ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 5, № 1 (2001) с. 91–100

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 5, No. 1 (2001) p. 91–100

НЕРІВНОВАЖНЕ УТВОРЕННЯ СЛАБКИХ ЛІНІЙ РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНИХ ЕЛЕМЕНТІВ У СОНЯЧНІЙ АТМОСФЕРІ: CeII

М. Ковальчук, М. Стоділка, Я. Благодир, М. Гірняк
Астрономічна обсерваторія Львівського національного університету імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 8, 79005, Львів, Україна
(Отримано 11 листопада 2000 р.; в остаточному вигляді — 9 лютого 2001 р.)

Подано результати розв'язку рівняння переносу випромінювання за відсутности локальної термодинамічної рівноваги (ЛТР) в сонячній атмосфері для складних багаторівневих моделей атомів рідкісноземельних елементів (РЗЕ). Розрахунки проведено методом прискореної Λ-ітерації. Отримано кількісні значення параметрів, що описують відхилення від ЛТР на різних рівнях атмосфери Сонця і їх дію на фраунгоферові лінії — заселеності їх рівнів, функцію джерела, профілі, еквівалентні ширини тощо. Отримано й пояснено перехід в емісію ліній на краю диска Сонця, що узгоджується зі спостережуваними даними й підтверджує велику роль не-ЛТР ефектів у механізмі утворення слабких складних спектрів РЗЕ на Сонці.
Ключові слова: перенесення випромінювання, не-ЛТР ефекти, профілі ліній, рідкісноземельні елементи.

PACS number(s): 96.60-FS

I. ВСТУП

Дефіцит важких елементів у зорях приблизно однаковий, за винятком тих, що беруть участь у процесах нейтронного захоплення. До елементів, що є сильними поглиначами нейтронів при повільних *s*- і швидких *r*-процесах нейтронного захоплення, належать рідкісноземельні елементи (РЗЕ). Вони дають один із максимумів на кривій поширености елементів у Всесвіті, їхні лінії першими переходять від поглинання до емісії під час повних сонячних затемнень, їм притаманні емісійні особливості на диску Сонця. Інтенсивності ліній РЗЕ виявляють часові зміни в спектрах більшости магнетних зір, а також зміни еквівалентних ширин ліній, що корелюють з рівнем сонячної активности, тоді як лінії інших елементів практично не змінюються. Це відкриває можливість точнішої атмосферної діягностики Сонця і зір.

II. СТАН ДОСЛІДЖЕННЯ ЛІНІЙ РЗЕ В АТМОСФЕРІ СОНЦЯ

На сьогодні серед праць з інтерпретації фраунгоферового спектра РЗЕ, на наш погляд, дослідження Кенфільда [1–3] і далі лишаються найвагомішими. Але і в нього аналіз спектрів РЗЕ виконаний лише якісно, хоч і в припущенні відхилення від локальної термодинамічної рівноваги (ЛТР). Кенфільд уводив чисто формальний параметр Δ для врахування долі розсіяння в утворенні ліній [1,2]. Значення Δ підбирав емпірично, узгоджуючи теоретичні і спостережувані центральні глибини ліній у різних точках диска Сонця. При цьому залучав низку спрощувальних припущень. Пізніше Кенфільд [3] відмовився від такого формалізму і провів прямі теоретичні розрахунки величин, що визначають долю внеску різних механізмів обміну енерґією в утворення ліній. Але всі ці розрахунки були проведені тільки для рівня оптичної глибини $\tau = 1$. Крім цього, в цих працях нехтувано ефектами розширення ліній. Безпосередньо близькі за змістом до цих досліджень праці Степанян (Стефанович) [4,5]. У них досліджено поведінку ліній РЗЕ при переході від центра до краю в спокійних й активних ділянках на Сонці, а також існування змін із часом ліній РЗЕ в спектрі Сонця як зорі [6,7].

Пізніше ми неодноразово досліджували лінії РЗЕ в незбуреній фотосфері Сонця [8,9] і показали, що хоча лінії РЗЕ є слабкими, але, внаслідок своїх атомних властивостей, вони утворюються порівняно високо у фотосфері Сонця ($h \approx 150 \div 200$ км) і їхня функція джерела контролюється фотоелектричними процесами. Таким чином, було стверджено необхідність ураховувати відхилення від ЛТР. Рівняння переносу випромінювання розв'язали в рамках класичного трактування цієї проблеми. При обчисленнях нерівноважних значень населеностей рівнів поглинаючих атомів використовували дворівневу плюс континуум модель атомів РЗЕ. І навіть у межах цієї обмеженої моделі атома нам вдалося домогтися доброго узгодження зі спостереженнями від центра до краю сонячного диска.

Але найбільші невизначеності при дослідженні поведінки ліній РЗЕ в сонячній атмосфері вносять неточні значення хемічного вмісту цих елементів на Сонці. Це є окремою, але водночас складовою частиною класичної проблеми астрофізики — визначення хемічного складу Сонця й зір. Ця задача тісно пов'язана з багатьма іншими, найважливішою серед яких є встановлення точних значень сил осциляторів для цих ліній. У праці [10] ми показали, що при з'ясуванні вмісту РЗЕ на Сонці необхідно враховувати дію різних механізмів утворення ліній — істинного поглинання когерентного й некогерентного розсіяння, а також відхилення від ЛТР у населеностях енерґетичних рівнів атомів.

III. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Для аналізу сонячного спектра високої роздільної здатности, який ми маємо, необхідний точний розв'язок рівняння переносу випромінювання сумісно з рівняннями статистичної рівноваги. Це в свою чергу вимагає розгляду якнайближчих до реальности моделей атомів, що враховують множину рівнів, причому ці рівні належать до декількох стадій йонізації атома, при переходах між якими (в межах однієї стадії йонізації) утворюються цілі набори ліній. Такі багаторівневі моделі атомів потребують використання сучасних складних моделей атмосфери, які з високим ступенем реалізму описують фізичний стан Сонця.

У цій праці ми подамо результати розв'язку нерівноважної задачі для складних фраунгоферових спектрів РЗЕ.

IV. РОЗВ'ЯЗОК РІВНЯННЯ ПЕРЕНОСУ ВИПРОМІНЮВАННЯ

Поставлену нерівноважну задачу ми розв'язували, використовуючи метод прискореної Λ-ітерації, покладений раніше [11] в основу розв'язку задачі багатомірного переносу випромінювання. Тому коротко зупинимося лише на схемі цього методу.

Інтенсивність випромінювання досить просто знайти, використовуючи рівняння переносу.

Якщо функція джерела відома, легко отримати його аналітичний розв'язок.

