

Astronomický ústav AV ČR Ondřejov

**Studium fyzikálních procesů
v řídkých obálkách
horkých hvězd**

Kandidátská disertační práce

RNDr. Petr Škoda

Školitel: RNDr. Petr Hadrava, CSc.

Práce byla dokončena v lednu 1995

Abstrakt

Tato práce se zabývá studiem nejdůležitějších fyzikálních procesů uplatňujících se v řídké silně ionizované plazmě tvořící plynné obálky horkých hvězd. Do této kategorie zahrnujeme i planetární mlhoviny a galaktické plynné mlhoviny (HII oblasti). Využívá se přitom postupů a formalismů zavedených právě pro studium planetárních mlhovin (teorie rekombinačních čar, funkce energetické bilance volných elektronů), ale nedopouští se přitom některých omezujících zjednodušení, která byla dříve v tomto oboru běžně postulována (případy A , B zavedené Bakerem a Menzelem, neúplná formulace rovnice energetické rovnováhy se zanedbáním volně-volné absorpce, zahrnutí srážkových procesů pouze pro základní hladinu aj.).

Hlavním výsledkem práce je program, umožňující určení základních parametrů (elektronová hustota, elektronová teplota, stupeň ionizace) čistě vodíkové plazmy vystavené působení spojitého horkého záření. Toto záření je v první aproximaci popsáno Planckovou funkcí s danou barevnou teplotou a příslušným faktorem zředění, popř. kombinací několika takovýchto funkcí (pro účely modelů obálek dvojhvězd nebo zahrnutí kosmologického reliktového záření). V programu je řešena rovnice statistické, energetické a ionizační rovnováhy se zahrnutím excitací, ionizací a opačných procesů zářivých i srážkových pro velké množství hladin atomu vodíku (až 500). Elektronová teplota je určována z energetické rovnováhy kontinua volných elektronů včetně volně-volných procesů.

Pro řešení soustavy nelineárních rovnic je použit specifický iterační algoritmus. Program umožňuje řešit jak případ, kdy je zadána elektronová hustota (např. pro modely planetárních mlhovin), tak variantu se zadanou celkovou hustotou všech částic (např. pro vazbu na výstupy tlaku plazmy z jiných modelů). Při formulaci algoritmů bylo použito nejnovějších dostupných atomárních parametrů a důraz byl přitom kladen na co největší přesnost a rozsah použitelnosti i jednoduchost programové realizace. Některé formulace složitějších vztahů byly ověřeny metodami symbolické algebry v systému Mathematica, pomocí něho byly určeny i přesné hodnoty použitých konstant.

Použití programu je ukázáno na modelových příkladech typické planetární mlhoviny a obálky Be hvězdy, přičemž je zdůrazněn silný vliv srážkových přechodů na výslednou elektronovou teplotu a průběhy obsazení jednotlivých hladin.

Součástí dodatků je rozsáhlá literární rešerše poznatků souvisejících se studovanou problematikou, podrobný popis programu včetně výpisu a ukázkového běhu i výstup odvození v programu Mathematica.

Poděkování

Rád bych poděkoval všem, kteří mi pomohli ke zdárnému dokončení této práce. Především bych rád poděkoval svému školiteli RNDr. Petru Hadravovi, CSc. za námět, úvod do problematiky a příkladné vedení práce, jakož i za kritické přečtení a podnětné připomínky k rukopisu. Velmi mu též děkuji za bezmeznou trpělivost a ochotu při bezpočtu pracovních konzultací ale i diskusí spontánně vzniklých při nejedné příležitosti.

Dále chci poděkovat svému původnímu školiteli RNDr. Svatopluku Křížovi, DrSc. za několikaleté vedení a cenné kritické připomínky ke studované problematice, RNDr. Petru Heinzlovi, DrSc. za zprostředkování komunikace s Dr. Hoang-Binhem a RNDr. Miloši Šidlichovskému, DrSc. za umožnění výpočtů v programu Mathematica.

Poděkovat bych chtěl rovněž Dr. Hoang-Binhovi a Dr. Hummerovi za poskytnutí programového kódu svých programů a s nimi souvisejících reprintů, stejně tak i Dr. Giovanardimu za upozornění na nekonzistentnost jeho tabulek aproximací srážkových přechodů. Velmi též děkuji všem kolegům ze stelárního oddělení za cenné náměty, rady i za tvůrčí pracovní klima, a vedení ústavu za vstřícnost a podporu, zvláště pak ve fázi dokončování předkládané práce.

Největší dík však patří mé ženě a dětem za trpělivost a pochopení během celé doby přípravy této práce.

Obsah

1 Úvod	9
2 Rovnice statistické rovnováhy	11
2.1 Lokální termodynamická rovnováha	11
2.2 Statistická rovnováha	12
2.3 Pseudokontinuum, grupované pravděpodobnosti	16
3 Pravděpodobnosti atomárních přechodů	21
3.1 Zářivé přechody	21
3.1.1 Vázaně-vázané přechody	21
3.1.2 Vázaně-volné přechody	24
3.2 Srážkové přechody	26
4 Rovnice energetické rovnováhy	31
4.1 Zářivé procesy	32
4.1.1 Fotoionizační ohřev kontinua	33
4.1.2 Fotorekombinační ochlazování kontinua	33
4.1.3 Volně-volné přechody	34
4.1.4 Volně-volná emise	36
4.2 Srážkové energetické rejty	36
4.2.1 Srážková ionizace a tříčásticová rekombinace	36
4.2.2 Srážková excitace a deexcitace	37
4.3 Výsledná energetická rovnováha	37
4.4 Hledání elektronové teploty	38
5 Použité algoritmy	41
5.1 Vázaně-vázané Gauntovy faktory	41
5.2 Vázaně-volné Gauntovy faktory a rejty	42
5.3 Srážkové rejty	43
5.4 Energetické rejty	45
5.4.1 Volně-volný středovaný Gauntův faktor	45
5.4.2 Zadání dopadajícího záření	46

6	Popis programu GRUPY	47
6.1	Zadání modelových dat	47
6.2	Hlavní iterační procedura	48
6.3	Procedura SOLVE	51
6.4	Výpočty jednotlivých rejtů	51
6.4.1	Zářivé přechody	51
6.4.2	Srážkové rejty	54
6.5	Pomocné procedury	54
7	Modelové příklady	55
7.1	Modely se zadanou elektronovou hustotou	55
7.2	Modely se zadanou koncentrací všech částic	59
7.3	Ověření správnosti programu	61
7.4	Několik slov ke konvergenci metody	63
8	Závěr	65
	Dodatek A – Přehled literatury	67
	Dodatek B – Ukázky v programu Mathematica	91
	Dodatek C – Výpis programu GRUPY	119
	Dodatek D – Ukázkový běh programu	161

Seznam obrázků

6.1	Schéma procedury NONLTE	50
6.2	Schéma procedury SOLVE — hledání intervalu obsahujícího kořen	52
6.3	Schéma procedury SOLVE — vlastní hledání kořene půlením intervalu	53
7.1	Energetické zářivé zisky Γ^R a ztráty Λ^R planetární mlhoviny se zanedbanými srážkami	56
7.2	Energetické zisky Γ^R a ztráty Λ^R zářivé i srážkové (Γ^C , Λ^C) v planetární mlhovině	57
7.3	Celkové energetické zisky Γ a ztráty Λ planetární mlhoviny	57
7.4	Průběhy b -faktorů v závislosti na čísle hladiny n pro model planetární mlhoviny. Model R zanedbává srážky, model RC je zahrnuje	58
7.5	Energetické zářivé zisky Γ^R a ztráty Λ^R obálky Be hvězdy se zanedbanými srážkami	58
7.6	Energetické zisky Γ^R a ztráty Λ^R zářivé i srážkové (Γ^C , Λ^C) v obálce Be hvězdy.	59
7.7	Celková energetická bilance $\mathcal{E}_{bal}$ obálky Be hvězdy	60
7.8	Průběh celkové energetické bilance $\mathcal{E}_{bal}$ během iterace elektronové teploty. Model planetární mlhoviny se zadanou hustotou částic N_0	60
7.9	Průběh celkové energetické bilance $\mathcal{E}_{bal}$ během iterace elektronové teploty. Model Be hvězdy se zadanou hustotou částic N_0	61
7.10	Průběh b -faktorů v závislosti na čísle hladiny pro planetární mlhovinu - model ze zadanou celkovou hustotou částic N_0 . Uvedeny jsou i výsledné iterované parametry	62
7.11	Průběh b -faktorů v závislosti na čísle hladiny pro Be hvězdu - model ze zadanou celkovou hustotou částic N_0 . Uvedeny jsou i výsledné iterované parametry	63

Předmluva

Studium fyzikálních procesů probíhajících v řídkých obálkách horkých hvězd je úzce svázáno s výzkumem Be hvězd, který tvoří již tradiční náplň práce stelárního oddělení astronomického ústavu v Ondřejově. Stejné postupy (jen s malými obměnami) je však možno použít na mnohem širší škálu astrofyzikálních objektů, ať již to jsou obálky nov, planetární mlhoviny, galaktické plynné mlhoviny (HII-oblasti), nebo dokonce extragalaktické objekty jako quasary či aktivní jádra galaxií. Příklady těchto aplikací jsou uvedeny v přehledu literatury — Dodatek A. Společným rysem těchto objektů jsou specifické fyzikální podmínky dané vysokým stupněm zředění dopadajícího záření a relativně nízkou hustotou studované plazmy a s tím spojené velké odchylky od lokální termodynamické rovnováhy. Velký důraz je proto kladen na přesnou formulaci rovnic statistické rovnováhy a tedy i detailní zahrnutí všech významných atomárních procesů.

Cílem této práce bylo vytvoření teoretického nástroje pro studium fyzikálních podmínek panujících ve studovaných objektech za účelem zlepšení interpretace pozorování.

Výsledkem je program pro výpočet určujících parametrů vodíkové plazmy vystavené působení horkého silně zředěného záření. Ve snaze o vysokou přesnost modelu je uvažováno velké množství energetických hladin vodíkového atomu, důraz je kladen i na přesné hodnoty užívaných konstant. Při jejich odvození byl použit i symbolicko-algebraický systém Mathematica.

V 1. kapitole jsou shrnuty základní předpoklady použitého modelu a nastíněn způsob výpočtu. Předmětem 2. kapitoly je studium obecných principů statistické rovnováhy v plazmě. Nejprve jsou formulovány základní charakteristiky lokální termodynamické rovnováhy a vzápětí je provedeno zobecnění na princip detailní rovnováhy na úrovni mikroskopických procesů. Hlavní náplní kapitoly je sestavení soustavy rovnic statistické rovnováhy doplněných o uzavírací podmínku zachování náboje, resp. počtu částic. Poslední část je věnována otázce zahrnutí velmi vysokých hladin tvořících jakési pseudokontinuum a následné modifikace odvozených rovnic.

Následující 3. kapitola se zabývá podrobným odvozením pravděpodobnosti jednotlivých typů mikroskopických přechodů vystupujících v soustavě rovnic statistické rovnováhy. V první části jsou zkoumány zářivé přechody — jak vázaně-vázané (fotoexcitace a zářivá deexcitace) tak vázaně-volné (fotoionizace a zářivá rekombinace),

druhá část kapitoly je pak věnována srážkovým přechodům.

Další důležitou součástí práce reprezentovanou kapitolou 4 je studium energetické rovnováhy v plazmě, s důrazem kladeným na energetickou rovnováhu kontinua volných elektronů. Na počátku je vyjádřeno množství energie přenášené fotoionizací a zářivou rekombinací, vzápětí je pozornost věnována volně-volným přechodům (brzdné záření a volně-volná absorpce). Další část rozebírá srážkové přechody a umožňuje tak následně zformulovat rovnici energetické rovnováhy. V závěru kapitoly je nastíněn princip použité iterační metody řešení.

Kapitola 5 vysvětluje detailněji některé numerické postupy a použité algoritmy, zatímco kapitola 6 obsahuje detailní popis programu včetně objasnění funkce všech použitých procedur. V kapitole 7 je ukázáno použití programu na modelových příkladech typické planetární mlhoviny a obálky Be hvězdy. Dále je zde uvedeno srovnání výsledků s prací Bakera et al. (1938) a je diskutována správnost a přesnost programu. Kapitulu 8 tvoří závěr.

Nedílnou součástí práce je několik dodatků. V dodatku A je uvedena rešerše literatury související se studovanou problematikou, dodatek B tvoří ukázky odvození některých složitějších vztahů pomocí programu Mathematica, dodatek C je výpisem popisovaného programu v jazyku FORTRAN, na nějž navazuje ukázka konkrétního běhu v dodatku D.

Kapitola 1

Úvod

Základy teorie fyzikálních procesů dominantních v řídkých obálkách horkých hvězd byly položeny v třicátých letech tohoto století při studiu nejtypičtějšího případu — planetárních mlhovin a HII oblastí, jejichž specifikem jsou nízká elektronová hustota (řádově 10^2 – 10^4 cm $^{-3}$) a vysoký stupeň (typicky 10^{14} -krát) zředění dopadajícího horkého záření o teplotě 30 000 – 100 000 K. Z toho plyne naprosto dominantní role procesů fotoionizace.

Proto zavedli Menzel a Baker (1937) dvě zjednodušující aproximace používané v podstatě dodnes. V případě *A*, který se hodí pro mlhoviny opticky tenké v Lymanových čarách, je uvažován atom, jehož hladiny jsou populovány rekombinací volných elektronů nebo kaskádováním z vyšších hladin a depopulovány zářivými přechody do nižších stavů. Zanedbává se zde tedy vliv dopadajícího záření, a neuvažuje se excitace ani ionizace z vyšších hladin. Příklad *B* se lépe hodí pro mlhoviny opticky tlusté v Lymanových čarách, kde se předpokládá, že absorpce Lymanových kvant je ihned následována jejich reemisí (tzv. *on-the-spot* aproximace). V obou případech je jediným zdrojem volných elektronů fotoionizace ze základní hladiny. Ta však nikde explicitně nefiguruje. Problém řešení rovnic statistické rovnováhy tak byl převeden na rekurentní výpočet kaskádových matic, používaný některými autory dodnes. Výše uvedené aproximace obcházejí nutnost řešení soustavy rovnic statistické rovnováhy, které je obecně velmi složité.

Postupem času byl tento aparát aplikován na další objekty a spolu s rozšiřováním rozsahu studovaných parametrů se ukázala nutnost zahrnutí i dříve zanedbávaných procesů — hlavně srážek s volnými elektrony a zářivé excitace. Zároveň s rozmachem výpočetních možností (zrychlování procesorů, růst paměti) je možno dnes řešit soustavu rovnic statistické rovnováhy v přesném tvaru i pro velmi vysoký počet energetických hladin.

V současnosti lze pozorovat i snahu o vysoké zpřesnění a částečnou revizi teorie v souvislosti s pokroky observačních metod v infračerveném a rádiovém oboru spektra, zvláště pak v oblasti milimetrových vln. Jsou prováděny pokusy o prokázání maserového zesilování vysokých vodíkových čar, přitom výsledky dosažené v po-

slední době jsou velmi nadějně. Podrobný vývoj studované problematiky je popsán v dodatku A.

