Astrofizică stelară
Cursul 5

Victor E. Ambruș

Universitatea de Vest din Timișoara

Conținutul cursului

III.3. Ecuațiile Boltzmann și Saha.
III.3.1. Modelul Bohr.

- Nivelele energetice electronice ale unui atom hidrogenoid au fost prima dată calculate de Bohr pornind de la presupunerea că momentul cinetic orbital este cuantificat:

$$L_n = n\hbar, \tag{1}$$

unde n reprezintă *numărul cuantic principal* al electronului.

- Presupunând că orbitele electronilor sunt circulare, rezultă:

$$\frac{\mu v_n^2}{r_n} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n^2} \Rightarrow r_n = \frac{m_e n^2}{\mu Z} a_0,$$
$$\mu = \frac{m_e m_{\mathrm{nucleu}}}{m_e + m_{\mathrm{nucleu}}}, \qquad a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}, \tag{2}$$

unde μ este masa redusă a sistemului nucleu-electron iar a_0 reprezinta **raza Bohr**.

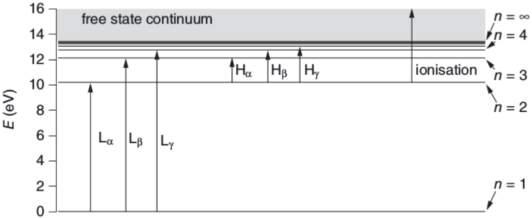
III.3.2. Nivelele energetice ale atomilor hidrogenoizi.

- Energia aferentă nivelului n este:

$$\varepsilon_n = -\frac{Z^2\mu}{m_e n^2} R_E, \qquad R_E = \frac{m_e}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2, \tag{3}$$

  unde $R_E \simeq 13,6\ \mathrm{eV}$ este energia Rydberg.
- În cazul atomului de hidrogen, $Z = 1$, $\mu/m_e = 1$ iar $R_E = E_\infty$ este energia de ionizare, astfel încât $\varepsilon_n = -E_\infty/n^2$.
- În cele ce urmează, este convenabilă exprimarea energiei nivelului n față de energia nivelului fundamental:

$$E_n = \varepsilon_n - \varepsilon_1 = E_\infty\left(1 - \frac{1}{n^2}\right). \tag{4}$$



- Tranzițiile între nivelul n și nivelele superioare dau naștere următoarelor serii spectrale:

$n = 1$: Seria Lyman;
$n = 2$: Seria Balmer;
$n = 3$: Seria Paschen;
$n = 4$: Seria Brackett.
ș.a.m.d.

- În funcție de distanța k dintre nivelul superior $m = n + k$ și n, liniile poartă denumirile:

$k = 1$: Linia α (linia Ly-α corespunde tranziției dintre $n = 1$ și $n = 2$);
$k = 2$: Linia β (linia Hβ corespunde tranziției dintre $n = 2$ și $n = 4$);
etc.

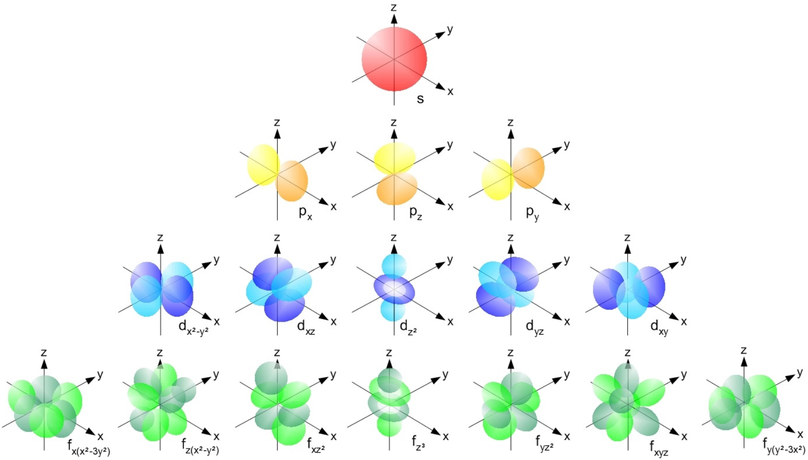
III.3.3. Degenerarea nivelelor energetice (ec. Schrödinger).

