

Přírodovědecká fakulta  
Masarykovy univerzity  
Ústav teoretické fyziky a astrofyziky

---

Diplomová práce

VÝPOČET PARTIČNÍCH FUNKCÍ PRO MODELY ATMOSFÉR

Adam Tichý



Brno 2010



### **Abstrakt**

Předložená diplomová práce se zabývá výpočty partičních funkcí. K výpočtu obsazení hladin a ionizačních stupňů pro modely atmosfér je potřeba znát vyjádření partičních funkcí jednotlivých atomů a iontů v plazmatu. Studujeme několik existujících modelů, které popisují vliv okolních částic plazmatu na obsazení energiových hladin atomu. Většina výpočtů je založena na formalismu Hummera & Mihalase (1988) a na práci Däppen, Anderson & Mihalas (1987).

Zabýváme se studiem partičních funkcí v podmínkách typických pro hvězdné atmosféry a hvězdné větry horkých hvězd. Partiční funkce jsou vypočteny pro atom vodíku, který je v atmosférách a větrech horkých hvězd důležitý.

### **Abstract**

The diploma thesis deals with the calculation of partition functions. Exact expressions of partition functions of atoms and ions are needed for the calculation of occupation numbers and ionization fractions in plasma. We study some existing models describing perturbations of energy levels of atoms by surrounding particles in plasma. Most of our calculations are based on the Hummer & Mihalas (1988) formalism and on the study of Däppen, Anderson & Mihalas (1987).

We study partition functions under conditions typical for stellar envelopes and stellar winds of hot stars. We compute partition functions of hydrogen atom, which is one of the most important chemical species in envelopes and winds of hot stars.

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci napsal samostatně s použitím zdrojů uvedených v seznamu literatury.

V Brně dne:

Na tomto místě bych ze srdce rád poděkoval vedoucímu práce doc. Mgr. Jiřímu Krtičkovi, Ph.D. za trpělivost, cenné rady a za možnost věnovat se zadanému tématu. Dále děkuji Mgr. Lucii Jílkové za včasné upozornění na některé nedostatky práce a Vladěnce za jazykové korektury, díky kterým je text hezčí.

Rovněž děkuji svým rodičům, podkroví Domečku a Cestě Čaje za duchovní i materiální podporu, bez které by práce nemohla vzniknout.

*Neklid přemáhá chlad,  
klid přemáhá žár.*

*Lao-c': Tao te t'ing*

# Obsah

<b>Úvod</b>	<b>6</b>
<b>1 Termodynamický stav látky a partiční funkce</b>	<b>7</b>
1.1 Kanonický soubor . . . . .	7
1.2 Definice partiční funkce a její vztah k termodynamickým veličinám . . . . .	10
1.3 Grandkanonický soubor . . . . .	12
1.4 Role partiční funkce v astrofyzice . . . . .	13
1.5 Ideální plyn a chemický pohled . . . . .	15
1.6 Interní partiční funkce a pravděpodobnostní formalismus . . . . .	15
<b>2 Studované aproximace - vodíkové plazma</b>	<b>19</b>
2.1 Planckova-Larkinova partiční funkce . . . . .	19
2.2 Model tvrdých koulí . . . . .	21
2.2.1 Výpočet . . . . .	23
2.3 Vliv nabitých částic . . . . .	23
2.4 Holtsmarkova distribuční funkce . . . . .	25
2.4.1 Výpočet . . . . .	27
2.5 Hummer & Mihalas . . . . .	27
2.5.1 Výpočet . . . . .	29
2.6 Q-fit . . . . .	29
2.6.1 Výpočet . . . . .	32
2.7 Analytický fit Holtsmarkovy partiční funkce . . . . .	34
2.8 Porovnání jednotlivých modelů . . . . .	35
<b>3 Relativní obsazení hladin</b>	<b>39</b>
<b>Závěr</b>	<b>42</b>
<b>Literatura</b>	<b>44</b>

# Úvod

Statistická termodynamika se zabývá hledáním makroskopických veličin systémů složených z velkého počtu částic. Při vzrůstajícím počtu částic, které se účastní makroskopických procesů, roste při klasickém popisu i komplikovanost soustavy diferenciálních pohybových rovnic, které bychom museli řešit, pokud bychom hledali fyzikální vlastnosti těchto systémů obvyklou cestou. Další komplikací by pak byla praktická nemožnost určení příslušného počtu počátečních podmínek těchto rovnic, tedy v klasickém případě počátečních poloh a hybností jednotlivých složek systému. Metody statistické fyziky umožňují tyto technické komplikace obejít, přičemž platí, že čím více částic se procesů účastní, tím méně bude celkový makrostav soustavy citlivý vůči malým fluktuacím vyvolaným chováním jednotlivých částic nebo malých objemů. Nalezení partiční funkce ze známého energiového spektra bývá prvním krokem k úplnému termodynamickému popisu soustavy.

Ve statistické fyzice je partiční funkce (v literatuře někdy též stavová funkce, stavová suma, partiční suma) matematický objekt, jehož prostřednictvím lze o studovaném termodynamickém systému zjistit prakticky veškeré fyzikálně zajímavé informace. Potřebnou vstupní informaci je pak znalost energiového spektra komponent systému. Pro daný systém v termodynamické rovnováze má partiční suma konstantní hodnotu. Matematické vztahy k důležitým fyzikálním veličinám, potřebným k úplnému popisu soustavy, jako je například Helmholtzova volná energie, měrné tepelné kapacity, entropie a jiné, jsou relativně jednoduché. Nicméně výpočet samotné partiční sumy zpravidla jednoduchý není, neboť bývá zatížen hned několika technickými komplikacemi. V literatuře zřejmě nejdiskutovanější je problém divergence, o kterém se zmíníme podrobněji níže. Způsobů, jak přistupovat k výpočtu stavové sumy, může být i v případě jednoho konkrétního systému několik. Následný tvar stavové rovnice této soustavy se může v jednotlivých případech lišit, stejně jako se mohou lišit fyzikální podmínky, pro které je ten který postup vhodnější.

Těžištěm našeho zájmu bude především vodíkové plasma v podmínkách atmosfér a hvězdných větrů horkých hvězd. Budeme se především snažit zjistit, jak dané počáteční podmínky prostředí (teplota, koncentrace částic) ovlivňují prostřednictvím partiční funkce obsazení jednotlivých energiových hladin zúčastněných atomů, a rovněž jaký mají jednotlivé metody výpočtu vliv na stavovou rovnici studovaného plasmatu. V jednodušších případech budeme uvažovat dvoučásticové interakční modely, kde vezmeme v úvahu srážky částic a jejich vzájemné coulombovské působení. V případech složitějších potom budeme studovat rozmití horních energiových hladin atomu vlivem nabitého okolního plasmatu, jako důsledek tzv. Starkova jevu. V tomto případě budeme uvažovat několik různých distribučních funkcí, popisujících nabitě pozadí (angl. microfield distribution). Pro účely výpočtů budeme používat jednotkový systém CGS, který se v dané oblasti astrofyziky standardně používá.



# Kapitola 1

## Termodynamický stav látky a partiční funkce

V této kapitole se pokusíme shrnout některé důležité obecné vlastnosti partiční funkce, její vztah k termodynamickým veličinám a aplikace v astrofyzice. Podkladem pro napsání této kapitoly byly především zdroje: Kvasnica (1983), Landau & Lifschitz (1980) a Rutten (2003).

### 1.1 Kanonický soubor

Pro ilustrativní odvození tvaru partiční funkce se pokusíme vypočítat rozdělovací funkci kanonického souboru, tj. souboru, ve kterém nedochází ke změně počtu částic. Uvažujme kanonický soubor  $N$  částic (identických systémů) v kontaktu s tepelnou lázní o teplotě  $T$ , se kterou jsou studované systémy (molekuly, atomy, ionty apod.) v rovnováze. Označme indexem  $r$  ( $r = 1, 2, 3, \dots$ ) mikrostavy, ve kterých se může daný systém nacházet a  $E_r$  energii systému ve stavu  $r$ . V tomto případě považujeme energiové spektrum za kvantované. Pokusíme se tedy odvodit vztah pro pravděpodobnost nalezení malé části celkového souboru ve stavu  $r$  s energií  $E_r$ .

Hledaná pravděpodobnost  $P_r$  je úměrná hustotě počtu stavů, jakožto funkci energie  $\Gamma(E)$ , kterou lze definovat:

$$\Gamma(E)dE = \text{počet stavů s energií v intervalu } (E, E + dE),$$

přičemž použijeme vyjádření pro entropii jako funkci energie, z definice:

$$S(E) \equiv k_B \ln \Gamma(E), \quad (1.1)$$

kde  $k_B$  je Boltzmannova konstanta,  $k_B = 1.380\,66 \cdot 10^{-16}$  erg K<sup>-1</sup>. Označme součet celkové energie tepelné lázně (čárkované veličiny) a malé části  $E_{\text{tot}} = E' + E_r$ , pro pravděpodobnost pak můžeme psát:

$$P_r \propto \Gamma_{A'}(E_{\text{tot}} - E_r) = \exp [S_{A'}(E_{\text{tot}} - E_r)/k_B]. \quad (1.2)$$

Jelikož energie malé části je velmi malá v porovnání s celkovou změnou energie lázně, lze položit  $E' \approx E_{\text{tot}} = \text{konst.}$  a entropii v exponentu lze aproximovat polynomem prvního řádu. Pro hustotu stavů pak máme:

$$\Gamma_{A'}(E_{\text{tot}} - E_r) \approx \exp \left[ \frac{1}{k_B} S_{A'}(E_{\text{tot}}) - \frac{E_r}{k_B} \frac{\partial S_{A'}}{\partial E'} \right] = C' \exp \left( -\frac{E_r}{k_B T} \right), \quad (1.3)$$

kde jsme pro derivaci entropie podle energie využili vztahu:

$$dE = TdS - pdV \quad \Rightarrow \quad dS = \frac{1}{T}dE + \frac{p}{T}dV,$$

odkud plyne

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_V = \frac{1}{T}. \quad (1.4)$$

Jelikož jsou oba systémy (malá část i lázeň) v rovnováze, je teplota malé části s teplotou lázně identická.

V rovnici (1.3) lze konstantu  $C'$  zjistit z normovací podmínky  $\sum_r P_r = 1$ , tedy:

$$C' = \frac{1}{\sum_{r'} \exp(-E_{r'}/k_B T)}, \quad (1.5)$$

kde sumace probíhá přes všechny fyzikálně rozlišitelné stavy. Převrácenou hodnotu normovací konstanty  $C'$  potom nazýváme kanonickou partiční funkcí a obvykle se v literatuře značí  $Z$ . Máme tedy konečné vyjádření  $P_r$ :

$$P_r = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E_r), \quad (1.6)$$

kde

$$Z \equiv \sum_{r'} \exp(-\beta E_{r'}) \quad (1.7)$$

je definiční rovnice pro kanonickou partiční funkci. Zavedli jsme označení:

$$\beta \equiv \frac{1}{k_B T}, \quad (1.8)$$

kterého se budeme nadále v textu držet. Sumace v rovnici (1.7) probíhá přes všechny fyzikálně rozlišitelné mikrostavy. Člen  $\exp(-\beta E_r)$  v rovnici (1.6) se nazývá Boltzmannův faktor na počest rakouského fyzika Ludwiga Eduarda Boltzmannna (1844 – 1906), který se velkou měrou zasloužil o rozvoj statistické fyziky a termodynamiky. Označení  $Z$  pro partiční funkci pochází z německé literatury, kde se tato veličina nazývá stavový součet (Zustandsumme). Samotné pojmenování partiční funkce (angl. partition function) vystihuje rovnice (1.6), neboť každý člen součtu v partiční sumě je úměrný právě počtu částic  $n_r$  v daném stavu  $r$  s energií  $E_r$  (v termodynamické rovnováze o teplotě  $T$ ). Jinými slovy, celkový počet  $N$  částic je rozdělen mezi všechny možné stavy stejným poměrem, jako je partiční suma rozdělena mezi hodnoty jednotlivých Boltzmannových faktorů odpovídajících téměř stavu:

$$\frac{n_r}{N} = \frac{\exp(-\beta E_r)}{Z} \quad (1.9)$$

nebo ekvivalentně pro hladiny  $r$  a  $s$ :

$$\frac{n_r}{n_s} = \exp[-\beta(E_r - E_s)]. \quad (1.10)$$

Rovnice (1.10) je zjednodušenou verzí tzv. Boltzmannova rozdělení popisujícího relativní obsazení hladin  $r$  a  $s$  v plynu za předpokladu termodynamické rovnováhy.

Pokud jsou v daném systému energiové hladiny degenerované, tj. několika různým kvantovým stavům odpovídá stejná hodnota energie, je důležité tento fakt v partiční sumě zahrnout:

$$Z = \sum_r g_r \exp(-\beta E_r), \quad (1.11)$$

kde  $g_r$  je násobnost degenerace. V obecných úvahách faktor  $g_r$  uvažovat nemusíme, neboť se jedná v zásadě pouze o číselnou korekci, nicméně v realističtějších modelech partiční funkce hraje velmi důležitou roli.

V klasickém popisu soustavy nelze hovořit o diskretních energiových stavech částic systému, neboť celkovou energii je v takovém případě možné rozepsat jako součet kinetické a potenciální energie, přičemž hybnost a poloha částic mohou nabývat libovolných hodnot. Energie takového systému se potom mění spojitě a sumaci ve vyjádření pro partiční funkci je potřeba nahradit integrálem přes celý fázový prostor. Například Hamiltonovu funkci plynu o  $N$  nerozlišitelných částicích lze obecně zapsat ve tvaru:

$$H(p_1, \dots, p_{3N}, q_1, \dots, q_{3N}) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} + U(q_1, \dots, q_{3N}). \quad (1.12)$$

Zde  $m$  je hmotnost částice a  $U(q_1, \dots, q_{3N})$  potenciální energie popisující působení částic mezi sebou,  $p_i$  a  $q_i$  značí zobecněné hybnosti, respektive souřadnice. Vztah pro partiční funkci pak nabývá tvaru:

$$Z = \frac{1}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \int \exp[-\beta H(p_1, \dots, p_{3N}, q_1, \dots, q_{3N})] dp_1 \dots dp_{3N} dq_1 \dots dq_{3N}. \quad (1.13)$$

Člen  $N!$  ve jmenovateli souvisí s faktem, že v partiční funkci je třeba zahrnout pouze rozlišitelné stavy (semiklasická kvantová korekce). Člen  $2\pi\hbar$  je objemový faktor ( $\hbar$  značí redukovanou Planckovu konstantu), který ve vztahu vystupuje z důvodu korektnosti s kvantovou povahou systému. Exponent  $3N$  odpovídá počtu stupňů volnosti. Rovnice (1.13) se obvykle nazývá konfigurační integrál.

Pro úplnost zmíníme, že v kvantové fyzice se častěji pracuje s operátory fyzikálních veličin. Například Hamiltonova funkce  $H$  tvaru (1.12) je nahrazena operátorem  $\hat{H}$ . Obecně lze pro kvantové systémy zapsat tvar partiční funkce v invariantním tvaru (tj. nezávislým na volbě souřadnicové báze):

$$Z = \text{tr}[\exp(-\beta\hat{H})], \quad (1.14)$$

kde lze exponent Hamiltonova operátoru definovat:

$$\exp(-\beta\hat{H}) = 1 - \frac{1}{1!}(\beta\hat{H}) + \frac{1}{2!}(\beta\hat{H})^2 \pm \dots$$

Je-li Hamiltonián systému složen z několika nezávislých částí, v principu je možné partiční funkci rozdělit a k výpočtu každé části přistupovat odděleně. To nám umožňuje soustředit se například na vnitřní strukturu atomů a okolní částice plazmatu považovat za pozadí, které studované atomy nebo ionty ovlivňuje. Takový přístup otevírá prostor k vytváření mechanismů, které (zpravidla nabitě) pozadí a vzájemnou interakci popisují. Z tohoto důvodu se v literatuře většinou partiční funkce rozděluje na několik částí. Například Däppen (1980) nebo Fontaine, Graboske & van Horn (1977) rozdělují partiční funkci, resp. volnou energii, na tři

hlavní části: translační, konfigurační a vnitřní, které lze i nadále zjemňovat. Těžištěm našeho zájmu bude především vnitřní partiční funkce, která popisuje obsazení jednotlivých energetických hladin atomu nebo iontu v závislosti na vnějších podmínkách (teplota a koncentrace částic včetně volných elektronů).