Pro podobné účely byl v dřívější době vyvinut autorem program určující populace velkého množství hladin ve vodíkové plazmě se zadanou elektronovou teplotou T_e a hustotou N_e vystavené působení horkého záření teploty T_* zředěného s faktorem W . Výsledky studia vysokých hladin, ukazující nezanedbatelné odchylky od zjednodušených modelů A a B , byly shrnuty v autorově práci Škoda (1993).

Dalším cílem bylo přizpůsobit tento program pro použití ve výzkumu obálek Be hvězd. Jelikož je zde záření podstatně méně zředěné a i hustoty jsou mnohem vyšší, není již možné chápat elektronovou teplotu jako nezávislý parametr, ale je nutno ji určovat z rovnice energetické rovnováhy.

V předkládané práci je použita formulace energetické rovnováhy jako rozdílu funkce energetického zisku a ztrát (heating function, cooling function) kontinua volných elektronů zavedená Spitzerem (1948). Řešení elektronové teploty, při níž je celková energetická bilance kontinua nulová, je prováděno metodou půlení intervalu. Ta je navíc kombinována s heuristickými algoritmy hledání intervalu obklopujícího kořen a vnořené iterace elektronové hustoty (pro případ zadané celkové koncentrace všech částic). Při výpočtu je používáno nejpřesnějších v současnosti dostupných atomárních parametrů spolu se zahrnutím velkého množství (až 500) atomárních hladin.

Výsledkem jsou elektronová teplota (popř. hustota) a populace jednotlivých hladin použitelné pro výpočet spektra opticky tenké plazmy ve studovaných obálkách. Populace jsou presentovány v podobě absolutního počtu atomů nacházejících se v daném stavu i jako b -faktory. Součástí výstupu programu je i přehled energetických zisků a ztrát kontinua připadajících na jednotlivé procesy.

Kapitola 2

Rovnice statistické rovnováhy

2.1 Lokální termodynamická rovnováha

Máme-li uzavřený systém plazmy a záření neinteragující s okolím, pak za určitou dobu zrelaxuje do stavu termodynamické rovnováhy (thermodynamic equilibrium — TE), ve které je rovnovážné rozdělení jednotlivých podsystémů dáno jedinou teplotou T . Počet atomů v jednotce objemu plazmy nacházejících se ve stavu j označme N_j . Budeme jej nazývat obsazením dané hladiny (occupation number). Obsazení jednotlivých energetických hladin atomů je určeno Boltzmannovou rovnicí

$$\frac{N_j}{N_i} = \frac{g_j}{g_i} \exp\left(-\frac{\chi_i - \chi_j}{kT}\right) \quad , \quad (2.1)$$

kde N_i, N_j jsou obsazení stavů i, j , g_i, g_j jejich statistické váhy χ_i, χ_j ionizační potenciály těchto stavů a k je Boltzmannova konstanta. Poměr počtu iontů N^+ a atomů v základním stavu N_1) je dán Sahovou rovnicí

$$\frac{N_e N^+}{N_1} = \frac{g^+}{g_1} \frac{2(2\pi m k T)^{3/2}}{h^3} e^{-\frac{\chi_1}{kT}} \quad , \quad (2.2)$$

přičemž m označuje hmotnost elektronu, h Planckovu konstantu a N_e je koncentrace volných elektronů. Statistická váha ionizovaného atomu g^+ je v případě vodíku (tj. protonu) rovna jedné. Sahova rovnice se obecně používá i pro vyjádření populace i – té hladiny, většinou ve tvaru

$$N_i = N_e N^+ \Phi_i(T) \quad . \quad (2.3)$$

Zde $\Phi_i(T)$ je tzv. Sahův-Boltzmannův faktor:

$$\Phi_i(T) = C_I T^{-3/2} \frac{g_i}{g^+} e^{\frac{\chi_i}{kT}} \quad (2.4)$$

a konstanta C_I má hodnotu

$$C_I = \frac{h^3}{2(2\pi m k)^{3/2}} = 2.07065 \cdot 10^{-16} \quad [\text{cm}^3 \text{ K}^{3/2}] \quad . \quad (2.5)$$

Volné elektrony mají rozdělení rychlostí dáno Maxwellovou rozdělovací funkcí

$$F(v) = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi k T} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} \quad (2.6)$$

V případě termodynamické rovnováhy má záření emitované plazmou charakter záření absolutně černého tělesa a jeho střední intenzita J_ν na frekvenci ν je dána Planckovou funkcí B_ν

$$J_\nu = B_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} \quad (2.7)$$

Pro reálné astrofyzikální objekty je obecně předpoklad termodynamické rovnováhy vzhledem k přenosu energie (hlavně formou záření) porušen, přesto je velice užitečné udržet tento předpoklad alespoň lokálně (pokud to je možné). Tedy předpokládáme, že rozdělení jednotlivých stavů atomů je určeno Sahovou a Boltzmannovou rovnicí a rozdělení elektronů Maxwellovou funkcí, avšak teplota je v každém místě plazmy jiná. Intenzita záření nesplňuje Planckův zákon a je určena řešením rovnice přenosu záření (radiative transfer equation - RTE). Této aproximaci se říká předpoklad lokální termodynamické rovnováhy (local thermodynamic equilibrium — LTE). Pro silně zředěnou plazmu (např. v planetárních mlhovinách, HII oblastech či v obálkách horkých hvězd) však předpoklad LTE neplatí a obsazení stavů je nutno určovat z obecnějších podmínek statistické rovnováhy. Odchylka skutečného obsazení i -tého stavu N_i od obsazení N_i^* realizovaného v LTE se vyjadřuje pomocí b -faktoru (departure coefficient) zavedeného Menzelem (1937):

$$b_i \equiv \frac{N_i}{N_i^*} \quad (2.8)$$

2.2 Statistická rovnováha

Statistická rovnováha je fundamentální pojem teorie astrofyzikální plasmy. Označuje se jím předpoklad stacionárního rozdělení atomů na mikroskopické úrovni.

Mějme daný atom (v dalším budeme pracovat jen s atomovým vodíkem — na podstatě problému toto zjednodušení nic nemění) v jistém kvantovém stavu $|n, l, m, s\rangle$, kde n je hlavní, l vedlejší, m magnetické a s spinové kvantové číslo. Platí (jak známo ze základů kvantové mechaniky): $s = +1/2, -1/2$, $m = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ a $l = 1, 2, \dots, n$. Tento atom působením vnějších podnětů změní svůj stav na $|n', l', m', s'\rangle$, přičemž stavy s rozdílným m a s energeticky degenerují (v nepřítomnosti vnějšího magnetického pole). Pro vodík navíc degenerují i stavy s různým l (malé energetické rozdíly způsobující jemnou strukturu čar pro jejich nepatrnost zanedbáme). Výběrová spektroskopická pravidla (pěkné odvození viz např. Mihalas (1970), str. 99 a násl.) navíc omezují výběr hodnot koncového stavu: $\Delta m = -1, 0, +1$ $\Delta l = -1, +1$. Rozdílnou energii mají tedy jen stavy s rozdílným n . Stavy se stejným n lišící se ostatními kvantovými čísly se shrnují do jedné energetické hladiny prostřednictvím statistické váhy g_n (to je vlastně počet těchto stavů).

Pro vodík je

$$g_n = 2n^2 \quad . \quad (2.9)$$

Pravděpodobnost přechodu atomu z energetického stavu n do stavu n' označme $P_{nn'}$. Obecně je odlišná pravděpodobnost $P_{nl,n'l'}$ pro různá l, l' a správně by se tento rozdíl měl uvažovat — viz. např. Burgess (1958), Pengelly (1964) či Hummer a Storey (1992) — pro jednoduchost však předpokládáme degeneraci orbitálního momentu hybnosti a budeme se proto zabývat pouze celkovou pravděpodobností přechodů mezi stavy s různým n . Atomu vodíku ve stavu n (pro základní stav je $n = 1$) odpovídá vazebná energie (vztahovaná vůči kontinuu)

$$E_n = -\chi_n = -\frac{\mathcal{R}}{n^2} \quad . \quad (2.10)$$

Zde $\mathcal{R} = 13.6\text{eV} = 2.17987 \cdot 10^{-11}\text{erg} = 2.17987 \cdot 10^{-18}\text{J}$ je energie 1 Rydbergu definovaná

$$\mathcal{R} = \frac{2\pi^2 e^4 \mu_H}{h^2} \quad (2.11)$$

(viz Mihalas (1970) str. 99), kde μ_H je redukovaná hmotnost elektronu v atomu vodíku. Obvykle se však ve většině dostupné literatury nahrazuje hmotností klidovou popř se obě veličiny volně směšují. Touto záměnou dojde k relativní změně hodnoty konstanty asi $5 \cdot 10^{-4}$, což vzhledem k nepřesnostem v dalším postupu můžeme zanedbat.

Pro volný elektron pohybující se rychlostí v s kinetickou energií (v Rydbergových jednotkách) $\varepsilon = \frac{1}{2}mv^2$ označíme tento stav podle Menzela a Pekerise (1935) imaginárním kvantovým číslem ik , pro které platí

$$k^2 = \frac{1}{\varepsilon} \quad . \quad (2.12)$$

Zavedeme-li si pro přehlednost označení i (initial) pro počáteční stav přechodu a f (final) pro jeho koncový stav musí pro změnu obsazení i -té platit obecně (např. Mihalas (1978), rovnice 5-48)

$$\frac{dN_i}{dt} \equiv \frac{\partial N_i}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla N_i = \sum_{f \neq i} N_f P_{fi} - N_i \sum_{f \neq i} P_{if} \quad . \quad (2.13)$$

Zde $\mathbf{u}$ je vektor rychlosti makroskopických pohybů plazmy Podmínka stacionarity (neměnnosti obsazení hladiny) vyžaduje aby pro každou hladinu i platilo

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = 0 \quad . \quad (2.14)$$

Pro statické prostředí se anulují i gradientový člen a potom z (2.13) dostáváme rovnici statistické rovnováhy (equation of statistical equilibrium — ESE), pro i -tou hladinu

$$\sum_{f \neq i} N_f P_{fi} - N_i \sum_{f \neq i} P_{if} = 0 \quad . \quad (2.15)$$

Pravděpodobnost přechodu volně splývá s termínem *rate* — česky bude asi nejlépe používat přepis *rejt* (Heinzel (1993)). Obvykle dochází k velmi nedůslednému používání tohoto termínu. V některých pracech (např. Mihalas (1970)) je jím označován

počet přechodů z/do dané hladiny v jednotce objemu, tj. $N_i P_{if}$, a hovoří se potom o (2.15) jako o „rate equation“, popř. se zavádí tzv. “net rate” $\mathcal{P}_{if}$ jako přebytek počtu „odchodů“ z hladiny i nad počtem „příchodů“ do ní tedy

$$\mathcal{P}_{if} = N_i P_{if} - N_f P_{fi} \quad . \quad (2.16)$$

Veličina P_{ij} je pak označena jako “transition rate *per atom*”. V jiných se však hovoří o rejtech přechodů a je tím myšleno P_{if} (např. Mihalas et al. (1975)). Pokud bychom se chtěli vyjádřit formálně přesně, je nutno rozlišovat mezi pravděpodobností přechodu jako mírou možnosti uskutečnění daného přechodu a počtem přechodů odehrávajících se v daném jednotkovém objemu zprůměrovaných na jeden atom (tj. statistickým středováním pravděpodobností. Vzhledem k těmto komplikacím v terminologii budeme v dalším používat termín *intenzita přechodů* popř. i termín *rejt*, pro počet přechodů za jednotku času vztažený na jeden atom v daném stavu (i pro ionizované atomy vodíku).

Změna stavu atomu může nastat působením záření — tzv. zářivé přechody R_{if} , nebo interakcí s jinou hmotnou částicí (např. atomem či volným elektronem) — to je tzv. srážkový přechod C_{if} . Můžeme tedy intenzitu přechodů rozdělit zvlášť na část vyvolanou zářením a srážkami:

$$P_{if} = R_{if} + C_{if} \quad P_{fi} = R_{fi} + C_{fi} \quad . \quad (2.17)$$

Označme souhrn všech možných imaginárních stavů ik atomu indexem κ a nazýváme jej kontinuem (volných elektronů). Počet všech iontů (tj. atomů s elektronem ve stavu κ) v jednotce objemu označíme N_κ nebo též N^+ , přitom díky intenzivním přechodům z/do kontinua předpokládáme rozdělení přes ik dané vztahem (2.6). Pak můžeme přechody rozdělit podle druhu koncového stavu na:

vázaně-vázané	(bound-bound = b-b)	$i \rightarrow f, f \rightarrow i$
vázaně-volné	(bound-free = b-f)	$i \rightarrow \kappa, \kappa \rightarrow i$
volně-volné	(free-free = f-f)	$\kappa \rightarrow \kappa$

Volně-volné přechody nás zatím z hlediska statistické rovnováhy nebudou zajímat, neboť nemění obsazení vázaných hladin ani kontinua jako celku (přerozdělují pouze obsazení jednotlivých imaginárních podstavů).

Vázaných hladin je sice teoreticky nekonečně mnoho, prakticky je však rušivým působením okolních nabitých částic jejich počet omezen na jakési $n_{\max}$, které budeme dále označovat symbolem M (podrobněji v další kapitole). Rozepišme nyní rovnice (2.15) pro všechny hladiny:

$$\begin{aligned}
\sum_{f=1}^M N_f P_{f1} - N_1 \sum_{f=1}^M P_{1f} + N_\kappa P_{\kappa 1} - N_1 P_{1\kappa} &= 0 \\
\sum_{f=1}^M N_f P_{f2} - N_2 \sum_{f=1}^M P_{2f} + N_\kappa P_{\kappa 2} - N_2 P_{2\kappa} &= 0 \\
\vdots & \\
\sum_{f=1}^M N_f P_{fj} - N_j \sum_{f=1}^M P_{jf} + N_\kappa P_{\kappa j} - N_j P_{j\kappa} &= 0 \\
\vdots & \\
\sum_{f=1}^M N_f P_{fM} - N_M \sum_{f=1}^M P_{Mf} + N_\kappa P_{\kappa M} - N_M P_{M\kappa} &= 0 \\
\sum_{f=1}^M N_f P_{f\kappa} - N_\kappa \sum_{f=1}^M P_{\kappa f} + N_\kappa P_{\kappa\kappa} - N_\kappa P_{\kappa\kappa} &= 0
\end{aligned} \tag{2.18}$$

V sumacích předpokládáme, že $P_{jj} = 0$ pro všechny hladiny (i kontinuum). Provedme nyní součet přes všechna j , tj. první až M -té rovnice ve sloupcích pod sebou:

$$\sum_{j=1}^M \sum_{f=1}^M N_f P_{fj} - \sum_{j=1}^M N_j \sum_{f=1}^M P_{jf} + N_\kappa \sum_{j=1}^M P_{\kappa j} - \sum_{j=1}^M N_j P_{j\kappa} = 0. \tag{2.19}$$