Рівняння переносу пов'язує інтенсивність випромінювання, що виникає в результаті переходів між двома рівнями атома, з відомими заселеностями рівнів. Заселеності рівнів задовольняють рівняння статистичної рівноваги, які можна записати в матричному зображенні:

$$\mathbf{A}\mathbf{n} = \mathbf{b}, \tag{1}$$

де: $\mathbf{n}$ — вектор заселеностей рівнів, $\mathbf{b}$ — вектор, усі елементи якого, крім останнього, дорівнюють нулеві.

Матриця $\mathbf{A}$ визначається радіятивними та ударними переходами між рівнями атома. Оскільки радіятивні члени залежать від інтенсивности випромінювання, яка визначається заселеностями рівнів, то система рівнянь (1) — нелінійна щодо $\mathbf{n}$.

Ефективним методом сумісного розв'язку рівнянь переносу та статрівноваги є метод прискореної Λ-ітерації.

Формальний розв'язок рівняння переносу можна записати так:

$$J_\nu = \Lambda_\nu S_\nu, \tag{2}$$

де J_ν — усереднена за напрямками інтенсивність. Знаючи S_ν, можна порахувати J_ν, а за J_ν — $\mathbf{n}$ і т. д. Такий ітераційний процес називається простою Λ-ітерацією; вона здебільшого погано збігається.

Для того щоб вдосконалити процес, Λ — оператор запишемо як суму наближеного оператора і поправки, яку рахуємо на попередній ітерації: при цьому фотони в ядрах лінії вибувають з переносу і розв'язок збігається швидше (прискорена Λ-ітерація).

Для багаторівневого атома рівняння переносу вносять у рівняння статрівноваги. Якщо на роль наближеного оператора вибрати локальний оператор, то в системі нелінійних рівнянь (1) аналітично скорочуються великі члени, а рівняння стають лінійними (така процедура називається передобумовленням рівнянь статрівноваги).

Таким чином, на підставі (1) отримуємо систему лінійних щодо $\mathbf{n}$ рівнянь:

$$\mathbf{A}^*\mathbf{n} = \mathbf{b}. \tag{3}$$

Розмір матриці $\mathbf{A}^*$ визначаємо моделлю атома.

Рівняння (3) ітераційно уточнюємо, тобто, знаючи заселеності рівнів, шукаємо інтенсивності випромінювання, а за (3) — нові заселеності рівнів. Але система рівнянь (3) лінійна, тоді збіжність розв'язку буде лінійною, що вимагає багато ітерацій. Кількість ітерацій можна значно зменшити, коли застосовувати прискорення збіжности.

V. СПОСТЕРЕЖУВАНИЙ МАТЕРІЯЛ

Ми використовували дані Кенфільда [1] і спостережувані фотоелектричні записи профілів ліній поглинання РЗЕ, які одержали на монохроматорах подвійної дифракції телескопів ГАО АН Росії (Пулково) і ГАО АН України (Голосіїво) [9]. Ці профілі виправлені за інструментальні спотворення, похибка їх лежить у межах 1–2%. Профілі отримані для трьох положень на незбуреному сонячному диску в центрі ($\cos\Theta = 1$) і поблизу краю (в точках $\cos\Theta = 0.44$ або $\cos\Theta = 0.28$). У таблиці 1 подано деякі фізичні параметри цих спостережуваних ліній у центрі і на краю сонячного диска — центральні залишкові інтенсивності (стовпці 3–5), еквівалентні ширини — (стовпці 6–8), а також їх відношення центр-край (стовпець 9) і півширини ліній (стовпці 10–12). Як видно з таблиці 1, центральні залишкові інтенсивності помірних ліній переважно збільшуються, а слабших — зменшуються при переході до краю диска Сонця; відношення ж край/центр для еквівалентних ширин усіх досліджуваних ліній РЗЕ більше від одиниці в отриманих точках диска, близьких до краю.

Елемент	λ, нм	r_{λ_0}			W_λ , пм			$\frac{W_L}{W_c}$	$h_{1/2}$, пм		
		$\mu = 1$	$\mu = .44$	$\mu = .28$	$\mu = 1$	$\mu = .44$	$\mu = .28$		$\mu = 1$	$\mu = .44$	$\mu = .28$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
LaII	432.251	.882	.893	–	.88	.92	–	1.04	6.4	7.9	–
	512.301	.888	–	.884	.84	–	1.00	1.19	6.2	–	8.3
	537.706	.952	–	.950	.35	–	.38	1.03	7.0	–	8.8
CeII	404.259	.787	.808	–	1.27	1.52	–	1.20	5.2	6.6	–
	406.884	.926	.919	–	.35	.46	–	1.31	4.5	6.2	–
	407.343	.758	.774	–	1.56	2.06	–	1.32	6.0	7.8	–
	434.979	.900	.905	–	.72	.81	–	1.12	6.0	6.8	–
	436.466	.829	.826	–	1.36	1.80	–	1.32	5.2	6.6	–
	456.028	.832	.838	–	1.26	1.36	–	1.11	5.8	6.8	–
	456.236	.715	.735	–	1.97	2.66	–	1.35	6.2	8.3	–
	462.816	.851	–	.842	1.07	–	1.38	1.29	6.4	–	8.4
PrII	521.903	.966	–	.960	.24	–	.28	1.17	6.8	–	7.8
	525.973	.955	–	.948	.32	–	.45	1.41	6.8	–	7.8
NdII	406.927	.856	.835	–	.85	1.06	–	1.25	5.2	6.8	–
	407.528	.766	.745	–	1.58	2.00	–	1.27	5.9	7.4	–
	431.451	.758	.772	–	1.78	2.06	–	1.16	6.0	7.6	–
	435.817	.705	.722	–	2.60	3.00	–	1.15	6.8	8.4	–
	444.639	.841	.852	–	.92	1.12	–	1.22	5.2	6.4	–
	531.982	.886	–	.898	.88	–	.96	1.09	7.2	–.	9.0
SmII	431.894	.880	.868	–	.96	1.14	–	1.19	5.6	7.2	–
	452.392	.870	.884	–	.98	1.10	–	1.12	6.2	8.4	–
	456.119	.918	.922	–	.53	.59	–	1.11	5.6	7.0	–
	457.769	.921	.928	–	.52	.54	–	1.04	6.2	7.8	–
EuII	664.513	.953	–	.948	.44	–	.52	1.18	8.0	–	9.9
CdII	408.557	.886	.896	–	.68	.74	–	1.09	5.6	6.8	–
	431.603	.898	.902	–	.65	.76	–	1.17	5.8	7.0	–
DyII	407.312	.907	.904	–	.66	.86	–	1.30	5.2	6.8	–

Таблиця 1. Фізичні параметри спостережуваних ліній РЗЕ в центрі та на краю сонячного диска.