Veškeré dosavadní závěry jsou založeny na představě, že studované systémy (atomy, ionty, molekuly aj.) jsou v tepelném kontaktu s velkou tepelnou lázní, jejíž vnitřní energie prakticky není ovlivněna tepelným tokem mezi termostatem a studovanými systémy. Předpoklad takového tepelné lázně lze v praktických úvahách nahradit představou, že celý soubor systémů rozdělíme na mnoho malých částí, které jsou vzájemně v tepelné rovnováze. Každé této malé části jsou okolní malé systémy tepelnou lázní (termostatem). Kanonické rozdělení je tedy možné rozšířit na všechny části souboru. Důsledkem kanonického rozdělení je nenulová fluktuace energie, nicméně právě při odvození tvaru rozdělovací funkce (1.6) je přijata nulovost fluktuací jako předpoklad (viz např. Kvasnica 1983). Naproti tomu je třeba dodat, že úplná izolovanost systému je rovněž prakticky nespílitelný předpoklad.

Kromě velkých výhod, které poskytuje kanonický soubor pro praktické výpočty, je jistě třeba vyzdvihnout fyzikální důvody, proč je kanonická partiční funkce tak zajímavá a důležitá. Partiční funkce je funkcí teploty  $T$  a rovněž do ní vstupují energie jednotlivých stavů (v případě kvantového popisu z řešení Schrödingerovy rovnice)  $E_1, E_2, E_3, \dots$ . Jednotlivé hodnoty energie jsou zároveň ovlivněny mikroskopickými vlastnostmi studovaných částic (například jejich hmotnost nebo elektrický náboj), je tedy zřejmé, že kanonická partiční funkce představuje jakési přemostění mezi popisem pomocí veličin mikroskopických a veličin makroskopických.

## 1.2 Definice partiční funkce a její vztah k termodynamickým veličinám

Důležitý vztah partiční funkce k jednomu z termodynamických potenciálů, konkrétně k volné energii, lze nalézt užitím tzv. Gibbsova<sup>1</sup> kanonického rozdělení. Pro pravděpodobnost (analógickou s rov. (1.6)) máme vyjádření:

$$P_r = \exp[\beta(F - E_r)], \quad (1.15)$$

kde  $F = E - TS$  je Helmholtzova volná energie. Použitím normovací podmínky  $\sum_r P_r = 1$  dospějeme ke vztahu:

$$\exp(-\beta F) = \sum_{r'} \exp(-\beta E_{r'}), \quad (1.16)$$

zde člen na pravé straně rovnice (1.16) vyhovuje definici partiční funkce (1.7). Ekvivalentně tedy

$$F \equiv -\beta^{-1} \ln Z. \quad (1.17)$$

Rovnici (1.17) můžeme považovat za definiční a jejím užitím je již možné nalézt veškeré potřebné vztahy k důležitým termodynamickým veličinám. Do diferenciálního vyjádření volné energie  $dF = dE - SdT - TdS$  dosadíme za vnitřní energii  $dE = TdS - pdV$ :

$$dF = TdS - pdV - SdT - TdS = -pdV - SdT,$$

<sup>1</sup>Josiah Willard Gibbs (1839-1903), americký fyzik, chemik a matematik, který mimo jiné pomohl položit základy pro rozvoj moderní statistické termodynamiky, viz Gibbs (1902)

odkud z podmínek pro úplný diferenciál plynou vztahy pro tlak a entropii:

$$p = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T ; \quad S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V . \quad (1.18)$$

Pro energii najdeme vztah:

$$E = F + TS = F - T \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{F}{T} \right)_V . \quad (1.19)$$

Měrné tepelné kapacity při konstantním objemu, resp. tlaku:

$$C_V = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V , \quad (1.20)$$

$$C_p = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_p . \quad (1.21)$$

Střední hodnotu libovolné veličiny, jejíž hodnota ve stavu  $r$  je  $M_r$ , lze vyjádřit z rovnice:

$$\langle M \rangle = \sum_r M_r P_r = \frac{\sum_r M_r \exp(-\beta E_r)}{\sum_{r'} \exp(-\beta E_{r'})} . \quad (1.22)$$

Například pro střední hodnotu vnitřní energie nelezeme:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_r E_r \exp(-\beta E_r)}{\sum_{r'} \exp(-\beta E_{r'})} = T^2 \frac{\sum_r \exp(-\beta E_r) E_r / T^2}{\sum_{r'} \exp(-\beta E_{r'})} = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln \sum_r \exp(-\beta E_r) . \quad (1.23)$$

S přihlédnutím k definici parametru  $\beta$  (1.8) lze výše uvedené výrazy (1.18) a (1.19) zapsat ve vztahu k samotné partiční funkci:

$$p = \frac{1}{\beta V} \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial \ln V} \right)_T , \quad (1.24)$$

$$S = \frac{1}{\beta T} \left[ \ln Z + \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial \ln T} \right)_V \right] , \quad (1.25)$$

$$E = \frac{1}{\beta} \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial \ln T} \right)_V . \quad (1.26)$$

Pro úplnost ještě uvedme vztahy ke zbylým, často používaným termodynamickým potenciálům, enthalpii  $H = E + pV$  a Gibbsově funkci  $G = E + pV - TS = H - TS = F + pV$ :

$$H = \frac{1}{\beta} \left[ \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial \ln T} \right)_V + \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial \ln V} \right)_T \right] , \quad (1.27)$$

$$G = -\frac{1}{\beta} \left[ \ln Z - \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial \ln V} \right)_T \right] . \quad (1.28)$$

Jednotlivé termodynamické potenciály jsou funkcemi vždy dvou proměnných, tedy  $E = E(S, V)$ ,  $F = F(T, V)$ ,  $H = H(S, p)$  a  $G = G(T, p)$ . V konkrétních příkladech je pak možné zvolit si na základě vstupních informací ten nejhodnější potenciál.

### 1.3 Grandkanonický soubor

Dosud jsme se zabývali soustavami, ve kterých jsme uvažovali výměnu tepla s termostatem, ale počet částic jsme považovali za konstantní. V případě kdy uvažujeme nenulový tok tepla i částic mezi studovaným systémem a pomyslným zásobníkem, hovoříme o grandkanonickém souboru. Taková situace by nás například zajímala, pokud bychom brali v úvahu ionizační a rekombinační procesy (které nás budou zajímat přednostně), termojaderné nebo chemické reakce, kdy dochází k výměně částic mezi atomy, ionty nebo molekulami a okolním plazmatem. Budeme tedy  $N$  považovat za nezávislou proměnnou, na níž budou termodynamické potenciály rovněž záviset. Například úplný diferenciál vnitřní energie napíšeme ve tvaru:

$$dE = TdS - pdV + \mu dN, \quad (1.29)$$

kde  $\mu$  se nazývá chemický potenciál a zastupuje partiální derivaci:

$$\mu = \left( \frac{\partial E}{\partial N} \right)_{S,V}. \quad (1.30)$$

Podobně pro volnou energii  $F \rightarrow F + \mu N$ , Gibbsovu funkci  $G$  a entalpii  $H$ . Pro chemický potenciál pak najdeme:

$$\mu = \left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = \left( \frac{\partial G}{\partial N} \right)_{T,p} = \left( \frac{\partial H}{\partial N} \right)_{S,p},$$

čili chemický potenciál lze získat derivací jakéhokoliv potenciálu  $E$ ,  $F$ ,  $G$  nebo  $H$  podle počtu částic, ale v každém z těchto případů bude výsledek vyjádřen jako funkce jiných proměnných. Zde se obvykle zavádí nový, tzv. Landauův potenciál  $\Omega = F - \mu N$ , rovnice (1.16) pak přechodem ke grandkanonickému souboru nabývá tvaru:

$$\Xi = \exp(-\beta\Omega) = \sum_r \exp[-\beta(E_r - \mu N_r)], \quad (1.31)$$

kde  $N_r$  zastupuje obsazení hladiny  $r$  s energií  $E_r$  a  $\Xi$  značí grandkanonickou partiční funkci.

Lze ukázat, že pro dva sousedící systémy v kontaktu, mezi kterými může docházet k výměně tepla i částic, platí pro rovnovážný stav těchto systémů podmínka  $\mu = \text{konst.}$  Obecně lze tedy říci, že v termodynamické rovnováze je chemický potenciál všech částí souboru stejný. Například podmínku rovnováhy pro ionizační procesy  $k \leftrightarrow (k+1) + e$  zapíšeme ve tvaru

$$\frac{\partial F}{\partial N_k} - \frac{\partial F}{\partial N_{k+1}} - \frac{\partial F}{\partial N_e} = 0, \quad (1.32)$$

kde  $N_k$  označuje počet částic ionizačního stupně  $k$ ,  $N_e$  je počet volných elektronů. Pro excitační/deexcitační rovnováhu pro procesy typu ( $i \leftrightarrow j$ ) nalezneme podmínku

$$\frac{\partial F}{\partial n_i} - \frac{\partial F}{\partial n_j} = 0, \quad (1.33)$$

kde  $n_i$  a  $n_j$  označují počet částic ve stavu  $i$ , resp.  $j$ .

## 1.4 Role partiční funkce v astrofyzice

Důležitou součástí stelární astronomie je modelování hvězdných atmosfér. Modelem atmosféry se rozumí průběh různých fyzikálních veličin v atmosféře hvězdy (například hustota látky, elektronová teplota, obsazení energetických hladin), přičemž vstupními informacemi do těchto modelů jsou předpoklady o chemickém složení atmosféry, efektivní teplotě na povrchu hvězdy a další. Na základě spočteného modelu je možné získat syntetické (teoretické) spektrum, které je možné porovnat se spektrem pozorovaným, čímž lze posoudit původní předpoklady a získat tak cenné údaje například právě o chemickém složení a gravitačním zrychlení na povrchu hvězdy, efektivní teplotě a jiných důležitých parametrech.

Nadále budou v textu značit symboly  $n$  i  $N$  koncentrace, nikoliv počet částic, pokud nebude výslovně řečeno jinak.

Pro popis průchodu elektromagnetického záření prostředím hvězdné atmosféry je potřeba řešit tzv. rovnici přenosu záření. Jedná se o obdobu kinetické Boltzmannovy rovnice pro fotonový plyn:

$$\left[ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + (\vec{n} \cdot \nabla) \right] I(\vec{r}, \vec{n}, \nu, t) = \eta(\vec{r}, \vec{n}, \nu, t) - \chi(\vec{r}, \vec{n}, \nu, t) I(\vec{r}, \vec{n}, \nu, t), \quad (1.34)$$

kde  $I(\vec{r}, \vec{n}, \nu, t)$  je specifická intenzita záření,  $\vec{r}$  je polohový vektor,  $\vec{n}$  směr šíření paprsku a  $\nu$  frekvence procházejícího fotonu,  $c$  značí standardně rychlost světla ve vakuu. Při průchodu fotonů hvězdným prostředím dochází k jejich pohlcování a vyzařování, proto se standardně zavádí parametry  $\eta$  (emisní koeficient) a  $\chi$  (extinkční koeficient), které tyto interakční procesy popisují. Uvažujeme-li stacionární a sféricky symetrickou atmosféru, jsou tyto parametry závislé na poloze v atmosféře  $r$ , vlnové délce, resp. frekvenci interagujícího záření  $\nu$  a rovněž na obsazení energetických hladin atomů nebo iontů. Dále se pomocí těchto parametrů obvykle zavádí tzv. zdrojová funkce, definovaná jako podíl koeficientů emise a absorpce  $S(r, \nu) = \frac{\eta(r, \nu)}{\chi(r, \nu)}$ . Za předpokladu lokální termodynamické rovnováhy (LTE) je pak monochromatická zdrojová funkce  $S_\nu$  rovna Planckově funkci  $B_\nu$ .

$$[S_\nu]_{\text{LTE}} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp(\beta h\nu) - 1} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\left[ \frac{g_i n_j}{g_j n_i} \right]_{\text{LTE}} - 1}. \quad (1.35)$$

Spojením rovnic (1.17) a (1.32) pro případ ideálního plynu lze odvodit tzv. Sahovu rovnici, popisující ionizační rovnováhu v podmínkách LTE. Pro podíl koncentrací iontů stupně  $j$  a  $j + 1$  platí vztah:

$$\frac{N_j}{N_{j+1}} = n_e \frac{Z_j(T)}{Z_{j+1}(T)} \frac{1}{2} \left( \frac{\beta h^2}{2\pi m_e} \right)^{3/2} \exp(-\beta \epsilon_{I,j}), \quad (1.36)$$

kde  $n_e$  je koncentrace elektronů,  $Z_j(T)$  a  $Z_{j+1}(T)$  jsou partiční funkce jednotlivých ionizačních stupňů,  $m_e$  je hmotnost elektronu a  $\epsilon_{I,j}$  značí ionizační potenciál  $j$ -tého iontu. Podobně pro excitační rovnováhu z rov. (1.33) v případě LTE máme již zmíněné Boltzmannovo rozdělení (1.9):

$$\frac{n_{ij}}{N_j} = \frac{g_{ij}}{Z_j(T)} \exp(-\beta \epsilon_{ij}), \quad (1.37)$$

kde  $\epsilon_{ij}$  je excitační potenciál hladiny  $i$ , měřené vzhledem k základní hladině,  $n_{ij}$  je obsazení hladiny  $i$  iontu  $j$  a  $g_{ij}$  je statistická váha (násobnost degenerace) hladiny  $i$  iontu  $j$ .

Jelikož je látka v atmosférách horkých hvězd obvykle silně ionizována, je možné při výpočtech termodynamického stavu atmosféry uvažovat pouze procesy excitace, ionizace a opačné procesy a zanedbat vliv molekul či prachových částic. Při vzájemných srážkách částic pak zpravidla hrají dominantní úlohu srážky atomů s volnými elektrony.

Předpoklad LTE nebývá však vždy dostatečný. Pokud je excitační/ionizační rovnováha určena spíše zářivými procesy, než-li procesy srážkovými (nepružné srážky s ionty, atomy a volnými elektrony), je potřeba použít namísto rovnic (1.36) a (1.37) obecnější, tzv. rovnice statistické rovnováhy. Excitační a ionizační rovnováha pak závisí rovněž na střední intenzitě pole záření. Pro excitační rovnováhu máme rovnici:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla(n_i \vec{v}) = \sum_{j \neq i} (n_j P_{ji} - n_i P_{ij}), \quad (1.38)$$

pro každou hladinu  $i$  daného prvku.  $P_{ij}$  značí četnost přechodu  $i \rightarrow j$  a naopak, přičemž se započítají i přechody do kontinua a zpět, rovnice (1.38) tedy zahrnuje i ionizaci a rekombinaci,  $n_i$  je okupační číslo hladiny  $i$ . Dále rovnice kontinuity pro  $k$ -tý prvek a obecná rovnice zachování hmoty:

$$\frac{\partial N_k}{\partial t} + \nabla(N_k \vec{v}) = 0, \quad (1.39)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v}) = 0, \quad (1.40)$$

kde  $\rho$  je hustota,  $\vec{v}$  vektor rychlosti a  $N_k$  je koncentrace  $k$ -tého prvku. V případě statického ( $\vec{v} = \vec{0}$ ) a stacionárního ( $\frac{\partial}{\partial t} = 0$ ) prostředí jsou rovnice (1.39) a (1.40) splněny identicky, rovnice (1.38) nabývá tvaru

$$\sum_{j \neq i} (n_j P_{ji} - n_i P_{ij}) = 0. \quad (1.41)$$

Četnost přechodů  $P_{ij}$  se zpravidla dělí na srážkový a zářivý příspěvek, které jsou popsány tzv. srážkovými, resp. zářivými raty (četnostmi přechodů). Partiční funkce tedy hraje důležitou úlohu při určování obsazení hladin, které je nutné znát pro předpovědi optických vlastností atmosfér hvězd. Podrobnější výklad teorie hvězdných atmosfér lze nalézt např. v Rutten (2003).