Jelikož lze druhý člen napsat ve tvaru

$$\sum_{j=1}^M N_j \sum_{f=1}^M P_{jf} = \sum_{j=1}^M \sum_{f=1}^M N_j P_{jf}, \tag{2.20}$$

vidíme, že po záměně sumací a prohození indexů je roven prvnímu členu a jejich rozdíl se tedy anulují. Dále je jasné, že třetí a čtvrtý člen součtu jsou záporně vzaté členy poslední rovnice (2.18) (pro κ). Je tedy součet všech rovnic soustavy (2.18) nulový a rovnice jsou pak lineárně závislé. Musíme proto nahradit jednu rovnici další nezávislou tzv. uzavírací podmínkou. Tuto můžeme napsat jako podmínku zachování náboje ve tvaru (platí pouze pro čistě vodíkovou atmosféru)

$$N_\kappa \equiv N^+ = N_e, \tag{2.21}$$

kde N_e je hustota volných elektronů, nebo jako podmínku pro počet všech (opět pouze vodíkových) částic N_0 (neutrální různě excitované atomy, ionty a elektrony)

$$N_0 = \sum_{i=1}^M N_i + N^+ + N_e = \sum_{i=1}^M N_i + 2N_e. \tag{2.22}$$

Nahradíme např. poslední rovnici v (2.18) podmínkou (2.22). Soustavu (2.18) pak můžeme nakonec psát v maticovém tvaru (indexem λ budeme značit index probíhající všechny vázané stavy i a kontinuum κ — tedy $i = 1, \dots, M$; $f = 1, \dots, M$; $\lambda = 1, 2, \dots, M, \kappa$)

$$\mathbf{Q} \mathbf{N} = \mathbf{B}, \tag{2.23}$$

kde jednotlivé prvky matice soustavy mají hodnoty (pro podmínku (2.22))

$$\begin{aligned} Q_{ii} &= - \left(\sum_{f \neq i} P_{if} + P_{i\kappa} \right) = - \sum_{\lambda \neq i} P_{i\lambda} \\ Q_{i\lambda} &= P_{\lambda i} \\ Q_{\kappa i} &= 1 \\ Q_{\kappa\kappa} &= 2 \end{aligned} \tag{2.24}$$

Vektor obsazení $\mathbf{N}$ je dán

$$\mathbf{N} = (N_1, N_2, \dots, N_M, N_\kappa) \tag{2.25}$$

a vektor pravých stran má pro uzavírací podmínku (2.22) tvar

$$\begin{aligned} B_i &= 0, \quad \forall i \\ B_\kappa &= N_0 \end{aligned} \tag{2.26}$$

Pro podmínku (2.21) se matice změní takto

$$\begin{aligned} B_\kappa &= N_e \\ Q_{\kappa i} &= 0 \\ Q_{\kappa\kappa} &= 1 \end{aligned} \tag{2.27}$$

2.3 Pseudokontinuum, grupované pravděpodobnosti

Zaměřme se nyní podrobněji na problém počtu vázaných stavů. Je jasné, že jich bude konečný počet, neboť elektrony v ještě vyšších hladinách jsou působením perturbujícího elektrického pole uvolněny do kontinua. Ve skutečnosti je pojem této maximální existující hladiny poněkud matoucí, neboť se jedná o hodnotu danou průměrováním mnoha atomů v jednotce objemu plazmy, z nichž každý má toto M jiné, dané momentální prostorovou konfigurací okolních perturbujících částic. Proto Hummer a Mihalas (1988) zavádějí pojem pravděpodobnosti obsazení daného energetického stavu — *occupation probability* — OP . Tato veličina vyjadřuje pravděpodobnost, s jakou jsou v plazmě za daných fyzikálních podmínek jednotlivé energetické hladiny skutečně vázané. Správně bychom tedy měli použít při řešení soustavy ESE tento formalismus pro nekonečně mnoho hladin. Z praktických důvodů však použijeme postupy používané dříve před zavedením OP-formalismu založené na odhadu maximálního M . Pro dostatečně vysoké hladiny se však příslušné pravděpodobnosti obsazení blíží k nule, takže nad jistou M -tou hladinou můžeme všechny ostatní opravdu zanedbat. Většinou se používalo kritérium srovnatelné velikosti vnějšího rušícího potenciálu s ionizačním potenciálem M -té hladiny ve tvaru (Hubený (1988)):

$$n_M = 2.154 \cdot 10^4 \left(\frac{T_e}{N_e} \right)^{1/4} \tag{2.28}$$

Jak ukázal Hubený (1994), je rozdíl výsledných obsazení při tomto pojetí oproti OP-formalismu téměř zanedbatelný. Stejně však vycházejí počty takto odhadnutých existujících vázaných hladin příliš vysoké, což značně komplikuje praktické naprogramování. Pro řešení soustavy ESE je limitujícím faktorem rychlost počítače a velikost paměti. Pro uložení matice soustavy pro n hladin je třeba pole o velikosti n^2 reálných čísel (ve dvojitě přesnosti) a počet operací nutných k vyřešení této soustavy je úměrný $n^3/3$. I při vysoké výkonnosti dnešních superpočítačů s použitím speciálních vektorových algoritmů je jasné, že pro již řádově tisíce hladin se stává soustava ESE prakticky neřešitelnou. Naštěstí lze počet vysokých hladin velmi podstatně zredukovat.

Velmi vysoké hladiny jsou totiž velmi citlivé (vzhledem k nízké ionizační energii) na působení elektronových srážkových procesů, jsou tedy v intenzivní interakci s kontinuem volných elektronů a můžeme je tedy považovat za podsystém nacházející se v lokální termodynamické rovnováze. V důsledku toho je obsazení těchto stavů určeno Sahovou (2.3) resp. Boltzmannovou (2.1) rovnicí. Nazvěme souhrn těchto vysokých stavů *pseudokontinuem*. (Hubený (1988) používá pro ně označení neexplicitní hladiny — na rozdíl od explicitních vázaných hladin, jejichž jednotlivá obsazení se počítají přímým řešením soustavy ESE) a zajímejme se o obsazení těchto stavů jako celku. Můžeme si představit, že jde o jakousi „superhladinu“, či energetický pás, popř. grupu stavů. Takovýto postup rozpracoval pro výpočty modelů atmosfér Anderson (1989). Ve skutečnosti bychom měli podobný formalismus použít i na jednotlivé explicitně vázané hladiny v důsledku dělení do podstavů podle vedlejšího kvantového čísla l s velmi blízkými energiemi. Zde předpokládáme ustavení LTE působením velmi účinných srážek s protony (typu $nl \rightarrow nl'$) mající za následek tzv. statistické populování podstavů $N_{nl} = (2l + 1)/n^2 N_n$. Podrobné diskuse oprávněnosti tohoto předpokladu viz Hummer a Storey (1992) v přehledu literatury (Dodatek A).

Pro jednotlivé hladiny pseudokontinua budeme v dalším používat řecké indexy ρ, σ a pro pseudokontinuum jako jednu „superhladinu“ pak index R . Explicitní vázané hladiny označíme i, f . Indexy λ, μ , pak budou procházet všechny možné stavy (tj. vázané, pseudokontinuum a pravé kontinuum). Abychom nemuseli všude explicitně vypisovat podmínku $\lambda \neq \mu$, definujeme pravděpodobnosti přechodu mezi stejnými hladinami $P_{\mu, \mu} = 0$. M bude značit maximální explicitní vázanou hladinu, zatímco pseudokontinuum se bude rozprostírat od hladiny $R_1 = M + 1$ do $R_{M'} = \kappa - 1$, kde κ je index rovnice resp. prvku matice pro pravé kontinuum. Struktura reprezentace obsazení hladin ve vektoru $\mathbf{N}$ je tedy následující:

$$(N_1, N_2, \dots, n_i, \dots, N_M, \underbrace{N_{R_1}, \dots, N_{\rho}, \dots, N_{R_{M'}}}_{N_R}, N_{\kappa})^T \quad . \quad (2.29)$$

Obsazení superhladiny N_R je

$$N_R = \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} N_\rho \quad . \quad (2.30)$$

Z platnosti Sahovy a Boltzmannovy rovnice pro N_ρ plyne

$$N_\rho = N_e N^+ C_I T_e^{-3/2} 2\rho^2 \exp\left(\frac{\mathcal{R}}{kT\rho^2}\right) \quad . \quad (2.31)$$

S použitím (2.30) pak můžeme psát

$$N_\rho = N_R Z_\rho \quad , \quad (2.32)$$

kde Z_ρ je relativní obsazení ρ -té hladiny pseudokontinua dané

$$Z_\rho = \frac{2\rho^2 \exp\left(\frac{\mathcal{R}}{kT\rho^2}\right)}{Z_R} \quad , \quad (2.33)$$

přičemž Z_R je stavová suma pseudokontinua :

$$Z_R = \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} 2\rho^2 \exp\left(\frac{\mathcal{R}}{kT\rho^2}\right) \quad . \quad (2.34)$$

Přepíšme nyní rovnice (2.18) se zahrnutím pseudokontinua:

$$i\text{-tá:} \quad \sum_{f=1}^M N_f P_{fi} + \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} N_\rho P_{\rho i} + N_\kappa P_{\kappa i} - N_i \left(\sum_{f=1}^M P_{if} + \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} P_{i\rho} + P_{i\kappa} \right) = 0 \quad (2.35)$$

$$\sigma\text{-tá:} \quad \sum_{f=1}^M N_f P_{f\sigma} + \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} N_\rho P_{\rho\sigma} + N_\kappa P_{\kappa\sigma} - N_\sigma \left(\sum_{f=1}^M P_{\sigma f} + \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} P_{\sigma\rho} + P_{\sigma\kappa} \right) = 0$$

Použitím vztahu (2.31) můžeme počet rovnic zredukovat, neboť rovnice pro hladiny z pseudokontinua jsou nyní lineárně závislé a můžeme je tedy nahradit jejich součtem přes všechny σ (obecně jakoukoli lineární kombinací). Dostaneme

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma=R_1}^{R_{M'}} \sum_{f=1}^M N_f P_{f\sigma} + N_R \sum_{\sigma=R_1}^{R_{M'}} \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} Z_\rho P_{\rho\sigma} + N_\kappa \sum_{\sigma=R_1}^{R_{M'}} P_{\kappa\sigma} \\ & - N_R \left(\sum_{\sigma=R_1}^{R_{M'}} Z_\sigma \sum_{f=1}^M P_{\sigma f} + \sum_{\sigma=R_1}^{R_{M'}} Z_\sigma \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} P_{\sigma\rho} + \sum_{\sigma=R_1}^{R_{M'}} Z_\sigma P_{\sigma\kappa} \right) = 0 \quad . \quad (2.36) \end{aligned}$$

Členy obsahující $P_{\rho\sigma}$ a $P_{\sigma\rho}$ se po záměně sum a indexů vzájemně vyruší a vidíme, že lze soustavu (2.35) psát opět ve tvaru (pro podmínku (2.22))

$$\overline{Q} \cdot \overline{N} = \overline{B} \quad , \quad (2.37)$$

kde nyní

$$\begin{aligned}
\overline{Q}_{ii} &= - \left(\sum_{f \neq i} P_{if} + \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} P_{i\rho} + P_{i\kappa} \right) \\
\overline{Q}_{if} &= P_{fi} \quad \forall f \neq i, i = 1, \dots, M \quad f = 1, \dots, M \\
\overline{Q}_{iR} &= \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} Z_\rho P_{\rho i} \\
\overline{Q}_{Ri} &= \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} P_{i\rho} \\
\overline{Q}_{RR} &= \sum_{f=1}^M \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} Z_\rho P_{\rho f} + \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} P_{\sigma\kappa} \\
\overline{Q}_{\kappa R} &= \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} Z_\rho P_{\rho\kappa} \\
\overline{Q}_{R\kappa} &= \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} P_{\kappa\rho} \\
\overline{Q}_{i\kappa} &= P_{\kappa i} \\
\overline{Q}_{\kappa i} &= 1 \\
\overline{Q}_{\kappa\kappa} &= 2 \\
\overline{B}_i &= 0 \\
\overline{B}_R &= 0 \\
\overline{B}_\kappa &= N_0
\end{aligned} \tag{2.38}$$

a vektor neznámých

$$\mathbf{N} = (N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_M, N_R, N_\kappa)^T \quad . \tag{2.39}$$

Matici $\overline{\mathbf{Q}}$ lze formálně psát analogicky k $\mathbf{Q}$ pomocí indexů (pro podmínku (2.22))
 $\Lambda = 1, 2, \dots, M, R, \kappa$ a $\mu = 1, 2, \dots, M, R$:

$$\begin{aligned}
\overline{Q}_{\mu\mu} &= - \sum_{\Lambda \neq \mu} \overline{P}_{\mu\Lambda} \\
\overline{Q}_{\mu\Lambda} &= \overline{P}_{\Lambda\mu} \\
\overline{Q}_{\kappa\mu} &= 1 \\
\overline{Q}_{\kappa\kappa} &= 2 \quad ,
\end{aligned} \tag{2.40}$$

kde $\overline{P}_{\Lambda,\mu}$ budeme nazývat grupované pravděpodobnosti

$$\begin{aligned}
\overline{P}_{\Lambda\mu} &= P_{\Lambda\mu} \quad \forall \Lambda \neq R, \mu \neq R \\
\overline{P}_{\Lambda R} &= \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} P_{\Lambda\rho} \\
\overline{P}_{R\Lambda} &= \sum_{\rho=R_1}^{R_{M'}} Z_\rho P_{\rho\Lambda} \quad .
\end{aligned} \tag{2.41}$$

Pro podmínku zachování náboje (2.21) dojde ke změně:

$$\begin{aligned}\overline{B}_\kappa &= N_e \\ \overline{Q}_{\kappa\mu} &= 0 \\ \overline{Q}_{\kappa\kappa} &= 1 \quad .\end{aligned}\tag{2.42}$$

Kapitola 3

Pravděpodobnosti atomárních přechodů

3.1 Zářivé přechody

3.1.1 Vázaně-vázané přechody

V této kapitole se zaměříme podrobně na zářivé dipólové přechody mezi dvěma vázanými stavy i, j vodíkového atomu. Většinu vztahů lze najít spolu se srozumitelným výkladem v učebnici Mihalase (1970 a 1978). Podobně je uvádí i Lang (1980) nebo Sobolev (1975). Obecnou kvantově-mechanickou formulací se podrobně zabývá Hadrava (1974). Přehled zdrojů atomárních konstant je uveden v dodatku A.

Uvažujme excitovaný atom s elektronem na hladině $i > 1$. Působením záření o střední intenzitě J_ν může změnit svůj stav následujícími způsoby:

1. Nastane *fotoexcitace* a při *absorpci* fotonu s frekvencí ν_{ij} dané vztahem

$$h\nu_{ij} = \mathcal{R} \left(\frac{1}{i^2} - \frac{1}{j^2} \right) \quad (3.1)$$

dojde k přeskoku elektronu na vyšší hladinu $j > i$. Pravděpodobnost tohoto přechodu je úměrná intenzitě záření J_ν o frekvenci odpovídající (3.1)

$$R_{ij} = B_{ij} \bar{J}_{ij} \quad , \quad (3.2)$$

kde střední intenzita záření v daném přechodu je dána integrálem přes profil čáry ϕ_ν

$$\bar{J}_{ij} = \int \phi_\nu J_\nu d\nu \quad (3.3)$$

Přesněji bychom měli uvažovat absorpční profil ϕ_ν a integrovat přes všechny frekvence, ale jelikož budeme dopadající záření uvažovat jako nařazené Planckovské, můžeme změnu jeho intenzity na intervalu frekvencí odpovídajícímu příslušnému profilu zanedbat a absorpční profil nahradíme Diracovou δ -funkcí.