VI. СТРУКТУРА ЕНЕРҐЕТИЧНИХ РІВНІВ АТОМІВ РЗЕ

Саме існування групи РЗЕ зв'язане із заповненням внутрішньої $4f$ — електронної оболонки після того, як заповнились більш зовнішні. Характерні особливості спектрів РЗЕ пояснюються наявністю, опріч f-електронів, зовнішніх $6s$- і $5d$-електронів. Один з електронів $6s$ зв'язаний слабше, ніж електрони $5d$ і $4f$, тому при переході від нейтральних атомів до йонів передусім губиться саме електрон $6s$. Це притаманне всім РЗЕ.

У сонячній фотосфері практично всі РЗЕ є в стадії однократної йонізації. Потенціял першої йонізації складає близько 6 еВ, потенціял другої йонізації — порядку 10-12 еВ [12]. Тому кількість двічі йонізованих атомів РЗЕ суттєва лише на великих глибинах у підфотосферних шарах. Найімовірнішими переходами для однократно йонізованих атомів є:

$$4f^k 6s - 4f^k 6p$$

$$4f^{k-1} 5d6s - 4f^{k-1} 5d6p$$

і

$$4f^k 6s - 4f^{k-1} 5d6s$$

$$4f^{k-1} 5d6s - 4f^{k-1} 6p6s.$$

Як бачимо, найглибша оболонка $4f$ інертніша, ніж $5d$-оболонка, а надто, ніж $6s$-оболонка. Тому поведінка РЗЕ найбільше залежить від цих зовнішніх електронів — або $6s$, або "лантанового" $5d$-електрона. Тому всі РЗЕ так дивовижно подібні.

Зате структура їхніх енерґетичних рівнів надзвичайно складна і, відповідно, складні їхні спектри. Трапляється, що перемішування рівнів різної конфіґурації настільки велике, що взагалі губить фізичний зміст саме віднесення їх до певної конфіґурації. Але, незважаючи на великі труднощі, на сьогодні витлумачена значна кількість атомних спектрів РЗЕ. Ґрунтуючись на встановлених електронних конфіґураціях, визначають абсолютні значення відповідних їм термів.

У таблиці 2 наведено дані для нормальних, тобто найглибше розміщених, електронних конфіґурацій і термів йонізованих атомів РЗЕ.

РЗЕ близькі за своїми хемічними й фізичними властивостями. Їхнім спектрам властиве розділення на два основних класи [12]. До першого належать спектр лантану (La), що не є типовим РЗЕ, і спектри европію (Eu), тулію (Tm), ітербію (Yb) і лютецію (Lu). Цей клас виявляє розпад на порівняно простий спектр, який складається з легкозбуджуваних ліній помірної інтенсивности і складний, що містить величезну кількість важкозбуджуваних слабких ліній. Другий клас, найтиповіший для РЗЕ, містить дуже багато ліній слабкої інтенсивности з мало характерним виглядом спектрів. Це спектри церію (Ce), празеодиму (Pr), неодиму (Nd), прометію (Pm), самарію (Sm), ґадолінію (Gd), тербію (Tb), диспрозію (Dy), гольмію (Ho) й ербію (Er).

LaII	CeII	PrII	NdII	PmII	SmII	EuII	GdII
$5d^2$	$4f5d^2$	$4f^36s$	$4f^46s$	$4f^56s$	$4f^66_s$	$4f^76s$	$4f^75d6s$
$^3F_2$	$^4H_{3/2}$	$^5J_4$	$^6J_{7/2}$	$^7H_2$	$^8F_{1/2}$	$^9S_4$	$D_{5/2}$

TbII	DyII	HoII	ErII	TmII	YbII	LuII
$4f^85d6s$	$4f^{10}6s$	$4f^{11}6s$	$4f^{12}6s$	$4f^{13}6s$	$4f^{14}6s$	$4f^{14}6s^2$
$^9H_9$	$^6J_{17/2}$	$^5J_8$	$^4H_{13/2}$	$^3F_4$	$^2S_{1/2}$	$^1S_0$

Таблиця 2. Нормальні електронні конфіґурації і терми йонізованих атомів РЗЕ.

Електронні конфіґурації для відповідних термів, з яких виникають досліджувані лінії РЗЕ, подані нижче.

LaII. Дві лінії λ432.251 нм і λ512.301 нм виникають із глибоких парних рівнів $^1D_2$ і $^3D_2$, що відповідають конфіґурації $5d6s$. Одна лінія λ537.706нм — із середнього непарного рівня $^3H^0_5$, що відповідає конфіґурації $4f5d$.

CeII. Чотири лінії $\lambda\lambda$404.259 нм; 406.884 нм; 434.979 нм і 436.466 нм виникають із непарних найглибших рівнів $^4F^0_{9/2}$, $^2G^0_{1/2}$ і $^4H^0_{11/2}$, що відповідають конфіґураціям $4f5d6s$ і $4f5d^2$. Чотири лінії — λ497.348 нм, λ456.026 нм, λ456.236 нм і λ462.816 нм виникають із глибоких парних рівнів $^4H_{7/2,9/2}$ і $^2H_{11/2}$, що відповідають конфіґурації $4f^26s$, яка розміщена на 0.48 еВ вище від непарних.

PrII. Дві лінії λ521.903 нм і λ525.973 нм виникають із глибоких непарних рівнів $^5K^0_7$ і $^5L^0_7$, що відповідають конфіґурації $4f^35d$.

NdII. П'ять ліній $\lambda\lambda$406.927 нм; 407.528 нм; 431.451 нм; 435.817 нм і 444.639 нм виникають із глибоких парних рівнів $^6J_{13/2,9/2,7/2}$ і $^4I_{9/2}$, що відповідають конфіґурації $4f^46s$. Лінія λ531.982 нм виникає з глибокого парного рівня $^6L_{11/2}$, що відповідає конфіґурації $4f^45d$.

SmII. Чотири лінії $\lambda\lambda$431.894 нм; 452.393 нм; 451.619 нм і 457.769 нм виникають із глибоких непарних рівнів $^8F_{9/2}$ і $^6F_{7/2,3/2}$, що відповідають конфіґурації $4f^66s$.

EuII. Лінія λ664.513 нм виникає з глибокого непарного рівня $^9D^0_6$, що відповідає конфіґурації $4f^75d$.

GdII. Лінії λ408.557 нм і λ431.608 нм виникають із глибокого непарного рівня $^{10}F_{13/2,11/2}$, що відповідає конфіґурації $4f^75d^2$.

DyII. Лінія λ407.312 нм. Спектр не витлумачений.