- Modelul Bohr explică existența nivelelor energetice discrete într-un atom și oferă o bună aproximație pentru valoarea acestora ca funcție de numărul cuantic principal n.

- Valoarea obținută de Bohr coincide cu cea obținută folosind ecuația Schrödinger.

- Ec. Schrödinger permite demonstrarea degenerării nivelului energetic n datorită valorilor permise momentului cinetic orbital $l = 0, 1, \ldots n - 1$ și a numărului magnetic $m = -l, -l + 1, \ldots l$ (în total n^2 stări).

- Suplimentar față de momentul cinetic orbital, electronul posedă un moment cinetic intrinsec (spinul), care dublează gradul de degenerare a stărilor energetice.


s
p_x
p_z
p_y
$d_{x^2-y^2}$
d_{xz}
d_{z^2}
d_{yz}
d_{xy}
$f_{x(x^2-3y^2)}$
$f_{z(x^2-y^2)}$
f_{xz^2}
f_{z^3}
f_{yz^2}
f_{xyz}
$f_{y(y^2-3x^2)}$

III.3.4. Ecuația Boltzmann pentru nivele excitate.

- Spectrul de absorbție, determinat de tranzițiile permise între nivelele atomice, depinde de stadiul de excitare al atomului.
- Când procesele de coliziune domină repartiția energiei într-un gaz, raportul populațiilor de atomi în stările energetice E_i și E_j este dat de ecuația Boltzmann:

$$\frac{n_i}{n_j} = \frac{g_i}{g_j} \exp\left[-\frac{E_i - E_j}{K_B T}\right],$$

unde g_i, n_i și E_i reprezintă gradul de degenerare, populația și energia raportată față de nivelul fundamental aferente stării i.

- Luând $j = 1$ și notând cu $n = \sum_{\ell=1}^{\infty} n_\ell$ populația totală însumată pe toate nivelele energetice ale atomului, rezultă:

$$\frac{n_i}{n} = \frac{g_i}{U} e^{-E_i/K_B T}, \qquad U = \sum_{\ell=1}^{\infty} g_\ell e^{-E_\ell/K_B T}, \tag{5}$$

unde U reprezintă funcția de partiție a ionului corespunzător.

III.3.5. Regularizarea funcției de partiție.

- În cazul atomului de hidrogen, $g_\ell = 2\ell^2$, în timp ce $E_\ell = E_\infty(1 - 1/\ell^2)$.
- Deoarece $E_\ell \to E_\infty$ când $\ell \to \infty$, $U_{\rm H}$ diverge.
- Divergență este datorată luării în calcul a nivelelor energetice cu ℓ mare, cărora le corespund $r_\ell = a_0\ell^2$ (a_0 este raza Bohr).
- Într-un sistem real, distanța medie $2d$ dintre atomi este finită $\Rightarrow$ doar nivelele cu $r_\ell < d$ reprezintă stări legate.
- Funcția de partiție $U_{\rm H}$ se calculează pentru $1 \le \ell \le \ell_{\rm max}$, unde

$$\ell_{\rm max} = \sqrt{\frac{d}{a_0}} = \frac{1}{n^{1/6}\sqrt{2a_0}}, \tag{6}$$

  unde $n = 1/(2d)^3$ este densitatea de ioni.
- În cazul atomilor complet ionizați, $U = 1$ deoarece aceștia pot exista într-o singură stare (starea fundamentală).

III.3.6. Coeficienții Einstein.

- Într-un gaz oarecare au loc procese de excitare radiativă (B_{ij}), dezexcitare spontană (A_{ji}) și dezexcitare radiativă (B_{ji}) sub influența unui flux de radiație I_ν.
- Impunând echilibrul secular se obține următoarea ecuație:

$$n_i B_{ij} I_\nu = n_j A_{ji} + n_j B_{ji} I_\nu, \tag{7}$$

  unde n_i și n_j sunt populațiile nivelelor i și j iar B_{ij}, A_{ji} și B_{ji} reprezintă coeficienții Einstein.
- Echilibrul secular impune următoarea relație pentru I_ν:

$$I_\nu = \frac{n_j A_{ji}}{n_i B_{ij} - n_j B_{ji}} = \frac{A_{ji}}{B_{ji}} \left[\frac{g_i B_{ij}}{g_j B_{ji}} e^{h\nu_0 / K_B T} - 1 \right]^{-1}, \tag{8}$$

  unde s-a aplicat statistica Boltzmann.
- Impunând ca $I_\nu = B_{\nu_0}$ (radiația corpului negru), rezultă:

$$\frac{A_{ji}}{B_{ji}} = \frac{2h\nu_0^3}{c^2}, \qquad \frac{g_i B_{ij}}{g_j B_{ji}} = 1. \tag{9}$$

- Valorile coeficienților Einstein se calculează folosind mecanica cuantică sau se determină experimental.