2. Výše excitovaný atom může přejít do původního (nebo nižšího) stavu — dojde k jeho *zářivé deexcitaci* buď *spontánní emisí*, jejíž pravděpodobnost vyjadřuje Einsteinův koeficient A_{ji} , tedy

$$R_{ji}^{sp} = A_{ji} \quad , \quad (3.4)$$

nebo *indukovanou emisí* s pravděpodobností

$$R_{ji}^{ind} = B_{ji} \bar{J}_{ij} \quad . \quad (3.5)$$

Celková pravděpodobnost zářivé deexcitace je tedy

$$R_{ji} = A_{ji} + B_{ji} \bar{J}_{ij} \quad . \quad (3.6)$$

Mezi výše definovanými Einsteinovými koeficienty platí známé vztahy

$$B_{ji} = \frac{g_i}{g_j} B_{ij} \quad A_{ji} = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2} B_{ji} \quad , \quad (3.7)$$

kde g_i, g_j jsou příslušné statistické váhy (2.9), c rychlost světla a h Planckova konstanta. Obvykle se koeficient B_{ij} vyjadřuje pomocí tzv. *síly oscilátoru* f_{ij} nebo pomocí objemového absorpčního koeficientu (= celkového účinného průřezu) a_{ij} :

$$a_\nu(i, j) = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} B_{ij} = \frac{\pi e^2}{mc} f_{ij} \quad , \quad (3.8)$$

kde e je náboj a m hmotnost elektronu. Podívejme se blíže na sílu oscilátoru, jež má pro výpočet pravděpodobností přechodů fundamentální význam.

Síla oscilátoru

Obvykle bývá interpretována jako efektivní počet klasických oscilátorů, který způsobí stejnou absorpci jako zkoumaný přechod počítaný na přesném kvantově-mechanickém základě. Její výpočet (pouze pro vodík) úzce souvisí s vyčíslením maticového elementu dipólového přechodu, tedy s integrálem

$$\left(\int_0^\infty P_{n'l'}(r) P_{nl}(r) r dr \right)^2 \quad , \quad (3.9)$$

kde

$$P_{nl}(r) = r R_{nl}(r) \quad (3.10)$$

a R_{nl} je radiální vodíková funkce pro hlavní n, n' a vedlejší l, l' kvantová čísla (platí výběrové pravidlo $l' = l \pm 1$). Na základě práce Gordona, který vyjádřil (3.9) v analytickém tvaru s použitím hypergeometrické funkce, pak dostali Menzel a Pekeris (1935) pro sílu oscilátoru f_{mn} vztah

$$f_{mn} = \frac{32}{3} m^2 n^4 \frac{(n-m)^{2n+2m-4}}{(n+m)^{2n+2m+3}} \Delta(m, n) \quad , \quad (3.11)$$

přičemž

$$\Delta(m, n) = F^2(-m, -n+1, 1; \rho) - F^2(-m+1, -n, 1; \rho) \quad , \quad (3.12)$$

kde

$$\rho = -\frac{4 m n}{(n-m)^2} \quad (3.13)$$

a $F \equiv {}_2F_1$ obyčejná hypergeometrická funkce definovaná vztahem

$$F(\alpha, \beta, \gamma; x) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma 1!} x + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1) 2!} x^2 + \dots \quad (3.14)$$

Sílu oscilátoru spočítal poprvé Kramers pomocí klasické fyziky a Menzel a Pekeris (1935) jeho výsledek vyjádřili ve tvaru (absolutní hodnota je tu kvůli zobecnění na imaginární stavy)

$$f_K(m, n) = \frac{64}{3\pi\sqrt{3}} \frac{1}{g_m} \frac{1}{\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)^3} \left| \frac{1}{m^3} \frac{1}{n^3} \right| \quad (3.15)$$

a proto se (3.11) vyjadřuje někdy pomocí této veličiny

$$f_{mn} = f_K(m, n) g_I(m, n) \quad (3.16)$$

Opravný koeficient $g_I(m, n)$ se nazývá Gauntův faktor pro vázaně-vázané přechody. Jeho výhoda spočívá v tom, že je řádově roven jedné, ke které se blíží tím více, čím vyšší je m nebo $n - m$ (největší odchylku od jedné má $g_I(1, 2) = 0.7165$). Porovnáním (3.11) a (3.15) vyplývá

$$g_I(m, n) = \pi\sqrt{3} \frac{n m}{(n-m)} \left(\frac{n-m}{n+m} \right)^{2n+2m} \Delta(m, n) \quad (3.17)$$

Dosazením (3.16), (3.15), (3.8) a (3.7) do (3.2) a (3.6) dostáváme výsledné vztahy pro intenzity vázaně-vázaných zářivých přechodů

$$R_{ij} = \mathcal{K} \frac{1}{(j^2 - i^2) i^3 j} g_I(i, j) \mathcal{J}_{\nu_{ij}} \quad (3.18)$$

$$R_{ji} = \mathcal{K} \frac{1}{(j^2 - i^2) i j^3} g_I(i, j) (\mathcal{J}_{\nu_{ij}} + 1) \quad (3.19)$$

kde

$$\mathcal{K} = \frac{1024 \pi^5 e^{10} m}{3\sqrt{3} c^3 h^6} = 1.5746 \cdot 10^{10} \quad [\text{s}^{-1}] \quad (3.20)$$

a modifikovaná střední intenzita $\mathcal{J}_\nu$

$$\mathcal{J}_\nu = J_\nu \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} \right)^{-1} \quad (3.21)$$

Alternativní zápis pravděpodobností R_{ij} , R_{ji} dostaneme s použitím (3.8).

$$R_{ij} = 4\pi \frac{a_\nu(ij)}{h\nu_{ij}} J_\nu \quad (3.22)$$

$$R_{ji} = 4\pi \frac{a_\nu(ij)}{h\nu_{ij}} \frac{g_i}{g_j} \frac{2h\nu^3}{c^2} (1 + \mathcal{J}_\nu) \quad (3.23)$$

Tento zápis se nám hodí pro výpočet vázaně-volných přechodů, které budou předmětem následující kapitoly.

3.1.2 Vázaně-volné přechody

Vázaně-volným přechodem rozumíme proces, při kterém je atom před či po přechodu ionizován, tedy když se jeho elektron nachází v kontinuu. V důsledku převládajících vzájemných srážek elektronů nad ostatními procesy (např. Osterbrock (1974) str. 15, Seaton(1964)) se rychle ustaví Maxwellovo rozdělení rychlostí charakterizované elektronovou teplotou T . Zářivé přechody můžeme rozdělit opět na tři procesy. Na fotoionizaci a na spontánní a indukovanou fotorekombinaci. Pro popis těchto procesů se mohou opět užít Einsteinovy koeficienty, které se pro vázaně-volné přechody nazývají Milneovy (a někdy se hovoří obecněji o Einstein-Milneových koeficientech). Podrobněji viz např. Lang (1980) str. 50. Mnohem častěji se však používá objemový absorpční koeficient $a_\nu(n)$ a rekombinační koeficient $\alpha_n(T)$.

Fotoionizace

Při *fotoionizaci* je po absorpci fotonu s energií $h\nu > \mathcal{R}/n^2$ uvolněn z n -té hladiny elektron s rychlostí v a odpovídající kinetickou energií (vyjádřenou v Rydbergových jednotkách) ϵ . Platí Einsteinova rovnice fotoefektu

$$h\nu = \frac{\mathcal{R}}{n^2} + \frac{mv^2}{2} = \mathcal{R} \left(\frac{1}{n^2} + \epsilon \right) \quad . \quad (3.24)$$

Použijeme-li imaginární formalismus (2.12) nabude (3.24) tvaru

$$h\nu = \mathcal{R} \left(\frac{1}{n^2} + \frac{1}{k^2} \right) \quad . \quad (3.25)$$

Přiřaďme každému přechodu do kontinua (do stavu ik) jistou sílu oscilátoru f_{nk} danou (po dosazení g_n) analogicky (3.15)

$$f_{nk} = \frac{32}{3\pi\sqrt{3}} \frac{1}{n^5 k^3} \left(\frac{1}{n^2} + \frac{1}{k^2} \right)^{-3} g_{II}(n, k) \quad . \quad (3.26)$$

Zde $g_{II}(n, k)$ je Gauntův faktor pro vázaně-volné přechody. Menzel a Pekeris (1935) jej upravili do tvaru

$$g_{II}(n, k) = \pi\sqrt{3} \frac{n k}{\sqrt{n^2 + k^2}} \frac{\exp(-4k \arctan(n/k))}{1 - \exp(-2\pi k)} |\Delta(n, ik)| \quad , \quad (3.27)$$

přičemž výraz v absolutní hodnotě je definován formálně stejně jako (3.12) a podobně i funkce (3.14). Objemový absorpční koeficient bude analogicky k (3.8)

$$a_\nu(n) = \frac{\pi e^2}{mc} f_{nk} \frac{dk}{d\nu} \quad , \quad (3.28)$$

pro dk koncových volných stavů v intervalu frekvencí $d\nu$. Derivací (3.25) dostaneme

$$\frac{dk}{d\nu} = -\frac{h k^3}{2\mathcal{R}} \quad , \quad (3.29)$$

tudíž po dosazení do (3.28) s vyjádřením (2.11) vychází

$$a_\nu(n) = \frac{64 \pi^4 m e^{10}}{3\sqrt{3} c h^6} \frac{1}{n^5 \nu^3} g_{II}(n, \nu) \quad , \quad (3.30)$$

číselně pak

$$a_\nu(n) = 2.815 \cdot 10^{29} g_{II}(n, \nu) \frac{1}{n^5 \nu^3} \quad [\text{s}^{-3} \text{ cm}^2] \quad . \quad (3.31)$$

Pravděpodobnost fotoionizace do kontinua κ můžeme psát analogicky (3.44) (po zintegrování přes všechny frekvence schopné fotoefektu)

$$R_{n\kappa} = 4\pi \int_{\nu_n}^{\infty} \frac{a_\nu(n) J_\nu}{h\nu} d\nu \quad , \quad (3.32)$$

kde ν_n je prahová frekvence ionizace z n -té hladiny

$$\nu_n = \frac{\mathcal{R}}{h n^2} \quad . \quad (3.33)$$

Snadněji se bude integrovat přes energii vylétávajícího elektronu ϵ . Označíme-li $\mathcal{J}_\epsilon$ intenzitu J_ν pro hodnotu ν vyjádřenou pomocí ϵ (viz (3.24)), obdržíme výsledný vztah

$$R_{n\kappa} = \frac{512 \pi^5 \epsilon^{10} m}{3\sqrt{3} c^3 h^6} \frac{1}{n^3} \int_0^{\infty} \frac{\mathcal{J}_\epsilon}{n^2 \epsilon + 1} g_{II}(n, \epsilon) d\epsilon \quad , \quad (3.34)$$

číselně

$$R_{n\kappa} = 7.8730 \cdot 10^9 \frac{1}{n^3} \int_0^{\infty} \frac{\mathcal{J}_\epsilon}{n^2 \epsilon + 1} g_{II}(n, \epsilon) d\epsilon \quad [\text{s}^{-1}] \quad . \quad (3.35)$$

Pozn. Konstanta před integrálem v (3.34) je vlastně rovna polovině $\mathcal{K}$ (3.20)

Fotorekombinace

Fotorekombinací rozumíme proces, při kterém dojde k zachycení volného elektronu na některou vázanou hladinu za současného vyzáření fotonu. Podobně jako u vázaně-vázaných přechodů může být fotorekombinace spontánní a indukovaná. Její celkovou pravděpodobnost dostaneme zobecněním (3.23)

$$P_{\kappa n} = \int_{\nu_n}^{\infty} \frac{a_\nu(n)}{h\nu} \frac{g_n}{g_k} \frac{2h\nu^3}{c^2} (1 + \mathcal{J}_\nu) d\nu \quad . \quad (3.36)$$

Zde g_k je statistická váha volného stavu popsaného kvantovým číslem ik , pro kterou ze statistické fyziky plyne

$$g_k = \frac{8\pi m^3 v^2}{h^3} \frac{1}{N_e} \frac{1}{F(v)} \quad , \quad (3.37)$$

kde $F(v)$ je rozdělovací funkce Maxwellova rozdělení rychlostí (2.6). Po dosazení (3.30), (2.6), (3.37) a (3.24) do (3.36) dostaneme konečně

$$R_{\kappa n} = N_e \frac{64}{3} \sqrt{\frac{8}{3\pi}} \frac{\pi^4 \epsilon^{10}}{\sqrt{m} c^3 h^3} \frac{(kT)^{-\frac{3}{2}}}{n} \int_0^{\infty} \frac{e^{-\frac{\mathcal{R}}{kT} \epsilon}}{1 + n^2 \epsilon} g_{II}(n, \epsilon) (1 + \mathcal{J}_\epsilon) d\epsilon \quad , \quad (3.38)$$

číselně

$$R_{\kappa n} = 3.2604 \cdot 10^{-6} N_e \frac{T^{-\frac{3}{2}}}{n} \int_0^{\infty} \frac{e^{-\frac{157887}{T} \epsilon}}{1 + n^2 \epsilon} g_{II}(n, \epsilon) (1 + \mathcal{J}_\epsilon) d\epsilon \quad [\text{s}^{-1}] \quad . \quad (3.39)$$

Ve většině prací (z oboru planetárních mlhovin) se stimulovaná emise $\mathcal{J}_\epsilon$ obvykle zanedbává (nebo se zahrnuje jako negativní absorpce do fotoionizace) a intenzita rekombinace (rekombinační rejt) se vyjadřuje pomocí rekombinačního koeficientu $\alpha_n(T_e)$

$$R_{\kappa n} = N_e \alpha_n(T_e) \quad . \quad (3.40)$$

Někdy se uvádí součet rekombinačních koeficientů přes všechny hladiny označovaný jako totální rekombinační koeficient pro nulovou hustotu. To proto, že někteří autoři od výše definovaného $\alpha_n(T)$ odečítají srážkové procesy a celek nazývají opět totálním rekombinačním koeficientem.

Pro některé zjednodušené úvahy hlavně v teorii planetárních mlhovin se Gauntův faktor g_{II} pokládá roven jedné a pak je možné napsat vztah pro rekombinační koeficient ve tvaru (např. Sobolev (1975), str.280)

$$\alpha_n(T) = 3.26 \cdot 10^{-6} \frac{1}{n^3 T^{3/2}} e^{x_n} E_1(x_n) \quad , \quad (3.41)$$

kde E_1 je integrální exponenciální funkce a $x_n = \frac{157887}{T n^2}$.

Alternativní způsob odvození fotorekombinace je pomocí jejího emisního koeficientu vztaženého na 1 atom — tedy vlastně účinného průřezu fotorekombinace $\sigma_{\kappa n}(v)$ pro který platí (např. Lang(1980), str. 50) :

$$\frac{a_\nu(n)}{\sigma_{\kappa n}(v)} = \frac{m^2 c^2 v^2}{\nu^2 h^2 g_n} \quad . \quad (3.42)$$

Po dosazení (3.30) a (2.9) dostaneme

$$\sigma_{\kappa n}(v) = \frac{128}{3\sqrt{3}} \frac{\pi^4 e^{10}}{m c^3 h^4} \frac{g_{II}(n, \nu)}{n^3 v^2 \nu} \quad . \quad (3.43)$$

Pravděpodobnost fotorekombinace pak napíšeme z pohledu volného elektronu jako

$$R_{\kappa n} = N_e \int_0^\infty \sigma_{\kappa n}(v) v F(v) dv \quad , \quad (3.44)$$

přičemž $F(v)$ je Maxwellova funkce (2.6). Kombinací (2.6), (3.24) a (3.43) dostaneme po úpravách opět (3.38).