VII. СТРУКТУРИЗОВАНА МОДЕЛЬ ЙОНА ЦЕРІЮ

Структура термів більшости однойонізованих РЗЕ має однотипний вигляд. Йонізований церій був вибраний для детальнішого дослідження, по-перше, тому що він є найтиповішим представником РЗЕ, по-друге, тому що він є одним з найпоширеніших у сонячній атмосфері РЗЕ (його вміст становить 1.6 dex у логарифмічній шкалі, де вміст водню дорівнює 12 dex; інші РЗЕ мають уміст менший від 1.6 dex), по-третє, тому що його сонячні лінії найліпше ототожнені (понад 3600 ліній) і досить вільні від бленд. Аналіз профілів сонячних ліній інших РЗЕ показав, що в сонячному спектрі є дуже мало ліній РЗЕ, сильніших від найсильніших ліній CeII. Отже, з точки зору подібности еквівалентних ширин, йонізаційних потенціялів, хемічних умістів й атомних структур РЗЕ, поведінки центр-край параметрів профілів їх ліній, ми вибрали для дослідження характерні лінії CeII (див. табл. 1).

Зупинімося на побудові багаторівневої моделі йона церію.

Характерною рисою спектра CeII є наявність двох систем переходів — між непарними нижніми й парними середніми рівнями (I-а група рівнів) і між парними нижніми й непарними середніми рівнями (II-а група рівнів).

Перша група рівнів є найчисленнішою. Відомо 75 непарних нижніх рівнів, що лежать в інтервалі від 0 до 13300 см$^{-1}$ (1.65 еВ), і 162 парних середніх рівнів, що лежать в інтервалі від 25000 см$^{-1}$ (від 3 до 4 еВ). Вони відповідають конфіґураціям $4f5d6s$ і $4f5d^2$ (нижні рівні), $4f5d6p$, $4f6s6p$ (середні рівні) і, можливо, $4f6s^2$ (нижні рівні) і $5d^26s$ (середні рівні). У цій групі рівнів є дуже глибокий терм $^4I^0$. Він може зумовлюватися лише конфіґурацією $4f5d^2$, яка для першої групи є дуже глибокою (терм $^4I^0$ третій за висотою). Не без того, що вона дає також і два найглибших рівні — $^4H^0_{7/2}$ і $^6H^0_{9/2}$. Хоч імовірніше, що вони виникають із конфіґурації $4f5d6s$.

Друга група рівнів відповідає конфіґураціям $4f^26s$ і $4f^25d$ (39 парних нижніх рівнів і $4f^26p$ (40 непарних середніх рівнів). Відносне положення I-ї і II-ї груп відрізняються приблизно на 0.48 еВ, а саме друга група лежить вище порівняно з першою. Отже, нормальною конфіґурацією для CeII є $4f5d^2$. Структура термів поблизу порога йонізації CeII на сьогодні відома погано.

Структуризована модель йона церію включає 63 усереднених за термами рівнів. Перший — це один синґлетний $^1G^0_4$ і два триплетних $^3F^0_2$ і $^3H^0_4$, які є найглибшими непарними термами нейтрального атома церію. Від другого до 61 (включно) — непарні й парні рівні йонізованого церію (від a^4H^0 до y^4I^0 відповідно), усереднені в межах відповідних термів, що розташовані в напрямку збільшення потенціялів збудження від 0 до 5.07 еВ. Останні два рівні — 62-й і 63-й — це основні рівні двічі і тричі йонізованого церію. При усередненні (для економії машинного часу розрахунку) підрівні тонкої структури, як звичайно, замінювали загальним мультиплетним енерґетичним рівнем, статистична вага якого дорівнює (зваженій за розподілом Больцмана) сумі ваг підрівнів. Це саме стосувалось й усереднених за мультиплетом сил осциляторів ліній цього мультиплету.

При прямих розрахунках окремих профілів ліній цих мультиплетів населеність певного підрівня відшукувалась в допущенні її пропорційности статвазі цього підрівня. Для годиться, подаємо перелік термів у структуризованій моделі CeII — від 2-го до 61-го рівня. Нижні рівні, з яких відбуваються переходи:

2 — a^4H^0; 3 — a^2G^0; 4 — a^4I^0; 5 — b^4H^0;
6 — a^2F^0; 7 — a^4F^0; 8 — b^2G^0; 9 — a^4D^0;
10 — a^2H^0; 11 — C^2G^0; 12 — a^4H; 13 — b^2F^0;
14 — a^4G^0; 15 — b^4G^0; 16 — b^4F^0; 17 — d^2G^0;
18 — a^2I^0; 19 — c^2F^0; 20 — a^2H; 21 — b^2D^0;
22 — b^2H; 23 — a^4F; 24 — b^4D^0; 25 — b^2H^0;
26 — C^4F^0; 27 — a^4K; 28 — a^2F; 29 — e^2F^0;
30 — a^4I; 31 — a^4p^0;32 — a^4G; 33 — a^2G;
34 — b^4H; 35 — a^2I.

Далі йдуть середні рівні, на які відбуваються переходи:

36 — z^2G; 37 — z^4I; 38 — z^2H; 39 — z^4F;
40 — z^4I^0; 41 — z^4H^0; 42 — z^4G; 43 — z^4H;
44 — y^2H; 45 — z^2H^0; 46 — z^4G^0; 47 — x^2H;
48 — y^2G; 49 — z^2I^0; 50 — y^4H; 51 — y^2G;
52 — z^2G^0; 53 — y^4G^0; 54 — y^2G^0; 55 — z^4F^0;
56 — z^2I; 57 — y^2F^0; 58 — y^2I; 59 — x^2G^0;
60 — y^2H^0; 61 — y^4I^0.

У такій моделі атома від 2-го до 35 (включно) рівень радіятивні переходи відсутні. Із цих рівнів іде йонізація на основний $^1G_4^0$ і на два найглибших рівні $^3F_2^0$ і $^3H_4^0$ двічі йонізованого церію, які об'єднані в цій моделі під номером 62. Між нижніми рівнями (від 2 до 35) і наступними (від 36 до 61 включно) існують різної сили радіятивні переходи — як дозволені, так і заборонені. Звичайно між усіма рівнями (від 1 до 62) існують ударні переходи. Останнім 63-м рівнем є основний рівень $^2F_{5/2}$ тричі йонізованого атома церію. Його враховують тільки в рівняннях збереження числа частинок. При розрахунках конкретних ліній поглинання ми брали до уваги тонку структуру термів і реальний радіятивний зв'язок між ними.

VIII. МЕТОДИКА РОЗРАХУНКУ ПРОФІЛІВ ЛІНІЙ РЗЕ

Відмінність фізичних умов у сонячній атмосфері відображена у зміні інтенсивности спостережуваного спектра диска Сонця. Тому вивчення фізичних характеристик і процесів, які відбуваються в атмосфері Сонця, ґрунтується на аналізі спостережуваного спектра, що описується рівнянням переносу випромінювання. Точний розрахунок теоретичних профілів ліній поглинання у спектрі Сонця вимагає знання різних параметрів, одні з яких належать до структури сонячної атмосфери, інші зв'язані з атомами чи йонами, що утворюють цю лінію, ще інші описують взаємодію відповідного роду частинок із полем випромінювання та середовищем.

