2} R_{10}(Zr) Y_{00}(\theta, \varphi) Z^{3/2} R_{n1}(Zr) Y_{1m}(\theta, \varphi) r \cos(\theta).$$

V tomto integrálu provedeme substituci $\bar{r} = Zr$, potom dostaneme

$$\langle \text{npm}|z|1s0\rangle = \frac{1}{Z} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^\infty d\bar{r} \bar{r}^2 R_{10}(\bar{r}) Y_{00}(\theta, \varphi) R_{n1}(\bar{r}) Y_{1m}(\theta, \varphi) \bar{r} \cos(\theta),$$

maticový prvek, tedy i redukovaný maticový prvek se zmenší Z krát. Tento výsledek dosadíme do rovnice pro účinný průřez

$$\sigma(\omega) = \sigma_e \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^4 \left| \sum_i \frac{\langle \text{np}||\tilde{r}||1s\rangle^2}{Z^4 \tilde{\omega}_i} \left(1 + \frac{1}{Z^4 \tilde{\omega}_i^2} \frac{\omega^2}{\omega_{\mathcal{L}}^2} + \frac{1}{Z^8 \tilde{\omega}_i^4} \frac{\omega^4}{\omega_{\mathcal{L}}^4} + \dots \right) \right|^2.$$

Tento výraz stačí již jen upravit podobně jako v předchozí části. Zajímají nás jen první tři členy, proto můžeme psát:

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) &= \sigma_e \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^4 \frac{1}{Z^8} \left| \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{Z^{4j}} (a_j + b_j) \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^{2j} \right|^2 = \\ &= \sigma_e \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^4 \frac{1}{Z^8} \left((a_0 + b_0) + \frac{1}{Z^4} (a_1 + b_1) \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^2 + \dots \right) \times \\ &\quad \left((a_0 + b_0) + \frac{1}{Z^4} (a_1 + b_1) \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^2 + \dots \right). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Odtud

$$\begin{aligned} \sigma(f) &= \sigma_e \left[\frac{(a_0 + b_0)^2}{Z^8} \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^4 + \frac{2(a_0 + b_0)(a_1 + b_1)}{Z^{12}} \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^6 + \right. \\ &\quad \left. \frac{(2(a_0 + b_0)(a_2 + b_2) + (a_1 + b_1)^2)}{Z^{16}} \left(\frac{\omega}{\omega_{\mathcal{L}}} \right)^8 + \dots \right]. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Číselně vyjádřeno ve formátu podle (4.1)

$$\sigma(f) = \frac{7.18355 \times 10^{-87}}{Z^8} f^4 + \frac{1.96052 \times 10^{-117}}{Z^{12}} f^6 + \frac{4.27101 \times 10^{-148}}{Z^{16}} f^8. \quad (4.12)$$

A konečně pro jednu ionizované helium dostáváme

$$\sigma(f) = 2.8061 \times 10^{-89} f^4 + 4.7864 \times 10^{-121} f^6 + 6.5170 \times 10^{-153} f^8. \quad (4.13)$$

Právě tento vzorec použijeme pro započítání Rayleighova rozptylu na He II v modelu atmosfér.

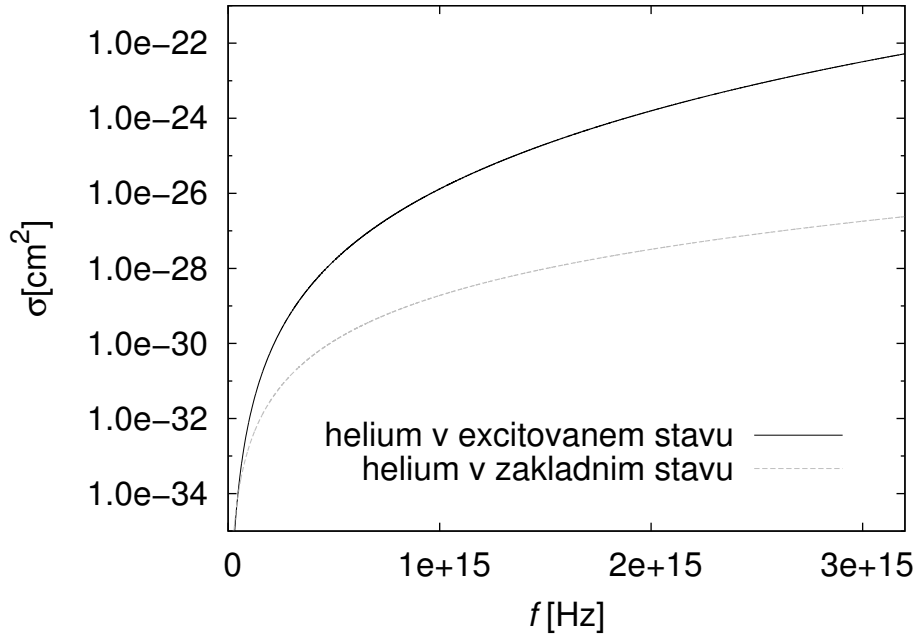
4.3

Excitované stavy vodíku a ionizovaného helia

Doposud jsme se zabývali pouze rozptylem na atomech v základním stavu. Ve hvězdných atmosférách se rovněž vyskytují atomy v excitovaných stavech.

n	a_j	n	a_j
0	27.6952	5	8.5032e+09
1	1297.15	6	4.39267e+11
2	63882.3	7	2.27297e+13
3	3.22736e+06	8	1.17716e+15
4	1.65133e+08	9	6.09919e+16

Tabulka 4.2: Jednotlivé koeficienty pro rozptyl na vodíku z hladiny 2s.



Obrázek 4.2: Porovnání účinného průřezu Rayleighova rozptylu z hladiny 1s a 2s na frekvenci.

Uvažme přechody z hladiny 2s do hladiny (mezistavu) np. Redukované maticové prvky jsou dány formulí (52.4) z [11]:

$$|\langle np || r || 2s \rangle|^2 = \frac{2^{17} n^7 (n^2 - 1) (n - 2)^{2n-6}}{3(n+2)^{2n+6}}. \quad (4.14)$$

Výraz pro výsledný účinný průřez pro neutrální vodík je potom ve tvaru

$$\sigma(f) = 4.354 \times 10^{-84} f^4 + 3.769 \times 10^{-113} f^6 + 2.530 \times 10^{-142} f^8. \quad (4.15)$$

Velikost účinného průřezu je až o čtyři řády větší než v případě vodíku v základním stavu. Velikost účinného průřezu totiž závisí na rozsahu orbitalu. Pro ionizované helium je účinný průřez analogicky k (4.12) roven

$$\sigma(f) = 1.700 \times 10^{-90} f^4 + 9.200 \times 10^{-117} f^6 + 3.861 \times 10^{-147} f^8. \quad (4.16)$$

Srovnání s frekvenční závislostí účinného průřezu pro He II v základním stavu je v grafu 4.2.

KAPITOLA 5

Rayleighův rozptyl v modelech hvězdných atmosfér

Tato kapitola je praktickou částí diplomové práce a jsou zde uvedeny výsledky modelů atmosfér. V první části bude popsána implementace kódu pro Rayleighův rozptyl na jednu ionizovaném heliu do zdrojového kódu TLUSTY. Dále budou popsány samotné výpočty a úpravy spočítaných dat. Ve třetí části uvedeme vypočítané LTE populace a zvážíme jejich vliv na opacitu prostřednictvím Rayleighova rozptylu a konečně v poslední části rozebereme přímo výsledné rozdíly ve spočítaných tocích záření u atmosfér se započtením a bez započtení Rayleighova rozptylu.

5.1

Implementace Rayleighova rozptylu na He II do zdrojového kódu

V modelu TLUSTY je implementován pouze Rayleighův rozptyl na H I. Ze vzorce (4.12) známe vztah pro libovolný atom podobný vodíku, proto úprava účinného průřezu bude sestávat jen z vynásobení jednotlivých koeficientů účinného průřezu pro neutrální vodík mocninami celočíselné konstanty. Také je v programu nutné zajistit, aby byly výpočty skutečně prováděny pro jednu ionizovanému heliu. Vzhledem k velké podobnosti obou dvou případů stačilo zkopírovat původní zdrojový kód pro Rayleighův rozptyl a provést popsané drobné úpravy. Zde je uvedena část zdrojového kódu příslušející Rayleighově rozptylu na jednu ionizovanému heliu.

```
01      if(ielhe2.gt.0) then
02          NOHN=NFIRST(IELHE2)
03      end if
04      IF(ICALL.GT.0) THEN
05          T=TEMP(ID)
06          DELTAT=TENM4*T
07          ANE=ELEC(ID)
08          HKT=HK/T
09          T32=UN/T/SQRT(T)
10          XHM=THM0/T
11          if(ielhe2.gt.0) POPI=POPUL(NOHN, ID)
12          SB00=SBHM*T32*EXP(XHM)*POPI*ANE
```

```

13     END IF
14     IF (IRSCT.NE.0) THEN
15         IT=IT+1
16         IF (MODE.LT.0) THEN
17             FRM=MIN(FR,4.D0*FRRAY)
18             X=16.D0*(C18/FRM)**2
19             if(it.gt.mcross)
20             *   CALL QUIT('it.gt.mcross in opadd',it,mcross)
21             if(ielhe2.le.0)
22             *   CALL QUIT('conflict in irstc - no hydrogen',irsct,ielhe2)
23             BFCS(IT,IJ)=(CR0+(CR1+CR2/X)/X)/X/X
24         ELSE
25             ABAD=POPI*CROSS(IT,IJ)
26             SCAD=ABAD
27         END IF
28     END IF

```

Nejprve popíšeme proměnné vystupující v kódu:

- IELHE2 – index příslušející He II, inicializace probíhá v této části kódu

```

IF (NUMAT(IA).EQ.2) THEN
  IATHE=IA
  IF (IZ(ION).EQ.1) IELHE1=ION
  IF (IZ(ION).EQ.2) IELHE2=ION
END IF

```

NUMAT – proměnná popisující číslo prvku, pro helium je rovna dvěma
 IZ – popisuje ionizaci, pro neutrální prvek =1, jednou ionizovaný =2, apod.
 IELHE2 – číslo ION pro He II
 pro jednou ionizované helium v základním stavu platí ION=3

- NFIRST – číslo započítané energiové hladiny příslušející iontu v základním stavu pro He II: NFIRST(3)=35=N0HN
- POPI=POPUL(N0HN,ID) – populace příslušného iontu, pro daný prvek – He II v hloubkové hladině s indexem ID populace (a parametry) se v prvním kroku načítají ze souboru číslo 8 do proměnné X, ze kterého v dalším kroku jsou převzaty samotné populace do proměnné POPULO

```

POPULO(I, ID)=X(NUMLT+I)
POPUL(I, ID)=POPULO(I, ID)

```

NUMLT je počet parametrů, v případě atmosfér: NUMLT=3, populace jsou v intervalu (4,NLEV0), kde NLEV0 je celkový počet započítaných energiových hladin a parametrů uvedený v souboru 8 (viz C.1), populace jsou ještě přepočítávány procedurou CHANGE

- FRM=MIN(FR,4.D0*FRRAY) – uvažovaná frekvence braná jako minimum ze dvou hodnot: FR=FREQ(IJ), což je frekvenční bod s indexem IJ, nebo čtyřnásobek proměnné FRRAY=2.463D15

Parametr	Hodnota
efektivní teplota	(15 – 30) kK
$\log(g)$	4.0
Abundance $N(\text{He})/N(\text{H})$ u hvězd s nadbytkem helia	10
Obsah těžších prvků podle [3]	

Tabulka 5.1: Vstupní parametry pro výpočet modelů atmosfér.