Znalost tvaru stavové rovnice látky, tvořící hvězdné prostředí, je důležitá i při všeobecném studiu stavby hvězd. Například při posuzování existence konvektivních zón, kde v podmínce

$$\frac{d(\ln p)}{d(\ln T)} > \frac{\gamma}{\gamma - 1}, \quad (1.42)$$

nazývané někdy též Schwarzschildova podmínka, vystupuje Poissonova konstanta  $\gamma$ , nebo-li adiabatický koeficient. Koeficient adiabaty je definován:

$$\gamma = \frac{C_p}{C_V} = \frac{(\partial S / \partial T)_p}{(\partial S / \partial T)_V}. \quad (1.43)$$

Je-li podmínka (1.42) splněna, je daná oblast hvězdy stabilní vůči konvekci (přesunu hmoty v radiálním směru) a k tomuto jevu nedochází. V případě vzniku konvekce se tento způsob přenosu energie stává dominantním, což má významné důsledky na stavbu daných vrstev hvězdy. V atmosférách horkých hvězd se však konvekce příliš často neuplatňuje.



## 1.5 Ideální plyn a chemický pohled

Doposud jsme se zabývali představou plynu, která nepředpokládá vzájemné interakce částic, které tento (ideální) plyn tvoří (s výjimkou dokonale elastických srážek, které však na průběh partiční funkce nemají vliv). Použitím grandkanonické partiční funkce pro případ jednočásticového fermionového plynu složeného z neinteragujících částic, lze odvodit stavovou rovnici, ve které figuruje korekční člen (viz např. Landau 1980):

$$p(T, V, N) = \frac{Nk_B T}{V} \left[ 1 + \frac{1}{\Gamma(3/2)} \frac{\pi^2 \hbar^3 N}{4(mk_B T)^{3/2} V} \right], \quad (1.44)$$

kde  $\Gamma(3/2)$  je Eulerova funkce, obecně  $\Gamma(p) = \int_0^\infty z^{p-1} \exp(-z) dz$  (pro  $p = 3/2$  přibližně 2.612). Korekční faktor v rov. (1.44) je důsledek Pauliho vylučovacího principu. Z tohoto pohledu je Pauliho princip (fiktivně) ekvivalentní odpudivým silám, do určité míry tedy simuluje interakce částic mezi sebou, přestože se při odvození uvažují pouze volné (neinteragující) částice. Stavová rovnice (1.44) popisuje tzv. Fermiho-Diracův ideální plyn.

Pro zobecnění stavové rovnice ideálního plynu se započtením mezičásticových interakcí lze použít tzv. viriálový rozvoj. Výraz pro tlak ideálního plynu rozvineme v řadu v závislosti na hustotě částic  $\rho = N/V$ :

$$\beta \frac{p}{\rho} = 1 + B_2(T)\rho + B_3(T)\rho^2 + \dots = 1 + \sum_{i=2}^{\infty} B_i(T)\rho^{i-1}. \quad (1.45)$$

Viriálové koeficienty  $B_i$  obecně závisí na teplotě a popisují interakci, které se účastní vždy  $i$  částic ( $B_2$  pro dvoučásticové interakce, atd.). Zde je pro určení parametrů  $B_i$  výhodné použít grandkanonickou partiční funkci  $\Xi$ , která je s výrazem  $\beta pV$  přímo spjata:

$$\beta pV = \ln \Xi. \quad (1.46)$$

Aplikace viriálového rozvoje je důležitá u modelu Planckovy-Larkinovy partiční funkce, kterou se budeme podrobněji zabývat ve druhé kapitole.

Uvážíme-li ideální plyn složený z různých chemických prvků  $k$ , každý ionizačního stupně  $j$ , lze volnou energii takového plynu zapsat ve tvaru (Hummer & Mihalas, 1988):

$$F = -k_B T \sum_s N_s [3/2 \ln T + \ln(V/N_s) + \ln \lambda_s + 1] - k_B T \sum_{j,k} N_{jk} \ln Z_{jk}, \quad (1.47)$$

kde jsme zavedli označení

$$\lambda_s \equiv (2\pi k m_s / h^2)^{3/2}. \quad (1.48)$$

Ve vztahu (1.47) index  $s$  probíhá přes všechny druhy částic, tedy i volné elektrony a úplně ionizované atomy, zatímco index  $j$  sčítá pouze částice, mající vnitřní energiovou strukturu (atomy a ionty). První člen rov. (1.47) odpovídá translační části volné energie, druhý člen popisuje vnitřní energiové spektrum.

## 1.6 Interní partiční funkce a pravděpodobnostní formalismus

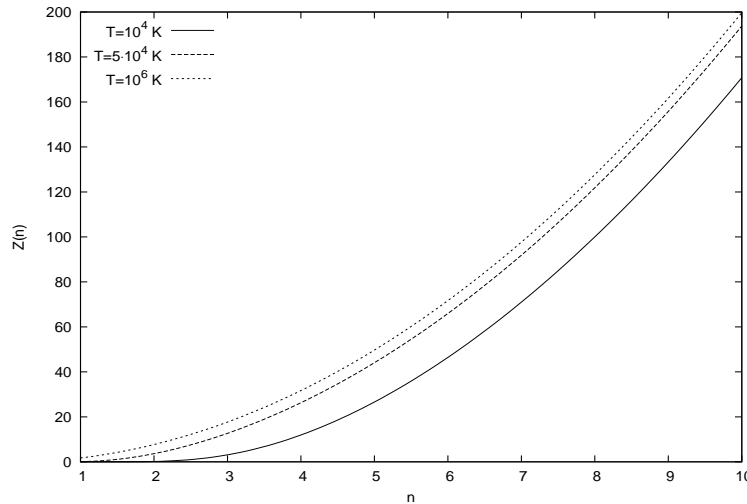
Předpoklad ideálního plynu s sebou přináší několik komplikací. V praxi se ukazuje, že i malé odchylky volné energie od modelu ideálního plynu mohou mít dalekosáhlé důsledky na předpověď optických vlastností studovaného prostředí. Je proto žádoucí uvažovat co nejrealističtější modely interakce atomů či iontů s nabitými i neutrálními částicemi.

Fyzikálně nekorektní závěry lze odvodit ze Sahovy rovnice (1.36), neboť z této rovnice vyplývá možnost rekombinace iontů za jakékoliv teploty při dostatečně vysoké (kritické) hustotě látky. Takový závěr by vedl k převážně neutrálnímu plazmatu při extrémně vysokých teplotách a hustotách vyšších, než je hustota kritická. Tato skutečnost odporuje představám o tzv. ionizaci tlakem, která se zpravidla modeluje jako snižování ionizačního potenciálu. Zmíněný problém je přímým důsledkem použití modelu ideálního plynu, ve kterém se neuvažují vzájemné interakce částic.

Další komplikací je skutečnost, že partiční suma ve tvaru (1.11) formálně diverguje. Například pro limitu vnitřní partiční funkce atomu vodíku (degenerační faktor  $g_n \propto n^2$ ):

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^2 \exp\left(\beta \frac{I_H}{n^2}\right) = \infty, \quad (1.49)$$

kde  $I_H$  je ionizační potenciál vodíku a  $n$  hlavní kvantové číslo. V principu je tedy nutné omezit počet energiových hladin, které se v partiční sumě zahrnou.



Obrázek 1.1: Průběh součinu Boltzmannova faktoru a statistické váhy  $2n^2$  v závislosti na kvantovém čísle  $n$  pro různé teploty.

V reálných podmínkách se při rostoucí koncentraci částic zároveň zvyšuje četnost a intenzita mezičásticových interakcí, což má vliv na méně těsně vázané energiové hladiny. Efektivně zde dochází k rozmití energiové hladiny do kontinua a tím k omezení stavového součtu. Tato *ionizace tlakem* teoreticky vede k úplně ionizovanému plynu při dostatečně vysokých hustotách. Pokusíme se nyní shrnout několik metod, které se obvykle pro omezení stavového součtu používají (Däppen, Anderson & Mihalas 1987):

1. *Fixované omezení*  $n = n_{\max}$ , přičemž  $n_{\max}$  bychom zvolili na základě minimálního příspěvku k partiční funkci. Za určitých speciálních podmínek by takovéto omezení mohlo mít praktické výhody, nicméně tento způsob není příliš fyzikálně korektní a není dostatečně pružný pro obecnější použití.

2. *Omezení závislé na teplotě a hustotě*  $n_{\max} = n_{\max}(T, \rho)$ . Takováto modifikace vázaných stavů vede ke známé komplikaci, kdy se v praktických výpočtech setkáváme s diskontinuitami v průběhu partiční funkce. Kdykoliv hustota přesáhne danou kritickou hodnotu, při které již daný stav přestává existovat (splyne s kontinuem), změní se skokově hodnota partiční funkce úměrně váhovému faktoru daného stavu. Takovéto diskontinuity nemají fyzikální opodstatnění a mohou vést k singularitám nebo jiným potížím při výpočtech termodynamických veličin, což má zpravidla velmi negativní dopad na praktické použití, pokud požadujeme spojitost daných funkcí i jejich derivací. Zpravidla je pak nutné uchýlit se k interpolačním metodám v průběhu vnitřní partiční funkce.
3. *Statický stíněný Coulombův potenciál (SSCP)*. Coulombovský potenciál jádra vodíku je nahrazen potenciálem ve tvaru:

$$V(\lambda_D, r) = -\frac{Z_i}{r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right), \quad (1.50)$$

kde  $Z_i$  je náboj jádra vodíku a  $\lambda_D$  je Debyeova délka. Je možné ukázat, že pro  $\lambda_D < \infty$  existuje vždy konečné množství kvantových stavů. Tento model simuluje efekty coulombovských interakcí mezi nabitými částicemi uvnitř atomu, zdá se tedy, že by mohl být vhodný zejména v silně ionizovaném prostředí. Nicméně podmínky, kdy je možné model SSCP bez obav použít, jsou relativně omezené, neboť pro úplně neutrální plyn partiční funkce opět diverguje, ionizace tlakem tedy *nemusí* nastat ani při extrémně vysokých hustotách. Navíc i v modelu SSCP dochází při výpočtech k diskontinuitám v průběhu partiční funkce (pokaždé, když je hladina atomu rozmitá do kontinua). Zřejmě mnohem závažnější námitka proti modelu SSCP je nesouhlas jeho předpovědí optických vlastností s experimentálními spektroskopickými daty (Hummer & Mihalas, 1987).

4. *Model stísněného atomu (CA)*. V tomto modelu je Coulombův potenciál ve střední mezičásticové vzdálenosti plazmatu nahrazen nekonečnou potenciálovou bariérou. Tímto způsobem jsou simulovány především srážky neutrálních částic, v kontrastu s modelem SSCP je již více problematický v ionizovaném prostředí. V porovnání s modelem SSCP je méně fyzikálně realistický, nicméně není tak křehký a funguje pro všechny teploty a hustoty (například umožňuje tzv. ionizaci z chladu, tzn. pro nízké počáteční teploty a hustoty není potřeba volných elektronů pro nastartování ionizace při zvyšování těchto hodnot).

Obecně lze požadavku na omezení stavové sumy vyhovět předpisem (opět pro plyn složený z různých chemických prvků):

$$Z_{jk}^{\text{int}} = \sum_{i=0}^{\infty} w_{ijk} g_{ijk} \exp(-\beta E_{ijk}), \quad (1.51)$$

kde váhový faktor  $w_{ijk}$  odpovídá pravděpodobnosti, že daný stav  $i$  iontu  $j$  prvku  $k$  stále existuje navzdory okolnímu plazmatu, přičemž faktor  $g_{ijk} \exp(-\beta E_{ijk})$  vyjadřuje pravděpodobnost, zda je daný stav aktuálně v systému obsazen. Pravděpodobnostní formalismus, zavedený rovnicí (1.51) má všeobecně řadu výhod:

- Faktor  $w_{ijk}$  klesá hladce a monotónně s rostoucí intenzitou interakce, kterou popisuje.

- Energetické hladiny se ztrácí ze stavové sumy hladce se snižující se hodnotou faktoru  $w_{ijk}$ , čímž je zaručena kontinuita partiční funkce i spojitost jejích derivací.
- Pravděpodobnostní interpretace faktoru  $w_{ijk}$  umožňuje kombinovat okupační pravděpodobnosti z nezávislých interakcí. Zároveň je tímto způsobem možné uvážit rozličné mechanismy s množstvím rozdílných částic, které se procesů účastní. Tímto způsobem je elegantně vyřešena komplikace s částečně ionizovaným plazmatem, stejně jako s limitními případy kompletně neutrálního nebo naopak zcela ionizovaného plynu.
- Faktor  $w_{ijk}$  je zpravidla možné vyjádřit a derivovat analyticky.

Zahrnutí okupační pravděpodobnosti  $w_{ijk}$  do partiční funkce vede k odpovídajícímu neideálnímu členu ve volné energii a naopak. Není tedy možné volit tvar  $w_{ijk}$  zcela libovolně, aby byla zachována termodynamická konzistentnost volné energie. Pro názornost nyní uvažujme jednočásticový plyn (bez započtení ionizace nebo disociace) o  $n$  částicích, přičemž vždy  $n_i$  částic je ve stavu  $i$  (tedy  $n \equiv \sum_i n_i = \text{konst.}$ ). Lze ukázat, že pokud pro takový plyn uvažujeme neideální člen ve volné energii  $f(T, V, \{n_i\})$ , který explicitně závisí na okupačních číslech  $\{n_i\}$ , najdeme pro váhový faktor (Hummer & Mihalas, 1988):

$$w_i \equiv \exp[-\beta(\partial f / \partial n_i)]. \quad (1.52)$$

Na základě (1.52) je možné ukázat, že odpovídající příspěvek k volné energii je vyjádřen:

$$\left[ f - \sum_i n_i \left( \frac{\partial f}{\partial n_i} \right) \right]. \quad (1.53)$$

Pokud je neideální člen  $f$  lineárně závislý na  $\{n_i\}$ , je příspěvek (1.53) nulový a konečný výraz pro volnou energii je modifikován pouze v rámci vnitřní partiční funkce  $Z_{\text{int}}$ . V případě nelineárního korekčního faktoru, pokud není umožněna jeho linearizace, je potřeba započítat i člen (1.53). Volná energie (1.47) je pro příklad jednočásticového plynu vyjádřena:

$$F = -k_B T n [3/2 \ln T + \ln(V/N_s) + \ln \lambda_s + 1] - k_B T n \ln Z_{\text{int}} + \left[ f - \sum_i n_i \left( \frac{\partial f}{\partial n_i} \right) \right]. \quad (1.54)$$

Navzdory velké popularitě modelů SSCP a CA byla v odborné literatuře věnována velká pozornost vývoji nových, přesnějších modelů pro výpočet partiční funkce. Těžisko problematiky se pak ve většině případů přenáší na hledání váhového faktoru  $w_{ijk}$ . Zejména na poli astrofyziky v oblasti modelování hvězdných atmosfér a optických vlastností astrofyzikálního plazmatu je potřeba věnovat přiměřenou pozornost fyzikální korektnosti použitých modelů, neboť výsledné veličiny bývají zpravidla velmi citlivé na počáteční předpoklady.

## Kapitola 2

# Studované aproximace - vodíkové plazma

V této kapitole podrobněji prostudujeme několik vhodnějších modelů na příkladu vodíkového plazmatu, pokud možno v rozmezí teplot a hustot odpovídajících podmínkám atmosfér zejména horkých hvězd a hvězdných větrů ( $T \leq 10^6$  K,  $\rho \lesssim 10^{-6}$  g cm $^{-3}$ ).