III.3.7. Ecuația Saha.

[Vezi Harwit 4:16 The Saha Equation (pg. 141)]

- Fie n_a numărul total de atomi aflați în starea de ionizare a.
- Numărul de atomi n_{a+1} în starea de ionizare $a+1$ (având cu un electron mai puțin decât cei din starea a) este dat de ecuația Saha:

$$\frac{n_{a+1}}{n_a} = \frac{2}{n_e} \left(\frac{2\pi m_e K_B T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{U_{a+1}}{U_a} e^{-E_{\infty,a}/K_B T}, \tag{10}$$

  unde n_e este densitatea electronilor liberi iar $E_{\infty,a}$ reprezintă energia de ionizare a ionului în starea a (exprimata față de starea fundamentală a ionului a).
- n_{a+1} crește relativ la n_a când T crește, însă scade cu n_e deoarece probabilitatea de recombinare crește cu n_e.
- Fracția de ionizare f_a reprezintă raportul dintre densitatea ionilor în starea a față de densitatea tuturor ionilor ai aceluiași atom:

$$f_a = \frac{n_a}{n_{\rm I} + n_{\rm II} + \dots} = \frac{\left(\frac{n_a}{n_{a-1}}\right)\left(\frac{n_{a-1}}{n_{a-2}}\right)\dots\left(\frac{n_{\rm II}}{n_{\rm I}}\right)}{1 + \left(\frac{n_{\rm II}}{n_{\rm I}}\right) + \left(\frac{n_{\rm II}}{n_{\rm I}}\right)\left(\frac{n_{\rm III}}{n_{\rm II}}\right) + \cdots}. \tag{11}$$

- Energiile de ionizare sunt maxime pentru ionii având configurațiile electronice ale gazelor nobile (nr. de electroni este 2, 10, 20, etc.)

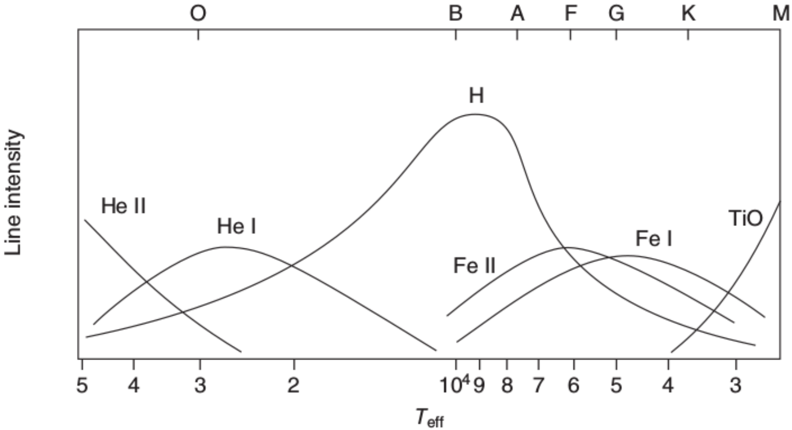
- Să considerăm că la o anumită adâncime, plasma stelară este alcătuită din hidrogen, heliu și ionii lor, împreună cu electronii aferenți acestora.
- Avem deci 6 necunoscute aferente celor 6 specii de particule: $n_{\rm HI}$, $n_{\rm HII}$, $n_{\rm HeI}$, $n_{\rm HeII}$, $n_{\rm HeIII}$ și n_e.
- Se pot scrie ecuații Saha pentru $n_{\rm HII}/n_{\rm HI}$, $n_{\rm HeII}/n_{\rm HeI}$ și $n_{\rm HeIII}$ / $n_{\rm HeII}$.
- Aceste 3 ecuații sunt suplimentate de ecuația de stare a gazului ideal:

$$P = n_{\rm tot} K_B T, \qquad n_{\rm tot} = n_{\rm HI} + n_{\rm HII} + n_{\rm HeI} + n_{\rm HeII} + n_{\rm HeIII} + n_e, \quad (12)$$