3.2 Srážkové přechody

Ke změně energie atomu může dojít vedle působení fotonu i při srážce s jiným atomem, iontem či elektronem. Vzájemné srážky neutrálních atomů jsou zanedbatelné vůči srážkám nabitých částic, neboť Coulombické síly mají mnohem větší dosah, takže k ovlivnění nabitých částic dochází na mnohem větší vzdálenost. Četnost srážek je úměrná rychlosti kolidujících částic, která je zase (při tepelné rovnováze) nepřímo úměrná odmocnině z hmotnosti částice. Jelikož poměr odmocnin hmotností protonu a elektronu činí asi 43, je jasné, že srážky atomu s ionty jsou méně četné

než srážky s volnými elektrony. Budeme tedy dále uvažovat pouze proces nazývaný *electron impact* (Mihalas (1970), str. 142).

Uvažujme excitaci atomu z hladiny i do hladiny j způsobenou dopadem volného elektronu s rychlostí v . Intenzita přechodů (transition rate) C_{ij} bude

$$C_{ij} = N_e \int_{v_0}^{\infty} \sigma_{ij}(v) F(v) v dv = N_e q_{ij}(T_e) , \quad (3.45)$$

kde N_e je hustota volných elektronů, $F(v)$ Maxwellovo rozdělení rychlostí (2.6), T elektronová teplota, σ_{ij} účinný průřez srážkové excitace a v_0 je rychlost odpovídající prahové energii E_0 excitace

$$\frac{mv_0^2}{2} = E_0(ij) = h\nu_{ij} . \quad (3.46)$$

Veličina q_{ij} , která má podobný význam jako Boltzmannův faktor (2.4) se často v literatuře označuje jako Ω_{ij} , a plete se tak se silou srážky (viz níže). Pro srážkovou deexcitaci je analogicky

$$C_{ji} = N_e \int_0^{\infty} \sigma_{ji}(v) F(v) v dv = N_e q_{ji}(T) . \quad (3.47)$$

Z detailní rovnováhy $N_i C_{ij} = N_j C_{ji}$ při termodynamické rovnováze s teplotou T (Boltzmannovo rozdělení) plyne

$$C_{ij} = C_{ji} \frac{g_j}{g_i} \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right) , \quad (3.48)$$

kde g_i, g_j jsou statistické váhy (2.9).

Ze vztahů (3.45) a (3.47) je vidět, že pro excitaci musí mít elektron rychlost větší než je rychlost odpovídající excitační energii přechodu, zatímco k deexcitaci dochází srážkou s elektronem libovolné energie.

Tradičně se zavádí vyjádření účinného průřezu $\sigma_{ij}(v)$ pomocí tzv. (monochromatické) síly srážky (collision strength) $\Omega_{ij}(v)$, což je veličina blízká jedné:

$$\sigma_{ij} = \frac{\pi}{g_i} \left(\frac{h}{2\pi m v} \right)^2 \Omega_{ij}(v) . \quad (3.49)$$

Po dosazení (3.49) a $F(v)$ (2.6) do (3.45) dostáváme

$$C_{ij} = \frac{N_e}{g_i} \frac{h^2}{(2\pi m)^{3/2} (kT)^{1/2}} \int_{v_0}^{\infty} v \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) \Omega_{ij}(v) dv , \quad (3.50)$$

což lze napsat (po dosazení konstant)

$$C_{ij} = 8.63 \cdot 10^{-6} N_e \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right) \frac{1}{g_i \sqrt{T}} \Gamma_{ij} \quad [\text{cm}^3 \text{ s}^{-1}] \quad (3.51)$$

$$\Gamma_{ij} = \frac{m}{kT} \exp\left(\frac{E_0}{kT}\right) \int_{v_0}^{\infty} v \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) \Omega_{ij}(v) dv . \quad (3.52)$$

Zde Γ_{ij} je efektivní srážková síla — pomalu se měnící funkce elektronové teploty T . Tak se vyhladí závislost na rezonancích, kdy účinný průřez pro některé rychlosti silně osciluje (viz Giovanardi et al. (1987)).

Pro srážkovou ionizaci lze psát analogicky (3.45)

$$C_{n\kappa} = N_e \int_{v_0}^{\infty} \sigma_{n\kappa}(v) F(v) v dv \quad , \quad (3.53)$$

kde κ označuje kontinuum. Z podmínky detailní rovnováhy a Sahovy rovnice (2.3) pak dostáváme vztah mezi srážkovou ionizací a inverzním procesem nazývaným tříčásticovou rekombinací (three body recombination)

$$C_{\kappa n} = \frac{N_e h^3}{(2\pi m k T)^{3/2}} n^2 \exp(\chi_n) C_{n\kappa} \quad , \quad (3.54)$$

kde χ_n je ionizační energie hladiny n .

V označení srážkových sil Ω_{ij} existuje značná nejednotnost, často jsou zaměňovány s Γ_{ij} , nebo q_{ij} nebo dokonce C_{ij} , intenzity srážkových přechodů (collision rates) se někdy značí γ_{ij} . Někdy se dokonce označuje jako Ω veličina $\Omega_{ij} \exp(h\nu/kT_e)$ (Giovanardi et al. (1987)). Je tedy vždy třeba dávat pozor na definici a označení veličin

Vlastní srážková síla je počítána na základě kvantově-mechanických výpočtů, které vedou k velice složitým a často analyticky nevyjádřitelným vztahům. Proto se pro praktické účely používá mnoho různých aproximací, které však lze použít jen pro jistý omezený rozsah energií, nebo kvantových čísel. Často se lze setkat např. s metodami jako Classic Impact Parameter Approximation, First Born Approximation, Bethe's Approximation, Distorted Wave Second Born Approximation aj.

Pro účely praktických výpočtů intenzit srážkových přechodů v astrofyzikálním plazmatu se uplatňují nejlépe semiempirické vzorce, které jsou kombinací několika metod a empirických koeficientů zvolených na základě laboratorních měření. Velká část takových prací pochází z per autorů Sampsona a Goldeny (Sampson (1969), Sampson a Golden (1970, 1971)) nověji pak Clark (1990). Nás budou dále zajímat pouze vztahy pro vodík. Pro naprogramování jsou vhodné např. vzorce uváděné Gee et al. (1976) nebo Johnsonem (1972).

Uvedené práce se zabývají přechody mezi hladinami odlišenými pouze hlavním kvantovým číslem (přechody $n \rightarrow n'$). Pokud se vezme v úvahu i dělení podle vedlejších kvantových čísel (přechody $nl \rightarrow n'l'$), je situace velmi nepřehledná, neboť každý autor uvádí vzorce jen pro několik málo přechodů (např. jen $2l \rightarrow 4l'$). Shrnutí roztržštěné literatury provedli Giovanardi et al. (1987), kteří se pokusili shrnout výsledky výpočtu intenzit srážkových přechodů podle dostupných vzorců do jednoduché aproximace pro Γ

$$\Gamma(T_e) = C_0 + C_1 \cdot T_e + C_2 \cdot T_e^2 + C_3 \cdot T_e^3 \quad , \quad (3.55)$$

kde koeficienty C_i tabelují pro všechny přechody $nl \rightarrow n'l'$ kde $n = 1-3$, $n' = 2-4$, pro $nl \rightarrow n$ kde $n = 1-4$, $n' = 5-15$, a pro $n \rightarrow n'$, kde $n = 5-14$, $n' = 6-15$. Různé sady koeficientů jsou uvedeny pro nízké elektronové teploty 5000–72 000 K a pro vysoké teploty 55 000–500 000 K.

Později Gionavardi a Palla (1989) opravili koeficienty pro přechody $nl \rightarrow n'l'$, kde $n = 1-2$, $n' = 2-3$, a uvedli korekce pro nízké teploty 2000–5000 K. V jejich pracích však našli Chang et al. (1991) velké nesrovnalosti pro první 4 přechody a doporučili používat pro všechny přechody $n \rightarrow n'$ kromě $1 \rightarrow 2$ vzorce Johnsonovy a pro $1 \rightarrow 2$ vzorec Scholz et al. (1990). Podle Giovanardiho (1991, soukromé sdělení) není nekonzistentnost uváděných koeficientů tak velká, nicméně podle jeho mínění je lepší použít Johnsonovy vzorce, pokud se zajímáme pouze o přechody $n \rightarrow n'$, což je náš případ. Přesto je možné užít polynomické aproximace Gionavardi et al. (1987) pro 5. a vyšší hladiny (neboť vycházejí z Johnsonových výpočtů). Pro výpočet přechodu z 1. do 2. hladiny a srážkové ionizace základní hladiny je v současnosti nejlepším zdrojem aproximace Scholze a Walterse (1991), pro ostatní přechody jsou i jimi doporučovány Johnsonovy vzorce (1972). Jejich podrobnější popis je uveden v kapitole 5.

Kapitola 4

Rovnice energetické rovnováhy

Abychom mohli spočítat pravděpodobnosti přechodů podle rovnic uvedených v předchozích kapitolách, je nezbytné určení neznámé elektronové teploty plazmy T . Můžeme ji stanovit ze zákona zachování energie, který má nyní tvar podmínky energetické rovnováhy zkoumané plazmy. V následujících úvahách budeme používat postupy a značení obvykle používané při studiu planetárních mlhovin. Budeme-li předpokládat stacionární stav studovaného objemu plazmy, musí být vedle podmínky statistické rovnováhy splněna i podmínka energetické rovnováhy, která říká, že celková energie absorbovaná souborem atomů (tj. soustavou protonů + elektronů) za jednotku času je rovna celkové energii emitované. Poprvé se podrobně tomuto problému věnovali Baker, Menzel a Aller (1938) na modelu planetární mlhoviny ozařované silně zředěným Planckovským zářením u které je energie přijímána fotoionizací a ztrácena jednak v podobě záření produkovaného při brzdném záření a při rekombinaci a následných deexcitacích, jednak při srážkových excitacích hlavně těžších prvků za vyzáření zakázaných čar. Na základě tohoto předpokladu pak spočítali elektronové teploty pro čisté vodíkovou planetární mlhovinu pro různé barevné teploty centrální horké hvězdy (podrobněji viz srovnání v kapitole 7). Ukázali, že zde působí jakýsi termostatický efekt, který udržuje elektronovou teplotu téměř konstantní při změně stupně ionizace (v případě vysokého stupně zředění záření).

Spitzer (1948, 1949) odvodil alternativní formulaci energetické rovnováhy pro samotné kontinuum a použil ji ve zdokonalené podobě (se započtením molekulárních, dvoufotonových a dvuelektronových procesů pro různé prvky a procesů na prachových mikročásticích) k určení elektronových teplot v mezihvězdném prostředí. Ukázal, že pro typickou HII oblast leží její elektronová teplota v rozmezí 7500 K až 13500 K (Spitzer a Savedoff (1950)). Aller (1987) ukazuje, že Spitzerovu rovnici pro kontinuum lze odvodit z původního formalismu Bakera et al. (1938). Podobný přístup jako Spitzer používá i Osterbrock (1974) a Sobolev (1975). Pro

jeho výhodnost pro popis zředěné plazmy v poli spojitého (nařaděného) záření jej budeme (po zobecnění) dále používat i my. Musíme zde však brát v úvahu i procesy měnící energii kontinua samotného tj. volně-volné přechody a srážky způsobující přerozdělování energie v jednotlivých volných stavech kontinua.

Uvažujme tedy kontinuum volných elektronů, jehož rozdělení rychlostí je popsáno Maxwellovým rozdělením (2.6) s elektronovou teplotou T (odchylky od Maxwellova rozdělení budou podle Böhma a Allera pro podmínky panující v mlhovinách a hustších prostředích zanedbatelné — viz Aller (1987) str. 160). Zajímejme se nyní o procesy měnící energii kontinua. Lze je rozdělit na procesy dodávající kontinuu energii, kam patří fotoionizace, volně-volná absorpce (obecně zanedbávaná) a srážková deexcitace (rovněž opomíjena), a procesy energii odebírající, tedy fotorekombinace, volně-volná emise (brzdné záření—bremsstrahlung) a srážková excitace. Někdy se od energetického zisku fotoionizací odečítá rekombinační ztráta a hovoří se pak o „čistém ohřevu“ (net heating rate). Hledanou elektronovou teplotu pak obdržíme v okamžiku, kdy se energetické zisky a ztráty vyrovnají. Vzhledem k nelineárnímu charakteru použitých rovnic je teplotu nutno hledat iterativním způsobem. Většina dostupných prací, které podobný postup uplatňují (např. Spitzer a Savedoff (1950), Aller (1987), Sobolev (1975), Osterbrock (1974)) se však spokojí s formulací obou funkcí (energetického zisku a ztrát) a další detaily hledání elektronové teploty neuvádí. Navíc jsou z formulace energetických funkcí vypouštěny některé členy, které nejsou významné pro podmínky planetárních mlhovin, my si je však s ohledem na aplikace pro obálky Be hvězd nemůžeme dovolit vypustit. Sem patří hlavně volně-volná absorpce, srážková deexcitace. Funkce energetického zisku a ztrát budeme přitom formulovat poněkud odlišně od výše citovaných autorů. Na tomto místě je třeba zdůraznit, že pojetí hledání energetické rovnováhy v oblasti výzkumu řídkých obálek je poněkud odlišné od postupu používaných v klasické teorii hvězdných atmosfér (formulace pomoci zachování zářivého toku či diferenciální formulace).

4.1 Zářivé procesy

Analogicky intenzitám přechodů (= číselným rejtům) z předchozí kapitoly zavedeme energetické rejty jako součin příslušného číselného rejtu a energie kterou do/z kontinua odnáší/přináší. Definujme je jako množství energie dodané/odebrané jednotce objemu kontinua za jednotku času. energii odnesenou z kontinua označíme záporným znaménkem, dodanou do kontinua pak kladným. Uvažme nejprve fotoionizaci.