- $X=16.D0*(C18/FRM)**2$ – pomocná proměnná pro výpočet účinného průřezu Rayleighova rozptylu, koeficient 16.D0 je proměnná Z^4 vystupující v účinném průřezu pro He II, C18 je konstanta, C18=2.997925D18
- $BFCs(IT,IJ)=(CR0+(CR1+CR2/X)/X)/X/X$ – vyjádření účinného průřezu pro frekvenci f ve frekvenčním bodě IJ, CR0, CR1 a CR2 jsou konstanty: CR0=2.784D0, CR1=1.422D-6, 5.799D-13
- $ABAD=POPI*CROSS(IT,IJ)$ – výpočet absorpčního koeficientu
- $CROSS(IT,IJ)$ – funkce pro výpočet účinného průřezu rozptylu
- SCAD – koeficient rozptylu

5.2

Modelování atmosfér a zpracování výstupu

Modely atmosfér byly počítány pro hvězdy spektrální třídy B s parametry uvedenými v tabulce 5.1

Spočítaná spektra, která jsou výsledkem výpočtu modelů, nejsou vhodná pro srovnání rozdílů bez a se započítáním Rayleighova rozptylu. V celém spektru se nachází velké množství čar, které způsobí, že vykreslený graf je nepřehledný. Proto je vhodné ze spočítaného toku H spočítat konvoluci s Gaussovou funkcí

$$(H * g)(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int d\lambda' H(\lambda') \exp\left(-\frac{(\lambda - \lambda')^2}{\sigma^2}\right),$$

kde σ je šířka Gaussovy funkce. Při výpočtech bylo zvoleno $\sigma = 10 \text{ \AA}$. Rozdíl hvězdných velikostí se spočítá pomocí známého vztahu

$$\Delta m(\lambda) = -2.5 \log \frac{H_+(\lambda)}{H_-(\lambda)},$$

kde toky H_+ , H_- jsou vystupujícím tokem modelů atmosfér se započítaným Rayleighovým rozptylem (+) a bez započítaného Rayleighova rozptylu (-). Výše uvedený vzorec však nebylo možné přímo použít. Ukázalo se, že v modelech, ve kterých je započítán Rayleighův rozptyl, je větší celkový povrchový tok než v modelech, ve kterých započítán není. Pro malé rozdíly celkových toků je potom možné spočítat rozdíl ze vztahu

$$\Delta m(\lambda) = -2.5 \log \left[H_-^{-1}(\lambda) \left(\frac{H_-^{\text{TOT}}}{H_+^{\text{TOT}}} H_+(\lambda) \right) \right], \quad (5.1)$$

T_{eff} [kK]	Sluneční chemické složení			S nadbytkem helia ($N(\text{He})/N(\text{H})=10$)	
	NO	H I	He II	NO	He II
15	2.287501D+11	2.289419D+11	2.294475D+11		
16	2.961510D+11	2.962398D+11			
17	3.779142D+11	3.780748D+11	3.792978D+11		
18	4.747821D+11	4.749003D+11			
19	5.891852D+11	5.892737D+11	5.916671D+11	5.888289D+11	1.103113D+12
20	7.231382D+11	7.232054D+11		7.226715D+11	7.666654D+11
21	8.787591D+11	8.788107D+11	8.897300D+11	8.782520D+11	8.991826D+11
22	1.058276D+12	1.058316D+12		1.057878D+12	1.144809D+12
23	1.265478D+12	1.268834D+12	1.271097D+12	1.263867D+12	1.380914D+12
24	1.500164D+12	1.498546D+12		1.498614D+12	1.560496D+12
25	1.764242D+12	1.764526D+12	1.884910D+12	1.764622D+12	1.844234D+12
26	2.063758D+12	2.063772D+12			
27	2.399838D+12	2.401006D+12	2.529868D+12	2.400960D+12	2.489526D+12
28	2.776006D+12	2.775365D+12	2.832519D+12	2.776882D+12	2.880626D+12
29	3.195393D+12	3.193342D+12	3.354373D+12	3.194145D+12	3.305285D+12
30	3.658571D+12	3.658585D+12	4.490067D+12	3.659533D+12	4.369993D+12

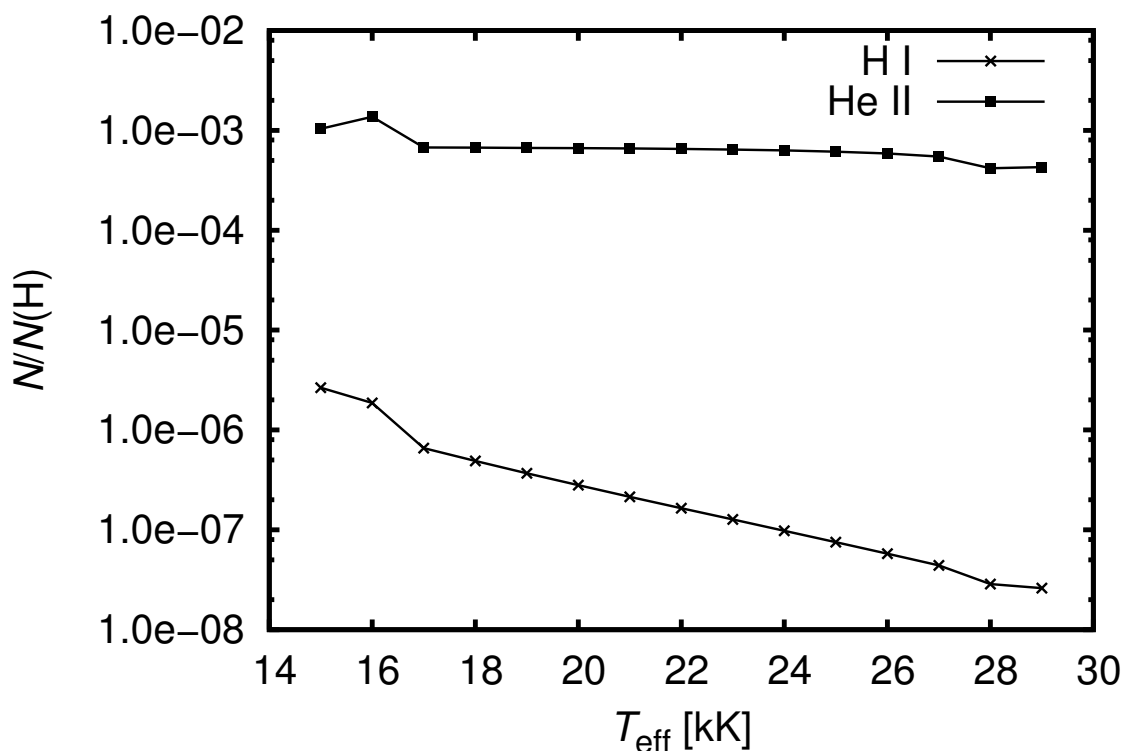
Tabulka 5.2: Výsledné celkové povrchové toky spočítané modelem TLUSTY. NO – modely bez Rayleighova rozptylu, H I – modely s Rayleighovým rozptylem na vodíku, He II – modely s Rayleighovým rozptylem na heliu. $[H^{\text{TOT}}] = \text{erg/cm}^2/\text{s/Hz}$.

kde H_+^{TOT} a H_-^{TOT} je celkový povrchový tok spočítaný modelem. Opakovanými výpočty modelů je možné provést korekci celkového toku. V modelech měníme parametr TAUDIV nebo NDRE udávající optickou hloubku, ve které se přepíná mezi výpočtem rovnice zachování zářivého toku v diferenciálním tvaru na tvar integrální. Jak bylo napsáno v kapitole o modelech atmosfér, právě rovnice zářivé rovnováhy v integrálním tvaru nezachovává celkový tok záření. Při zmenšujících se hodnotách uvedených parametrů však modely konvergují pomaleji (nebo nekonvergují). Největší problém nastal u chemicky pekulárních hvězd, kde bylo nutné výpočet opakovat zhruba pětkrát, aby došlo k patřičnému snížení toku. Jednotlivé hodnoty toků jsou uvedeny v tabulce 5.2. Typické hodnoty TAUDIV v prvním LTE modelu byly kolem tří, parametr NDRE zhruba 30 – 35. Nejlepší shody celkových toků záření v modelech se započítaným a bez započítaného Rayleighova rozptylu dostáváme pro TAUDIV=0.01.

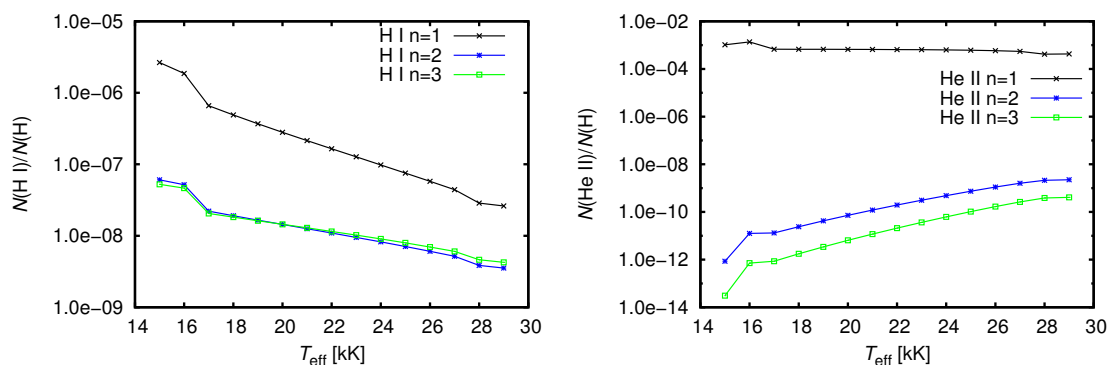
5.3

Populace atomů vodíku a helia

V této části uvedeme LTE populace vodíku a helia. Na základě znalosti populací lze provést odhad míry vlivu Rayleighova rozptylu na modely atmosfér. Nejprve se podíváme na populaci neutrálního vodíku a jednou ionizovaného helia v základním stavu, viz graf 5.1. Z grafu je zřejmé, že populace He II je asi o tři řády větší než populace H I. Ionizační energie jednou ionizovaného helia je asi čtyřikrát větší než ionizační energie jednou ionizovaného vodíku. Populace neutrálního vodíku v základním stavu s rostoucí efektivní teplotou výrazně klesá, v případě jednou ionizovaného helia je populace řádově konstantní na celém intervalu efektivních teplot.



Obrázek 5.1: Poměr populací neutrálního vodíku a jednou ionizovaného helia v optické hloubce $\tau \approx 1$ vzhledem k celkové populaci vodíku v atmosféře.



Obrázek 5.2: Levý graf: podíl populací vodíku v různých stavech s hlavním kvantovým číslem n vzhledem k celkové populaci částic vodíku. Pravý graf: totéž pro helium. Populace jsou vykresleny pro hvězdy se slunečním chemickým složením v optické hloubce $\tau \approx 1$.

Podívejme se na populaci excitovaných stavů vodíku a helia ve srovnání s populacemi příslušných prvků v základních stavech. Ty jsou znázorněny v grafu 5.2. Populace neutrálního vodíku v excitovaných stavech jsou zhruba o jeden řád menší než populace vodíku v základním stavu. S rostoucím hlavním kvantovým číslem populace neutrálního vodíku mírně rostou. Jelikož s rostoucím n se zvětšuje celkový účinný průřez, mohou tyto atomy ovlivnit model atmosféry mnohem více, než samotný

neutrální vodík v základním stavu. Populace excitovaných stavů jednou ionizovaného helia je o několik řádů menší, než populace He II v základním stavu.

V případě hvězd s nadbytkem helia je rozdíl mezi populacemi helia a vodíku ještě větší. Populace jsou vykresleny v horním grafu 5.3. V atmosféře hvězdy s nadbytkem helia je nejvíce He II v základním stavu. Populace atomů v excitovaných stavech (5.4) a neutrálního vodíku je zde o několik řádů menší. Na opacitu atmosféry by mohly mít vliv také atomy neutrálního helia. Populace neutrálního helia a jeho excitovaných stavů ve srovnání s populací ionizovaného helia jsou vyneseny ve spodním grafu 5.3. Pro nízké teploty jsou populace He I řádově stejné, s rostoucí efektivní teplotou se však výrazně snižuje, pro teplotu 30 kK je o tři řády menší.

Z předchozích odstavců a grafů vyplývá, že jednou ionizované helium v základním stavu se ve hvězdách spektrální třídy B vyskytuje ve velké populaci. Bude mít proto větší vliv na výsledný model atmosféry než neutrální vodík. Největší vliv He II lze proto očekávat u hvězd s nadbytkem helia viz část 5.4.

5.4

Vliv Rayleighova rozptylu na modely atmosfér

V této části uvedeme hlavní výsledky diplomové práce. Těmi jsou rozdíly mezi spektry vypočtenými se započteným a spektry bez započítaného Rayleighova rozptylu. Výpočet je popsán v části 5.2 této kapitoly. Uvedeme zde výsledky jak pro atmosféry se slunečním chemickým složením (rozptyl na H I, He II) a s nadbytkem helia (rozptyl na He II). V této kapitole budou uvedeny jen některé získané grafy, zbytek je v dodatku A. Ze vztahu (5.1) vyplývá, že záporné hodnoty v grafech odpovídají vlnovým délkám, na kterých je atmosféra se započítaným Rayleighovým rozptylem jasnější.