Розрахунки профілів й еквівалентних ширин ліній CeII проводили від центра до краю сонячного диска — в точках $\mu = \cos\Theta = 1$; 0.8; 0.6; 0.44; 0.4; 0.20; 0.10; 0.07 і 0.05.

а) Модель атмосфери Сонця. З метою виявлення впливу структури атмосфери Сонця на розрахунок профілів ліній поглинання ми використовували два типи найуживаніших сучасних моделей Сонця — VAL C-80 [13] і MACKKL [14]. Вони відрізняються характером спостережуваних даних, на основі яких побудовані, і як наслідок цього — різним значенням і положенням рівня температурного мінімуму.

Модель I-го типу — модель MACKKL (Малтбі, Авретта, Карлсона, К'єлдсет–Мое, Куруча і Лезера). Це емпірична модель сонячної фотосфери й нижньої хромосфери. У ній включено в розрахунок величезну кількість ультрафіолетових ліній, що спричинило підвищення коефіцієнта непрозорости, і як результат цього — менш крутий ґрадієнт фотосферної температури. Мінімальне значення температури в ділянці довжин хвиль $\lambda 5000$ відповідає геометричній висоті 515 км і складає 4400° K.

До другого типу належить модель VAL C-80 (Вернацца, Авретта, Лезера, середній потік). Модель VAL базується на позаатмосферних абсолютних вимірах неперервного спектра, виконаних у широкому діяпазоні довжин хвиль — від мікрохвиль до ультрафіолетових. Положення ділянки температурного мінімуму близьке до геометричних висот у моделі MACKKL, але саме значення мінімальної температури є дещо нижчим — 4150° K.

б) Хемічний уміст церію. Прийнятий хемічний уміст церію в атмосфері Сонця ґрунтується на рекомендованому в праці [15], де зроблено аналіз багаторічних результатів з цієї проблеми. Отже, ми використовуємо $\lg N_{\rm ce} = 1.6$ в шкалі, де прийнято $\lg N_{\rm H} = 12$.

в). Сили осциляторів. Для всіх ліній церію вони взяті з каталогу: VALD [21]. Причому сила осцилятора мультиплетної лінії f_{ij} (mult.) дорівнює

$$f_{ij}(\mathrm{mult.}) = \frac{\sum_{\rm i=1}^{\rm n} \rm g_i f_{ik} e^{\frac{-\Delta E_{ik}}{kT}}}{\rm n \cdot \sum_{i=1}^{n} g_i e^{\frac{-\Delta E_{ik}}{kT}}},$$

де f_{ik} — сила осцилятора k-ої лінії мультиплету, T — температура, що відповідає діяпазонові температур у ділянці утворення ліній (приблизно від 4000^0 до 8000° K).

г) Функція Фойґта. При розрахунку коефіцієнта селективного поглинання розглядали фойґтівський профіль, що є згорткою дисперсійного й ґаусового профілів. Спосіб розрахунку функції Фойґта докладно описано в монографії [16].

д) Параметри загасання. Дуже важливо точно знати параметри загасання під час зіткнень. При дослідженні механізмів розширення фотосферних ліній і постійних взаємодії в ефектах Штарка і Ван дер Ваальса такі відомості обов'язкові, бо у фотосфері домінує загасання внаслідок зіткнень. Для ліній CeII ми розглядали постійну загасання, зумовлену взаємодією з атомами водню — γ_6 з виправним множником E = 1.5 (збільшення E практично не впливає на профіль лінії).

е) Мікро- і макротурбулентна швидкості. Розподіл мікрошвидкостей узято відповідно до моделей атмосфери. Зміну макротурбулентної швидкости з висотою брали з [7]. Для ліній, що утворюються в центрі диска (глибини утворення $H < 200$ км), $V_{\rm macro} = 1.85$ км/с. При наближенні до краю диска глибина утворення лінії зростає, $V_{\rm macro}$ дещо зменшується.

є) Імовірності переходів. При розв'язку системи рівнянь стаціонарности без використання наближення ЛТРураховували як радіятивні, так і ударні переходи. Коефіцієнт C_{li} (швидкість ударних переходів) у рівнянні статрівноваги визначає кількість переходів $l \to i$ за одиницю часу в одиничному об'ємі, що відбуваються внаслідок зіткнень II-го роду з електронами. У цій праці були враховані тільки такі зіткнення, що викликають переходи. Імовірності таких переходів здебільшого відомі з невисокою точністю. Тому для розрахунку C_{li} використовували напівемпіричні формули. Для зв'язано-зв'язаних оптично дозволених переходів коефіцієнти збудження електронним ударом C_{li}, які складають матрицю ударних швидкостей збудження, обчислювали за формулою ван Реґемортера [17]:

$$C_{li} = 32 \cdot 10^{-8} f_{li} \left(\frac{Ry}{\Delta E_{li}}\right)^{3/2} \exp(-\beta) P(\beta) N_e;$$

швидкості заборонених переходів розраховували за формулою Остерброка [18]:

$$C_{li} = 8.63 \cdot 10^{-6} \exp(-\beta) N_e \Omega_{li} / (g_l \sqrt{T_e}),$$

позначення в цій і попередній формулах такі: f_{li} — сила осцилятора переходу $l \to i$, Ry — атомна одиниця енерґії, 1 $Ry = 13.606$ еВ, ΔE_{li} — енерґія збудження переходу $l \to i$ в електрон-вольтах, $\beta = \frac{\Delta E_{li}}{kT_e}$, N_e — електронна концентрація, $P(\beta) = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} E_1(\beta)$ (при $\beta \ll 1$, E_1 — інтеґроекспоненціяльна функція I-го порядку), причому функція $P(\beta)$ — затабульована в наведеній праці ван Реґемортера [17], Ω_{li} — сила зіткнення, яку для всіх заборонених переходів приймаємо рівною 1, g_l — статистична вага нижнього рівня.

Оскільки проблема йонізації електронним ударом для РЗЕ теж поки що не розв'язана, то ймовірність йонізації електронним ударом розраховували за формулою Лотца [19]:

$$C_{lk} = 6 \cdot 10^{-8} m \left(\frac{Ry}{E_l}\right)^{3/2} \frac{N_e}{\sqrt{\beta}} E_1(\beta),$$

де m — число еквівалентних електронів в оболонці, інші змінні вже визначені вище.

Швидкості радіятивних переходів обчислювали, як звичайно [20]: для зв'язано-зв'язаних переходів $l \to i$ швидкості радіятивних переходів угору розраховували за формулою:

$$R_{li} = \frac{4\pi}{hc} \lambda_{li} \alpha_{li} \bar{J}_{li} \equiv \frac{4\pi}{hc} \lambda_{li} \frac{4\pi e^2}{mc} f_{li} \bar{J}_{li},$$

де α_{li} — квантовомеханічний переріз поглинання, $\bar{J}_{li}$ — інтенсивність, усереднена за напрямками і профілем коефіцієнта поглинання.