4.1.1 Fotoionizační ohřev kontinua

Příslušná intenzita ohřevu na jednotku objemu za jednotku času (heating rate) fotoionizací z n -té hladiny bude dána vztahem

$$E_{n\kappa}^R = +N_n W_{n\kappa}^R \quad , \quad (4.1)$$

kde N_n je obsazení n -té hladiny a $W_{n\kappa}$ energie typicky dodaná do kontinua za jednotku času jedním statisticky středovaným atomem. Je analogem pravděpodobnosti přechodu a má rozměr $[\text{erg s}^{-1}]$. Pohltí-li se foton o energii $h\nu$, předá se volnému elektronu jen energie $h(\nu - \nu_n)$, kde ν_n je hrana n -té série (3.33). Energie dodaná do všech volných stavů ik je pak analogicky (3.32)

$$W_{n\kappa}^R = 4\pi \int_{\nu_n}^{\infty} \frac{a_\nu(n) J_\nu}{h \nu} h(\nu - \nu_n) d\nu \quad . \quad (4.2)$$

Po dosazení (3.30), (3.33) a z (3.24) plynoucího vztahu

$$h(\nu - \nu_n) = \mathcal{R} \epsilon \quad (4.3)$$

vyjde po úpravách výsledný vztah

$$W_{n\kappa}^R = \frac{1024 \pi^7 e^{14} m^2}{3\sqrt{3} c^3 h^8} \frac{1}{n^3} \int_0^\infty \frac{\epsilon \mathcal{J}_\epsilon}{n^2 \epsilon + 1} g_{II}(n, \epsilon) d\epsilon \quad , \quad (4.4)$$

číselně

$$W_{n\kappa}^R = 0.17162 \frac{1}{n^3} \int_0^\infty \frac{\epsilon \mathcal{J}_\epsilon}{n^2 \epsilon + 1} g_{II}(n, \epsilon) d\epsilon \quad [\text{erg s}^{-1}] \quad . \quad (4.5)$$

4.1.2 Fotorekombinační ochlazování kontinua

Podobné úvahy jako v předchozím odstavci nás dovedou k vyjádření

$$E_{\kappa n}^R = -N_\kappa W_{\kappa n}^R \quad . \quad (4.6)$$

Vztah pro fotorekombinaci vyplyne z (3.36)

$$W_{\kappa n}^R = \int_{\nu_n}^{\infty} \frac{a_\nu(n)}{h\nu} \frac{g_n}{g_k} \frac{2h\nu^3}{c^2} (1 + \mathcal{J}_\nu) (h\nu - h\nu_n) d\nu \quad , \quad (4.7)$$

což nakonec dá

$$W_{\kappa n}^R = N_e \frac{128}{3} \sqrt{\frac{8}{3\pi}} \frac{\pi^6 e^{14} \sqrt{m}}{c^3 h^5} \frac{(kT)^{-\frac{3}{2}}}{n} \int_0^\infty \frac{\epsilon e^{-\frac{\mathcal{R}}{kT} \epsilon}}{1 + n^2 \epsilon} g_{II}(n, \epsilon) (1 + \mathcal{J}_\epsilon) d\epsilon \quad , \quad (4.8)$$

číselně

$$W_{\kappa n}^R = 7.1073 \cdot 10^{-17} N_e \frac{(T)^{-\frac{3}{2}}}{n} \int_0^\infty \frac{\epsilon e^{-\frac{157887}{T} \epsilon}}{1 + n^2 \epsilon} g_{II}(n, \epsilon) (1 + \mathcal{J}_\epsilon) d\epsilon \quad (4.9)$$

$[\text{erg s}^{-1}]$.

Energii fotorekombinace však můžeme napsat i z pohledu volného elektronu, který odnese z kontinua energii $\frac{1}{2}mv^2$. Příslušný vztah vychází z (3.44)

$$W_{\kappa n}^R = N_e \int_0^\infty \frac{1}{2}mv^2 \sigma_{\kappa n}(v) v F(v) dv \quad , \quad (4.10)$$

kde $\sigma_{\kappa n}$ je opět účinný průřez rekombinace (3.43). Prakticky se (4.1) používá většinou ve tvaru

$$E_{\kappa n}^R = N_\kappa N_e kT \beta_n(T) \quad , \quad (4.11)$$

Jak snadno nahlédneme, má $\beta_n(T)$ význam termálně vystředovaného rekombinačního koeficientu $\alpha_n(T)$ a proto se je obvykle nazývá *recombination cooling coefficient* s rozměrem $[s^{-1} \text{ cm}^3]$. Pro účely tabelace se obvykle $\beta(T)$ sčítá přes všechny hladiny a značí se $\beta_A(T)$ (podle Menzelova typu *A*), nebo se vynechá základní hladina — $\beta_B(T)$ pro typ *B* a hovoří se pak o totálním koeficientu rekombinačních ztrát. Pokud položíme Gauntův faktor roven jedné dostaneme vztah zcela analogický (3.41)

$$\beta_n(T) = 3.26043 \cdot 10^{-6} \frac{1}{n^3 T^{3/2}} e^{x_n} E_2(x_n) \quad . \quad (4.12)$$

4.1.3 Volně-volné přechody

Při volně-volných přechodech dochází k interakci mezi volnými elektrony v poli iontu a zářením. Při volně-volné absorpci se energie elektronu zvýší, při emisi produkující tzv. brzdné záření dojde k ztrátě části energie elektronu. I tyto procesy mohou být studovány stejným aparátem gauntových faktorů resp. sil oscilátorů, nyní však je počáteční i koncový stav čistě imaginární. Podrobné odvození této problematiky je možné nalézt v práci Karzase a Lattera (1961).

Volně-volná absorpce

Elektron ve stavu ik přejde po dopadu fotonu s energií $h\nu$ do energeticky vyššího stavu il určeného podmínkou

$$\frac{\mathcal{R}}{k^2} + h\nu = \frac{\mathcal{R}}{l^2} \quad , \quad (4.13)$$

a zároveň stavu ik odpovídá rychlost v daná (3.24). Zavedeme objemový absorpční koeficient $a(\nu, v)$ (vztahený na jeden iont a jeden elektron) pro absorpci z pásu stavů dk do dl stavů na interval frekvencí $d\nu$ podobný (3.28)

$$a(\nu, v) = \frac{\pi e^2}{m c} f_{kl} dk \frac{dl}{d\nu} \quad . \quad (4.14)$$

Nyní zde vystupuje síla oscilátoru

$$f_{kl} = \frac{64}{3\pi\sqrt{3}} \frac{1}{g_k} \frac{1}{k^3 l^3} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{l^2} \right)^{-3} g_{III}(k, l) \quad , \quad (4.15)$$

kde g_k je statistická váha volného elektronu (3.37) a g_{III} je Gauntův faktor pro volně-volné přechody. Po příslušném dosazení vyjde

$$a(\nu, \nu) = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}} \frac{\epsilon^6}{m^2 c h} \frac{1}{\nu^3 \nu} g_{III}(\nu, \nu) \quad . \quad (4.16)$$

Výsledný absorpční koeficient pro energii pohlcenou v pásu frekvencí $(\nu, \nu + d\nu)$ jednotkovým objemem ze všech směrů obdržíme integrováním přes Maxwellovo rozdělení počátečních stavů

$$a_\nu = N_e N^+ \int_0^\infty a(\nu, \nu) F(\nu) d\nu \quad . \quad (4.17)$$

Po úpravách a zahrnutí stimulované emise jako negativní absorpce koeficientem $(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}})$ obdržíme

$$a_\nu = N_e N^+ \frac{4\sqrt{2}\pi}{3\sqrt{3}} \frac{\epsilon^6}{hc\sqrt{m^3 k}} \frac{1}{\sqrt{T}} \frac{1}{\nu^3} \bar{g}_{III}(\nu, T) \left(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}\right) \quad , \quad (4.18)$$

kde $\bar{g}_{III}(\nu, T)$ je termálně středovaný Gauntův faktor

$$\bar{g}_{III}(\nu, T) = \int_0^\infty g_{III}(\nu, \nu) e^{-\frac{m\nu^2}{2kT}} \frac{m\nu}{kT} d\nu = \int_0^\infty g_{III}(\nu, u') e^{-u'} du' \quad , \quad (4.19)$$

přičemž

$$u' = \frac{m\nu^2}{2kT} \quad (4.20)$$

Středovaný Gauntův faktor se také někdy (např. Karzas a Latter (1961)) zapisuje jako

$$\langle g_{ff}(u, \gamma^2) \rangle = \int_0^\infty g_{ff}(u', \gamma^2) e^{-u'} du' \quad , \quad (4.21)$$

přičemž

$$u = \frac{h\nu}{kT} \quad \gamma^2 = \frac{157887}{T} \quad . \quad (4.22)$$

Někteří autoři (např. Karzas a Latter (1961), Hummer (1988)) používají normovaný absorpční koeficient k_ν

$$k_\nu = \frac{1}{4\pi} a_\nu \quad . \quad (4.23)$$

Celková energie pohlcená jednotkovým objemem ve všech frekvencích ze všech směrů za jednotku času bude

$$E_{ff}^{abs} = 4\pi \int_0^\infty a_\nu(T) J_\nu d\nu \quad , \quad (4.24)$$

což s použitím (4.18) dá výsledek

$$E_{ff}^{abs} = 1.4239 \cdot 10^{-27} \sqrt{T} N_e N^+ \int_0^\infty \bar{g}_{III}(u, T) (1 - e^{-u}) \mathcal{J}_u du \text{ [erg s}^{-1}\text{]} \quad , \quad (4.25)$$

kde $\mathcal{J}_u$ je J_ν podle (3.21) s ν vyjádřeným z (4.22).

4.1.4 Volně-volná emise

Opačným procesem k volně-volné absorpci je volně-volná emise. Elektron prolétávající kolem iontu (v našem případě protonu) uvolní část energie v podobě fotonu brzdného záření a sám se přitom zpomalí (zbrzdí). Celkovou emisi určíme na základě emisního koeficientu j_ν :

$$E_{ff}^{em} = \int_0^\infty 4\pi j_\nu d\nu \quad . \quad (4.26)$$

Emisní koeficient je vázaný na absorpční pomocí Kirchhoffova-Planckova zákona

$$j_\nu = a_\nu B_\nu \quad , \quad (4.27)$$

kde B_ν je Planckova funkce (2.7) a a_ν je určeno (4.18). Po dosazení vyjde

$$j_\nu = N_e N^+ \frac{8\sqrt{2}\pi}{3\sqrt{3}} \frac{e^6}{c^3\sqrt{m^3k}} \frac{1}{\sqrt{T}} \bar{g}_{III}(\nu, T) e^{-\frac{h\nu}{kT}} \quad , \quad (4.28)$$

což numericky dává

$$j_\nu = 5.44 \cdot 10^{-39} N_e N^+ \frac{1}{\sqrt{T}} \bar{g}_{III}(\nu, T) e^{-\frac{h\nu}{kT}} \quad [\text{erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \text{ srad}^{-1} \text{ Hz}^{-1}] \quad . \quad (4.29)$$

Použitím (4.26) konečně dostaneme

$$E_{ff}^{em} = N_e N^+ \frac{32\sqrt{2}\pi^{3/2}}{3\sqrt{3}} \frac{e^6}{hc^3\sqrt{m^3}} \sqrt{kT} \int_0^\infty \bar{g}_{III}(u, T) e^{-u} du \quad . \quad (4.30)$$

Číselně nakonec vyjde

$$E_{ff}^{em} = 1.4239 \cdot 10^{-27} N_e N^+ \sqrt{T} \int_0^\infty \bar{g}_{III}(u, T) e^{-u} du \quad [\text{erg s}^{-1}] \quad . \quad (4.31)$$

Výraz pod integrálem se někdy označuje jako $\bar{g}$ nebo $\langle g_{ff}(\gamma^2) \rangle$. Je to vlastně již druhé středování přes Maxwellovo rozdělení a nabývá jako funkce pouze elektronové teploty hodnot 1.1 – 1.5 . Většinou se proto z výsledného vztahu pro celkovou volně-volnou emisi rovnou vypouští.

4.2 Srážkové energetické rejty

Další možností, jak energie může být dodána či odňata kontinuu jsou srážkové přechody a to hlavně (jak již bylo ukázáno dříve) nepružné srážky volného elektronu s atomem vodíku. Určíme nyní energii, která se přenáší.

4.2.1 Srážková ionizace a tříčasticová rekombinace

Při srážkové ionizaci dojde k interakci volného elektronu s počáteční energií ϵ a neutrálního atomu vodíku. Část $\Delta\epsilon$ počáteční energie elektronu ϵ se předá vázanému

elektronu na n -té hladině a ten je po překonání ionizačního potenciálu χ_n uvolněn do kontinua, kde mu ještě zbývá energie ϵ' . Zjevně platí

$$\Delta\epsilon = \chi_n + \epsilon' \quad . \quad (4.32)$$

Z kontinua tak byla odebrána energie rovná ionizačnímu potenciálu z n -té hladiny (tedy $\chi_n = \mathcal{R}/n^2$). Analogickou úvahou dostaneme, že při tříčásticové rekombinaci se stejná energie do kontinua dodá. Celkové množství energie je dané příslušným číselným srážkovým rejtem. Dostaneme tedy vztahy

$$E_{n\kappa}^C = -N_n W_{n\kappa}^C = -N_n C_{n\kappa} \chi_n \quad (4.33)$$

$$E_{\kappa n}^C = +N_\kappa W_{\kappa n}^C = +N_\kappa C_{\kappa n} \chi_n \quad , \quad (4.34)$$

kde srážkové číselné rejty jsou dané vztahy (3.53) a (3.54).

4.2.2 Srážková excitace a deexcitace

Není-li energie dopadajícího elektronu dostatečná k vyvolání ionizace atomu, může jej alespoň excitovat — např. z i -té do j -té hladiny. V tomto případě se kontinuu odebere energie excitačního potenciálu $\chi_{ij} = \chi_j - \chi_i$. Opačný proces, tj. deexcitace tuto energii kontinuu přidá. Tedy příslušné energetické rejty jsou

$$E_{ij}^C = -N_i W_{ij}^C = -N_i C_{ij} \chi_{ij} \quad (4.35)$$

$$E_{ji}^C = +N_j W_{ji}^C = +N_j C_{ji} \chi_{ij} \quad , \quad (4.36)$$

přičemž potřebné číselné rejty jsou dány (3.45) a (3.47).

4.3 Výsledná energetická rovnováha

Zákon zachování energie pro kontinuum požaduje aby celková energetická bilance byla nulová. Označme veškerý přítok energie do kontinua jako Γ a veškerou ztrátu energie jako Λ . Jejich rozdíl bude celková energetická bilance (energetic balance) $\mathcal{E}_{bal}$. Veličina Γ bývá označována jako funkce ohřevu (heating function) a Λ jako ochlazovací funkce (cooling function). Energetická rovnováha pak znamená, že

$$\mathcal{E}_{bal} \equiv \Gamma - \Lambda = 0 \quad . \quad (4.37)$$

Příslušné funkce obdržíme po vysčítání všech energetických členů $E_{\lambda\mu}$ uvedených v předchozích podkapitolách přes všechny hladiny. Přitom do zisku energie zahrneme všechny členy s kladným znaménkem a do ztráty záporně vzaté členy se záporným znaménkem (ztráta bude rovněž kladná). Dostaneme tak pro zisk

$$\Gamma = \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M E_{ji}^C + \sum_{n=1}^M (E_{\kappa n}^C + E_{n\kappa}^R) + E_{ff}^{abs} \quad (4.38)$$

a pro energetickou ztrátu:

$$\Lambda = \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M E_{ij}^C + \sum_{n=1}^M (E_{n\kappa}^C + E_{\kappa n}^R) + E_{ff}^{em} \quad . \quad (4.39)$$

Zde je třeba dodat, že M je maximální vázaná hladina ve smyslu kapitoly (2.3), a správně je třeba jako hladinu $M - 1$ dosadit pseudokontinuum R a podobně veškeré pravděpodobnosti přechodů chápat jako grupované (tzn. veličiny s pruhem).

Jakmile máme vypočtenou energetickou bilanci $\mathcal{E}_{bal}$, můžeme přistoupit k vlastnímu hledání rovnovážné elektronové teploty popř. hustoty. Použijeme k tomu specifický iterační algoritmus založený na metodě půlení intervalu.

4.4 Hledání elektronové teploty

Rovnice energetické rovnováhy (4.37) kontinua požaduje aby se celkový energetický zisk kontinua vyrovnal celkové ztrátě. Zde je třeba rozlišovat dva případy zadání.