5.4.1

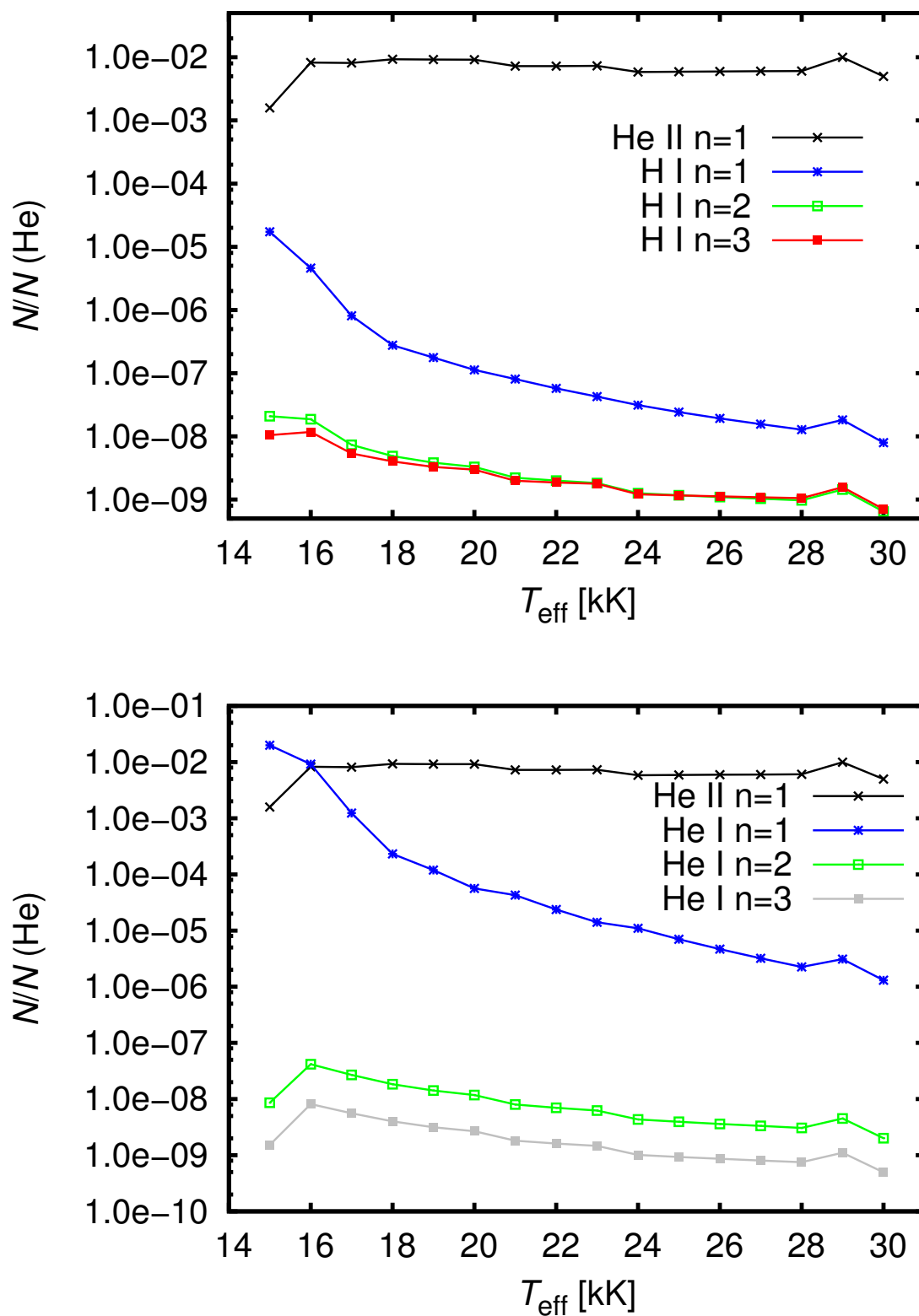
Rozptyl na vodíku pro hvězdy se slunečním chemickým složením

V atmosférách horkých hvězd se nachází malá populace neutrálního vodíku. Tomu odpovídají i výsledné rozdíly v toku záření mezi modelem se započítaným a bez započítaného Rayleighova rozptylu. Změny se pohybují v řádu 10^{-3} mag a s rostoucí efektivní teplotou klesají až na řádově 10^{-5} mag, viz obr. 5.5. Tak malé změny toku nejsou měřitelné. Pokles s rostoucí efektivní teplotou souvisí se snižováním populace neutrálního vodíku v základním stavu. Podívejme se na závislost hvězdné velikosti na vlnové délce v grafu 5.5. Takový průběh je podobný i v ostatních případech. Asi do vlnové délky 2000 Å jsou v grafu kladné hodnoty. Atmosféra s Rayleighovým rozptylem je v tomto intervalu vlnových délek temnější, což zřejmě souvisí s vysokým účinným průřezem Rayleighova rozptylu. V intervalu (2000 – 3780) Å je atmosféra s Rayleighovým rozptylem jasnější. Tato oblast pravděpodobně souvisí s dodatečnou opacitou v důsledku vázaně-volných procesů, které zeslabují vliv Rayleighova rozptylu a způsobují redistribuci toku záření právě do těchto vlnových délek. K poklesu z maximálních hodnot dochází v blízkosti ionizační hrany vodíku. V intervalu od 3780 Å jsou hodnoty opět kladné až na několik izolovaných vlnových délek odpovídajících čarám.

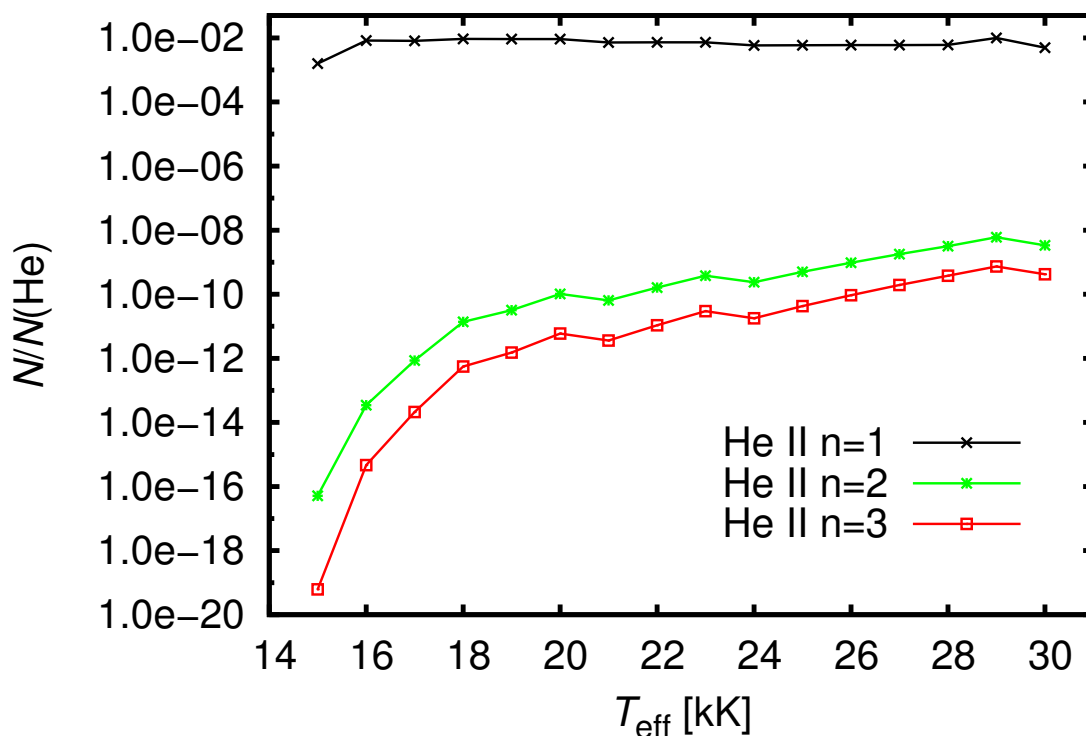
5.4.2

Rozptyl na jednou ionizovaném heliu pro hvězdy se slunečním chemickým složením

Populace jednou ionizovaného helia jsou výrazně větší než populace neutrálního vodíku. Tomu odpovídají i spočítané změny ukázané na obrázku 5.6, které jsou výrazně větší i přes menší účinný průřez Rayleighova rozptylu He II oproti H I. Velikost změny není monotónní funkcí teploty, ale nejprve



Obrázek 5.3: Horní graf: Podíl populací vodíku a helia v různých stavech s hlavním kvantovým číslem n vzhledem k celkové populaci helia $N(\text{He})/N(\text{H})=10$. Spodní graf: To samé pro neutrální helium.



Obrázek 5.4: Poměr populací He II v různých stavech s hlavním kvantovým číslem n vzhledem k celkové populaci helia u hvězd s nadbytkem helia.

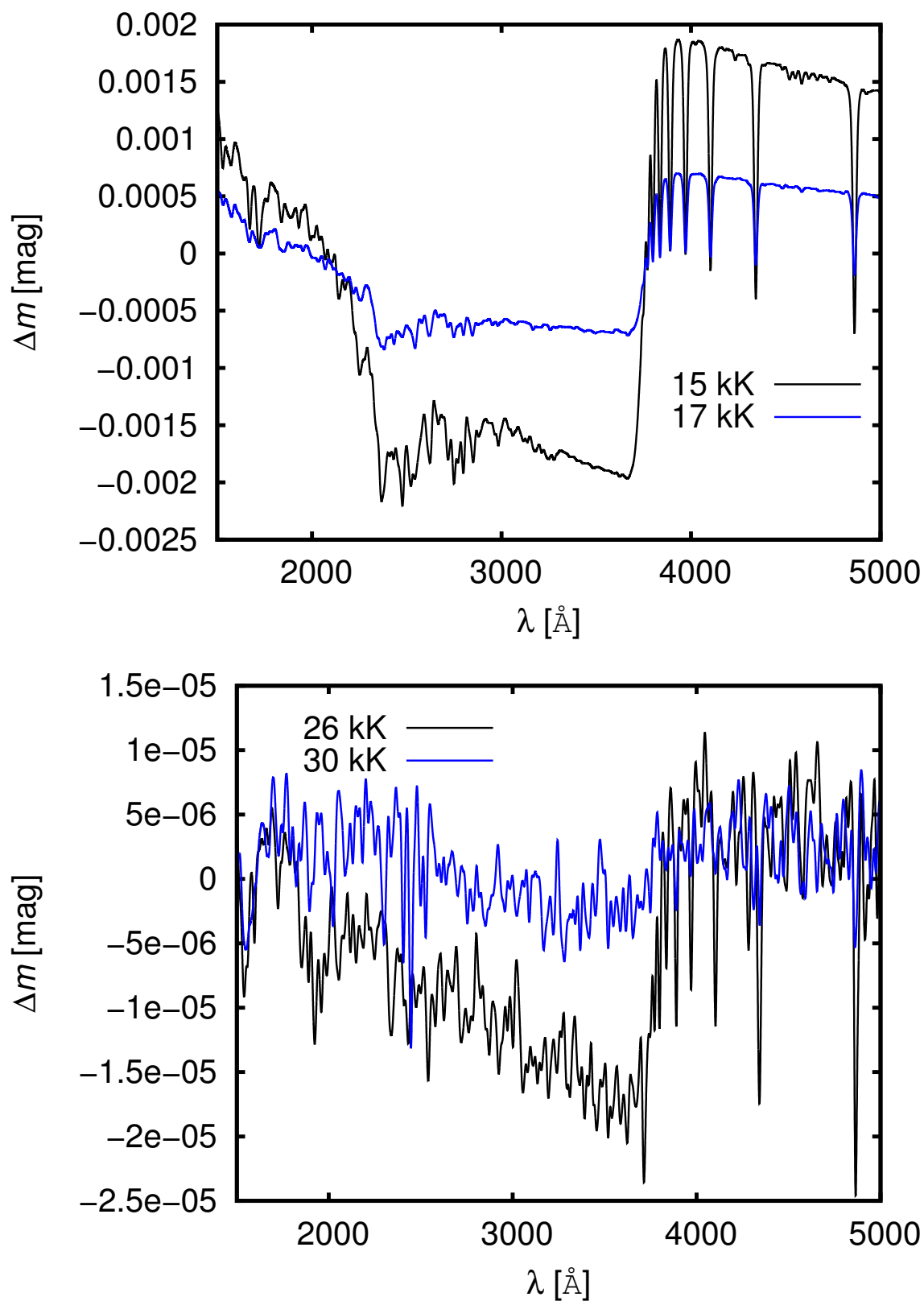
dochází k nárůstu, poté k poklesu. Nárůst souvisí se zvyšující populací ionizovaného helia na úkor helia neutrálního, pokles zase s další ionizací ionizovaného helia.