  împreună cu condiția de neutralitate $n_e = n_{\rm HII} + n_{\rm HeII} + 2n_{\rm HeIII}$.
- Pentru a închide sistemul de ecuații, este necesară specificarea fracțiilor de hidrogen ($A_{\rm H}$) și heliu ($A_{\rm He}$), definite prin:

$$\begin{aligned} A_{\rm H} &= \frac{n_{\rm HI} + n_{\rm HII}}{n_{\rm HI} + n_{\rm HII} + n_{\rm HeI} + n_{\rm HeII} + n_{\rm HeIII}}, \\ A_{\rm He} &= \frac{n_{\rm HeI} + n_{\rm HeII} + n_{\rm HeIII}}{n_{\rm HI} + n_{\rm HII} + n_{\rm HeI} + n_{\rm HeII} + n_{\rm HeIII}}, \end{aligned} \quad (13)$$

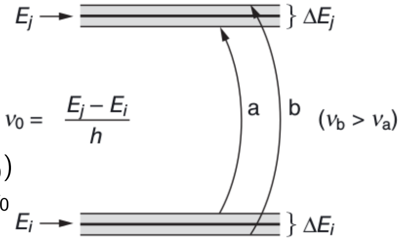
  ținând cont că $A_{\rm H} + A_{\rm He} = 1$.



O
B
A
F
G
K
M
H
He II
He I
TiO
Fe I
Fe II
Line intensity
5
4
3
2
10⁴
9
8
7
6
5
4
3
T_{eff}

III.4. Lărgirea liniilor spectrale.
III.4.1. Introducere

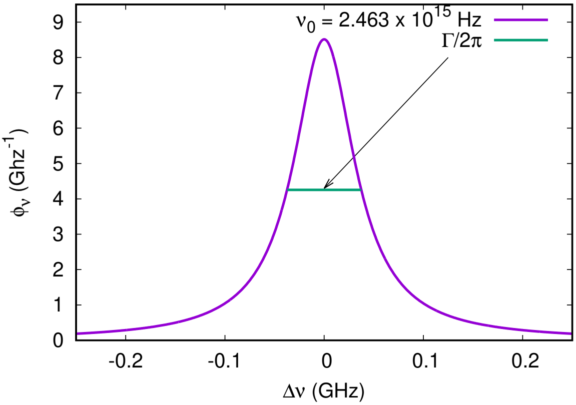
- Modelarea proceselor care implică liniile spectrale ale atomilor se face utilizând profilul liniei φ_ν.
- Pentru o tranziție între două linii ideale i și j, $\varphi_\nu \sim \delta(\nu - \nu_0)$ este infinit localizat pe frecv. ν_0 coresp. tranziției, $\nu_0 = (E_j - E_i)/h$.



- În realitate, liniile spectrale au o lățime specifică $\Delta\nu > 0$, definită ca intervalul de frecvență centrat pe ν_0 pentru care intensitatea liniei satisface $\varphi_\nu > \varphi_{\nu_0}/2$.
- Lărgirea liniilor spectrale ale atomilor și moleculelor se datorează în principal următoarelor 3 cauze:
  - Lărgimea naturală (datorată principiului de incertitudine);
  - Lărgirea Doppler (datorată mișcării termice și a rotației stelei);
  - Lărgirea datorată coliziunilor;
  - Lărgirea datorată presiunii.

III.4.2. Lărgimea naturală: Profilul Lorentz.