1. Kromě vstupních parametrů záření máme zadánu hustotu volných elektronů N_e a hledáme pouze elektronovou teplotu T_e , pro kterou se funkce $\mathcal{E}_{bal}$ rovná nule. Tento případ je typický v planetárních mlhovinách, kde je elektronová hustota určena z pozorování a stupeň ionizace plazmy je blízký jedné. V tomto případě se jako nejlepší metoda řešení (po různých zkouškách metody sečen a regula falsi) osvědčila prostá metoda půlení intervalu. Orientace je dána tím, že pro iterační elektronovou teplotu menší než bude výsledná rovnovážná je celková energetická bilance kladná a naopak pro teploty vyšší záporná (to plyne z fyzikální podstaty — při teplotě vyšší než je rovnovážná, začnou ztráty převládat nad ziskem energie a dojde k ochlazení na rovnovážnou teplotu). Navíc je zde použito i některých heuristických postupů při hledání nejužšího intervalu obklopujícího hledané řešení (postupné zdvojnásobování či půlení kroků při „osahávání“ okolí vstupního odhadu teploty). Podrobnosti lze nalézt v popisu procedury **SOLVTE** v kapitole 6.

2. Máme zadáno pouze záření a celkovou hustotu všech částic. Je tedy nutné použitím podmínky (2.22) a (4.37) určit zároveň elektronovou teplotu i hustotu. Zde se jedná o řešení soustavy dvou nelineárních rovnic o dvou neznámých. Situace je podstatně složitější a navíc prostor možných řešení je rozsáhlejší (podmínka jednoznačnosti řešení - tj. jediná hodnota T_e i N_e nemusí být obecně splněna — energetická rovnováha může nastat při různých stupních ionizace). Pro řešení této úlohy byly zkoušeny profesionální metody **C05NBF**, **C05NCF**, **C05NDF** knihovny NAG i algoritmy z Numerical Recipes (Press et al. (1992)) — konkrétně procedura **xbroydn**. Bohužel tyto metody selhaly pro případ vysoké koncentrace částic (převládající srážky), kdy řešení začalo oscilovat. Nakonec byla vyvinuta heuristická metoda postupné iterace v obou osách, která překvapivě konverguje i nejrychleji. Vychází přitom z rozdílné citlivosti obou iterovaných veličin (N_e, T_e) na změně parametrů plazmy. Jelikož elektronová hustota se mění při změně teploty jen zvolna, je nejprve nalezen hrubý (coarse) odhad elektronové teploty (s přesností ΔT_e^c) při

zadané hustotě a teprve potom je hustota korigována prostou iterací soustavy ESE, dokud není dosaženo ionizační rovnováhy. Pro tuto novou elektronovou hustotu je opět hledána teplota a celý proces se opakuje tak dlouho, dokud se výsledná hustota nemění o méně než δ_{Ne}^c . Pak se tolerance změni na přesnější (fine) $\Delta_{Te}^f, \delta_{Ne}^f$ a pokud je teplota i hustota splní, je proces ukončen. Jako počáteční hodnota teploty se vezme teplota horkého záření T_* a za hustotu pak její LTE hodnota. Pro počet všech částic dostaneme z (2.3), (2.21), a (2.22) kvadratickou rovnici,

$$N_0 = N_e^2 \sum_{i=1}^M \Phi_i(T) + 2 N_e \quad , \quad (4.40)$$

jejíž kladný kořen má hodnotu

$$N_e = \frac{\sqrt{N_0 \sum_{i=1}^M \Phi_i(T) + 1} - 1}{\sum_{i=1}^M \Phi_i(T)} \quad . \quad (4.41)$$

Podrobnější popis algoritmu ukazuje diskuse procedury NONLTE v kapitole 6

Kapitola 5

Použité algoritmy

V této kapitole budou presentovány některé algoritmy a aproximativní vztahy používané v programu (Gauntovy faktory, srážkové rejty, volně-volné rejty). Popsány jsou i praktické numerické zkušenosti a testy přesnosti.

5.1 Vázaně-vázané Gauntovy factory

Výpočet Gauntových faktorů (resp. sil oscilátoru) podle (3.17) je značně komplikovaný, neboť funkce ${}_2F_1$ nabývá pro vyšší m, n gigantických hodnot kladných i záporných členů. Jako příklad poslouží přechod $200 \rightarrow 201$, pro který je

$${}_2F_1(-200, -201+1, 1; \rho) = 1.38 \cdot 10^{1041}, \quad {}_2F_1(-200+1, -201, 1; \rho) = -2.08 \cdot 10^{1040},$$

hodnota rozdílu kvadrátů

$$\Delta(200, 201) = 1.87 \cdot 10^{2082},$$

ale výsledný Gauntův faktor je řádově roven jedné:

$$g_I(200, 201) = 0.778558.$$

Proto není možné použít přímého numerického vyjádření ani nelze použít vyjádření hypergeometrické funkce pomocí funkce Gamma. Jednou z možností je počítat součiny pomocí logaritmů, ale zde se nevyhneme ztrátě numerické přesnosti. Další obecně používanou metodou je užití rekurentních vztahů pro hypergeometrickou funkci, což s úspěchem použil Hoang-Binh et al. (1990) pro určení radiálního integrálu (3.9). Podobnou metodu užíli i Storey a Hummer (1991). I zde ale může nastat pro velké hodnoty vsupních kvantových čísel jistá nepřesnost vlivem zaokrouhlovacích chyb. Proto byla námi použita metoda přímého výpočtu Gauntových faktorů pomocí přesného analytického vyčíslení za pomoci symbolické algebry s následným numerickým vyčíslením. Použit byl systém Mathematica for Windows¹ Pomocí jed-

¹bohužel kvůli chybě v implementaci optimalizace algoritmu pro výpočet funkce `Hypergeometric2F1` ve verzi 2.1. musely být některé výsledky doplněny explicitním použitím definice, což výpočet zpomalilo. Verze 2.2.1 již má tento problém odstraněn

	$m = 1$	$m = 2$	$m \geq 3$
$g_0(m)$	1.1330	1.0785	$0.9935 + 0.2328\frac{1}{m} - 0.1296\frac{1}{m^2}$
$g_1(m)$	-0.4059	-0.2319	$-\frac{1}{m} (0.6282 - 0.5598\frac{1}{m} + 0.5299\frac{1}{m^2})$
$g_2(m)$	0.07014	0.02947	$\frac{1}{m^2} (0.3887 - 1.181\frac{1}{m} + 1.470\frac{1}{m^2})$

Tabulka 5.1: Johnsonova aproximace Gauntových faktorů

noduchého programu v Mathematice (viz dodatek B) byla vygenerována tabulka Gauntových faktorů $g_I(m, n)$ pro prvních 500 hladin, která byla v prvních verzích programu používána jako jeden ze vstupních souborů. Později byla (po obdržení programového kódu obou výše zmíněných metod laskavostí Dr. Hoang-Binha a Dr. Hummera) porovnána přesnost obou numerických vyjádření a nakonec byl testován i jednoduchý algoritmus Johnsona (1972). Pro vázaně-vázaný Gauntův faktor $g_1(m, n)$ uvádí Johnson aproximaci

$$g(m, x) = g_0(m) + g_1(m)\frac{1}{x} + g_2(m)\frac{1}{x^2} \quad , \quad (5.1)$$

přičemž x je poměr excitační energie přechodu k ionizační energii spodní hladiny:

$$x = E_{mn}/\chi_m = 1 - (m/n)^2 \quad (5.2)$$

a pomocné hodnoty g_m udává tabulka 5.1.

Tato aproximace byla určena s požadavkem reprodukovat hodnoty Gauntových faktorů z tabulek Green, Rush, Chandler (1957) a Karzas, Latter (1961) pro $n = m + 1$, $n = m + 2$ a $n \rightarrow \infty$. Porovnáním s výše analyticky (přesněji symbolicko-algebraicky) získanými hodnotami vyplynulo zjištění, že Johnsonova aproximace (5.1) dosahuje v celém rozsahu přechodů mezi 500 hladinami relativní chyby menší než 1%, typicky však o řád menší. Proto je také v programu používána s ohledem na jednoduchost implementace a nezávislost programu na rozsáhlých datových souborech - jež by navíc přinášely i problémy se reprezentací těchto dat na různých architekturách procesorů. Metody Hoang-Binha a Hummera dávají stejné výsledky jako výstup systému Mathematica (s chybou danou přesností reprezentace typu **DOUBLE PRECISION**), jejich efektivní použití v programu je však nevýhodné pro svou rekurenci. Muselo by se proto postupovat systematicky a při odděleném rekurentním výpočtu ukládat získané hodnoty do samostatného souboru a ten potom do programu **GRUPY** načítat při startu s vědomím výše uvedených nevýhod.

5.2 Vázaně-volné Gauntovy faktory a rejty

Přímý výpočet $g_{II}(n, \epsilon)$ podle (3.27) je opět složitý a časově náročný, použití tabulek Karzas a Latter (1961) opět přináší komplikace, navíc zesílené závislostí na spojitě

se měnící energii ϵ . Nejlepší aproximací se opět jeví (5.1), kde nyní položíme

$$x = n^2\epsilon + 1 \quad (5.3)$$

pro přechod $ik \rightarrow n$, kde $k^2 = 1/\epsilon$. Johnson uvádí i přímo vztah pro rekombinační koeficient (3.40) jako součet tří integrálních exponenciálních funkcí ve tvaru (přepsaném pro naše značení):

$$\alpha_n(T) = 5.197 \cdot 10^{-14} \left(\frac{\mathcal{R}}{n^2 kT} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{\mathcal{R}}{n^2 kT} \right) \sum_{i=0}^2 g_i(n) E_{i+1} \left(\frac{\mathcal{R}}{n^2 kT} \right) \quad [\text{cm}^3 \text{s}^{-1}] \quad (5.4)$$

Vzhledem k absenci stimulované rekombinace $\mathcal{J}_\epsilon$ je v programu raději použito numerické integrace podle (3.39). Zpočátku byla integrace prováděna podle popisu v Burgess (1965) — tj. 5-bodové Booleovo pravidlo (uzavřený Newton-Cotesův vzorec) se zdvojnásobením kroku v každém novém subintervalu, ale po různých experimentech s volbou počátečního kroku a odhadem poslední (nejdelší) volby délky kroku jsme nakonec použili profesionální adaptivní proceduru **DO1AMF** numerické knihovny NAG. Tato má několik zásadních výhod — umožňuje nastavit požadovanou chybu integrálu, sama si ošetřuje vhodným váhovaním špatně konvergující integrandy, transformuje váhy pro polonekonečné i obousměrně nekonečné integrační meze a v neposlední řadě je optimalizována pro konkrétní procesor. Tato procedura je nadále používána i pro všechny ostatní numerické integrace obsažené v programu. Správnost a přesnost integrace pro široký rozsah parametrů byly testovány nezávislým výpočtem rekombinačních koeficientů s Gauntovými faktory rovnými jedné (3.41) pomocí exponenciálních integrálních funkcí zabudovaných v programu Mathematica (s nastaveným počtem 50 desetinných míst) Výsledky potvrdily, že žádaná přesnost integrálu zadaná proceduře **DO1AMF** je vždy dodržena, tedy že při zadané přesnosti 10^{-6} se výstupy numerické integrace lišily od mnohem přesněji určených výsledků programu Mathematica typicky na 6. desetinném místě (procedura se kvůli úspoře času nesnaží počítat přesněji, pokud to nemá předepsáno).

Přesné hodnoty rekombinačního koeficientu (s použitím Johnsonovy aproximace volně-vázaného Gauntova faktoru) byly porovnávány s hodnotami tabelovanými Osterbrockem (1974, str.17) a zpřesněnými Hummerem (1994). Ukazuje se výborná shoda s chybou typicky pod 0.5 %, danou zjevně chybou Johnsonovy aproximace.

Pro fotoionizační rejty (3.35) se podobné tabulky nepodařilo v literatuře nalézt (tzn. zintegrovaný součin absorpčního koeficientu a Planckovy funkce) a proto byla správnost integrace porovnána alespoň nezávislou numerickou integrační metodou zabudovanou v programu Mathematica. Ani zde procedura **DO1AMF** neklamala (chování integrandu je přitom odlišné od rekombinace).

5.3 Srážkové rejty

Pro výpočet srážkových excitačních a ionizačních rejtů jsou v programu použity semiempirické aproximace Johnsona (1972), které se obecně těší velké důvěře (viz

Přehled literatury). Pokus zpřesnit prvních 5 hladin polynomicou aproximací Gionavardi et al. (1987) a Gionavardi a Palla (1989) byl záhy ukončen na základě kritiky Changa et al. (1991) a doporučení Dr. Gionavardiho (1991, soukromé sdělení). Pouze pro přechod $1 \rightarrow 2$ byl podle doporučení Changa et al. (1991) použit vztah podle Scholze et al. (1991), který byl později spolu se srážkovou ionizací základní hladiny nahrazen vztahem Scholze a Walterse (1991). Zkoušeny byly zpočátku i výrazy Gee et al. (1976) a Percivala a Richardse (1978) — ty však platí hlavně pro velmi vysoké elektronové teploty a rozsah jejich teplotní platnosti je závislý na hlavním kvantovém čísle hladiny. Johnsonova aproximace přepsaná do námi používaného značení má tvar:

$$C_{mn} = N_e \mathcal{K} \sqrt{T_e} \frac{2m^2}{x} y^2 \left\{ A_{mn} \left[E_1(y) \left(\frac{1}{y} + \frac{1}{2} \right) - E_1(z) \left(\frac{1}{z} + \frac{1}{2} \right) \right] + \left(B_{mn} - A_{mn} \ln \frac{2m^2}{x} \right) \left[\frac{1}{y} E_2(y) - \frac{1}{z} E_2(z) \right] \right\}, \quad (5.5)$$

$$\mathcal{K} = \sqrt{\frac{8k}{\pi m_e}} \pi a_0^2 = 5.465 \cdot 10^{-11} \quad [\text{cm}^3 \text{s}^{-1}], \quad (5.6)$$

kde

$$x = \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) m^2 = 1 - \left(\frac{m^2}{n^2} \right), \quad y = \frac{x}{m^2} \frac{\mathcal{R}}{kT_e}, \quad z = x \left(r_m + \frac{\mathcal{R}}{kT_e m^2} \right), \quad (5.7)$$

přičemž $a_0 = \hbar^2 / (4\pi^2 m_e e^2)$ je Bohrov poloměr atomu.