5.4.3

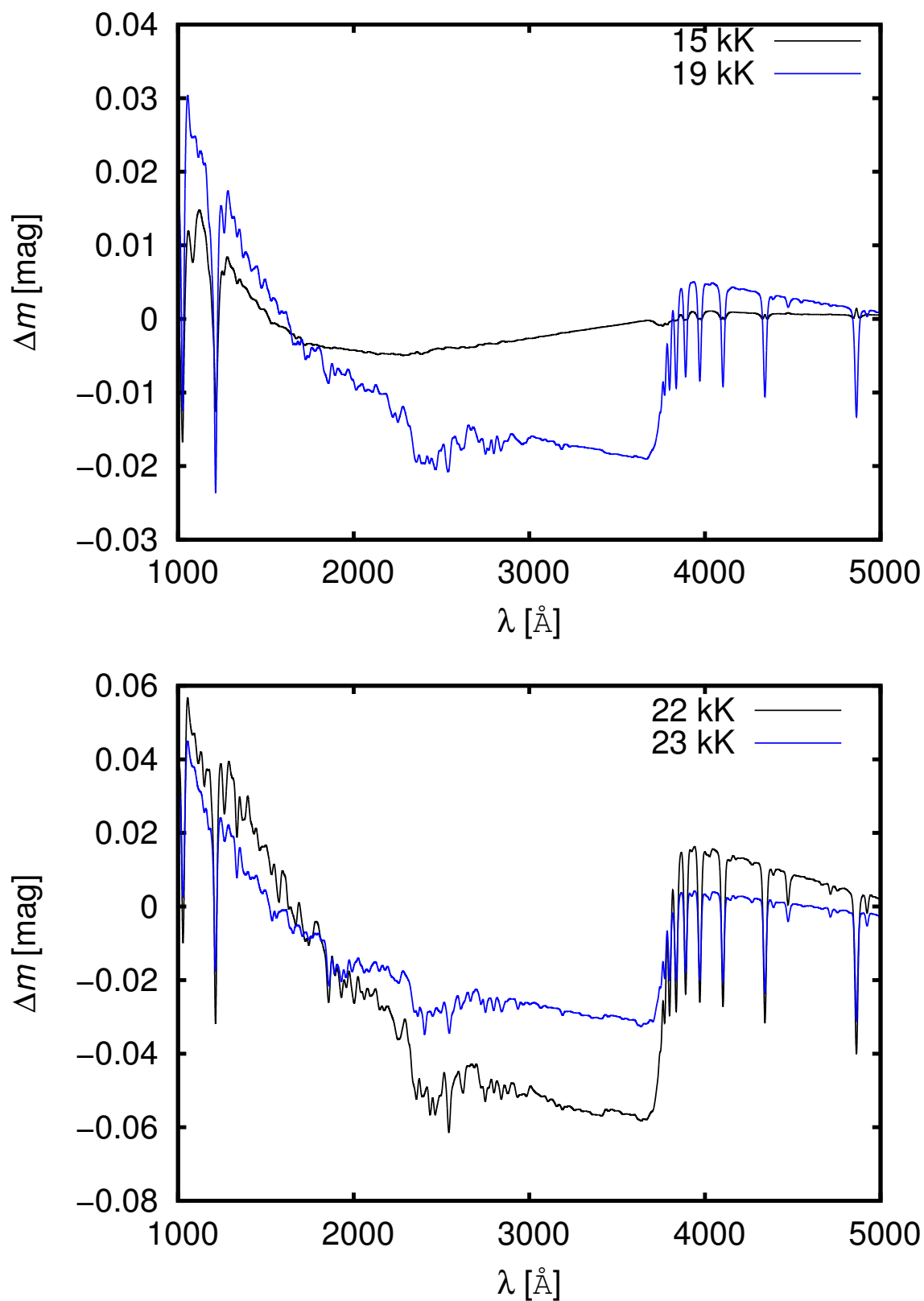
Rozptyl na jednou ionizovaném heliu pro hvězdy s nadbytkem helia

Výsledky pro tento případ jsou uvedeny na obrázku 5.7. Závislost velikosti rozdílů pro hvězdy s nadbytkem helia na efektivní teplotě je podobná jako v případě hvězd se slunečním chemickým složením, nicméně absolutní hodnota rozdílů hvězdných velikostí je o řád větší. Takové změny jsou již velmi dobře měřitelné. Na rozdíl od Rayleighova rozptylu na vodíku, viz obrázek 5.5, jsou v grafech 5.7 viditelné dva skoky. Druhý přísluší ionizační hraně jednou ionizovaného helia.

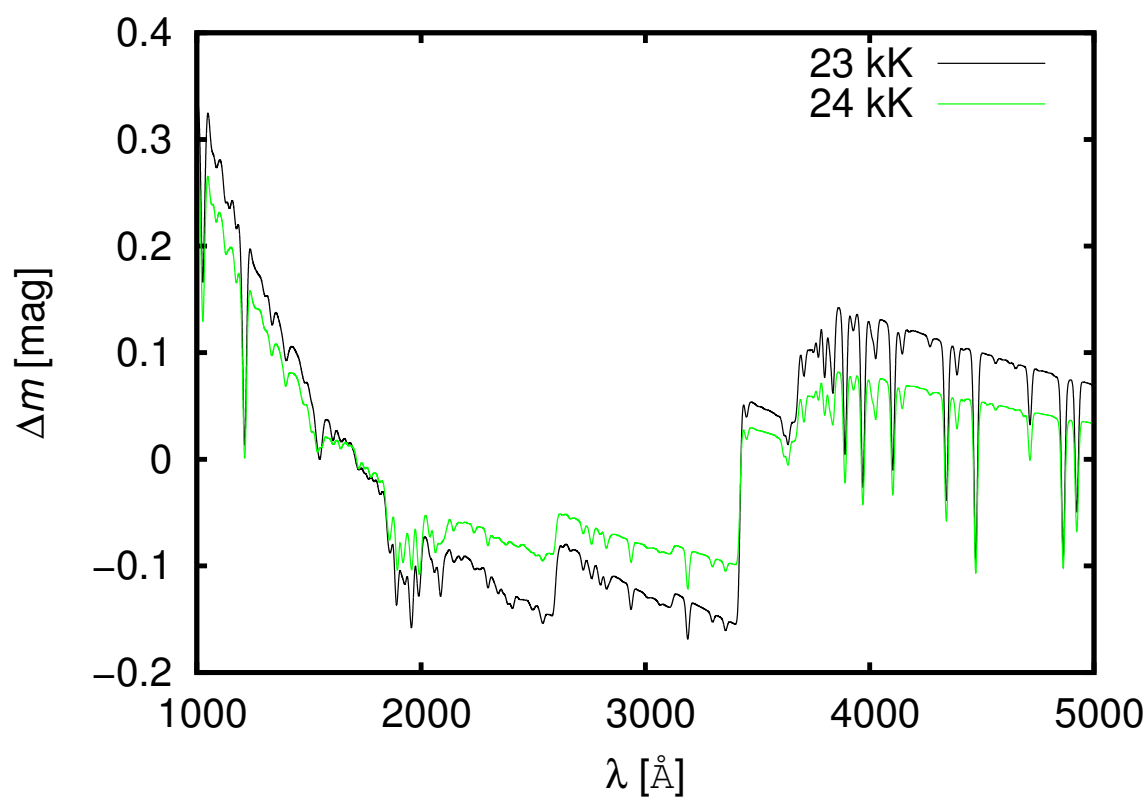
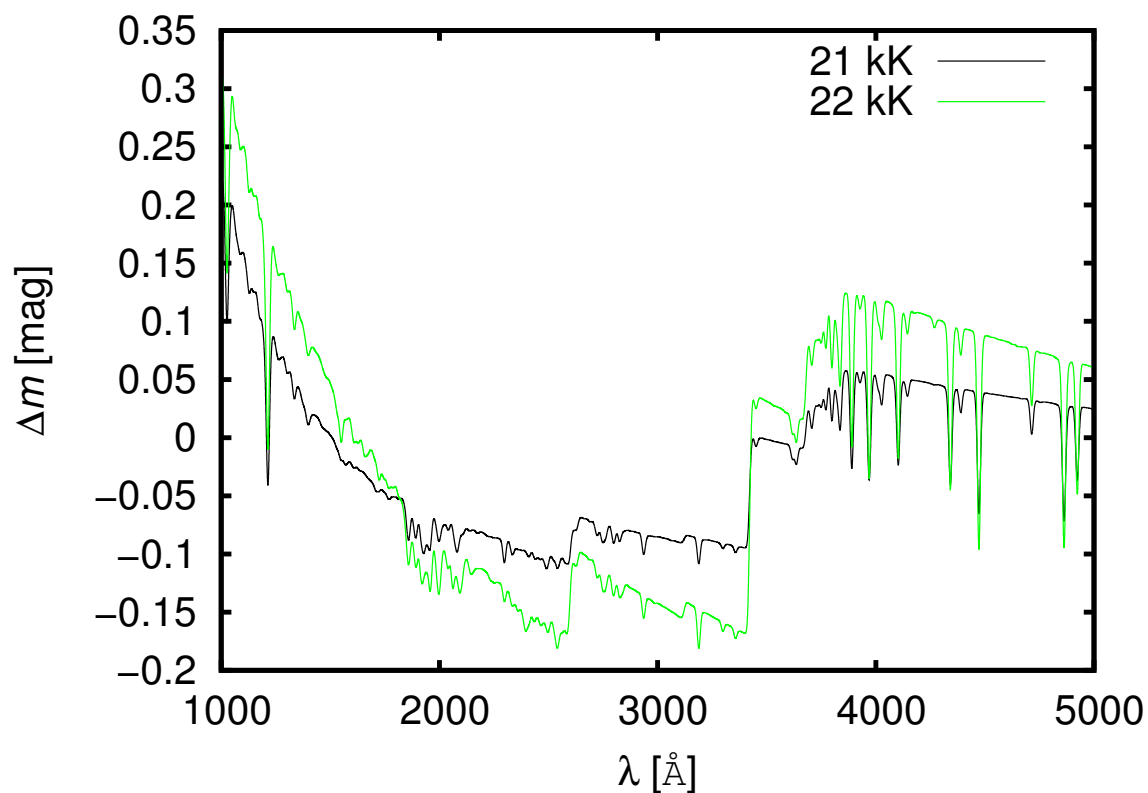
Výsledné rozdílů pro rozptyl na jednou ionizovaném heliu jsou jen modelové. U hvězd s nadbytkem helia vycházíme z předpokladu, že abundance vodíku je tak vysoká v celé ploše atmosféry. V první kapitole však bylo ukázáno, že se v atmosféře hvězdy vyskytují jen určité oblasti s tak velkými abundancemi helia. Naměřené spektrum tak nebude odpovídat ani modelu hvězdy se slunečním chemickým složením ani modelu hvězdy s nadbytkem helia. Pro srovnání s naměřenými daty je nejprve nutné znát rozložení helia v atmosféře a z toho spočítat syntetické spektrum, což je uvedeno v článku [9].



Obrázek 5.5: Rozdíl ve hvězdné velikosti mezi vystupujícím tokem záření se započítaným a bez započítaného Rayleighova rozptylu na neutrálním vodíku. Modely byly spočítány pro atmosféry se slunečním chemickým složením.



Obrázek 5.6: Rozdíl ve hvězdné velikosti mezi vystupujícím tokem záření se započítaným a bez započítaného Rayleighova rozptylu na jednou ionizovaném heliu. Modely byly spočítány pro atmosféry se slunečním chemickým složením.



Obrázek 5.7: Rozdíl ve hvězdné velikosti mezi vystupujícím tokem záření se započítaným a bez započítaného Rayleighova rozptylu na jedné ionizované heliu. Modely byly spočítány pro atmosféry s nadbytkem helia, $N(\text{He})/N(\text{H})=10$.