- Deoarece nivelele energetice superioare nivelului fundamental nu sunt stabile, durata lor de viață Δt este finită, ceea ce duce la incertitudinea în energie:
$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{14}$$
- Unei linii de frecvență ν_0 îi corespunde următorul *profil Lorentz*:
$$\varphi_\nu = \frac{\Gamma/4\pi^2}{(\nu - \nu_0)^2 + (\Gamma/4\pi)^2}, \qquad \int_0^\infty d\nu\, \varphi_\nu \simeq 1, \tag{15}$$
unde Γ este constanta de atenuare radiativă iar $\Gamma/2\pi$ reprezintă lățimea întreagă a profilului la jumătatea intensității.
- De regulă, timpul de viață al nivelelor excitate este de ordinul $10^{-8}\,\mathrm{s}$, ducând la $\Delta\nu \simeq 10^8\,\mathrm{Hz}$, sau $\Delta\lambda \simeq 10^{-4}$ Å (mult mai puțin decât ceea ce se observă în spectrele stelare).



Profilul Lorentz φ_ν: lărgimea naturală a liniei corespunzătoare tranziției Lα a hidrogenului ($\nu_0 = 2,463 \times 10^{15}\,\mathrm{Hz}$), având lățimea întreagă $\Gamma/2\pi \simeq 75\ \mathrm{MHz}$.

III.4.3. Lărgirea Doppler.

- Să presupunem că distribuția atomilor este de tip Maxwell-Boltzmann:

$$f(\mathbf{V}) = \left(\frac{m}{2\pi K_B T}\right)^{3/2} e^{-m\mathbf{V}^2/2K_B T}. \tag{16}$$

- Viteza medie este:

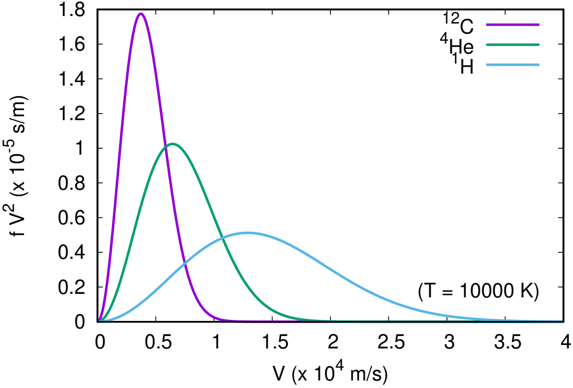
$$\overline{V} = \int d^3V\, f\, V = \sqrt{\frac{8K_B T}{\pi m}}, \tag{17}$$

în timp ce viteza cea mai probabilă este dată de:

$$\left.\frac{d(fV^2)}{dV}\right\rfloor_{V=V_0} = 0 \Rightarrow V_0 = \sqrt{\frac{2K_B T}{m}}. \tag{18}$$

- Distribuția Maxwell-Boltzmann poate fi deci scrisă sub forma:

$$f(\mathbf{V}) = \frac{1}{(V_0\sqrt{\pi})^3} e^{-\mathbf{V}^2/V_0^2}. \tag{19}$$



Distribuția Maxwell-Boltzmann la $T = 10.000\ \mathrm{K}$ (normată la unitate) a atomilor de carbon și hidrogen.

Funcția Voigt.

- Să considerăm un atom care se deplasează cu viteza $V_x \ll c$ înspre observator.
- Un foton de frecvență ν va avea frecvența $\nu(1 - V_x/c)$ în sistemul propriu al atomului.
- Drept urmare, profilul liniei se va modifica după cum urmează:

$$\varphi_\nu \to \varphi_\nu(V_0) = \int d^3 V f(\mathbf{V}) \varphi_{\nu(1-V_x/c)}$$
$$= \frac{\nu_0}{\nu} \frac{a}{\pi^{3/2} \Delta\nu_D} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{\exp\left[-y^2 \left(\frac{\nu_0}{\nu}\right)^2\right]}{(v - y)^2 + a^2}. \qquad (20)$$

- Integrarea în ec. (20) se face după $y = \Delta\nu/\Delta\nu_D$, iar

$$\Delta\nu = \frac{\nu V_x}{c}, \qquad \Delta\nu_D = \frac{\nu_0 V_0}{c}, \qquad a = \frac{\Gamma}{4\pi\Delta\nu_D}, \qquad v = \frac{\nu - \nu_0}{\Delta\nu_D}.$$