Energiové spektrum atomu vodíku je známo z kvantové teorie, odkud z řešení Schrödingery rovnice známe závislost energie vázaných stavů na hlavním kvantovém čísle  $n$  ve tvaru  $E_n = I_H/n^2$ , kde  $I_H$  je ionizační potenciál,  $I_H = -13.5984$  eV. Statistická váha hladiny  $n$  je rovna  $g_n = 2n^2$ , jelikož jsou dvě možné konfigurace vzájemných orientací spinu jádra a elektronu a pro vedlejší kvantové číslo  $l$ ,  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ , popisující moment hybnosti, máme  $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$ . Vnitřní kanonická partiční funkce atomu vodíku je pak rovna:

$$Z_H = 2 \sum_n n^2 \exp\left(\beta \frac{I_H}{n^2}\right). \quad (2.1)$$

### 2.1 Planckova-Larkinova partiční funkce

Pro vnitřní partiční funkci atomu vodíku máme již zmíněné vyjádření (2.1). Přepsáním do tvaru, ve kterém jsou energie excitovaných hladin měřeny od energie základní hladiny s hlavním kvantovým číslem  $n = 1$  dostaneme vyjádření:

$$Z_H = 2 \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \exp\left[-\beta I_H \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)\right]. \quad (2.2)$$

Rovnici (2.2) přepíšeme do tvaru

$$Z_H = 2 \exp(-\beta I_H) \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \exp\left(\beta \frac{I_H}{n^2}\right) \quad (2.3)$$

a exponenciálu rozvineme v Taylorův polynom:

$$\exp\left(\beta \frac{I_H}{n^2}\right) = 1 + \beta \frac{I_H}{n^2} + \beta^2 \frac{I_H^2}{2n^4} + \dots \quad (2.4)$$

První dva členy součtu vedou k divergenci partiční funkce, kdežto zbylé členy řady dávají konvergentní část. Zanedbáním prvních dvou divergentních členů součtu (2.4) a dosazením zpět do vztahu (2.3) získáme vyjádření pro tzv. Planckovu-Larkinovu partiční funkci (Däppen a kol. 1987):

$$Z_H^{\text{PLPF}} = 2 \exp(-\beta I_H) \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \left[ \exp\left(\beta \frac{I_H}{n^2}\right) - 1 - \beta \frac{I_H}{n^2} \right]. \quad (2.5)$$

Přepsáním do tvaru

$$Z_H^{\text{PLPF}} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \exp\left[-\beta I_H \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)\right] \times \left[1 - \left(1 + \beta \frac{I_H}{n^2}\right) \exp\left(-\beta \frac{I_H}{n^2}\right)\right]$$

lze separovat váhový faktor

$$w_n^{\text{PLPF}} = \left[1 - \left(1 + \beta \frac{I_H}{n^2}\right) \exp\left(-\beta \frac{I_H}{n^2}\right)\right]. \quad (2.6)$$

Tvar Planckovy-Larkinovy partiční funkce (dále PLPF) (2.5) odvodil Larkin (1960) v kontextu statistického popisu plazmatu. Později se podařilo ukázat, že obdoba rovnice (2.5) vystupuje ve druhém koeficientu viriálového rozvoje grandkanonické partiční funkce (např. Rogers 1986), PLPF tedy není partiční funkcí v pravém slova smyslu. Využití PLPF při výpočtech stavové rovnice a obsazení hladin tedy není tak přímočaré jako u standardní partiční funkce. Použitím modelu PLPF se lze vyhnout divergenci partiční sumy, nicméně PLPF představuje pouze *částičný* příspěvek k termodynamickým potenciálům (1.17), (1.27) a (1.28). Proto přímé použití pro výpočet optických vlastností plazmatu vede opět ke špatné shodě s pozorováním (viz §IV v Däppen a kol. 1987).

Obecněji pro plyn složený z volných elektronů (e) a iontů ( $\alpha$ ) může být druhý viriálový koeficient  $B_{e\alpha}$  vyjádřen pomocí energií vázaných stavů  $E_{nl}$  ( $n$  a  $l$  zastupují hlavní a vedlejší kvantová čísla iontu) a koeficientu  $\delta_l$ , který popisuje posun stavu částice ve fázovém prostoru, jakožto důsledek neurčitosti polohy při elastických kolizích (viz např. §123 v Landau & Lifschitz, Vol. 3, odvození Beth a Uhlenbeck 1937). Použitím Levinsonových teorémů pro parametry  $\delta_l$  (Levinson 1949) lze dospět ke tvaru druhého viriálového koeficientu (Rogers 1986):

$$B_{e\alpha} = b_{e\alpha}^b + b_{e\alpha}^c. \quad (2.7)$$

Použijeme-li označení

$$Z^{\text{PLPF}} = \sum_{nl} (2l+1) (\exp(-\beta E_{nl}) - 1 + \beta E_{nl}), \quad (2.8)$$

jsou členy pravé strany rovnice (2.7) rovny

$$b_{e\alpha}^b = 4\pi^{3/2} \lambda_{e\alpha}^3 Z^{\text{PLPF}}, \quad (2.9)$$

kde  $\lambda_{e\alpha} = h(\beta/2\mu_{e\alpha})^{1/2}$ ,

$$b_{e\alpha}^c = \frac{4\beta^2 a_{e\alpha}}{\mu_{e\alpha}^2} \int dp f_2(p) \exp\left(-\frac{\beta p^2}{2\mu_{e\alpha}}\right), \quad (2.10)$$

$$f_2(p) = \sum_l (2l+1) \int dp p^2 \delta_l(p). \quad (2.11)$$

Zde  $\mu_{e\alpha}$  je redukovaná hmotnost dvojice elektron-iont a  $p$  je relativní hybnost. Z rov. (2.9) je již vidět, v jaké pozici vystupuje ve stavové rovnici Planckova-Larkinova partiční funkce. Druhý viriálový koeficient je korekcí ke stavové rovnici při uvážení dvoučásticových interakcí.

Rovnice ekvivalentní Sahově, ze které je možné vypočítat efektivní koncentrace pro výpočet stavové rovnice v případě PLPF nabývá tvaru

$$\frac{N_e N_\alpha}{N_H} = \frac{2V \lambda_H^3 \exp(\beta z e^2 / \bar{\lambda}_D)}{\lambda_e^3 \lambda_\alpha^3 Z^{\text{PLPF}}}, \quad (2.12)$$

kde  $\lambda_i = h(\beta/2\pi m_i)^{-1/2}$  pro  $i = \{e, \alpha, H\}$ ,  $\bar{\lambda}_D$  je efektivní Debyova délka a  $e$  je elementární náboj a  $z$  je náboj iontu.

Podrobnější postup odvození, včetně vyšších řádů viriálových koeficientů a komentáře jsou popsány v Rogers (1986) a v odkazech v této práci.

**Diskuze.** Uvážením výše uvedeného lze odvodit termodynamicky konzistentní stavovou rovnici plazmatu i potřebná okupační čísla například pro výpočty emisivit atomu vodíku. Nicméně právě Planckova-Larkinova partiční funkce bývá často opomíjena či kritizována pro neshody jejích závěrů s experimenty (např. Rouse 1983). Většina kritických hodnocení však vycházela z nepřesné interpretace PLPF. Model PLPF však nabízí přirozený a korektní nástroj k výpočtům termodynamických veličin, přičemž pracuje s coulombovskými dvoučásticovými interakcemi. Vzhledem k dalekodosahovému charakteru coulombovské interakce však může představovat použití pouze dvoučásticového modelu jisté úskalí. Jelikož zároveň nezahrnujeme srážkové procesy, je PLPF omezena na relativně nízké hustoty, ačkoliv tedy sama PLPF na hustotě explicitně nezávisí, podmínky její použitelnosti ano.

Existuje rovněž modifikace, ve které je uvedena podoba PLPF v závislosti na teplotě i hustotě (Ebeling a kol. 1985), jejíž korektní použitelnost je rovněž omezená nižšími hustotami.

## 2.2 Model tvrdých koulí

Model tvrdých koulí (Hard sphere model – HSM) představuje jednoduchý způsob, jak započítat do modelů partiční funkce vliv srážek neutrálních částic. Každé zúčastněné částici je přiřazen poloměr, který definuje efektivní dosah interakce. Jinými slovy, každé částici ve stavu  $i$  přiřadíme poloměr  $r_i$  a nejbližší sousední částici (narušiteli) ve stavu  $l$  poloměr  $r_l$ , přičemž ke srážce dojde tehdy, když se obě částice přiblíží na vzdálenost menší než  $r_i + r_l$ . Zároveň předpokládáme, že překrytím sfér studované částice ve stavu  $i$  a narušitele ve stavu  $l$  dojde k efektivnímu rozmití hladiny  $i$ .

Okupační pravděpodobnost lze následně napsat ve tvaru (Hummer & Mihalas 1988)

$$w_i = \exp \left[ -\frac{4\pi}{3V} \sum_l n_l (r_i + r_l)^3 \right]. \quad (2.13)$$

Odpovídající neideální člen volné energie z rov. (1.52) je

$$f = \frac{2\pi}{3\beta V} \sum_i \sum_l n_i n_l (r_i + r_l)^3, \quad (2.14)$$

kde  $n_i$  a  $n_l$  je počet částic ve stavu  $i$ , resp.  $l$ . Příspěvek k volné energii:

$$[f - \sum_i n_i (\partial f / \partial n_i)] = -f.$$

Tvar členu (2.14) odvodil již Fermi (1924) ze stavové rovnice van der Waalsova plynu, kde vystupuje ve druhém viriálovém koeficientu.

Předpis okupační pravděpodobnosti (2.13) není pro praktické výpočty příliš vhodný, neboť při minimalizaci volné energie vyžaduje znalost okupačních čísel všech stavů narušitelů jakožto nezávislé proměnné. Pro obecnější plyn složený z různých chemických prvků by se situace ještě zkomplikovala okupačními čísly všech ionizačních stupňů všech zúčastněných prvků. Pokud budeme uvažovat, že každá částice (narušitel), která vstoupí do kontaktu se studovaným atomem, je v základním stavu  $l = 1$ , přepíšeme rov. (2.13) do tvaru:

$$w_i = \exp [-(4\pi/3V)N(r_i + r_1)^3]. \quad (2.15)$$

Obecně pro plyn složený z iontů  $j$  různých chemických prvků  $k$  (Nayfonov a kol. 1999):

$$w_{ijk} = \exp \left[ -(4\pi/3V) \sum_{j',k'} N_{j'k'} (r_{ijk} + r_{1j'k'})^3 \right], \quad (2.16)$$

Formálně jsme z důvodu kompletního popisu přijali i možnost, že jedna ze zúčastněných částic může být nabitá, nicméně protože je model HSM při popisu interakcí nabitých částic nedůvěryhodný, takové příspěvky zanedbáme a sčítáme tedy pouze přes neutrální částice. V tomto případě je neideální příspěvek k volné energii identicky roven nule:

$$[f - \sum_i n_i (\partial f / \partial n_i)] = 0.$$

Linearizací modelu (2.13) jsme tedy veškeré projevy srážek neutrálních částic zahrnuli pouze ve vyjádření vnitřní partiční funkce  $Z_{\text{int}}$ .

**Diskuze.** Model tvrdých sfér popisuje srážkové procesy neutrálních částic, přičemž jsme pro praktické výpočty přijali předpoklad narušitele v základním stavu. V principu model tvrdých sfér každému kvantovému stavu přiřazuje rozdílný poloměr, což simuluje detailnější popis stavby atomu. Naproti tomu model CA definuje pro všechny stavy všech částic jednotný poloměr interakce. S rostoucí hustotou tedy v modelu HSM dochází nejprve k rozmití horních, méně těsně vázaných energiových hladin, což odpovídá kvalitativním představám o ionizaci tlakem. Modelem HSM je docíleno žádané konvergence partiční funkce, přičemž k rozmití dané hladiny dochází tehdy, když vyplňuje objem větší, než je střední objem na jednu částici.

Formální kritérium použitelnosti modelu HSM je dle Graboske, Harwood & Rogers (1969)  $4\pi R^3 N/3V \ll 1$ , kde  $R$  je typický poloměr částice. Pro vodíkové plazma je tato podmínka pohodlně splněna pro hustoty  $\rho \leq 10^{-2} \text{ g cm}^{-3}$ , tedy pro oblast našeho zájmu.

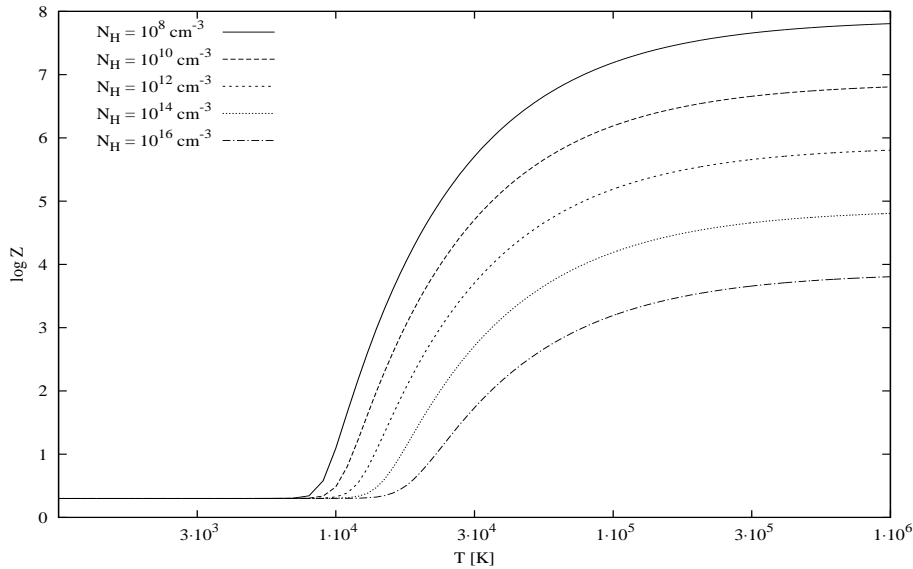
Pro linearizaci modelu (2.13) je potřeba označit zvlášť ovlivněnou částici a narušitele a následně sečíst pro každou ovlivněnou částici vliv každého narušitele, přičemž při celkovém součtu si následně obě částice role vymění. Přímým důsledkem linearizace HSM je tedy fakt, že je každý zúčastněný pár atom-narušitel započítán v exponentu  $w_i$  dvakrát. Použijeme-li pro charakteristický poloměr atomu ve stavu  $n$  výraz  $r_n = a_0 n^2$ , kde  $a_0$  je Bohrov poloměr, je váhový faktor úměrný  $w_n \sim \exp [-n^6 (a_0/r_0)^3]$ , kde  $r_0$  je průměrná vzdálenost mezi částicemi. Je tedy možné říci, že nejistota kvantového čísla nejvyšší hladiny, přispívající do stavového součtu, je úměrná  $2^{1/6}$  a samotná hodnota interní partiční funkce je skze faktor  $g_n = 2n^2$  zatížena nejistotou  $2^{1/2}$ .



### 2.2.1 Výpočet

Numerickými propočty vychází najevo, že Boltzmannův faktor  $\exp(-\beta\chi/n^2)$ , určující pravděpodobnost obsazení dané hladiny, zpočátku klesá s kvantovým číslem strměji než váhový faktor  $w_n$ . Vhodným kritériem konvergence výpočtu konkrétní partiční funkce se tedy jeví omezení  $w_n \leq \epsilon$ , kde jsme ve většině případů použili  $\epsilon = 0.001$ . Pro vysoké teploty v rozmezí  $T = 10^5 - 10^6$  K klesají Boltzmannův i váhový faktor řádově zhruba stejným tempem. Hladiny, pro které již platí  $w_n < \epsilon = 0.001$ , přispívají k partiční funkci za extrémně vysokých teplot řádově  $\epsilon^2 \sim 10^{-6}$ .