Závěr

V této diplomové práci se zabýváme vlivem Rayleighova rozptylu na jednou ionizovaném heliu na modely atmosfér hvězd spektrální třídy B se slunečním chemickým složením i hvězd s nadbytkem helia. Také byl prověřen vliv Rayleighova rozptylu na neutrálním vodíku.

Hvězdy spektrální třídy B jsou *horké hvězdy*. V atmosférách horkých hvězd dominuje přenos energie prostřednictvím záření. Bez konvekčního proudění je v horních vrstvách atmosfér těchto hvězd možné nahromadění helia (případně jiných prvků). Tato abnormální abundance látky je způsobena zářivou difuzí a hvězda je označena jako *chemicky pekuliární*. Koncentrace v povrchových vrstvách není rovnoměrná. Příklad abundanční mapy je na obrázku 1.2. Právě v oblastech s vysokým obsahem helia je Rayleighův rozptyl na jednou ionizovaném heliu nezanedbatelným zdrojem opacity. V kapitolách 3 a 4 byl spočítán účinný průřez na jednou ionizovaném heliu. Výpočet byl proveden na základě znalosti účinného průřezu pro vodík s využitím vlastností vlnových funkcí a energií příslušných stavů. Za účelem diskuze příspěvku atomů v excitovaných stavech byl proveden výpočet jejich účinného průřezu pro Rayleighův rozptyl. Účinný průřez pro jednou ionizované helium byl implementován do zdrojového kódu TLUSTY viz kapitola 5. V této kapitole dále byly diskutovány populace vodíku a helia a nakonec příslušné rozdíly ve spočítaném toku se započítaným a bez započítaného Rayleighova rozptylu.

Bylo spočítáno následujících pět sérií modelů atmosfér:

- sluneční chemické složení, bez rozptylu,
- sluneční chemické složení, s rozptylem na H I,
- sluneční chemické složení, s rozptylem na He II,
- nadbytek helia, bez rozptylu,
- nadbytek helia, s rozptylem na He II.

Spočítané rozdíly mezi vystupujícími toky jsou uvedeny v grafech 5.5, 5.6, 5.7 a dodatku A. Průběh spočítaných grafů je podobný. Lze jej rozdělit na tři oblasti. V první oblasti s kratšími vlnovými délkami je jasnější atmosféra bez započítaného Rayleighova rozptylu. Ten je pro tyto vlnové délky výrazným zdrojem opacity. V prostřední oblasti je naopak jasnější hvězda se započítaným Rayleighovým rozptylem. Zde se více uplatňuje absorpce v čarách a vázaně-volné procesy. Ve třetí, dlouhovlnné oblasti dominuje Rayleighův rozptyl, kromě několika vlnových délek odpovídajících přechodům v čarách.

Podle očekávání, Rayleighův rozptyl na neutrálním vodíku má na modely atmosfér zanedbatelný vliv. Rayleighův rozptyl na jednou ionizovaném heliu je v případě hvězd se slunečním složením již na hranici měřitelnosti a v případě hvězd s nadbytkem helia má Rayleighův rozptyl na modely atmosfér výrazný vliv. Helium je v atmosférách těchto hvězd koncentrováno nerovnoměrně, pro přímé srovnání s naměřenými daty by bylo nutné zohlednit jeho povrchové rozložení.

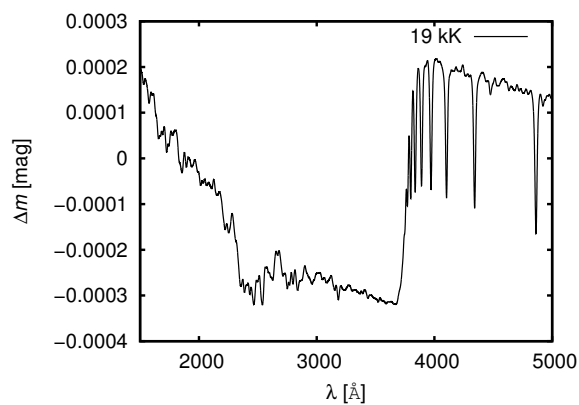
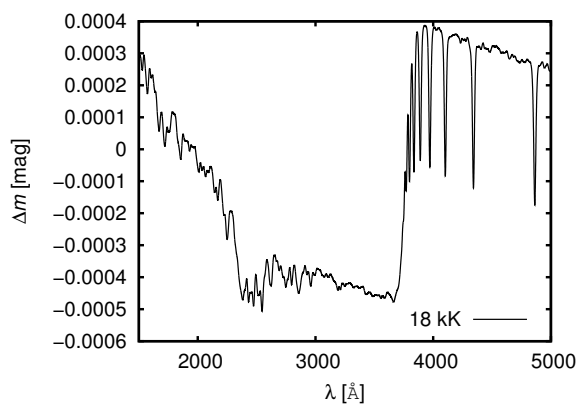
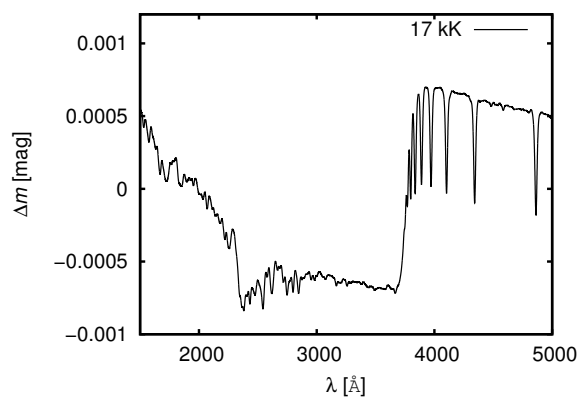
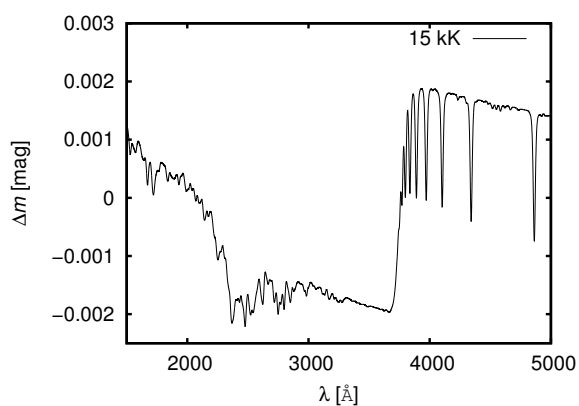
PŘÍLOHA A

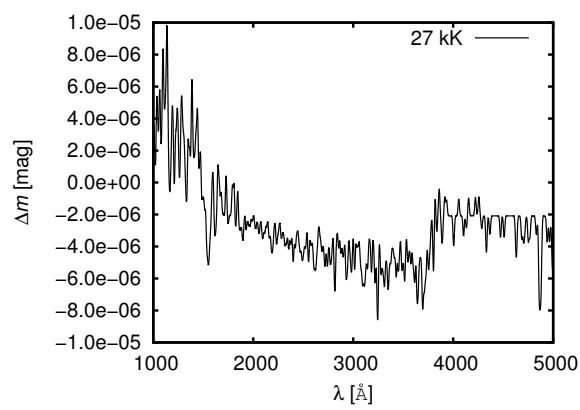
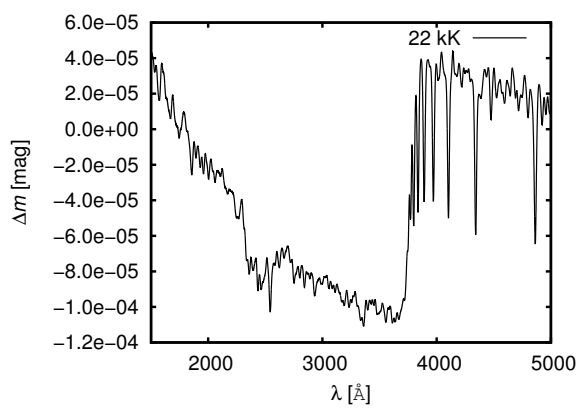
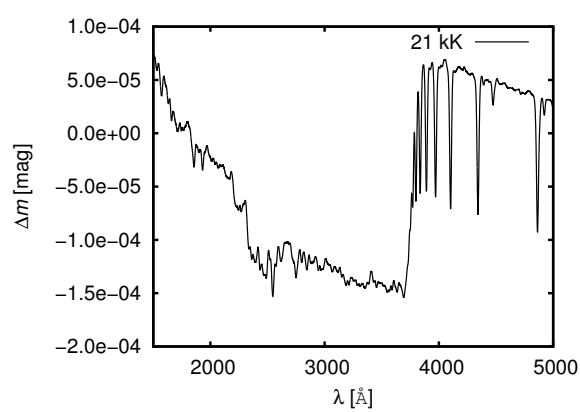
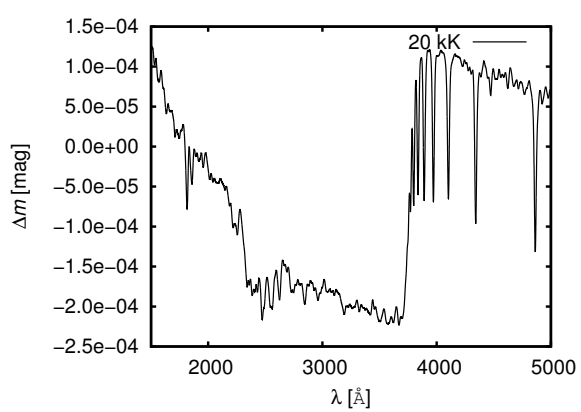
Výsledné grafy

V tomto dodatku uvedeme spočítané grafy rozdílů ve vystupujících tocích podle (5.1) pro různé efektivní teploty.

A.1

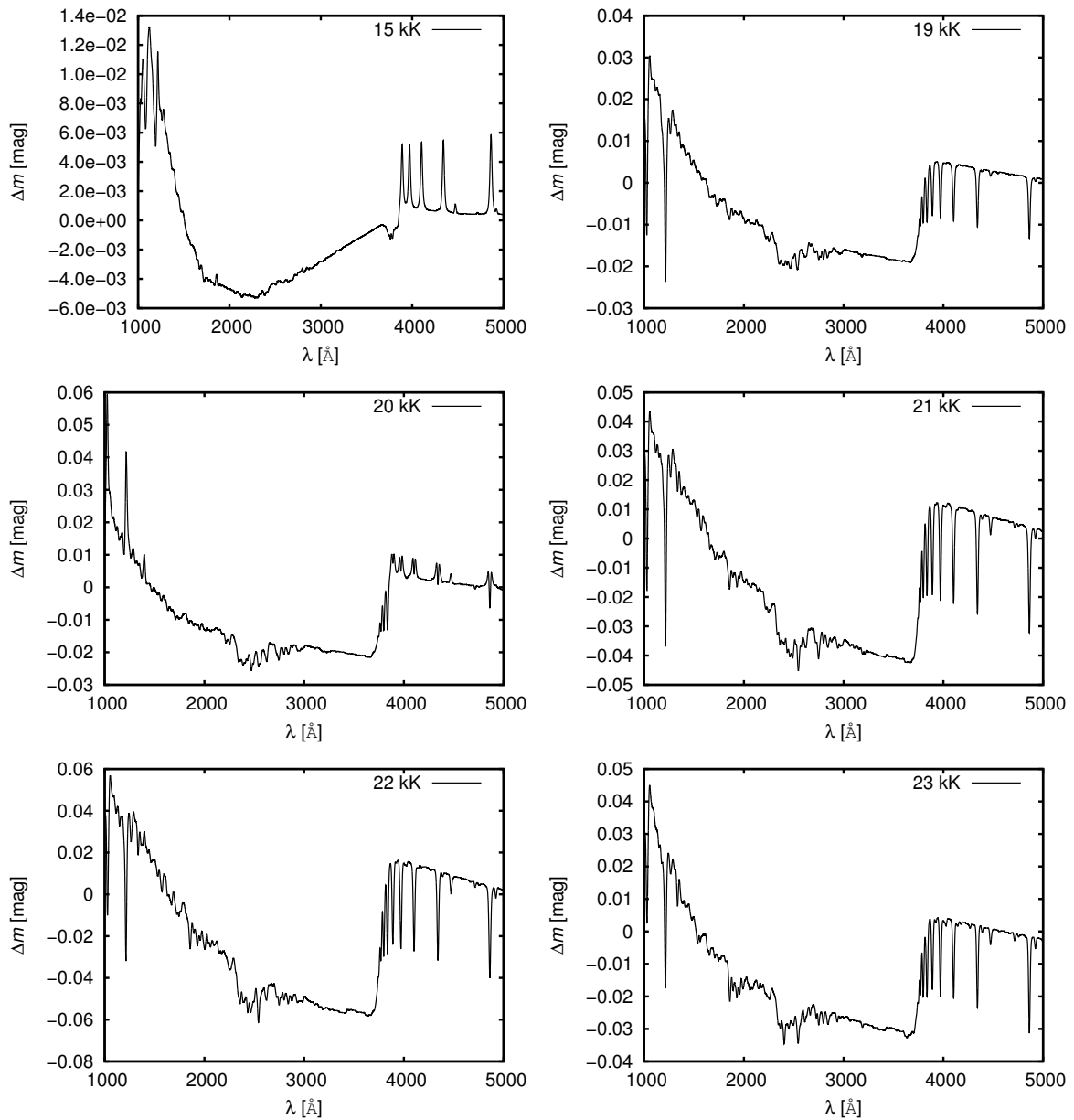
Rozptyl na vodíku pro hvězdy se slunečním složením