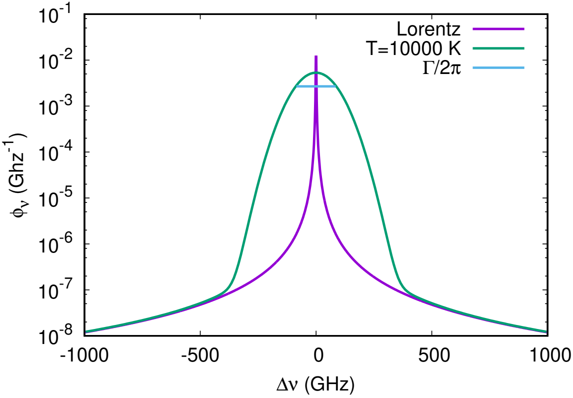
- Considerând deplasări Doppler mici (aferente limitei $V_0 \to 0$), rezultă:

$$\varphi_\nu(V_0) = \varphi_\nu(0)\left\{1 - 2\pi^2\left(1 - \frac{6}{\Gamma\varphi_\nu(0)}\right)\left[\frac{\nu\varphi_\nu(0)V_0}{c}\right]^2 + \dots\right\}. \tag{21}$$

- Deoarece termenul $\varphi_\nu(0)\nu \sim \nu^{-1}$ pentru $|\nu - \nu_0| \gg \Gamma$, corecția Doppler afectează semnificativ doar zona centrală a spectrului ($\nu \simeq \nu_0$), în timp ce lărgirea naturală rămâne dominantă în zonele periferice.
- Făcând aproximația $\nu/\nu_0 \simeq 1$, $\varphi_\nu(V_0) \simeq \varphi_{\nu,\mathrm{Voigt}}$ se poate scrie folosind funcția Voigt $H(a, v)$:

$$\varphi_{\nu,\mathrm{Voigt}} = \frac{H(a,v)}{\Delta\nu_D\sqrt{\pi}}, \qquad H(a,v) = \frac{a}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dy\,\frac{e^{-y^2}}{(v-y)^2 + a^2}, \tag{22}$$

- unde raportul $U(a, v) = H(a, v)/\sqrt{\pi}$ poartă numele de funcție Voigt normată.



Lărgirea Doppler a liniei corespunzătoare tranziției Ly-α a hidrogenului ($\nu_0 = 2,44 \times 10^{15}\,\mathrm{Hz}$) datorată agitației termice la $T = 10000\ \mathrm{K}$. Lățimea întreagă este în acest caz $\Gamma/2\pi \simeq 175\ \mathrm{GHz}$ (comparat cu $\Gamma/2\pi \simeq 0.095\ \mathrm{GHz}$ aferentă profilului Lorentz).

III.5.6. Lărgirea datorată rotației.

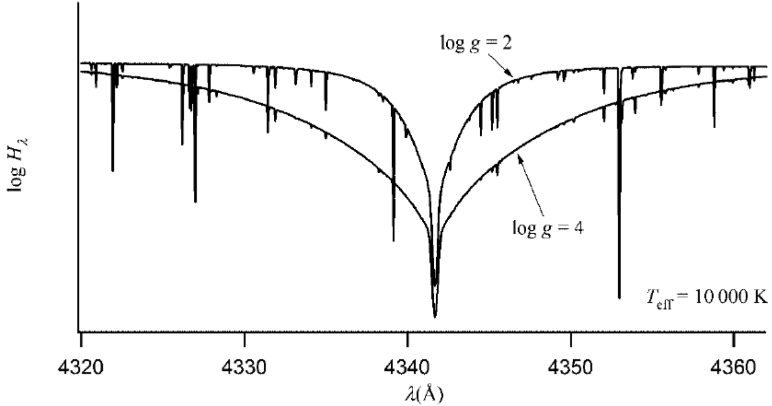
- Dacă axa de rotație a unei stele nu este paralelă cu direcția de observare, rotația acesteia induce o lărgire de tip Doppler a liniilor spectrale.
- Efectul variază monoton, astfel că spectrele atomilor aflați pe partea care intră vor fi deplasate spre ultraviolet, în timp ce cele corespunzătoare atomilor care ies vor fi deplasate înspre infraroșu.
- Spectrele atomilor coliniari cu observatrul și axa de rotație rămâne nealterat.
- Variația lungimii de undă este proporțională cu viteza pe direcția de observație V_r:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} = \frac{V_r}{c}. \tag{23}$$

- Rotațiile suficient de rapide pot duce la fuziunea liniilor spectrale care altfel ar apărea distincte.