Швидкості радіятивних переходів униз $i \to l$ обчислювали за формулою:

$$R_{il} = \frac{g_l}{g_i} \left(\frac{8\pi^2 e^2}{mc} \frac{f_{li}}{\lambda_{li}^2} + R_{li}\right),$$

де g_l, g_i — статистичні ваги нижнього й верхнього рівнів.

Для радіятивних переходів у континуум $l \to k$ і з континууму $k \to l$ використовували аналогічні вирази:

$$R_{lk} = \frac{4\pi}{h_c} \lambda_m^2 \int_0^1 a_{lk}(x) J_x dx$$

і

$$R_{kl} = (n_l/n_k) \frac{4\pi}{hc} \lambda_m^2 \int_0^1 a_{lk}(x) \left(\frac{2hc^2}{\lambda_m^5 \cdot x^5} + J_x\right)$$

$$\times \exp\left(-\frac{hc}{\lambda_m xkt}\right) dx,$$

де (n_l/n_k) — відношення населеностей при ЛТР, J_x — поле випромінювання в континуумі, $x = \frac{\lambda}{\lambda_m}$ — безрозмірна довжина хвилі, λ_m — граничні довжини хвиль, що відповідають йонізаційному порогові. Для a_{lk} ми взяли залежність, аналогічну до класичної (за Крамерсом) [20]:

$$a_{lk}(x) = a_{lk}^0 (\lambda/\lambda_m)^3 = a_{lk}^o x^3.$$

При вдалому виборі a_{lk}^0 функція $a_{lk}(x)$ досить добре відтворює реальну залежність.

ж) Оцінка впливу відхилень від ЛТР на фізичні параметри спектральних ліній. Для оцінки впливу відхилень від ЛТР на інтенсивності випромінювання

$I_\lambda(\mu)$, на функції джерела в лініях $S_\lambda(\mu)$, на центральну залишкову інтенсивність $r_0(\mu)$, на профілі $r_\lambda(\mu)$ і на еквівалентні ширини $W_\lambda(\mu)$ ліній поглинання йонізованого церію значення цих величин, знайдені для різних положень μ на диску Сонця, порівнювали з відповідними значеннями, розрахованими в наближенні ЛТР. Коефіцієнти відхилень від ЛТР населеностей рівнів (параметри Цвана) церію визначали, як звичайно, із співвідношення:

$$b_i = n_i/n_i^*,$$

де n^* — населеність при ЛТР, а i — номер рівня.

IX. АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ СУМІСНОГО РОЗВ'ЯЗКУ РІВНЯНЬ ПЕРЕНОСУ ВИПРОМІНЮВАННЯ, СТАТИСТИЧНОЇ РІВНОВАГИ І ЗБЕРЕЖЕННЯ ЧАСТИНОК ДЛЯ ЛІНІЙ РЗЕ

При аналізі кількісних розрахунків сумісного розв'язку рівнянь переносу випромінювання статистичної рівноваги і збереження частинок для ліній РЗЕ в сонячній атмосфері ми отримали такі результати:

1. На рис. 1–2 показано залежність еквівалентної ширини ліній $\lambda 436.47$ нм та $\lambda 456.24$ нм CeII від положення на диску Сонця: спостережувані дані[1,9] та теоретичні залежності, пораховані при не-ЛТР наближеннях (модель MACKKL). Наявні суттєві розбіжності між спостережуваними профілями й теоретичними, що ґрунтуються на розрахунках у допущенні ЛТР. Ці відмінності в значеннях центральних залишкових інтенсивностей r_{λ_0}, профілях r_λ, еквівалентних ширинах W_λ невеликі в центрі диска і значно збільшуються при переході центр-край на сонячному диску (рис. 1–2).

2. Урахування ефектів відхилення від ЛТР у лініях набагато поліпшує узгодження зі спостереженнями центр-край (рис. 1–2). Але повного узгодження досягнути не вдається, особливо на краю диска. Основною причиною цього можуть бути температурні неточності в ділянці формування цих ліній, а також неадекватне зображення атомних рівнів.

3. Використання різних моделей приводить до того, що центральні частини профілів ліній відрізняються між собою на 2% в центрі сонячного диска. Для найслабших ліній відмінність між теоретичними профілями, розрахованими за різними моделями, зовсім незначна. Ця відмінність трохи збільшується з наближенням до краю сонячного диска (до 5–6%). Теоретичні еквівалентні ширини ліній, розраховані за цими моделями, відрізняються на 6-8%, на краю — до 12%. Вплив вибору моделі на форму крила фраунгоферових ліній несуттєвий. Відзначимо, що зміна центральних залишкових інтенсивностей і еквівалентних ширин ліній при просуванні від центра до самого краю сонячного диска в рамках різних моделей більше відповідає розподілу параметрів у моделі MACKKL, ніж у моделі VAL C-80. Отже, добре зарекомендувавши себе при інтерпретації неперервного спектра і дуже слабких ліній, модель VAL C-80 тут стикається з труднощами. Середні висоти, на яких утворюються лінії $\lambda 456.24$ нм, ($\lambda 436.47$ нм) у центрі диска Сонця лежать у ділянці від 0 — неперервний спектр до 70 км — ядро лінії (від 0 до 40 км) для обох моделей. При наближенні до краю ділянки утворення цих ліній зміщується у вищі шари, ядра ліній при цьому утворюються в шарах,що прилягають до температурного мінімуму.

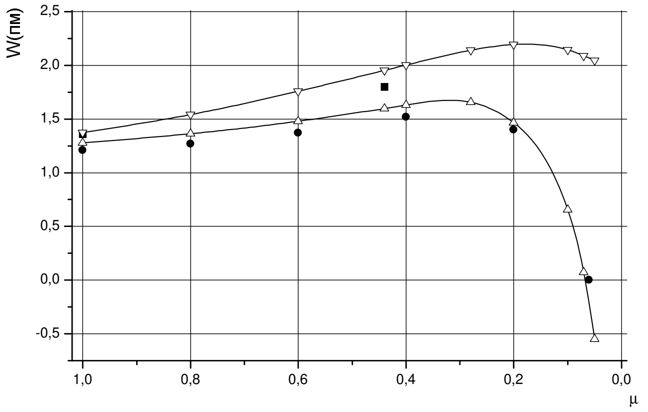

Рис. 1. Залежність еквівалентної ширини λ 436.47 нм CeII від положення ($\mu = \cos\Theta$) на диску Сонця (модель MACKKL): квадрат - спостереження [9], круг — спостереження [1], трикутник уверх — не-ЛТР, трикутник униз — ЛТР.