Pro ilustraci uvedeme průběh partičních funkcí pro koncentrace vodíku  $N_H$  v rozmezí  $10^8 - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , což odpovídá rozpětí hustot  $\rho \approx 10^{-16} - 10^{-8} \text{ g cm}^{-3}$ .

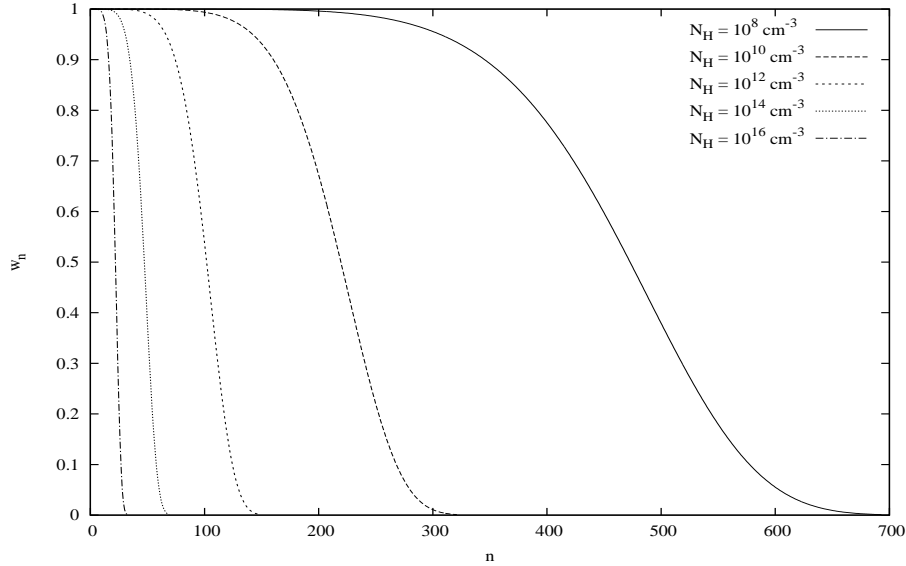


Obrázek 2.1: Partiční funkce  $Z = Z(T)$  pro různé koncentrace vodíku.

Z obrázků (2.1) a (2.2) je patrný vliv ionizace tlakem. Při zvyšující se hustotě klesá počet přispívajících hladin. Zároveň s hustotou rapidněji klesá váhový faktor, což má vliv na elektrony okupující vyšší, méně těsně vázané hladiny. Nicméně model tvrdých sfér není sám o sobě příliš vhodný k výpočtům vlastností astrofyzikálního plazmatu, neboť nepopisuje dobře interakce s nabitými částicemi.

## 2.3 Vliv nabitých částic

V částečně nebo úplně ionizovaném prostředí hraje důležitou úlohu coulombovské působení nabitých částic. Ačkoliv se atom jako celek jeví z dostatečně velké vzdálenosti jako elektricky neutrální, v zásadě jde o kompozici bodových nábojů (elektronů a jader), je tedy popsán rozložením náboje, resp. je možné pro atom definovat dipólový moment. Při interakci s vnějším



Obrázek 2.2: Průběh váhového faktoru  $w = w(n)$ . Váhový faktor pro model tvrdých sfér není závislý na teplotě. Počet přispívajících hladin je pro nízké koncentrace příliš vysoký, neboť v reálných spektrech hvězd zpravidla nebývá pozorován tak velký počet vodíkových čar.

elektrickým polem pak dochází k ovlivnění vnitřní struktury atomu. Reálně je tedy počet vázaných hladin atomu nebo iontu v plazmatu omezen elektrickým polem, které je buzeno nabitým okolím.

Lze tedy říci, že energiové hladiny jsou "rozmazané", tj. jsou zatíženy neurčitostí energie, přičemž hladiny s vyššími kvantovými čísly, které od sebe nejsou energiově dostatečně vzdáleny, se překrývají, v mezním případě rozmývají do kontinua. Budeme tedy uvažovat, že pro elektron v daném vázaném stavu existuje vlivem elektrického pole buzeného okolí určitá nenulová pravděpodobnost, že se elektron uvolní od původního jádra atomu. Tento jev je důsledkem Starkova<sup>1</sup> efektu (často v anglické literatuře označovaný jako Stark shift nebo Stark broadening), který je v podstatě elektrostatickou analogií Zeemanova rozštěpení hladin vlivem magnetického pole.

Základní představou je, že pro každý vázaný stav  $i$  iontu  $j$  prvku  $k$  existuje kritická hodnota intenzity elektrického pole  $\xi_{ijk}$  taková, že daný stav přestává existovat, pokud intenzita pole přesáhne tuto kritickou hodnotu. Pravděpodobnost existence daného stavu je pak rovna pravděpodobnosti, že intenzita pole kritickou hodnotu  $\xi_{ijk}$  nepřesahuje (Hummer & Mihalas 1988):

$$w_{ijk} = \int_0^{\xi_{ijk}} P(\xi) d\xi, \quad (2.17)$$

kde  $P(\xi)$  je distribuční funkce elektrického pole (angl. microfield distribution).

<sup>1</sup>Johannes Stark (1874 – 1957), německý fyzik, který v roce 1913 tento jev objevil a popsal.

Stav s ionizačním potenciálem  $\chi$  může být v atomu považován za vázaný, pokud je intenzita pole  $\xi$  menší než kritická hodnota (Unsöld 1948, použity atomové jednotky, ve kterých je  $\hbar = e = m_e = 1/(4\pi\epsilon_0) = 1$ ):

$$\xi_{ijk} = K(\chi) \frac{\chi^2}{4Z_a} \text{ a.u.}, \quad (2.18)$$

kde  $Z_a$  je elektrický náboj jádra a  $K(\chi)$  je tzv. Starkův ionizační kvantově-mechanický korekční faktor. Pro vodíkový plyn můžeme použít vztah

$$\chi_n = Z_a^2/2n^2 \text{ a.u.}, \quad (2.19)$$

kde  $n$  zastupuje hlavní kvantové číslo atomu vodíku.

Přepisem  $K(\chi)$  do tvaru, kde je zachycena přímá souvislost s hlavním kvantovým číslem  $K_n$ , máme vyjádření:

$$K_n = \begin{cases} 1 & \text{pro } n \leq 3 \\ \frac{16}{3} \left(\frac{n}{n+1}\right)^2 \frac{n+7/6}{n^2+n+1/2} & \text{pro } n \geq 3. \end{cases} \quad (2.20)$$

Tvar (2.20) je možné odvodit pomocí (2.18) a (2.19) z poruchové teorie prvního řádu (viz např. Landau & Lifschitz, vol. 3) pro energii stavu v degenerované hladině. Faktor (2.20) nabývá důležitosti teprve pro hladiny s  $n > 3$ , neboť pro takovéto hladiny dochází k jejich vzájemnému překrývání, jsou tedy degenerované (Hummer & Mihalas 1988). V čitateli (2.20) pro  $n > 3$  vystupuje člen  $n + 7/6$ , který nahrazuje původně odvozený tvar  $n + 1/2$  z důvodu spojitosti v bodě  $n = 3$ .

## 2.4 Holtsmarkova distribuční funkce

Pro popis elektrického pole čistě vodíkového plazmatu lze s výhodou použít Holtsmarkovu<sup>2</sup> distribuční funkci (Holtsmark distribution function – HDF). Ačkoliv byla Holtsmarkova distribuční funkce odvozena pro vodíkové plazma, zavedeme z důvodu obecnější použitelnosti korekci, pomocí které zahrneme i vliv jiných iontů, než protonů.

Kritickou hodnotu pole  $\xi_{ijk}$  nahradíme hodnotou redukovanou (Hummer & Mihalas 1988)

$$\zeta_{ijk} = \xi_{ijk}/\xi_0, \quad (2.21)$$

kde  $\xi_0$  je intenzita buzená iontem ve střední mezičásticové vzdálenosti  $R_0$  pro tento iont. Pro okupační pravděpodobnost máme vyjádření (2.17), použitím redukované hodnoty pole:

$$w_{ijk} = \int_0^{\zeta_{ijk}} d\zeta P_H(\zeta), \quad (2.22)$$

kde

$$P_H(\zeta) = \frac{2\zeta}{\pi} \int_0^\infty dy \exp(-y^{3/2}) y \sin \zeta y \quad (2.23)$$

<sup>2</sup>Johan Peter Holtsmark (1894 – 1975), norský fyzik, proslulý zejména díky studiu rozšiřování spektrálních čar a rozptylu elektronů.

je Holtsmarkova distribuční funkce. Pro hodnotu  $\xi_0$  použijeme vyjádření:

$$\xi_0 \equiv \frac{Z_p}{R_0^2} = Z_p \left( \frac{4\pi N_p}{3} \right)^{2/3} a_0^2, \quad (2.24)$$

kde  $a_0$  je Bohrov poloměr,  $N_p$  koncentrace iontu s nábojem  $Z_p$ , kde  $p = 1, 2, \dots$ . Pro koncentrace volných elektronů a iontů máme:

$$N_e = \sum_z N_z Z \quad (2.25)$$

a

$$N_{\text{ion}} = \sum_z N_z. \quad (2.26)$$

Veškerý přebývající kladný náboj, který není nesen protony, rozdělíme rovnoměrně mezi všechny zúčastněné ionty. Každý pak bude nosičem náboje ( $N_{\text{ion}}$  je koncentrace iontů bez ohledu na náboj):

$$\bar{Z}_p = \frac{\sum_z N_z Z}{\sum_z N_z} = \frac{N_e}{N_{\text{ion}}}. \quad (2.27)$$

Dosazením do vztahu (2.24), kde  $N_p = N_{\text{ion}}$  dostáváme

$$\xi_0 = N_e N_{\text{ion}}^{-1/3} (4\pi a_0^3/3)^{2/3}. \quad (2.28)$$

Kritická hodnota pole  $\zeta_{ijk}$  je spojením rovnic (2.18), (2.21) a (2.28) vyjádřena:

$$\zeta_{ijk} = K_{ijk} \frac{\chi_{ijk}^2}{4Z_a} \left( \frac{4\pi a_0^3}{3} \right)^{-2/3} \frac{N_{\text{ion}}^{1/3}}{N_e}. \quad (2.29)$$

Rovnice (2.22) a (2.29) vyjadřují hledaný výraz pro okupační pravděpodobnost, popisující vliv plazmatu na partiční funkci.

Pro vodíkové a vodíku podobné ionty s nábojem  $Z_p$  lze kritickou hodnotu  $\zeta_{ijk}$  dále upravit. Pokud parametrizujeme koncentraci iontů poměrem ke koncentraci protonů, tedy podílem  $f_p = N(Z_p)/N(1)$ ,  $p = 2, 3, \dots$ , máme:

$$N_{\text{ion}} = \left( \frac{1 + \sum_{p=2} f_p}{1 + \sum_{p=2} p f_p} \right) N_e \equiv C N_e.$$

Pro vodíkový systém nabývá rov. (2.29) tvaru (Hummer & Mihalas, 1988):

$$\zeta_n(Z_a) = K_n \frac{1}{16n^4} \left( \frac{4\pi}{3} \right)^{-2/3} a_0^{-2} C^{1/3} Z_a^3 N_e^{-2/3}. \quad (2.30)$$

**Diskuze.** Hlavní úskalí Holtsmarkovy distribuce je neuvážení vlivu elektrostatického působení částic, tvořících okolní plazma. Hummer & Mihalas (1988) však ukázali, že pro podmínky, typické pro hvězdné obálky, nejsou tyto procesy pro distribuční funkci příliš důležité (§IV, obr. 2).

V případě horkých a relativně řídkých atmosfér hvězd a hvězdných větrů hrají dominantní úlohu volné elektrony. V takovém případě lze pro odhad teplot, pro které je HDF v případě platná, zhruba napsat podmínku ( $n$  je kvantové číslo)

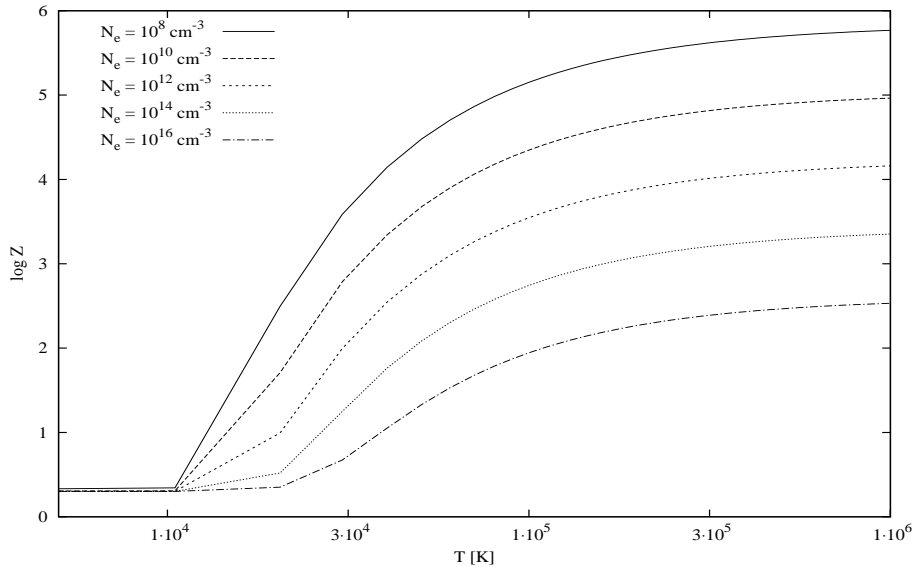
$$T \ll T_{\max} \approx 9.0 \cdot 10^3 Z_a^{2/5} N_e^{2/15} \text{ cgs} \quad (n \gg 1).$$

$T_{\max}$  se tedy pro rozmezí koncentrací elektronů  $N_e \sim 10^{10} - 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  pohybuje zhruba  $T_{\max} \sim 10^5 - 10^6 \text{ K}$ .

Dále je třeba započítat srážkové procesy. V případě srážek neutrálních částic je možné použít model tvrdých sfér. Pro vliv srážek s nabitými částicemi Hummer & Mihalas (1988) numerickými výpočty ukázali, že pro oblasti teplot a hustot, které odpovídají typickým podmínkám hvězdných atmosfér, je omezení stavové sumy maximální započítanou hladinou  $n_{\max}$  zpravidla větší, než omezení plynoucí z HDF.

### 2.4.1 Výpočet

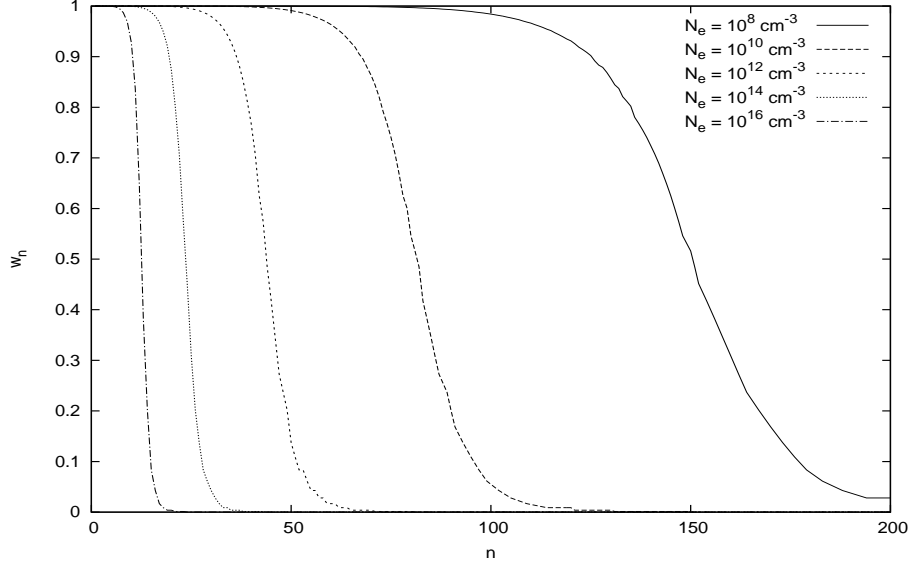
K výpočtu partiční funkce pomocí Holtsmarkovy distribuce byl pro kritickou hodnotu použit vztah (2.29). Důležitou aproximací je položení  $(N_{\text{ion}}/N_e) = 1$ , kritická hodnota pole je tedy na koncentraci volných elektronů závislá  $\zeta \sim N_e^{-2/3}$ .