III.5.7. Lărgirea datorată coliziunilor (presiunii).

- În urma interacțiunii cu atomii învecinați, spectrele atomice suferă modificări datorită perturbațiilor asupra potențialului Coulombian care generează nivelele într-un atom liber.
- Interacțiunea cu ioni sau electroni poate duce la despicarea nivelelor energetice prin efect Stark (despicarea în câmp electric), însă deoarece diferența energetică este prea mică, rezultatul observat este o lărgire a liniilor respective.
- Interacțiunea cu momentul dipolar al atomilor neutri duce la lărgirea de tip Van der Waals.
- Atât lărgirea prin efect Stark, cât și cea de tip Van der Waals, duc la profile de tip Lorentz și se pot lua în considerare prin adăugarea unei constante de atenuare prin coliziune Γ_{col} la constanta de atenuare radiativă Γ.



Lărgirea în atmosfera a două stele cu $T_{\mathrm{efectiv}} = 10.000\ \mathrm{K}$ având $\log g = 2$ ($1\ \mathrm{m/s}^2$, stea supergigantă) și $\log g = 4$ ($100\ \mathrm{m/s}^2$, stea de pe secvența principală). Linia reprezentată corespunde tranziției Balmer-γ ($n = 2$–$n = 5$). Liniile vizibile în spectrul stelei cu $g = 2$ (corespunzătoare metalelor) dispar la $g = 4$.

Probleme

1. Să se găsească temperatura la care densitatea de atomi de hidrogen în starea fundamentală ($n = 1$) este egală cu cea corespunzătoare celei de-a doua stări excitate ($n = 3$). [R: 63.850 K]
2. Să se găsească temperatura la care densitatea de atomi de hidrogen în prima stare excitată este egală cu o zecime din cea corespunzătoare stării fundamentale. [R: 32.088 K]
3. Presupunem că $g_n = 4n^2$ pentru un anumit ion. Știind că la $T = 40.000\ \mathrm{K}$, $n_3 = n_1/4$, să se găsească E_3. [R: $E_3 \simeq 12,36\ \mathrm{eV}$]
4. Să se găsească fracția de hidrogen neutru într-o stea compusă din hidrogen pur la o adâncime unde $T = 12.000\ \mathrm{K}$ și $n_e = 2 \times 10^{15}\,\mathrm{cm}^{-3}$, presupunând că $U_I = 2$ ($U_{II} = 1$). [$f_I \simeq 24,5\ \%$]
5. Să se calculeze densitatea electronilor liberi n_e într-un gaz la $T = 14.000\ \mathrm{K}$ compus din hidrogen pur unde 70% sunt ionizați, presupunând că $U_I = 2$. [$n_e = 2,18 \times 10^{16}\mathrm{cm}^{-3}$]
6. Care este fracția de ionizare a HI la o adâncime la care $T = 9000\ \mathrm{K}$ și $P = 14\ \mathrm{Pa}$ într-o stea compusă din hidrogen pur (presupunând că $U_{\mathrm{HI}} = 2$)? [R: $f \simeq 55\%$]

Probleme

7. Să se calculeze densitatea totală n_{tot} și densitatea masică ρ într-o stea compusă din hidrogen pur la o adâncime la care $T = 9500\ \mathrm{K}$ dacă 35% dintre atomi sunt ionizați (presupunând că $U_{\mathrm{HI}} = 2$). Ce procent din atomii de hidrogen sunt pe nivelul energetic $n = 2$?
8. La o anumită adâncime într-o stea, trei dintre ionii unui element au fracțiile de ionizare $f_1 = 0.1$, $f_2 = 0.85$ și $f_3 = 0.05$. Cunoscând funcțiile de partiție $U_1 = 1$, $U_2 = 2$ și $U_3 = 8$ și energiile de ionizare $E_{\infty,1} = 30\ \mathrm{eV}$ și $E_{\infty,2} = 55\ \mathrm{eV}$, să se calculeze n_e și T la această adâncime. Se presupune că ionul 3 are cu un electron mai puțin decât ionul 2, care are cu un electron mai puțin decât ionul 1.
[R: $T = 51,200\ \mathrm{K}$; $n_e = 1,4 \times 10^{25}\ \mathrm{m}^{-3}$]