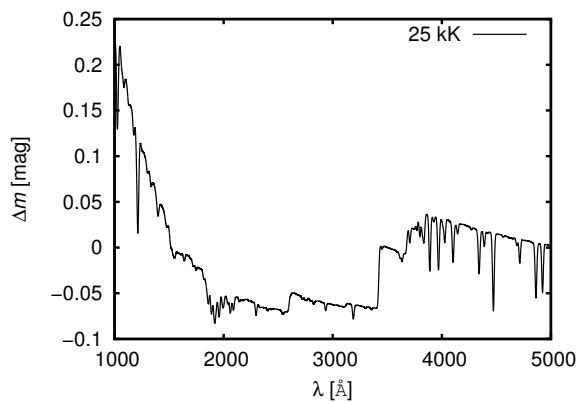
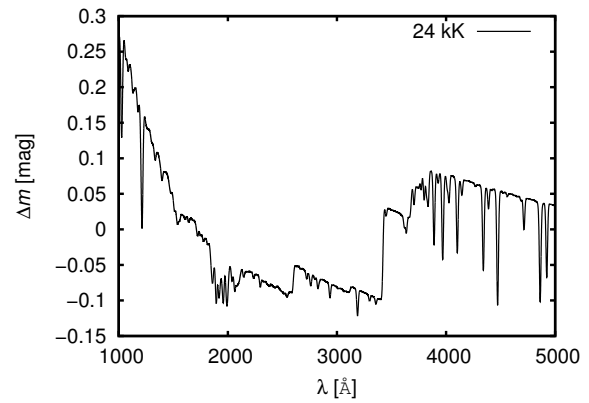
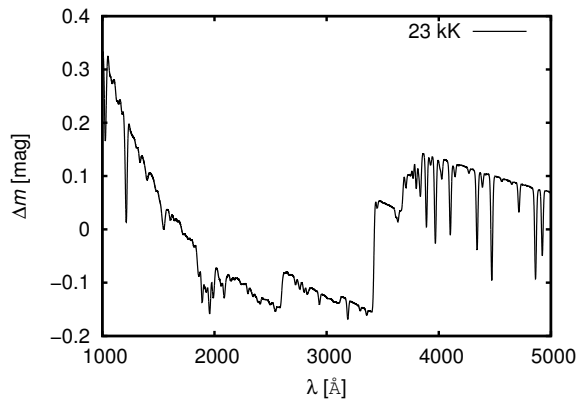
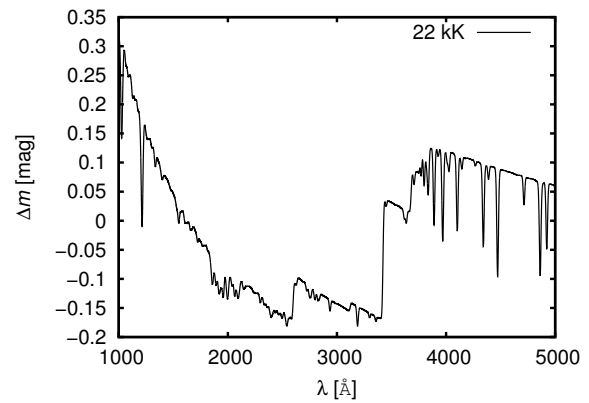
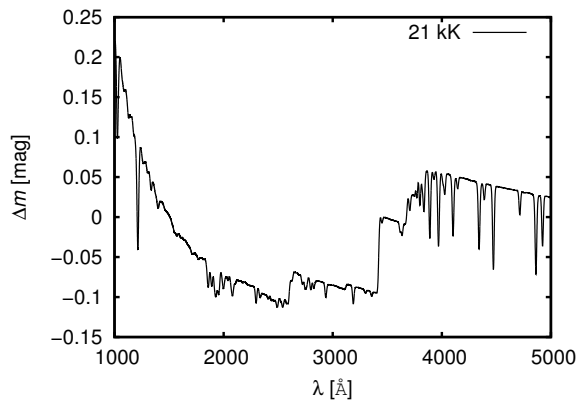
A.2

Rozptyl na heliu pro hvězdy se slunečním složením



A.3

Rozptyl na heliu pro hvězdy s nadbytkem helia



PŘÍLOHA B

Časově závislá poruchová teorie

Tato část práce je věnována odvození vzorce (3.9), ze kterého vycházíme při odvození Krammersovy-Heisenbergovy formule. Postup je převzat z knih [25] a [1]. Časový vývoj stavového vektoru $|\psi(t)\rangle$ systému dostaneme řešením Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle, \quad (\text{B.1})$$

ve které hamiltonián \mathcal{H} je roven $\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}$. Složka $\hat{\mathcal{H}}_0$ je časově nezávislá neporušená část a $\hat{\mathcal{V}}$ je obecně časově závislá porucha. Definujeme operátor časového vývoje $\hat{U}(t, t_0)$ tak, že

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (\text{B.2})$$

Rovnice (B.1) a (B.2) jsou v tzv. Schrödingerově reprezentaci. Pro studium vlivu poruch závislých na čase je mnohem výhodnější počítat v *interakční reprezentaci*. Stavový vektor v interakční reprezentaci $|\psi(t)\rangle_I$ je definovaný takto:

$$|\psi(t)\rangle_I = \exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) |\psi(t)\rangle. \quad (\text{B.3})$$

Pro derivaci podle času dostaneme

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I &= -\hat{\mathcal{H}}_0 \exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) |\psi(t)\rangle + \exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) \left(i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle\right) = \\ &= -\hat{\mathcal{H}}_0 |\psi(t)\rangle_I + \exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) \underbrace{\left(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}\right)}_{\hat{\mathcal{H}}} |\psi(t)\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Definujeme operátor $\hat{\mathcal{V}}$ v interakční reprezentaci $\hat{\mathcal{V}}_I$:

$$\hat{\mathcal{V}}_I = \exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) \hat{\mathcal{V}} \exp\left(-\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right).$$

Člen obsahující $\hat{\mathcal{V}}$ v rovnici (B.4) ještě upravíme

$$\exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) \hat{\mathcal{V}} = \left[\exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) \hat{\mathcal{V}} \exp\left(-\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) \right] \exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) = \hat{\mathcal{V}}_I \exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right).$$

Rovnici (B.4) můžeme přepsat takto:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = \underbrace{-\hat{\mathcal{H}}_0 |\psi(t)\rangle_I + \hat{\mathcal{H}}_0 \exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) |\psi(t)\rangle}_{0} + \hat{\mathcal{V}}_I \exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{V}}_I |\psi(t)\rangle_I. \quad (\text{B.5})$$

Schrödingerova rovnice má tedy v interakční reprezentaci tvar

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = \hat{\mathcal{V}}_I(t) |\psi(t)\rangle_I. \quad (\text{B.6})$$

Časový vývoj stavového vektoru $|\psi(t)\rangle_I$ v interakční reprezentaci můžeme vyjádřit pomocí evolučního operátoru:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_I &= \exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) |\psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) \hat{U}(t, t_i) |\psi(t_i)\rangle = \\ &= \exp\left(\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) \hat{U}(t, t_i) \exp\left(-\frac{it}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0\right) |\psi(t_i)\rangle_I = \hat{U}_I(t, t_i) |\psi(t_i)\rangle_I, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

kde $\hat{U}_I(t, t_i)$ je operátor časové evoluce v interakční reprezentaci. Dosadíme do levé strany rovnice (B.6) a dostaneme

$$i\hbar \frac{d}{dt} (\hat{U}_I(t, t_i) |\psi(t_i)\rangle_I) = i\hbar \frac{d\hat{U}_I(t, t_i)}{dt} |\psi(t_i)\rangle_I + i\hbar \hat{U}_I(t, t_i) \frac{d}{dt} |\psi(t_i)\rangle_I = i\hbar \frac{d\hat{U}_I(t, t_i)}{dt} |\psi(t_i)\rangle_I.$$

Celou rovnici (B.6) potom můžeme napsat ve tvaru

$$i\hbar \frac{d\hat{U}_I(t, t_i)}{dt} |\psi(t_i)\rangle_I = \hat{\mathcal{V}}_I(t) \hat{U}_I(t, t_i) |\psi(t_i)\rangle_I.$$

Musí platit pro libovolný stav $|\psi(t_i)\rangle_I$, proto

$$i\hbar \frac{d\hat{U}_I(t, t_i)}{dt} = \hat{\mathcal{V}}_I(t) \hat{U}_I(t, t_i). \quad (\text{B.8})$$

Při řešení rovnice (B.1) v časově závislé poruchové teorii předpokládáme znalost vlastních hodnot a stavů neporušené části Hamiltoniánu $\hat{\mathcal{H}}_0$. Hlavní otázka, na kterou se časově závislá poruchová teorie snaží odpovědět je: Jaká je pravděpodobnost přechodu systému ze stavu $|\psi_i\rangle$ do stavu $|\psi_f\rangle$ při působení poruchy $\hat{\mathcal{V}}$? Hlavní výhodou řešení tohoto problému v interakční reprezentaci je fakt, že Schrödingerova rovnice je vyjádřena ve tvaru (B.6), kdy explicitně vystupuje jen $\hat{\mathcal{V}}$. V dalších krocích budeme řešit rovnici (B.8). Tuto rovnici integrujeme podle času v mezích od t_i do t

$$\hat{U}_I(t, t_i) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t dt' \hat{\mathcal{V}}_I(t') \hat{U}_I(t', t_i), \quad (\text{B.9})$$

protože $\hat{U}_I(t_i, t_i) = \hat{1}$. Časově závislá poruchová teorie pracuje s přibližnými řešeními této integrální rovnice. Předpokládáme, že $\hat{\mathcal{V}}$ je malé a rovnici řešíme iterativně. Nejprve položíme na pravé straně ($\hat{U}_I(t', t_i) = \hat{1}$). Dostaneme

$$\hat{U}^{(1)}(t, t_i) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t dt' \hat{\mathcal{V}}_I(t').$$

Po dosazení do integrálního vyjádření (B.9) dostaneme aproximaci druhého řádu

$$\begin{aligned} \hat{U}^{(2)}(t, t_i) &= \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t dt' \hat{\mathcal{V}}_I(t') \left(\hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t'} dt'' \hat{\mathcal{V}}_I(t'') \right) = \\ &= \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t dt' \hat{\mathcal{V}}_I(t') + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_i}^t dt' \hat{\mathcal{V}}_I(t') \int_{t_i}^{t'} dt'' \hat{\mathcal{V}}_I(t''). \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Pro nalezení aproximace třetího řádu opět dosadíme do integrální rovnice, atp. Obecné vyjádření řešení je ve tvaru

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_i) = & \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t dt_1 \mathcal{V}_I(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_i}^t dt_1 \mathcal{V}_I(t_1) \int_{t_i}^{t_1} dt_2 \mathcal{V}_I(t_2) + \dots \\ & + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_i}^t dt_1 \mathcal{V}_I(t_1) \int_{t_i}^{t_1} dt_2 \mathcal{V}_I(t_2) \int_{t_i}^{t_2} dt_3 \mathcal{V}_I(t_3) \dots \int_{t_i}^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{V}_I(t_n) + \dots, \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

což se nazývá *Dysonův rozvoj*.