Obrázek 2.3: Partiční funkce spočtená pomocí Holtsmarkovy distribuce.

## 2.5 Hummer & Mihalas

Model založený na Holtsmarkově distribuční funkci je relativně náročný na výpočetní čas, neboť ve výpočtech je potřeba řešit dvojný integrál. Hummer & Mihalas (1988) proto využili jednoduššího modelu, vycházejícího z interakce dvou nejbližších částic (angl. Nearest



Obrázek 2.4: Průběh váhového faktoru v závislosti na kvantovém čísle  $n$  pro různé koncentrace volných elektronů. Holtsmarkova distribuce.

neighbor approximation – NN), který numericky porovnali s výsledky  $w_{ijk}$ , získanými pomocí Holtsmarkovy distribuční funkce. Výsledný tvar okupační pravděpodobnosti pro nabitě narušitele pak našli ve tvaru:

$$w_{ijk}^{\text{nab}} = \left\{ - \left( \frac{4\pi}{3V} \right) 16 \left[ \frac{(Z_{jk} + 1)^{1/2} e^2}{K_{ijk} \chi_{ijk}} \right]^3 \sum_{j',k'} N_{j',k'} Z_{j',k'}^{3/2} \right\}, \quad (2.31)$$

kde  $Z_{jk}$  označuje náboj iontu  $j$  prvku  $k$  (nula pro neutrální částice),  $e$  je elementární náboj. Sumace probíhá přes všechny stavy  $i$  iontů  $j$  prvků  $k$ . Dále  $\chi_{ijk}$  je ionizační potenciál hladiny  $(ijk)$  a faktor  $K_{ijk}$  odpovídá rov. (2.20), kde  $n \rightarrow (ijk)$  zastupuje obecné označení hladiny s potenciálem  $\chi_{ijk}$  částice s nábojem  $Z_{jk}$ .

V dalším kroku Hummer & Mihalas využili okupační pravděpodobnosti  $w_{ijk}^{\text{neut}}$  z rov. (2.16) odvozené pro srážky neutrálních částic, tedy model tvrdých koulí. Spojením rovnic (2.31) a (2.16) dostáváme okupační pravděpodobnost ve tvaru:

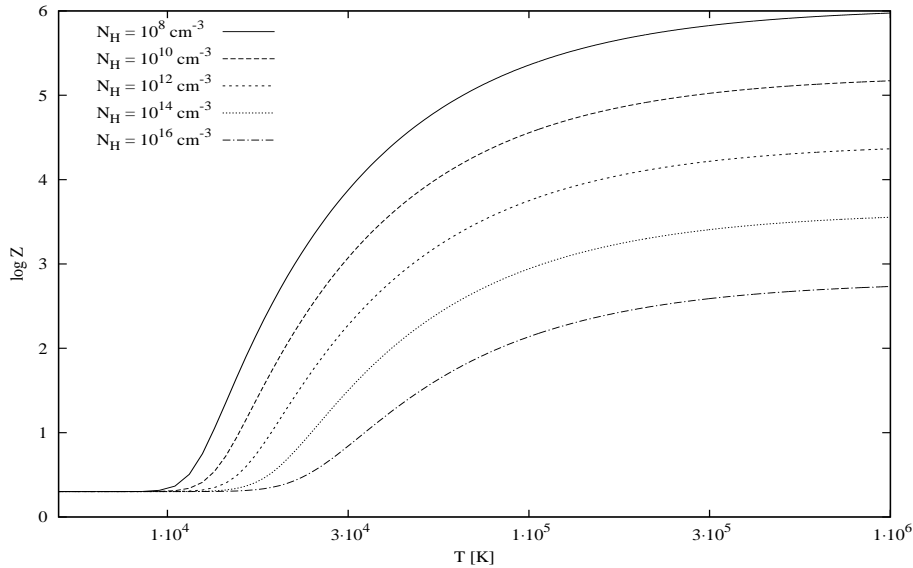
$$w_{ijk} = w_{ijk}^{\text{nab}} \cdot w_{ijk}^{\text{neut}} = \exp \left[ - \left( \frac{4\pi}{3V} \right) \left\{ \sum_{v',k'} N_{v',k'} (r_{ijk} + r_{1v'k'})^3 + 16 \left[ \frac{(Z_{jk} + 1)^{1/2} e^2}{K_{ijk}^{1/2} \chi_{ijk}} \right]^3 \sum_{j',k'} N_{j',k'} Z_{j',k'}^{3/2} \right\} \right]. \quad (2.32)$$

Okupační pravděpodobnost (2.32) je lineárně závislá na okupačních číslech  $N_{ijk}$ , neboť není přímo závislá na obsazení hladin narušitelů, korekční člen  $[f - \sum_i n_i (\partial F / \partial n_i)]$  je tedy

nulový a interakce jsou započítány pouze v interní partiční funkci. Použitelnost modelu (2.31) je omezena pro hladiny, pro které platí  $w_{ijk} > 0.1$ , neboť pro nižší okupační pravděpodobnosti klesá rov. (2.31) mnohem rychleji, než rov. (2.22), ačkoliv fyzikálnímu požadavku, aby byly tyto hladiny efektivně rozmyty do kontinua je i přesto vyhověno.

### 2.5.1 Výpočet

Partiční funkce vypočtená pomocí rovnice (2.32), kde  $Z_{jk} = 0$  (neutrální vodík),  $N_p$  je koncentrace nabitých částic. Pro čistě vodíkové plasma je  $N_p$  rovna koncentraci protonů, kterou budeme uvažovat totožnou s koncentrací volných elektronů.

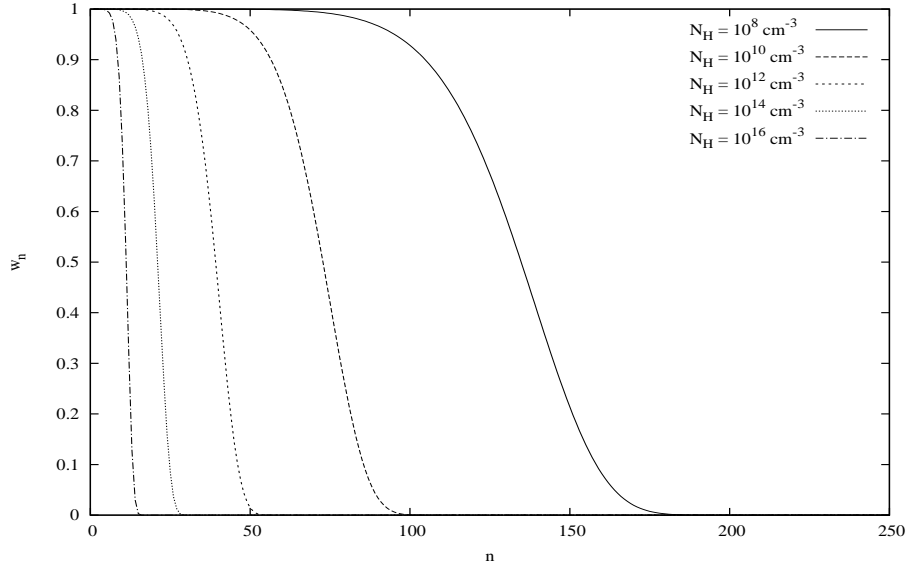


Obrázek 2.5: Partiční funkce s použitím modelu Hummer & Mihalas (1988). Zahrnuje vliv srážek neutrálních částic i coulombovské působení nabitých částic se  $Z_{jk} = 0$ .

## 2.6 Q-fit

Holtmarkovu distribuční funkci je možné rozšířit uvážením vzájemného působení částic v plazmatu, které bylo diskutováno v kapitole (2.4). Zavádí se proto tzv. korelační faktor, který zachycuje význam interakcí v plazmatu pro distribuční funkci. Korelační faktor je poměr energie coulombovské interakce dvou iontů (uvažujeme pouze jednu ionizovanou částici) ve střední vzdálenosti  $r_0$ , definované  $(4\pi/3) \sum_{\text{ion}} n_i r_0^3 = 1$ , podělený střední kinetickou energií  $k_B T$ :

$$\Lambda = \left( \frac{e^2}{k_B T r_0} \right), \quad (2.33)$$



Obrázek 2.6: Průběh váhového faktoru při teplotě  $T = 6 \cdot 10^3$  K. Model Hummer & Mihalas.

kde  $e$  je elementární náboj. Korelace částic není důležitá pro  $\Lambda \ll 1$ , naopak pro  $\Lambda \gtrsim 1$  je pro tvar distribuční funkce korelace významná. Limitní případ  $\Lambda \rightarrow 0$  odpovídá Holtsmarkově distribuci.

Do vyjádření distribuční funkce s nenulovým korelačním faktorem vstupují jako další proměnné náboj iontu  $Z_r$  a tzv. korelační parametr  $a$  (Nayfonov a kol., 1999):

$$a = \left( \frac{4\pi}{3} N_e r_D^3 \right) \approx \frac{0.09 N_e^{1/6}}{T^{1/2}} \text{ cgs}, \quad (2.34)$$

kde

$$r_D = \sqrt{\frac{k_B T}{4\pi e^2 N_e}} \quad (2.35)$$

je Debyův poloměr. Fyzikální smysl korelačního parametru je vidět přepisem  $a = \eta^{-1/3}$ , kde  $\eta$  je počet iontů ve sféře o Debyova pomoměru  $r_D$ . Jednoduchými matematickými úpravami vztahu (2.34) lze najít souvislost parametrů  $a$  a  $\Lambda$ :

$$a^2 = 3\Lambda. \quad (2.36)$$

Odpovídající distribuční funkci  $W(\zeta'; Z_r, a)$  odvodil Hooper (1968), na jejímž základě našel Hummer (1990) dvoudimenzionální fit v proměnných  $\zeta$  a  $a$  pro  $Z_a = 0, \dots, 5$  a  $a \leq 0.8$ . Pro okupační pravděpodobnost obecně máme ( $\zeta$  je intenzita pole, jejíž kritická hodnota je totožná s rovnicí (2.29),  $n$  zastupuje obecně hladinu  $i$  iontu  $j$  prvku  $k$ ):

$$w_n = \int_0^{\zeta_n} W(\zeta'; Z_r, a) d\zeta' \equiv Q(\zeta; Z_r, a). \quad (2.37)$$



Výsledný fit Hummer (1990) nalezl ve tvaru:

$$Q(\zeta; Z_r, a) = \frac{f(\zeta; Z_r, a)}{1 + f(\zeta; Z_r, a)}, \quad (2.38)$$

kde

$$f(\zeta; Z_r, a) = \frac{C_1(Z_r, a)\zeta^3}{1 + C_2(Z_r, a)\zeta^{3/2}}. \quad (2.39)$$

Koeficienty  $C_1$  a  $C_2$  závisí na korelačním parametru  $a$  a náboji  $Z_r$  vztahy:

$$C_1(Z_r, a) = P_1(X + P_5 Z_r a^3), \quad (2.40)$$

$$C_2(Z_r, a) = P_2 X, \quad (2.41)$$

kde

$$X = (1 + P_3 a)^{P_4}, \quad (2.42)$$

pro konstantní parametry  $P_1, \dots, P_5$  v rozmezí podmínek  $Z_a = 0, \dots, 5$  a  $a \leq 0.8$  vyhovují následující hodnoty:

$$P_1 = 0.1402 \quad (2.43)$$

$$P_2 = 0.1285$$

$$P_3 = 1.0$$

$$P_4 = 3.15$$

$$P_5 = 4.0.$$

Naznačený model se někdy též označuje jako post-Holtsmarkova distribuční funkce. Q-fit byl s úspěchem použit pro studium atmosfér horkých hvězd za předpokladu NLTE (Hubený, Hummer & Lanz 1994).

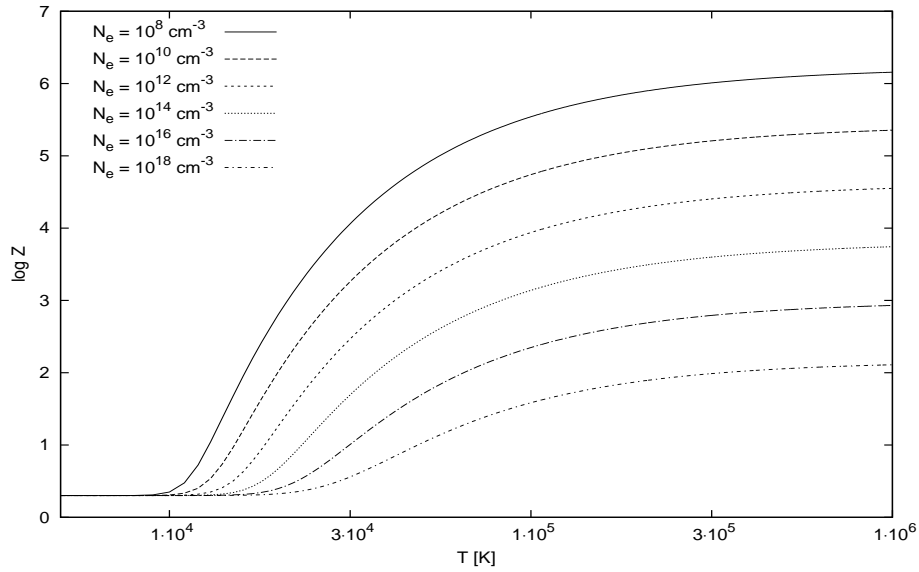
**Diskuze.** Hooperova distribuční funkce plazmatu je založená na následujících předpokladech (Nayfonov a kol. 1999):

1. elektrony a ionty, které se účastní interakcí jsou v rovnováze se stejnou kinetickou teplotou;
2. v případě vícenásobně ionizovaných iontů ( $Z > 1$ ) mají všechny částice vstupující do interakce náboj  $Z = 1$ .