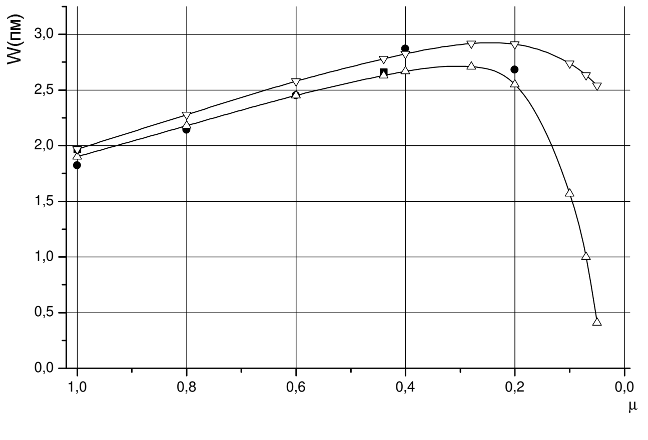

Рис. 2. Залежність еквівалентної ширини $\lambda 456.24$ нм CeII від положення ($\mu = \cos\Theta$) на диску Сонця (модель MACKKL): квадрат — спостереження [9], круг — спостереження [1], трикутник уверх — не-ЛТР, трикутник униз — ЛТР.

4. Залежність поведінки функцій джерела в лінії S_L і в неперервному спектрі B та їх відношення S_L/B від глибини в атмосфері Сонця зображена на

рис. 3. У глибоких шарах атмосфери характер поведінки S_L і B відображає температурний хід моделі атмосфери, а відношення S_L/B близьке до 1. На висотах, де формуються центральні частини ліній РЗЕ на краю диска (поблизу 200 км), відношення S_L/B стає більшим від 1. Цим самим підтверджується вплив не-ЛТР ефектів на слабкі лінії РЗЕ.

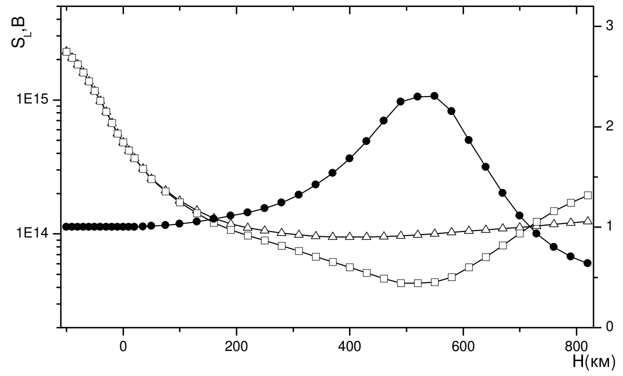

Рис. 3. Залежність S_L та B від глибини для λ456.24 нм CeII: трикутник — S_L, квадрат — B, круг — S_L/B.

5. Отримано перехід теоретичних нерівноважних ліній поглинання в емісійні лінії на краю диска Сонця (рис. 1); обчислене положення $\mu = \cos\Theta \approx 0.06$ для λ436.47 нм на диску Сонця, де відбувається перехід ліній поглинання в лінії випромінювання (так зване обертання ліній), у моделі MACKKL збігається зі спостережуваним Кенфільдом [1]. Одночасно обчислене положення появи емісії в лініях у моделі VAL C-80 є трохи завищеним і дорівнює $\mu = \cos\Theta \approx 0.10$. Щобільше, локалізація точки, при якій лінії обертаються з поглинання в емісію, змінюється з довжиною хвилі, а саме — чим коротша довжина хвилі для λ456.24 нм, $\mu = 0.04$, тим раніше вони з'являються в емісії на диску, що підтверджує результати, отримані в праці [1]. Емісія є наслідком зростання ролі не-ЛТР ефектів у вищих шарах сонячної атмосфери, що відображено у збільшенні відношення S_L/B порівняно з 1.

6. Отримано розподіл за висотою в атмосфері Сонця населеностей рівнів n_i РЗЕ, а також параметрів Цвана, що служать важливим індикатором відхилень фізичних умов від ЛТР. Розрахунки показують, що практично у всіх шарах атмосфери Сонця кількість високозбуджених йонізованих атомів церію не відповідає ЛТР-значенням. На рис. 4 наведено відхилення від рівноважного розподілу населеностей рівнів залежно від їх енерґетичних потенціялів і висоти в атмосфері. Як видно, нижні рівні, між якими існують тільки ударні переходи по всій фотосфері і в нижніх шарах хромосфери перебувають в ЛТР; у ділянці утворення ліній параметри $b \approx 1$, тільки при $h > 700$ км вони починають зростати. Рівні, на які відбуваються радіятивні переходи, перенаселені у верхній фотосфері (починаючи з ≈ 100 км) і нижній хромосфері, в цій ділянці температурне збудження ліній більше за рівноважне: при $h > 700$ км вони збіднені.

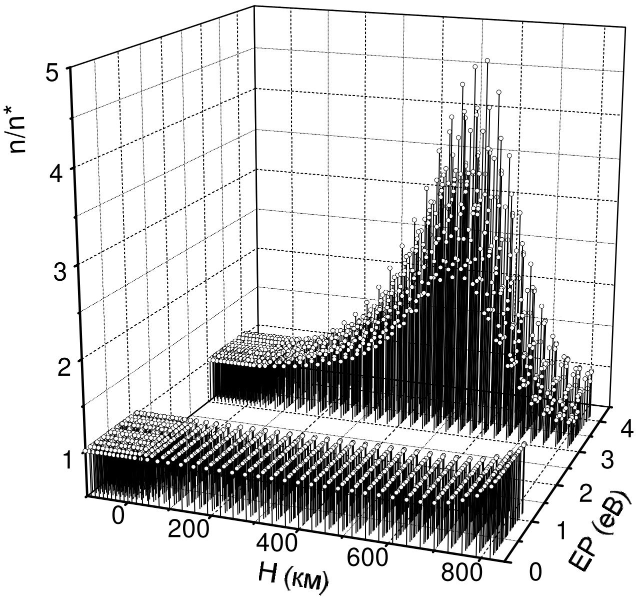

Рис. 4. Залежність не-ЛТР параметрів від висоти та EP для CeII.

У ділянці утворення ліній (нижче від температурного мінімуму) заселеності верхніх рівнів переходів зростають щодо ЛТР значень; максимум — у ділянці 500 км. Причому зі збільшенням потенціялу збудження (EP) верхнього рівня перенаселеність також збільшується (для верхніх рівнів CeII майже на порядок: для рівнів із порядковими номерами 56, 60, 61 відношення n/n^* становить 4.6, 3.6, 6.7 відповідно). Це зв'язано з тим, що зі збільшенням EP заселеність рівня зменшується, а тому вони чутливіші до поля випромінювання зв'язано-зв'язаних переходів (за умови слабкого впливу фотойонізаційних процесів). Унаслідок чого функція джерела в лінії зростає і збільшується інтенсивність випромінювання в лінії. Із наближенням до краю на диску Сонця ділянка утворення лінії зміщується вгору, інтенсивність зростає і лінія переходить в емісію.