Nyní můžeme odhadnout pravděpodobnost přechodu P_{fi} mezi stavy

$$P_{fi} = |\langle f, t | i, t_i \rangle|^2 = |\langle f | \hat{U}(t, t_i) | i \rangle|^2 \approx |\langle f | \hat{U}^{(2)}(t, t_i) | i \rangle|^2.$$

Výraz $\langle f | \hat{U}^{(2)}(t, t_i) | i \rangle$ upravíme. První člen je triviální, $\langle f | i \rangle$. Druhý člen už je nutné upravit

$$-\frac{i}{\hbar} \langle f | \int_{t_i}^t dt' \mathcal{V}_I(t') | i \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t dt' \exp\left(\frac{it'}{\hbar}(E_f - E_i)\right) \langle f | \mathcal{V}(t') | i \rangle. \quad (\text{B.12})$$

Rozdíl mezi energií počátečního a konečného stavu $E_f - E_i$ budeme značit symbolem ε_{fi} . Nakonec vyjádříme třetí člen

$$\begin{aligned} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \langle f | \int_{t_i}^t dt' \mathcal{V}_I(t') \int_{t_i}^{t'} dt'' \mathcal{V}_I(t'') | i \rangle = & \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \langle f | \int_{t_i}^t dt' \mathcal{V}_I(t') \sum_n |n\rangle \langle n| \int_{t_i}^{t'} dt'' \mathcal{V}_I(t'') | i \rangle = \\ & \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_n \int_{t_i}^t dt' \exp\left(\frac{it'}{\hbar}\varepsilon_{fn}\right) \langle f | \mathcal{V}(t') | n \rangle \int_{t_i}^{t'} dt'' \exp\left(\frac{it''}{\hbar}\varepsilon_{ni}\right) \langle n | \mathcal{V}(t'') | i \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

kde jsme využili faktu, že vlastní stavy tvoří bázi, tj. $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$. Dále budeme předpokládat, že operátor \mathcal{V} nezávisí na čase, klademe $t_i \rightarrow \infty$ a $t \rightarrow \infty$ a pro zajištění konvergence integrálu přidáme k operátoru \mathcal{V} exponenciální faktor $\exp(-\eta|t|)$, kde $\eta \in \mathbb{R}_+$ je infinitesimalní a v závěrečné části výpočtu položíme $\eta = 0$. Využijeme vlastnost δ funkce podle [1]

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (x \mp i\varepsilon)^{-1} = i\pi\delta(x) \pm \mathcal{P} \frac{1}{x},$$

kde \mathcal{P} je hlavní hodnota integrálu. Přepíšeme výraz na pravé straně B.12 a dostaneme:

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \langle f | \mathcal{V} | i \rangle \exp\left(\frac{it'}{\hbar}(E_f - E_i) - \eta|t'|\right) = \\ -\frac{i}{\hbar} \langle f | \mathcal{V} | i \rangle \left[\int_{-\infty}^0 dt' \exp\left(\frac{it'}{\hbar}(E_f - E_i) + \eta t'\right) + \int_0^{\infty} dt' \exp\left(\frac{it'}{\hbar}(E_f - E_i) - \eta t'\right) \right] = \\ -\langle f | \mathcal{V} | i \rangle \left[\frac{1}{E_f - E_i + i\delta\hbar} + \frac{1}{E_f - E_i - i\delta\hbar} \right] \stackrel{\eta \rightarrow 0}{=} \\ -\langle f | \mathcal{V} | i \rangle \left[\pi\delta(E_f - E_i) - \mathcal{P} \frac{1}{E_f - E_i} + \pi\delta(E_f - E_i) + \mathcal{P} \frac{1}{E_f - E_i} \right] = \\ -2\pi i\delta(E_f - E_i) \langle f | \mathcal{V} | i \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Člen druhého řádu upravíme podobně:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_n \langle f | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle \langle n | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp\left(\frac{it'}{\hbar} \varepsilon_{fn} - \frac{\eta}{\hbar} |t'| \right) \int_{-\infty}^{t'} dt'' \exp\left[\frac{it''}{\hbar} (E_n - E_i) - \frac{\eta}{\hbar} |t''| \right] = \\ & \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_n \frac{\langle f | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle \langle n | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle}{E_n - E_i - i\eta} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp\left[\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) - \frac{\eta}{\hbar} |t'| \right] \stackrel{\eta \rightarrow 0}{=} \\ & -2\pi i \delta(E_f - E_i) \sum_n \frac{\langle f | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle \langle n | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle}{E_n - E_i}. \quad (\text{B.15}) \end{aligned}$$

S uvážením členů prvního a druhého řádu dostaneme nakonec pro pravděpodobnost přechodu výraz

$$\begin{aligned} \left| \langle f | \hat{U}^{(2)}(t_i, t) | i \rangle \right|^2 &= \left| -2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle f | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle + -2\pi i \delta(E_f - E_i) \sum_n \frac{\langle f | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle \langle n | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle}{E_n - E_i} \right|^2 = \\ & 4\pi^2 \left| \langle f | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle + \sum_n \frac{\langle f | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle \langle n | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle}{E_n - E_i} \right|^2 [\delta(E_f - E_i)]^2. \quad (\text{B.16}) \end{aligned}$$

Čtverec delta funkce upravíme na tvar podle [1]

$$[\delta(E_f - E_i)]^2 = \frac{\delta(E_f - E_i)}{2\pi\hbar} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T}^T dt \exp\left[\frac{it}{\hbar} (E_f - E_i)\right] = \frac{\delta(E_f - E_i)}{2\pi\hbar} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T}^T dt,$$

pravděpodobnost přechodu za jednotku času potom můžeme napsat ve tvaru

$$P_{if} = \frac{\left| \langle f | \hat{U}^{(2)}(t_i, t) | i \rangle \right|^2}{\lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T}^T dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle + \sum_n \frac{\langle f | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle \langle n | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle}{E_n - E_i} \right|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (\text{B.17})$$

PŘÍLOHA C

Numerický model TLUSTY

C.1

Základní schéma vstupu

Pro výpočet modelu atmosféry je nutné specifikovat *efektivní teplotu* T_{eff} , logaritmus gravitačního zrychlení na povrchu hvězdy $\log(g)$, chemické složení atmosféry a samotný model (LTE, NLTE). Všechny tyto veličiny jsou specifikovány ve vstupním souboru 5, jehož struktura je následující:

```
19000. 4.0
T T          ! LTE, LTGRAY
'nst'        ! name of file containing non-standard flags
*
*-----
* frequencies
*
2000
*
*-----
* data for atoms
*
30           ! NATOMS
* mode abn modpf
   2  0.    0      ! H
   2 10.    0      ! He
*
*-----
* data for ions
*
*iat  iz   nlevs  ilast  ilvlin  nonstd  typion  filei
*
   1   0    9     0     0     0    ' H 1'  'data/h1.dat'
   1   1    1     1     0     0    ' H 2'  ' '
   2   0   24     0     0     0    'He 1'  'data/he1.dat'
   2   1   20     0     0     0    'He 2'  'data/he2.dat'
   2   2    1     1     0     0    'He 3'  ' '

```

*
* end

Tento soubor je pro šedý model atmosféry složené jen z vodíku a helia. Abundance helia je desetkrát větší než abundance vodíku (CP hvězda). Soubor je rozdělen na čtyři bloky, které nyní popíšeme:

1. Základní parametry pro výpočet modelu

- první řádek
 - TEFF – efektivní teplota hvězdy
 - GRAV – logaritmus gravitačního zrychlení na povrchu hvězdy (cm.s^{-2})
- druhý řádek
 - LTE =.TRUE. je počítán LTE model, =.FALSE. je počítán NLTE model
 - LTGRAY =.TRUE. je počítán LTGRAY model jako počáteční model, =.FALSE. není počítán LTGRAY model a je nutné dodat vstupní model pro výpočet atmosféry
- třetí řádek
 - FINSTD – definice souboru s volitelnými parametry

2. Frekvence

- NFREAD – při automatickém výpočtu frekvenčních bodů a jejich vah

3. Započítané atomy

- NATOMS – největší atomové číslo prvku, který je započítáván do modelu
- MODE – způsob započítání vlivu daného prvku na opacitu, 0: prvek se nezapočítává, 1: vliv na opacitu žádný, započítává se jen vliv na celkový počet částic 2: započítává se i vliv na opacitu
- ABN – abundance daného prvku, 0: stejné jako ve Slunci, $n>0$: v atmosféře je obsah daného prvku n -krát větší než je obsah vodíku

4. Započítané ionty

- IATI – atomové číslo pro daný iont
- IZII – náboj daného iontu (0 pro neutrální, 1 pro jednou ionizované, apod.)
- NLEVS – počet energetických hladin uvažovaných explicitně
- ILAST – indikátor, zda je daný iont dosáhl nejvyššího započítaného stupně ionizace
- ILVLIN – indikátor řešení celé skupiny vázaně-vázaných přechodů
- NONSTD – parametr popisující data pro daný iont
- TYPION – stručný popis daného iontu
- FILEI – popisuje cestu k souboru s atomovými daty příslušejícími danému iontu

Na stranách 18 – 21 [5] je uveden příklad vstupního souboru pro hvězdu spektrální třídy O s uvažovaným vlivem čar.

V souboru „nst“ jsou uloženy volitelné parametry týkající se numerických výpočtů. Zde je příklad obsahu tohoto souboru:

```

NLAMBD=3, ITEK=15, XGRAD=0.,
NITER=100, ND=50, VTB=2.,
ISPODF=1, STRLX=1.D-10, DDNU=0.75,
ICOLHN=1, ITLAS=0,
IOPADD=1, IRSCT=1,
POPZER=1.D-30, POPZR2=1.D-30
IACC=15, TAUDIV=5,

```

Výčet a popis všech parametrů je uveden na stranách 21 – 44 v [5]. Zde uvedeme jen některé:

- VTB – rychlost mikroturbulentního rozšíření
- TAUFIR – (LTGRAY) Rosselandova optická hloubka v prvním hloubkovém bodě
- TAULAS – (LTGRAY) Rosselandova optická hloubka v posledním hloubkovém bodě
- NITER – maximální počet linearizačních iterací
- ISPLIN – způsob numerické reprezentace RTE
- NDRE – způsob řešení rovnice zářivé rovnováhy (diferenciální/integrální tvar)
- TAUDIV – podobná funkce jako parametr NDRE
- IOPADD – započítání dodatečných opacit
- IRSCT – počítání s Rayleighovým rozptylem
- ITEK – počet iterací, po kterých se má spustit Kantorovichovo urychlení konvergence

Vstupní model atmosféry se nachází v souboru 8, jehož prvních několik řádek vypadá následovně:

```

50 1130
*-----*
3.258000D-07 5.139000D-07 8.106000D-07 1.279000D-06 2.017000D-06 3.180000D-06
5.013000D-06 7.899000D-06 1.244000D-05 1.958000D-05 3.078000D-05 4.832000D-05
7.576000D-05 1.186000D-04 1.854000D-04 2.893000D-04 4.509000D-04 7.014000D-04
1.088000D-03 1.681000D-03 2.584000D-03 3.940000D-03 5.949000D-03 8.880000D-03
1.309000D-02 1.904000D-02 2.735000D-02 3.882000D-02 5.454000D-02 7.600000D-02
1.053000D-01 1.456000D-01 2.016000D-01 2.806000D-01 3.936000D-01 5.576000D-01
7.977000D-01 1.150000D+00 1.663000D+00 2.399000D+00 3.422000D+00 4.810000D+00
6.887000D+00 1.065000D+01 1.753000D+01 2.977000D+01 5.084000D+01 8.601000D+01
1.427000D+02 1.432000D+02
*-----*
1.270441D+04 8.313084D+08 1.798399D-15 4.087330D+01 2.648232D-03
1.542400D-03 2.132693D-03 3.195534D-03 4.567351D-03 6.257252D-03
8.584743D-03 2.927125D+01 7.545400D+08 6.688084D+03 5.735294D-04
...

```

Na prvním řádku je uveden počet hloubkových bodů a celkový počet uvažovaných parametrů a energiových hladin. Následuje explicitní výčet hloubkových hladin, po kterých, pro každou hloubkovou hladinu, je uvedena teplota, hustota elektronů a celková hustota částic. Největší část zabírá výčet populací jednotlivých atomů a iontů v základních a excitovaných stavech. Pořadí a parametry jednotlivých energiových hladin jsou uvedeny v souboru 6.