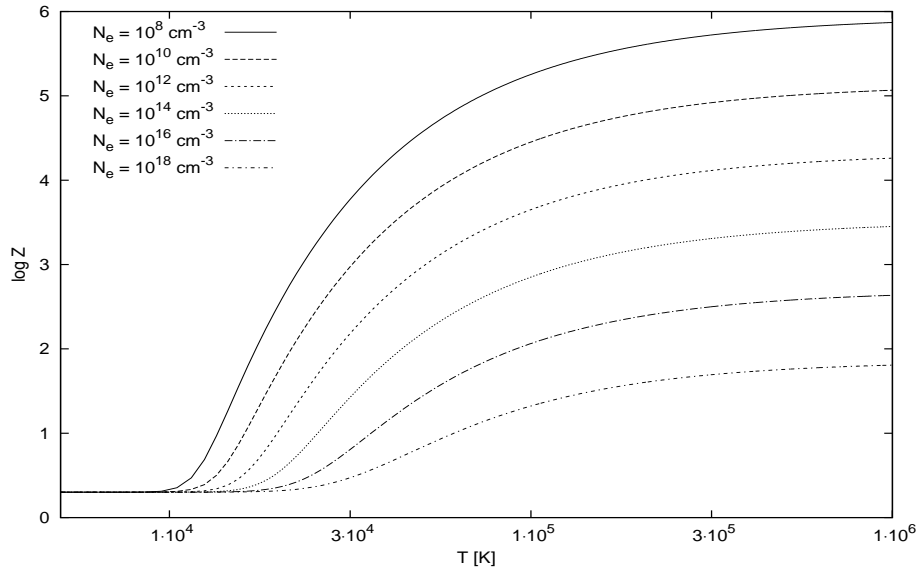
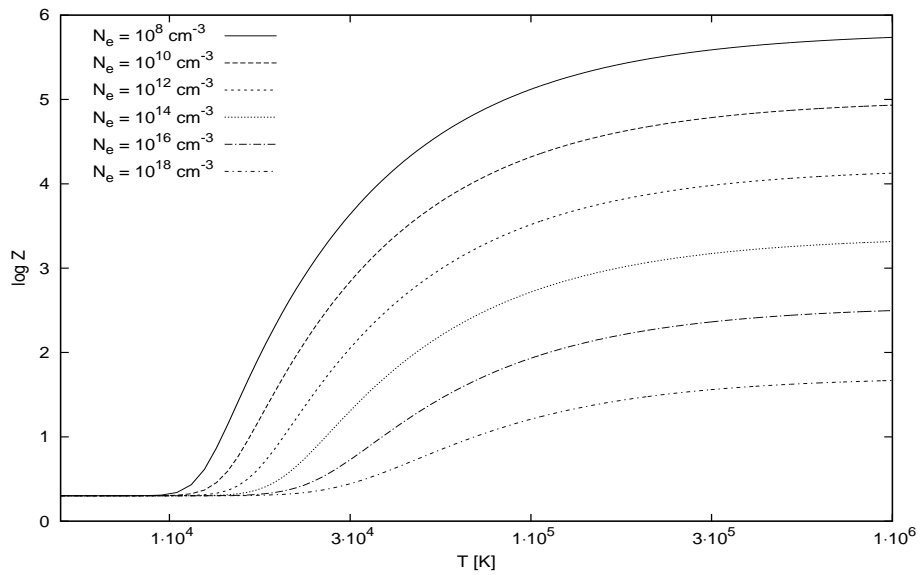
Tyto předpoklady jsou relativně přísné, Hooperova distribuce se proto příliš nehodí k obecnějšímu studiu plazmatu. Zejména v nitrech hvězd je dobře splněna podmínka rovnováhy, teploty elektronů i iontů jsou stejné. Ve hvězdných větrech a atmosférách mladších hvězd je dominantním prvkem vodík, převážnými narušiteli tedy jsou volné elektrony a protony, tedy jednoduše nabitě částice. Přestože hvězdné atmosféry v termodynamické rovnováze nejsou a nemohou tedy vyhovět první podmínce, jistě může v tomto případě model Q-fit dobře posloužit studiu atmosfér horkých hvězd s převážným obsahem vodíku (Hubený, Hummer & Lanz 1994).

### 2.6.1 Výpočet

Omezení parametru  $a \leq 0.8$  určuje pro danou koncentraci volných elektronů minimální teplotu, pro kterou je již Q-fit možné použít. V podmínkách hvězdných atmosfér je tato podmínka omezující pro vyšší koncentrace volných elektronů, tedy v řádech  $N_e \gtrsim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , kde minimální teplota je již řádově  $T_{\text{min}} \sim 10^3 \text{ K}$ .



Obrázek 2.7: Partiční funkce  $Z = Z(T)$ ,  $Z_r = 0$ .

Obrázek 2.8: Partiční funkce  $Z = Z(T)$ ,  $Z_r = 2$ .Obrázek 2.9: Partiční funkce  $Z = Z(T)$ ,  $Z_r = 4$ .

## 2.7 Analytický fit Holtsmarkovy partiční funkce

Pomocí spočtených dat partiční funkce s Holtsmarkovou distribuční funkcí jsme se pokusili nalézt vzorec, který by dobře popisoval chování  $Z = Z(N_e, T)$ . Nalezli jsme dobrý dvoudimenzionální fit v proměnných  $N_e$  a  $T$  ve tvaru:

$$Z(N_e, T) = A_1(N_e) \exp\left(-\frac{A_2}{T}\right) \left[1 - \left(1 + \frac{A_3}{T}\right) \exp\left(-\frac{A_4(N_e)}{T}\right)\right] + A_5. \quad (2.44)$$

Tvar rov. (2.44) je inspirován Planckovou-Larkinovou partiční funkcí. Parametry  $A_1$  a  $A_4$  jsou závislé na koncentraci vztahy:

$$A_1(N_e) = B_1 \cdot N_e^{B_2} \quad (2.45)$$

$$A_4(N_e) = B_3 \cdot N_e^{B_4}, \quad (2.46)$$

kde optimální hodnoty konstantních parametrů jsou:

$$A_2 = 154.399 \cdot 10^3 \text{ K} \quad (2.47)$$

$$A_3 = -1.038 \cdot 10^6 \text{ K}$$

$$A_5 = 2.099$$

$$B_1 = 1.123 \cdot 10^9 \text{ cm}^{3/B_2}$$

$$B_2 = -0.402$$

$$B_3 = 2.571 \cdot 10^7 \text{ cm}^{3/B_4}$$

$$B_4 = -0.038$$

Proložení bylo provedeno programem Gnuplot. Nejprve jsme pro konstantní hodnoty koncentrace provedli proložení v závislosti na teplotě, čímž byly postupně zjištěny hodnoty parametrů  $\{A_i\}$ . Dále byla prostudována závislost jednotlivých parametrů na koncentraci volných elektronů. Pro parametry závislé na koncentraci,  $A_1(N_e)$  a  $A_4(N_e)$  jsme obdobným postupem našli vyhovující funkci. Neurčitosti výsledných parametrů se pohybují od  $10^{-5} \%$  do  $2 \%$  v nejhorsích případech.

Naznačený fit lze s výhodou použít pro speciální případ vodíkového plazmatu, kde jako proměnné vystupují teplota a koncentrace volných elektronů. Nevýhodou je přirozeně nemožnost použít tento vzorec s uvedenými parametry k jiným chemickým kompozicím plazmatu. Naproti tomu Q-fit pracuje s proměnnými, které závisí nejenom na teplotě a koncentraci volných elektronů, ale i na náboji narušitele a kritické hodnotě distribuční funkce, kam vstupuje i ionizační potenciál.

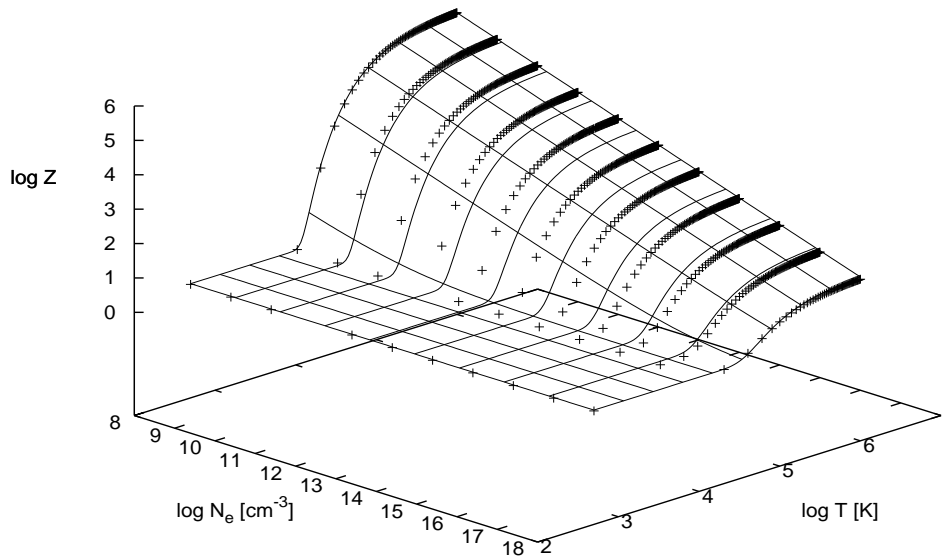
Dále funkce (2.44) simuluje celkové chování partiční funkce, nikoliv pouze váhového faktoru  $w_{ijk}$ . Je tak možno obejít nutnost sumace při výpočtu partiční funkce.

Limitní případ rov. (2.44) pro  $T \rightarrow 0$  je podle předpokladů roven parametru  $A_5$ , který se blíží dvojce, neboť atomy vodíku při nízkých teplotách zůstávají v základním stavu, do stavové sumy pak přispívá především stav s kvantovým číslem  $n = 1$  a statistická váha je rovna  $g_n = 2n^2 = 2$ . Limitní případ pro vysoké teploty  $T \rightarrow \infty$  dává:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} = A_5.$$

Vzorec (2.44) tedy představuje použitelný vztah pouze pro vymezené rozmezí teplot.

Neurčitost hodnoty partiční funkce je pro spodní spočítanou mez koncentrace elektronů přibližně rovna  $1.5 \%$  a pro horní mez koncentrace  $0.5 \%$ .

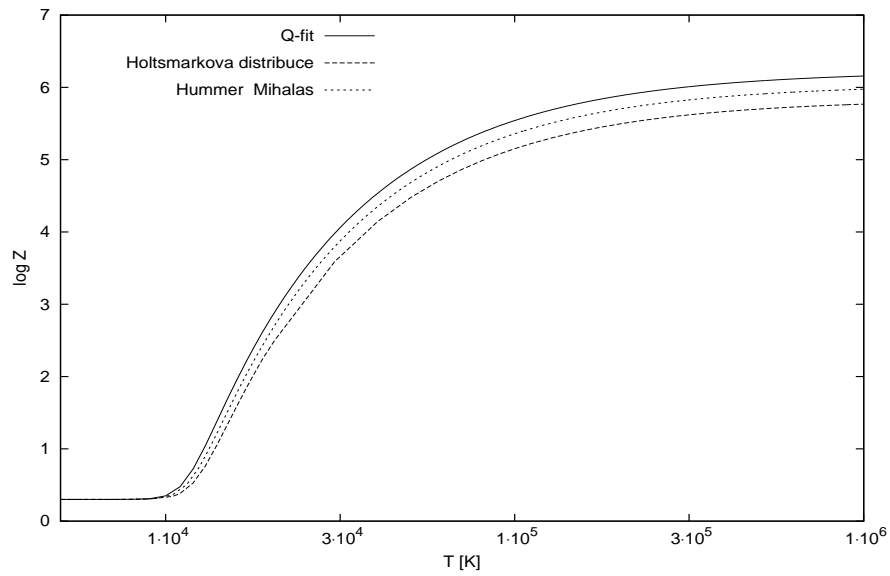


Obrázek 2.10: Proložení sítě bodů partiční funkce s Holtsmarkovou distribucí rovnicí (2.44). Zvolené rozmezí koncentrací  $8 < \log N_e < 18$ , rozmezí teplot pak  $2 < \log T < 6$ . Křížky označují spočtené hodnoty partiční funkce, spojitými čarami je naznačen průběh nalezené funkce  $Z = Z(N_e, T)$ .

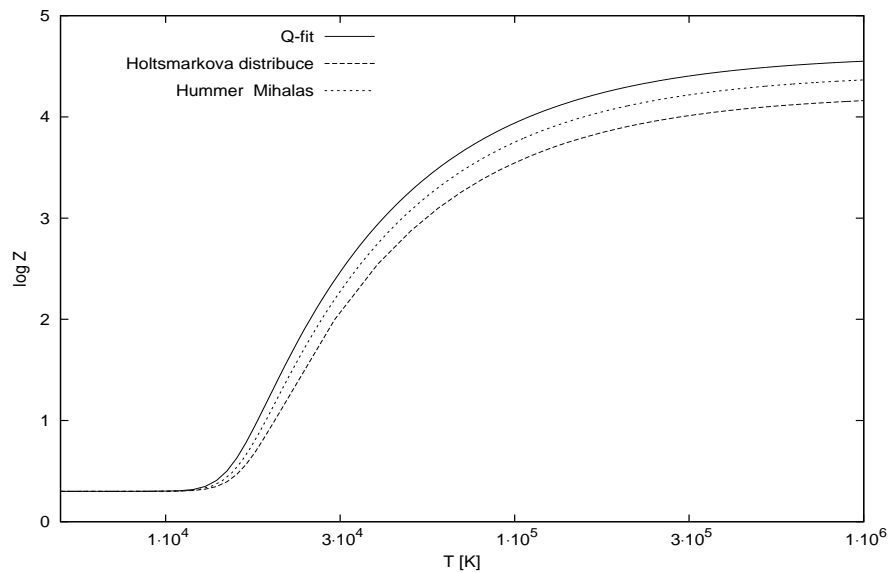
## 2.8 Porovnání jednotlivých modelů

Pro porovnání průběhu partiční funkce jsme použili modely Q-fit, Hummer & Mihalas a partiční funkci s Holtsmarkovou distribucí. Ve všech třech případech jsme neuvažovali srážky neutrálních částic, což odpovídá silně ionizovanému prostředí.

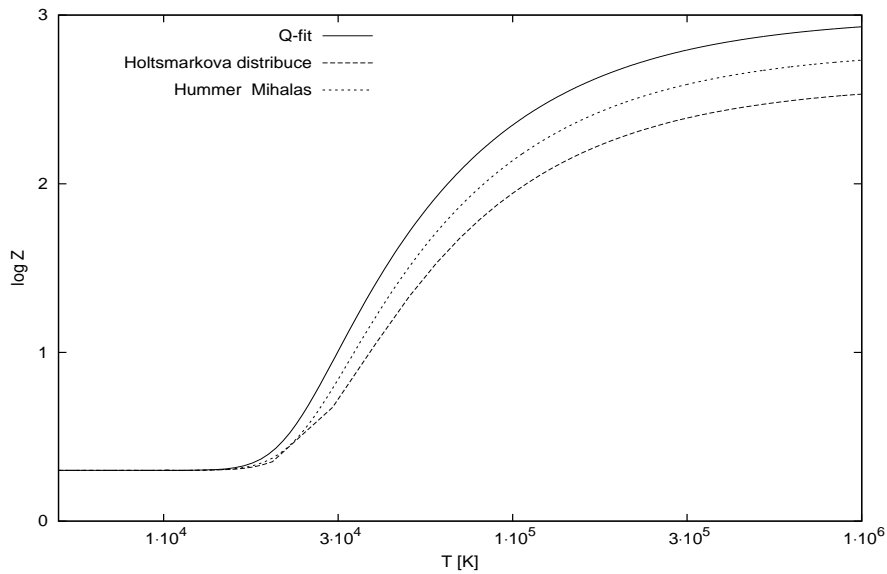
Z obrázků (2.11), (2.12) a (2.13) je vidět dobrá shoda všech tří modelů. Podrobnější srovnání a komentáře Holtsmarkovy a Hooperovy distribuce plazmatu jsou obsaženy v Trampedach a kol. (2006).



Obrázek 2.11: Modely Q-fit, Hummer & Mihalas a partiční funkce s Holtsmarkovou distribucí. Koncentrace volných elektronů  $N_e = 10^8 \text{ cm}^{-3}$ .



Obrázek 2.12: Stejný případ jako obr. (2.11) pro koncentraci  $N_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ .



Obrázek 2.13: Stejný případ jako obr. (2.11) pro koncentraci  $N_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .

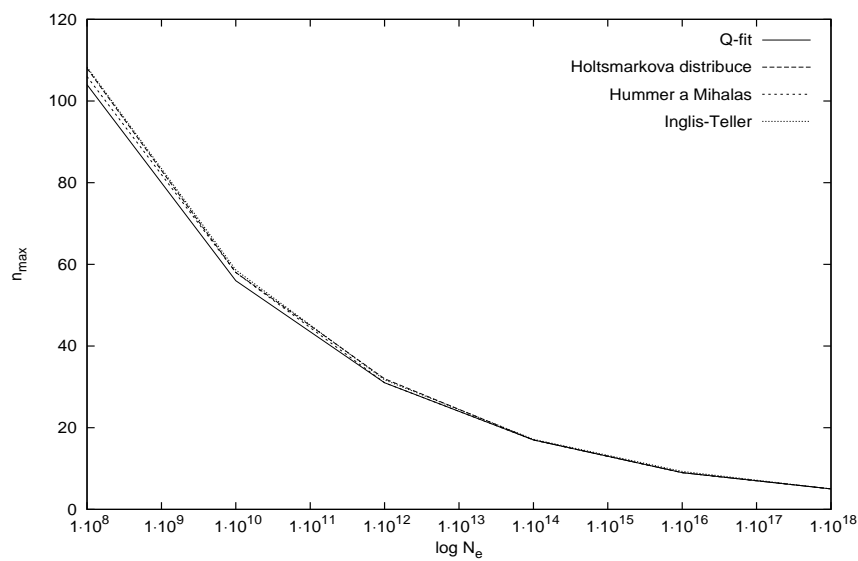
Pro první odhad koncentrace volných elektronů ve hvězdné atmosféře se využívá tzv. *Inglisův-Tellerův* vztah (Rutten 2003):

$$\log N_e = 23.26 - 7.5 \log n_{\max}, \quad (2.48)$$

kde  $n_{\max}$  je číslo nejvyšší pozorované čáry. Vztah (2.48) dává do souvislosti počet pozorovaných čar Balmerovy série (odpovídajících přechodům do první excitované hladiny s  $n = 2$ ) a koncentraci volných elektronů.