7. У верхніх шарах концентрація йонізованого церію на десять порядків переважає концентрацію нейтрального церію і стає сумірною з концентрацією двічі йонізованого церію.

У ділянці утворення ліній концентрація йонізованого церію на чотири порядки перевищує як концентрацію нейтрального, так і двічі йонізованого церію.

У глибоких шарах атмосфери значення концентрації церію аналогічне до значень у верхніх шарах — нейтрального церію є на сім порядків менше, ніж йонізованого, але концентрація останнього одного порядку з концентрацією двічі йонізованого.

Отже, результати розв'язку нерівноважної задачі для складних спектрів РЗЕ дають цінну інформацію про фізичний стан речовини сонячної атмосфери на різних глибинах.

X. ВИСНОВКИ

1. Аналіз слабких сонячних ліній йонізованих РЗЕ показує, що для узгодження теоретичних профілів зі спостережуваними на диску розрахунок потрібно проводити в рамках теорії, у якій враховано відхилення від ЛТР в атмосфері Сонця.

2. Отримано кількісні значення параметрів, що описують не-ЛТР ефекти на різних рівнях атмосфери Сонця і їх дію на лінії поглинання — на заселеності їх рівнів, функцію джерела, профілі, еквівалентні ширини тощо.

3. Показано, що перехід ліній CeII в емісію на краю диска зумовлений перенаселенням верхніх рівнів переходів у верхній фотосфері.

4. Виявлено ефекти підвищеної чутливости ліній РЗЕ до температурної моделі атмосфери. Звідси випливає, що при інтерпретації спостережень ліній РЗЕ з урахуванням відхилень від ЛТР треба особливо обережно ставитись до вибору моделі сонячної атмосфери. Неточності в розподілі температури, як наприклад, температурні відмінності в моделях VAL C-80 і MACKKL, у ділянці утворення ліній можуть привести до суттєвих варіяцій їхніх еквівалентних ширин.

Ліпше узгодження поведінки теоретичних і спостережуваних ліній РЗЕ на сонячному диску отримуємо, використовуючи моделі MACKKL. Цей ефект не проявляється при рівноважному утворенні ліній: тут хід кривих $W_\lambda(\mu)$ у рамках різних моделей є паралельним, отже вибір моделі неоднозначний.

5. Обчислено положення локалізації точок на сонячному диску, де відбувається перехід ліній поглинання в лінії випромінювання. Розрахунки добре узгоджуються зі спостережуваними даними і показують залежність від довжини хвилі — чим коротша довжина хвилі лінії, тим раніше ці лінії з'являються в емісії на диску. Цей ефект є ще одним підтвердженням великої ролі не-ЛТР ефектів у механізмі утворення слабких складних спектрів ліній РЗЕ на Сонці.

6. Аналіз результатів цих досліджень дає змогу діягностувати фізичний стан сонячної атмосфери на різних глибинах.

[1] R. Canfield, Astrophys. J. **157**, 425 (1969).

[2] R. Canfield, Astron. Astrophys. **10**, 64 (1971).

[3] R. Canfield, Astron. Astrophys. **10**, 54 (1971).

[4] Н. Н. Стефанович, Известия Крым. астрофиз. обсерв. **17**, 191 (1957).

[5] Н. Н. Степанян, Известия. Крым. астрофиз. обсерв. **22**, 56 (1960).

[6] Н. Н. Степанян, З. А. Щербакова, Известия. Крым. астрофиз. обсерв. **58**, 3 (1978).

[7] Н. Н. Степанян, З. А. Щербакова, Известия. Крым. астрофиз. обсерв. **59**, 91 (1979).

[8] М. М. Ковальчук, Солн. данные, No 8, 64 (1980).

[9] Б. Т. Бабий, М. М. Ковальчук, Астрон. журн. **61**, 771 (1984).

[10] М. М. Ковальчук, Вопросы астрофизики. Вест. Львов. ун-та, сер. астрон., № 56, 14 (1981).

[11] М. І. Стоділка, Р. Є. Рикалюк, Журн. фіз. досл. **2**, 427 (1998)

[12] М. А. Ельяшевич, *Спектры редких земель*, (Гостехиздат, Москва, 1953).

[13] J. E. Vernazza, E. R. Avrett, R. Loeser, Astrophys. J. Suppl. Ser. **45**, N 4, 635 (1981).

[14] P. Maltby, E. H. Avrett, M. Carlsson, O. Kjeldseth-Moe, R. L. Kuruch, R. Loeser, J. Phys. Chem. Ret. Data. **9**, 1 (1980).

[15] Н. В. Карпов, Р. И. Костык, Кинем. физ. небес. тел, **3**, 14 (1987).

[16] Д. Грей, *Наблюдения и анализ звездных фотосфер* (Мир, Москва, 1980).

[17] H. Van Regemorter, Astrophys. J. **136**, 906 (1962).

[18] D. E. Osterbrok, *Astrophysics of gaseous nebulae* (Freeman, San Francasco (1974).

[19] Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юхов, *Возбуждения атомов и ионов электронами* (Наука, Москва, 1973).

[20] Д. Михалас, *Звездные атмосферы* (Мир, Москва, 1982).

[21] N. E. Piskunov, F. Kupka, T. A. Ryabchikova, W. W. Weiss, C. S. Jefferi, Astron. Astroph. Suppl. Ser. **112**, 525 (1995).

NON-EQUILIBRIUM FORMATION OF RARE-EARTH ELEMENTS WEAK SPECTRA IN THE SOLAR ATMOSPHERE: CeII

M. M. Kovalchuk, M. I. Stodilka, Ja. T. Blagodyr, M. B. Girnyak
Astronomical Observatory of the Ivan Franko National University of Lviv,
8 Kyrylo i Mephodij Str., UA–79005, Lviv, Ukraine
E-mail: sun@astro.franko.lviv.ua

The results of the radiation transfer equation solution without local thermodynamic equilibrium (LTE) in solar atmosphere for complex many-level atomic models of rare-earth elements (REE) are presented in this article.

The calculation has been carried out by the accelerated Λ-iteration method.

The quantitative means of parameters, that describe the non-LTE effects at the different atmosphere layers and their influence on Fraunhofer lines (levels population), source function, profiles, equivalent widths and so on are received.

The inversion of REE lines into emission on the solar limb that coordinates with observations and confirms an important role of the non-LTE effects in the formation of weak complicated Sun spectra has been received and explained.