C.2

Základní schéma výstupu

Prvním souborem výstupu je logovací soubor (6), do kterého se zapisují parametry příslušného modelu, uvažované složení atmosféry a uvážená atomová data. Při neúspěšném výpočtu se sem zapisují chybové zprávy. Nejprve jsou vypsané explicitně započítané ionty. Následuje výčet explicitně uvažovaných energetických hladin:

EXPLICIT ENERGY LEVELS INCLUDED

NO.	LEVEL	ION	ION.EN. (ERG)	G	NQ	IEL	ILK	IAT	IMOD	ILT	IIE	IIF
1	(N=1)	H 1	2.1785304D-11	2.00	1	1	0	1	5	0	1	1
2	(N=2)	H 1	5.4463260D-12	8.00	2	1	0	1	5	0	0	0
3	(N=3)	H 1	2.4205893D-12	18.00	3	1	0	1	5	0	0	0
4	(N=4)	H 1	1.3615815D-12	32.00	4	1	0	1	5	0	0	0
5	(N=5)	H 1	8.7141216D-13	50.00	5	1	0	1	5	0	0	0
6	(N=6)	H 1	6.0514734D-13	72.00	6	1	0	1	5	0	0	0
7	(N=7)	H 1	4.4459804D-13	98.00	7	1	0	1	5	0	0	0
8	(N=8)	H 1	3.4039538D-13	128.00	8	1	0	1	5	0	0	0
9	(N=9)	H 1	0.0000000D+00	162.00	9	1	0	1	5	0	0	0
10	H 2	H 1	0.0000000D+00	1.00	1	1	1	1	5	0	2	2
...												

Zde jsou uvedeny energetické hladiny až po He II. Důležitý je parametr NO, který udává číslo energetické hladiny. Právě v tomto pořadí jsou zapisovány populace do souboru 7 a 8. Tak například ve výše uvedeném prvním případě je v prvním hloubkovém bodě, jehož Rosselandova optická hloubka je 3.258000D-07 popořadě teplota, hustota elektronů, celková hustota, populace H I v základním stavu, populace prvního excitovaného stavu H I, atd. Následuje explicitní výčet frekvenčních bodů a jejich vah a nejdelší sloupec náleží parametrům přechodu mezi energetickými hladinami.

TRANSITION PARAMETERS (TOTAL OF 20476)

ITR	ILOW	IUP	INDEXP	ICOL	IFRO	IFR1	OSC	FR0	LAMBDA
1	1	10	5	0	1	239111	7.919D-19	3.288D+15	911.764
2	2	10	5	0	1	472366	1.584D-18	8.220D+14	3647.055
3	3	10	5	0	1	539190	2.376D-18	3.653D+14	8205.874
4	4	10	1	0	1	538856	3.168D-18	2.055D+14	14588.221
5	5	10	1	0	1	542389	3.959D-18	1.315D+14	22794.095
6	6	10	1	0	1	544041	4.751D-18	9.133D+13	32823.497
7	7	10	1	0	1	545128	5.543D-18	6.710D+13	44676.427
8	8	10	1	0	1	545818	6.335D-18	5.138D+13	58352.884
9	9	10	1	0	0	0	6.335D-18	0.000D+00	0.000
...									

Poslední blok dat přísluší samotnému modelu atmosféry:

1 ID	MASS	TAUROSS	TEMP	NE	DENS	P	...
1	3.198D-05	5.292D-06	8958.1	1.092D+11	2.617D-13	2.838D-01	
2	4.577D-05	9.953D-06	9037.8	1.591D+11	3.817D-13	4.175D-01	
3	6.538D-05	1.687D-05	9146.5	2.287D+11	5.488D-13	6.074D-01	
4	9.313D-05	2.718D-05	9273.0	3.253D+11	7.810D-13	8.761D-01	
5	1.323D-04	4.257D-05	9411.5	4.590D+11	1.102D-12	1.255D+00	
6	1.870D-04	6.559D-05	9558.4	6.431D+11	1.545D-12	1.786D+00	
7	2.631D-04	1.000D-04	9710.1	8.944D+11	2.149D-12	2.523D+00	
8	3.678D-04	1.514D-04	9863.6	1.234D+12	2.966D-12	3.538D+00	
9	5.101D-04	2.280D-04	10017.1	1.689D+12	4.060D-12	4.918D+00	
...							
...	LOG G(RAD)	EXP.FLUX	ALI FLUX	TOT.FLUX			
	2.983D+00	5.651D+05	2.287D+11	2.28750D+11			
	2.124D+00	2.430D+05	2.287D+11	2.28728D+11			
	2.160D+00	2.355D+05	2.287D+11	2.28728D+11			
	2.176D+00	2.225D+05	2.287D+11	2.28728D+11			
	2.182D+00	2.030D+05	2.287D+11	2.28728D+11			
	2.181D+00	1.769D+05	2.287D+11	2.28728D+11			
	2.178D+00	1.456D+05	2.287D+11	2.28728D+11			
	2.176D+00	1.102D+05	2.287D+11	2.28728D+11			
	2.176D+00	7.247D+04	2.287D+11	2.28728D+11			
...							

Pro každý hloubkový bod ID jsou zde uvedeny informace o hloubkovém bodě a spočítané fyzikální parametry. Zapisují se sem informace o teplotě, počtu částic, hustotě částic, tlaku, logaritmu zářivého zrychlení a tři druhy spočítaných toků. Nakonec je uvedena fyzikální struktura atmosféry pro příslušné hloubkové body.

Do souboru 9 se zapisují informace o konvergenci vektoru Ψ

RELATIVE CHANGES OF VECTOR PSI

ITER	ID	TEMP	NE	POP	RAD	MAXIMUM	ilev	ifr
1	50	1.01D-02	-1.38D-02	-4.28D-01	1.01D-01	-4.28D-01	37	1
1	49	1.38D-02	-1.82D-02	-5.80D-01	1.37D-01	-5.80D-01	37	1
1	48	1.22D-02	-1.62D-02	-5.04D-01	1.35D-01	-5.04D-01	37	1
1	47	1.15D-02	-1.49D-02	5.57D-01	1.43D-01	5.57D-01	22	1
1	46	1.29D-02	-1.53D-02	7.53D-01	1.82D-01	7.53D-01	22	1
1	45	1.38D-02	-1.56D-02	9.81D-01	2.16D-01	9.81D-01	22	1
1	44	1.42D-02	-1.70D-02	1.17D+00	2.44D-01	1.17D+00	22	1
1	43	1.53D-02	-1.90D-02	1.41D+00	2.89D-01	1.41D+00	22	1
1	42	1.70D-02	-2.12D-02	1.72D+00	3.52D-01	1.72D+00	22	1
1	41	1.88D-02	-2.35D-02	2.11D+00	4.26D-01	2.11D+00	22	1
1	40	2.01D-02	-2.51D-02	2.53D+00	4.99D-01	2.53D+00	22	1
...								

Soubor obsahuje informace pro každou iteraci a každý hloubkový bod. Je zde popsána změna teploty, elektronové hustoty, maximální relativní změna všech populací, linearizované střední intenzity záření,

maximální relativní změnu všech fyzikálních veličin a index hladiny a frekvenčního bodu, pro které dochází k největší relativní změně příslušných veličin.

V souboru číslo 13 je popsáno vystupující záření z hvězdy. Navíc je v něm uveden povrchový Eddingtonův faktor $f_H = J(\nu, 0)/H(\nu, 0)$.

Literatura

- [1] Davydov, A. S.: *Kvantová mechanika*. Státní pedagogické nakladatelství, 1978.
- [2] Feynman, R. P.: *Feynmanovy přednášky z fyziky s řešenými příklady 1/3*. Fragment, první vydání, 2000.
- [3] Grevesse, N.; Sauval, A.: Standard Solar Composition. *Space Science Reviews*, ročník vol. 85, č. 1/2, 1998: s. 161–174.
URL <http://link.springer.com/10.1023/A:1005161325181>
- [4] Hubeny, I.: A computer program for calculating non-LTE model stellar atmospheres. *Computer Physics Communications*, ročník 52, č. 1, 1988: s. 103–132.
URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0010465588901774>
- [5] Hubený, I.; Lanz, T.: TLUSTY — A User's Guide, 2006.
URL <http://nova.astro.umd.edu/Tlusty2002/tlusty-frames-guides.html>
- [6] Jackson, J. D.: *Classical electrodynamics*. John Wiley, třetí vydání, c1998.
- [7] Kleczek, J.: *Velká encyklopedie vesmíru*. Praha: Academia, první vydání, 2002.
- [8] Krtička, J.: Fyzika horkých hvězd II, 2011, skripta.
URL http://astro.physics.muni.cz/download/documents/skripta/F7601_2.pdf
- [9] Krtička, J.; Mikulášek, Z.; Zverko, J.; aj.: The light variability of the helium strong star HD 37776 as a result of its inhomogeneous elemental surface distribution. *Astronomy and Astrophysics*, ročník 470, č. 3, 2007: s. 1089–1098.
URL <http://www.aanda.org/10.1051/0004-6361:20066627>
- [10] Kubát, J.: Fyzika hvězdných atmosfér, 2013, skripta.
- [11] Landau, L. D.; Lifshits, L.; Pitaevskii, V.; aj.: *Quantum electrodynamics*. Pergamon Press, druhé vydání, 1982.
- [12] Landau, L. D.; Lifšic, J. M.: *Quantum mechanics*. Butterworth-Heinemann, třetí vydání, c1977.
- [13] Lanz, T.; Hubeny, I.: A Grid of Non-LTE Line-Blanketed Model Atmospheres of O-Type Stars. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, ročník 146, č. 2, 2003: s. 417–441.
URL <http://stacks.iop.org/0067-0049/146/i=2/a=417>
- [14] Lanz, T.; Hubeny, I.: A Grid of NLTE Line-blanketed Model Atmospheres of Early B-Type Stars. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, ročník 169, č. 1, 2007: s. 83–104.
URL <http://stacks.iop.org/0067-0049/169/i=1/a=83>

- [15] Lanz, T.; Hubeny, I.; de Koter, A.: Atomic data for non-LTE model stellar atmospheres. *Physica Scripta*, ročník 1996, č. T65, 1996-01-01: s. 144–150.
URL <http://stacks.iop.org/1402-4896/1996/i=T65/a=020?key=crossref.be6c18009b1953695fff10d30d8ae60e>
- [16] LeBlanc, F.: *An introduction to stellar astrophysics*. Wiley, 2010.
- [17] Lee, H.-W.; Kim, H. I.: Rayleigh scattering cross-section redward of Ly α by atomic hydrogen. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, ročník 347, č. 3, 2004-01-21: s. 802–806.
URL <http://mnras.oxfordjournals.org/cgi/doi/10.1111/j.1365-2966.2004.07255.x>
- [18] Loudon, R.: *The quantum theory of light*. Oxford University Press, druhé vydání, 1983.
- [19] Michaud, G.: Atomic diffusion in stellar surfaces and interiors. In *Proceedings of the International Astronomical Union*, ročník 2004, The United Kingdom: Cambridge University Press, 2004, s. 173 – 183.
URL http://www.journals.cambridge.org/abstract_S1743921304004533
- [20] Mihalas, D.: *Stellar atmospheres*. W. H. Freeman, 1970.
- [21] Mikulášek, Z.: Fyzika horkých hvězd I, 2011, skripta.
URL http://astro.physics.muni.cz/download/documents/skripta/F7601_1.pdf
- [22] Smalley, B.: Observations of convection in A-type stars. In *Proceedings of the International Astronomical Union*, ročník 2004, The United Kingdom: International Astronomical Union, 2004, s. 131 – 138.
URL http://www.journals.cambridge.org/abstract_S1743921304004478
- [23] Trampedach, R.: 3D-simulation of the outer convection-zone of an A-star. In *Proceedings of the International Astronomical Union*, ročník 2004, The United Kingdom: International Astronomical Union, 2004, s. 155 – 160.
URL http://www.journals.cambridge.org/abstract_S1743921304004508
- [24] von Unge, R.: Advanced Quantum Mechanics, skripta.
URL <http://physics.muni.cz/~unge/lectures.aqm.pdf>
- [25] Zettili, N.: *Quantum mechanics*. Wiley, druhé vydání, c2009.
- [26] Štoll, I.: *Dějiny fyziky*. Prometheus, první vydání, 2009, s. 399 – 400.