Tabulka 2.1: Příklady koncentrací volných elektronů a příslušného počtu Balmerových čar spočtených ze vztahu (2.48). Tabulka je převzata z Rutten (2003).

Hvězda	spektrální typ	$n_{\max}^{\text{Balmer}}$	$\log N_e$
$\alpha$ Cyg	A 2 I	29	12.2
Sirius	A 2 V	18	13.8
$\tau$ Sco	B 0 V	14	14.6
bílý trpaslík	D A	8	16.4



Obrázek 2.14: Porovnání maximální přispívající hladiny v závislosti na koncentraci volných elektronů při teplotě  $T = 6 \cdot 10^3$  K. Spočtené pro model Q-fit, Holtsmarkovu distribuční funkci, Hummer & Mihalas a Inglisův-Tellerův vzorec. Maximální kvantové číslo přispívající hladiny je definováno omezením  $w_n < e^{-1}$ . Ve všech případech je dosaženo dobré shody, mírné odchylky vykazuje pro nízké koncentrace volných elektronů model Q-fit.



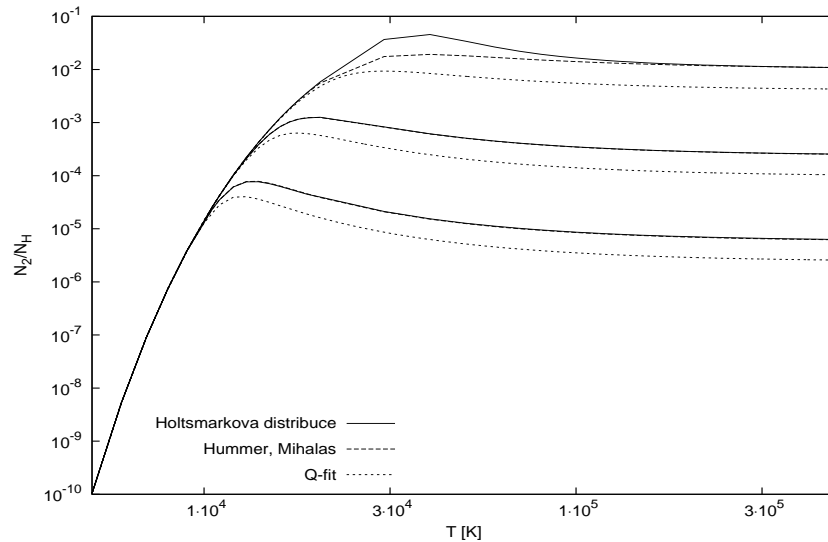
## Kapitola 3

# Relativní obsazení hladin

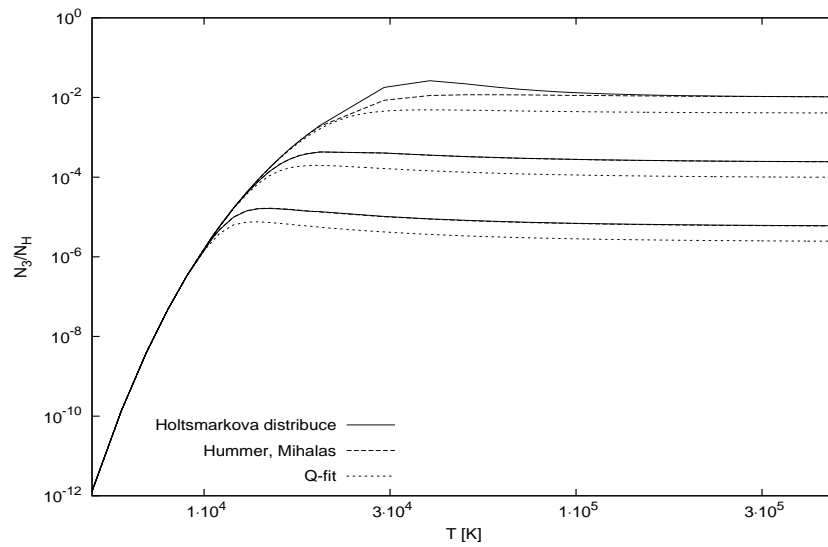
Jako příklad aplikace partiční funkce spočteme relativní obsazení prvních tří excitovaných hladin atomu vodíku s kvantovými čísly  $n = 2, 3, 4$ . Pro jednoduchost budeme předpokládat platnost Boltzmannova rovnovážného rozdělení. Pro podíl obsazení hladiny  $n$  a celkové koncentrace atomů vodíku  $N_{\text{H}}$  máme vyjádření:

$$\frac{N_n}{N_{\text{H}}} = \frac{g_n}{Z_{\text{H}}(N_e, T)} \exp \left[ -\frac{I_{\text{H}}}{k_{\text{B}}T} \left( 1 - \frac{1}{n^2} \right) \right], \quad (3.1)$$

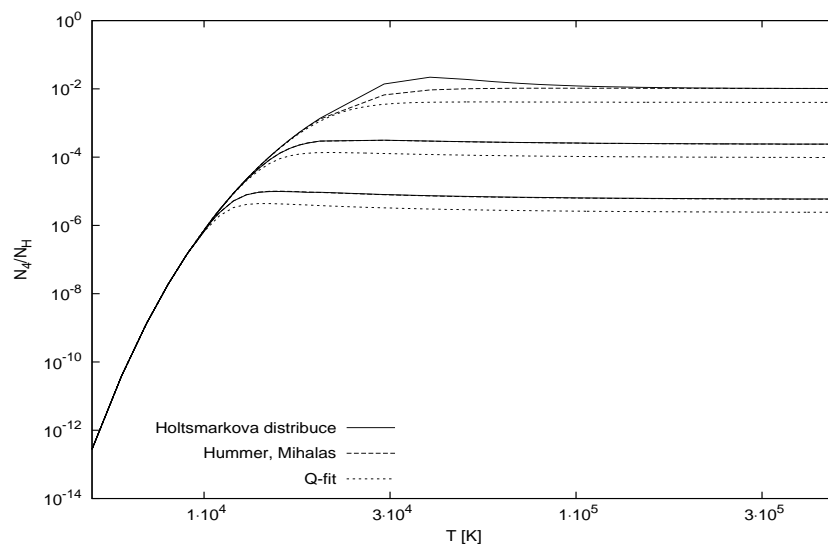
kde  $Z_{\text{H}}(N_e, T)$  je vnitřní partiční funkce atomu vodíku. Pro porovnání použijeme modely Q-fit, Hummer & Mihalas a partiční funkci založenou na Holtsmarkově distribuci.



Obrázek 3.1: Relativní obsazení první excitované hladiny  $n = 2$  vůči celkové koncentraci atomu vodíku. Spočteno pro koncentrace volných elektronů  $\log N_e = \{8, 12, 16\}$ .



Obrázek 3.2: Relativní obsazení hladiny s kvantovým číslem  $n = 3$  vůči celkové koncentraci atomu vodíku. Spočteno pro koncentrace volných elektronů  $\log N_e = \{8, 12, 16\}$ .



Obrázek 3.3: Relativní obsazení hladiny s kvantovým číslem  $n = 4$  vůči celkové koncentraci atomu vodíku. Spočteno pro koncentrace volných elektronů  $\log N_e = \{8, 12, 16\}$ .

Modely Hummer & Mihalas a partiční funkce s Holtsmarkovou distribucí se vzájemně téměř překrývají, pouze pro vysoké koncentrace  $N_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  vykazuje Holtsmarkova partiční funkce vyšší maximum. Dále se pro zvyšující se koncentraci volných elektronů posouvá maximum relativního obsazení hladiny k vyšším teplotám.

# Závěr

Předložená práce se věnuje problematice partičních funkcí. Obsazení hladin atomu nebo iontu je v plazmatu ovlivněno okolními, zpravidla nabitými částicemi. Partiční funkce poskytuje nástroj, který umožňuje potřebná okupační čísla nebo jiné důležité informace o termodynamickém stavu plazmatu nalézt.

První kapitola stručně shrnuje fyzikální motivace ke studiu partičních funkcí. Jsou uvedeny některé důležité základní pojmy a metody statistické termodynamiky, které jsou s partičními funkcemi spojeny. Dále je naznačeno použití a význam partičních funkcí v astrofyzice, zejména v oblasti modelování hvězdných atmosfér. V nejpodstatnější části první kapitoly zavádíme pravděpodobnostní formalismus, pomocí kterého již přestáváme pracovat pouze s ideálním plynem, přičemž je brán zřetel na termodynamickou konzistentnost. Příným důsledkem zavedení váhového faktoru  $w_{ijk}$  do partiční funkce je existence neideálního členu  $[f - \sum_i n_i (\partial f / \partial n_i)]$  ve vyjádření volné energie. Prakticky ve všech námi studovaných případech je tento člen nulový.

Druhá kapitola se zabývá výpočty a porovnáním několika různých modelů partiční funkce za předpokladu čistě vodíkového plazmatu. Je studován vliv interakcí atomu vodíku s nabitým prostředím i vliv srážek s neutrálními částicemi na obsazení hladin studovaného atomu. Při vzájemném porovnávání modelů je zanedbán vliv srážek neutrálních částic, jelikož oblast našeho zájmu je relativně zředěná a horké prostředí vrchních obálek a hvězdných větrů horkých hvězd, kde se setkáváme se silně ionizovaným plazmatem. Dominantní úlohu zde tedy hrají dalekodosahové coulombovské interakce. Nicméně model tvrdých koulí představuje relativně jednoduchý způsob, jak srážky neutrálních částic do modelů započítat. U studovaných modelů jsou diskutovány omezující podmínky použití a některá zásadní úskalí jednotlivých modelů.

Fyzikálně nejuvěrohodnější jsou především modely založené na distribuční funkci plazmatu. Naproti tomu modely založené na vzájemné interakci dvou či více nejbližších částic (např. NN aproximace nebo Planckova-Larkinova partiční funkce), nejsou použitelné zcela obecně, přestože za určitých předpokladů, např. při relativně nízkých hustotách a teplotách, mohou najít dobré uplatnění. Pro praktické uplatnění partičních funkcí při modelování atmosfér je potřeba brát ohled na čas potřebný k výpočtu partiční funkce. Z tohoto pohledu se jeví jako nejideálnější modely Q-fit a Hummer & Mihalas. Model Q-fit je založený na rozšířené Holtsmarkově distribuci (Hooper 1968), která bere v úvahu i vzájemnou korelaci částic plazmatu.

Ve třetí kapitole je na jednoduchém příkladu ukázána aplikace partičních funkcí k výpočtu relativního obsazení energiových hladin v atomu vodíku vůči celkové koncentraci vodíku. Pro jednoduchost je předpokládána platnost Boltzmannova rovnovážného rozdělení. Je vykreslen průběh relativního obsazení prvních tří excitovaných hladin v atomu vodíku pro tři různé modely partiční funkce.

Vzhledem ke komplexnosti a složitosti procesů, které v plazmatu probíhají, je třeba po-

važovat uvedené modely za přiblížení, pomocí kterých lze dosáhnout dobré shody s pozorovanými daty (viz např. Däppen a kol. 1987). Z jevů, které nejsou studovanými modely dostatečně popsány, můžeme uvést například ionizaci či rekombinaci prostřednictvím tunelového jevu, existenci tzv. kvazi-vázaných stavů elektronů, kdy elektron, uvolněný od svého původního jádra, může být stále vázaný v kompozici dvou, tří či více iontů ve svém okolí, vliv magnetického pole aj. Význam některých podobných jevů, které nejsou ve studovaných modelech dostatečně popsány, je z velké části komentován v článku Hummer & Mihalas (1988). V některých velmi komplikovaných případech je zřejmě potřeba rozšíření stávajících metod, které se k statistickému popisu plazmatu v současnosti používají.

# Literatura

- [1] Beth E., Uhlenbeck G. E., 1937, *Physica*, **4**, 915
- [2] Däppen W., 1980, *A&A*, **91**, 202
- [3] Däppen W., Anderson L., Mihalas D., 1987, *ApJ*, **319**, 195
- [4] Däppen W., Mihalas D., Hummer D. G. & Mihalas B. W., 1988, *ApJ*, **332**, 261
- [5] Ebeling W., Kraeft W. D. & Kremp D. & Röpke G., 1985, *ApJ*, **290**, 24
- [6] Fermi E., 1924, *Zs. Phys.*, **25**, 54
- [7] Fontaine G., Graboske H. C., Jr. & van Horn H. M., 1977, *ApJ Suppl.*, **35**, 293
- [8] Gibbs J. W., New York, 1902, *Elementary principles in statistical mechanics*
- [9] Graboske H. C., Harwood D. J. & Rogers F. J., 1969, *Phys. Rev.*, **186**, 210
- [10] Guénault T., Chapman & Hall, 1995, *Statistical physics, 2nd ed.*
- [11] Hála E., Boublík T., Academia, Praha, 1969, *Úvod do statistické termodynamiky*
- [12] Hooper C. F., 1966, *Phys. Rev.*, **149**, 77
- [13] Hubeny I., Hummer D. G. & Lanz T., 1994, *A&A*, **282**, 151
- [14] Hummer D. G., Mihalas D., 1988, *ApJ*, **331**, 794
- [15] Irwin A. W., 1981, *ApJS*, **45**, 621
- [16] Kvasnica J., Academia, Praha, 1983, *Statistická fyzika*
- [17] Landau L. D., Lifschitz E. M., *Course of theoretical physics, vol. 3: Quantum mechanisc Nonrelativistic theory*
- [18] Landau L. D., Lifschitz E. M., *Course of theoretical physics, vol. 5: Statistical physics*
- [19] Larkin A. I., 1960, *Zh. Eksper. Teor. Fiz.*, **38**, 1986
- [20] Levinson N., 1949, *K. Dansk. Vidensk. Selsk.*, **25**, No. 9
- [21] Luo G., 1994, *A&A*, **284**, 679
- [22] Mihalas D., Däppen W. & Hummer D. G., 1988, *ApJ*, **331**, 815

- 
- [23] Mikulášek Z., Krtička J., Brno, 2007, *Fyzika horkých hvězd*
- [24] Nayfonov A., 1998, *ESA SP*, **418**, 647
- [25] Nayfonov A., Däppen W., Hummer D. G. & Mihalas D., 1999, *ApJ*, **526**, 451
- [26] Rogers F. J., 1986, *ApJ*, **310**, 723
- [27] Rogers F. J., 1990, *ApJ*, **352**, 689
- [28] Rogers F. J., Iglesias C. A., 1992, *A&A*, **23**, 133
- [29] Rouse C. A., 1983, *ApJ*, **272**, 377
- [30] Rutten R. J., Institute of Theoretical Astrophysics Oslo, 2003, *Radiative Transfer in Stellar Atmospheres*
- [31] Trampedach R., Däppen W., Baturin V. A., 2006, *ApJ*, **646**, 560
- [32] Unsöld A., 1948, *Z. Astrophys.*, **24**, 355
- [33] <http://en.wikipedia.org/>