Koeficienty A_{mn} a B_{mn} , zvané *Betheho koeficienty* jsou pak

$$A_{mn} = \frac{64}{3\sqrt{3}\pi} \left(\frac{m}{n} \right)^3 \frac{2}{x^4} g_1(m, n) \quad (5.8)$$

$$B_{mn} = 4 \frac{m^4}{n^3} \frac{1}{x^2} \left(1 + \frac{4}{3} \frac{1}{x} + b_m \frac{1}{x^2} \right), \quad (5.9)$$

přičemž

$$b_1 = -0.603 \quad (5.10)$$

$$r_1 = 0.45 \quad (5.11)$$

$$b_m = \frac{1}{m} \left(4.0 - 18.63 \frac{1}{m} + 36.24 \frac{1}{m^2} - 28.09 \frac{1}{m^3} \right) \quad (5.12)$$

$$r_m = 1.94 m^{-1.57} \quad \text{pro } m \geq 2 \quad (5.13)$$

Pro výpočet srážkové ionizace použijeme Johnsonovu rovnici (39'), která uvažuje, že vysoké vázané hladiny s $n > n_0$ jsou již rozšířením kontinua a předpokládá se tam proto Sahova rovnováha.

$$C_{n\kappa} = N_e \mathcal{K} \sqrt{T_e} \frac{2n^2}{x_0} y_n'^2 \left\{ A_n' \left[\frac{1}{y_n'} E_1(y_n') + \frac{1}{z_n'} E_1(z_n') \right] + \left(B_n' - A_n' \ln \frac{2n^2}{x_0} \right) [\xi(y_n') - \xi(z_n')] \right\}, \quad (5.14)$$

kde

$$x_0 = \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n_0^2} \right) n_0^2 = 1 - \left(\frac{n}{n_0} \right)^2, \quad y'_n = \frac{x_0}{n^2} \frac{\mathcal{R}}{kT_e}, \quad z'_n = x_0 \left(r_n + \frac{\mathcal{R}}{kT_e n^2} \right). \quad (5.15)$$

Betheho koeficienty v tomto případě jsou

$$A'_n = \frac{32}{3\sqrt{3}\pi} n \sum_{i=0}^2 \frac{g_i(n)}{i+3} x_0^{-(i+3)} \quad (5.16)$$

$$B'_n = \frac{2}{3} n^2 x_0^{-1} (3 + 2x_0^{-1} + b_n x_0^{-2}), \quad (5.17)$$

kde

$$\xi(t) = E_0(t) - 2E_1(t) + E_2(t). \quad (5.18)$$

Vázaně-vázaný Gauntův faktor $g_I(m, n)$ je dán tabulkou 5.1. Pro integrální exponenciálu E_n platí známé vztahy

$$E_{n+1}(z) = \frac{1}{n} [e^{-z} - z E_n(z)], \quad E_0(z) = \int_1^\infty e^{-zt} dt = \frac{1}{z} e^{-z}. \quad (5.19)$$

Podprogram pro výpočet E_1 byl převzat z programu Kurucze (1970, str. 189), zkoušena byla i NAG funkce **S013AA**. Vztahy pro opačné přechody (3.48) a (3.54) nabudou tvaru

$$C_{ji} = N_e \left(\frac{i}{j} \right)^2 \exp \left(\frac{\mathcal{R}}{kT_e} \left(\frac{1}{i^2} - \frac{1}{j^2} \right) \right) C_{ij} \quad (5.20)$$

$$C_{\kappa n} = 4.141 \cdot 10^{-16} N_e T_e^{-3/2} n^2 \exp \left(\frac{\mathcal{R}}{n^2 kT_e} \right) C_{n\kappa} \quad (5.21)$$

5.4 Energetické rejty

Vzhledem k formální podobnosti s číselnými rejty, vyčísľují se integrály (4.5) a (4.9) opět numericky pomocí **D01AMF**. Kontrola správnosti integrace $\beta_n(T)$ byla provedena opět pomocí tabulek Osterbrock (1974, str.17) a nověji Hummer(1994). Testovány byly i hodnoty s jednotkovým Gauntovým faktorem proti (4.12) počítaném programem Mathematica.

Srážkové energetické rejty pro přechod $1 \rightarrow 2$ a fotoionizaci byly kontrolovány pomocí tabulky ochlazovací funkce v práci Scholz and Walters (1991).

5.4.1 Volně-volný středovaný Gauntův faktor

Pro výpočet $[g_{III}(u, \gamma^2)]$ je v programu použit algoritmus Hummera (1988) který převedl výsledky přesně počítaných vztahů Karzase a Lattera (1961) do jednoduchého rozvoje dvoudimenzionálních Čebyševových polynomů. Později byla tato procedura optimalizována podle triků použitých v Hummerově numerickém kódu

RADZ1. Dvakrát středovaný Gauntův faktor, tj. integrand (4.31) a integrál (4.25) obsahující navíc modifikovanou intenzitu záření je opět počítán pomocí NAG procedury **D01AMF**. Správnost procedur byla testována dosazením intenzity záření rovné Planckově funkci. V tomto případě se výsledná energie pohlcená i vyzářená sobě rovnaly, jak je požadováno.

5.4.2 Zadání dopadajícího záření

Pro výpočet zářivých rejtů je důležitá forma zadání dopadajícího záření. S ohledem na budoucí aplikace (obálky horkých hvězd a planetární mlhoviny) budeme dopadající záření pro jednoduchost aproximovat zářením černého tělesa B_ν (viz. (2.7)) při teplotě T_* , které je však ve studovaném místě plazmy dostatečně naředěno díky velké vzdálenosti od hvězdy. Faktor zředění W je dán známým vztahem (např. Sobolev (1975), str. 266)

$$W = \frac{1}{2} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{R}{r} \right)^2} \right] , \quad (5.22)$$

kde r je vzdálenost od hvězdy a R její poloměr. U planetárních mlhovin dosahuje toto zředění typicky hodnoty 10^{-14} . Pro účely studia dvojhvězd můžeme uvažovat i záření dané součtem dvou (popř. i více) takových funkcí s různými teplotami i faktory zředění. Tedy

$$J_\nu = W_1 B_\nu(T_1) + W_2 B_\nu(T_2) \quad . \quad (5.23)$$

Podobné vyjádření může posloužit i k zahrnutí kosmologického reliktového záření při studiu radiových čar (s hodnotami $T_* = 2.7$ K, $W = 1$).

Kapitola 6

Popis programu GRUPY

Pro výpočet energetické rovnováhy studované plazmy a následné určení dalších fyzikálních parametrů byl vytvořen program **GRUPY**. Původně byly jeho podstatné části napsány v jazyku Turbo Pascal pro počítač typu IBM PC/AT s procesorem i286/386. Problém velkých polí (matic) byl řešen s použitím virtuální paměti pomocí knihovny Turbo Power. Nicméně problémy při řešení více než 100 hladin byly tak velké (značná pomalost, systémově a konfiguračně závislý zdrojový kód i nekompatibilita s ostatními počítači), že byl program přepsán do jazyku FORTRAN-77 s použitím standardních VAX-extendí (**do-end do**, **do while**, komentáře za vykřičníkem atd.). V této podobě byl úspěšně přeložen na PC386 s 32-bitovým překladačem NDP-F77, na strojích řady SPARCStation-1 a SPARCStation-2 firmy Sun Microsystems a jejich klonech včetně chipu SPARC-Power (Weitek) pod OS SunOS 4.1.X i na stroji CRAY YMP-EL.

Celý program (viz výpis v dodatku C) se skládá z velkého množství programových jednotek, z nichž některé obsahují pouze pár jednoduchých příkazů. Tato struktura má za cíl vysokou modularitu s možností snadné změny každé metody - hlavně způsob pojetí pseudokontinua a uzavřenosti stavových sum tak může být snadno změněn. Podobně i forma zadání vnějšího záření. V programu se pracuje s několika přídatnými soubory jejichž čísla kanálů jsou deklarovány v include souboru **params.for**. Zde jsou rovněž uloženy numerické hodnoty konstant vystupujících v rovnicích z předchozích kapitol a konstanty vymezující platnost numerických aproximací exponenciály velkých a malých čísel. Konečně jsou zde zadány i hrubé a jemné tolerance pro iteraci elektronové teploty a hustoty.

6.1 Zadání modelových dat

Při startu se na standardním vstupu objeví dotaz na jméno souboru s číslem **IMODF** obsahujícího zadání modelů, přičemž každý řádek označuje jeden nezávislý model. Tento soubor má přesně danou strukturu (jež je nadepsána v prvním řádku) zadání modelových parametrů (ukázka viz přílohu). Nejprve se uvede název modelu v dél-

ce přesně 8 znaků. Tento název ponese všechny výstupní soubory (s koncovkami **.LOG**, **.DAT**, **.OUT**) související s daným modelem. Dále následuje počet explicitně vázaných hladin zvětšený o 1 (tj. vlastně pořadí první hladiny pseudokontinua **nbel1**) a počet všech vázaných hladin **nthr**. Pokud bude **nthr = nbel1**, znamená to, že pseudokontinuum je redukováno na jednu poslední hladinu. Následuje dvoupísmenný symbol **NE** pro případ zadané elektronové hustoty nebo **NO**, pokud je zadaná celková koncentrace všech částic N_0 . Další následuje jednopísmenné označení **R**, pokud jsou uvažovány pouze zářivé přechody, nebo **F** (full) pro přechody zářivé i srážkové. Možnost **C** pro pouze srážkové přechody nemá příliš velký praktický význam a slouží pro testování numerické správnosti srážkových členů. Další vstupní hodnotou je koncentrace volných elektronů (pokud je předcházející symbol **NE**) nebo koncentrace všech částic (předchází-li **NO**). Konečně následuje zadání dopadajícího záření — barevná teplota **T1** a faktor zředění **W1**. Následovat může ještě sekundární záření (např. reliktové) **T2**, **W2**. Na základě zadání se nastaví logické proměnné **lnefix**, **liscol**, **lisrad** podle kterých se řídí výpočty příslušných funkcí zářivých a srážkových rejtů i metoda iterace teploty a hustoty. Opis zadání je vypisován na standardní výstup i do souboru **.LOG**. V tomto okamžiku jsou otevřeny i soubory **.DAT**, kam jsou vypisovány pro jednotlivé iterace hodnoty všech energetických členů a **.OUT**, jenž slouží pro výstup výsledných populací, b-faktorů a maserových koeficientů $1 - \beta_n$ ve formátu vhodném pro import do grafických presentačních programů (konkrétně AXUM).

6.2 Hlavní iterační procedura

Jádrem celého programu je procedura **NONLTE**, jež provádí celý iterační výpočet elektronové teploty popř. hustoty pro plazmu zadaných parametrů. Tato procedura pak může být volána z jiného programu, který dodá koncentraci částic (nebo elektronů) a parametry dopadajícího záření — jedna z budoucích aplikací popisovaného programu by měla spočívat ve spojení s programem **KAPKA Dr.** Hadravy na modelování plynných proudů ve dvojhvězdách. Pro nalezení elektronové teploty při zadané elektronové hustotě je volána procedura **SOLVTE**, pro počáteční odhad LTE hustoty elektronů na základě (5.3) procedura **SAHANE**.

Rozhodující veličinou pro nalezení stavu energetické rovnováhy je hodnota **ebal**, kterou spolu s populacemi a b-faktory všech hladin vrací procedura **ESE** — tato je proto několikrát volána během každé iterace. V této proceduře je vlastně řešena kompletní soustava rovnic statistické rovnováhy — dojde zde k vytvoření matice rejtů $\bar{P}_{\Lambda\mu}$ podle (2.41) pro přechody mezi explicitně vázanými hladinami (volání funkcí **PIF**, **PFI**), mezi explicitně vázanými a pseudokontinuem (**PIR**, **PRI**), explicitně vázanými a kontinuem (**PIC**, **PCI**) a pseudokontinuem a kontinuem (**PRC**, **PCR**).

Matice rejtů je vzápětí převedena na matici $\bar{Q}_{\Lambda\mu}$ (viz. (2.40)) procedurou **TRANSMAT**

a tato je následně řešena prostou Gaussovou eliminací v proceduře **GAUSS**. Výsledkem je pole populací jednotlivých hladin a pseudokontinua (jako jedné superhladiny) **xvec**. Odtud se pak spočítá LTE obsazení jednotlivých hladin pseudokontinua v proceduře **POPLTE** a výsledek se objeví v poli **pvec**.

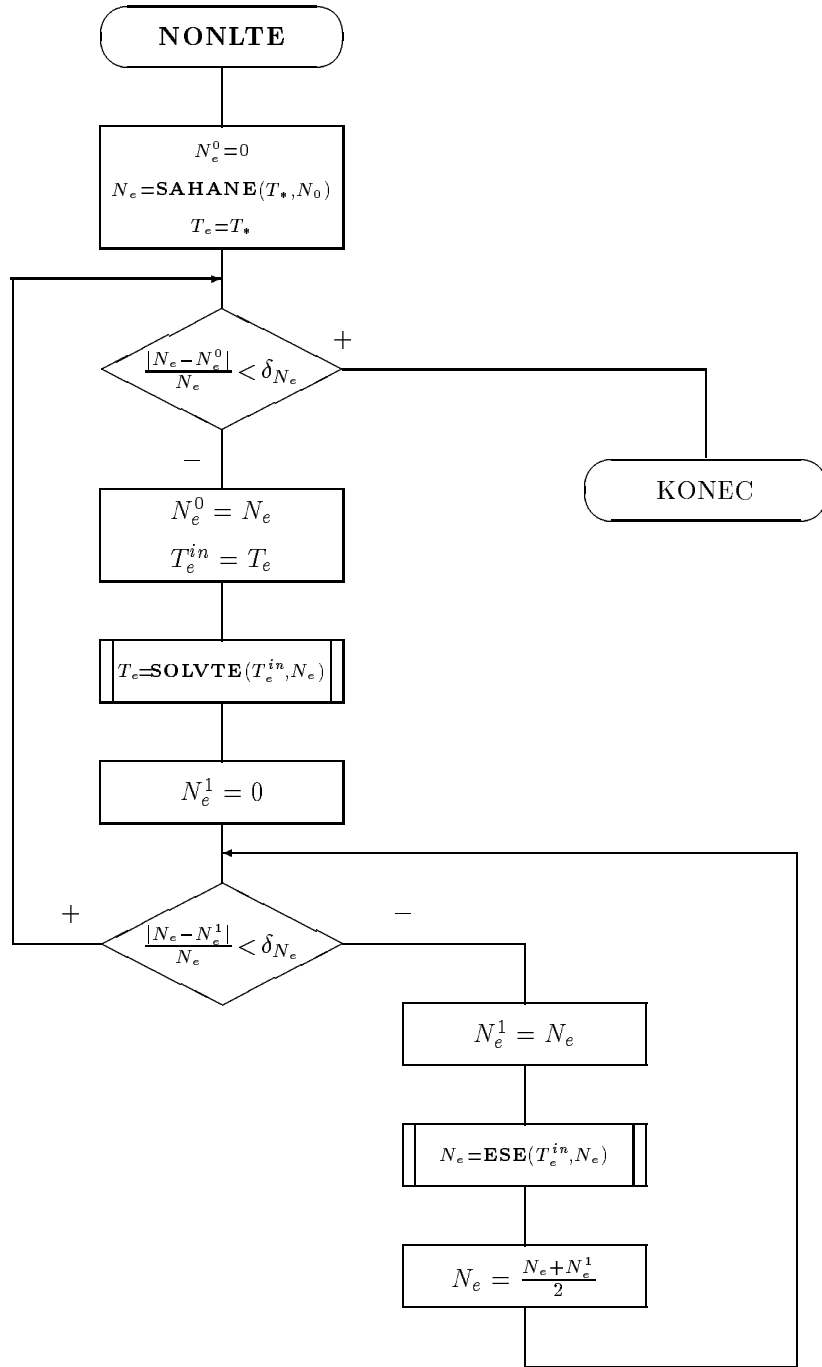
Z něho se dále odvodí b-factory z pole **bvec** podle (2.8) v proceduře **BFACTORS** a následně ještě pole koeficientů síly maseru **dmvec** v proceduře **MASERBETA**. Na základě známých populací hladin se zjistí celková energetická bilance podle (4.37) ve funkci **EBALANCE**.

Popišme si nyní podrobněji použitý heuristický algoritmus iterace. Pokud je nastaven příznak **lnefix**, tj. elektronová hustota je zadána, zbývá řešit pouze elektronovou teplotu voláním procedury **SOLVTE** a výpočet je u konce. Zabývat se budeme případem, kdy je zadána celková hustota částic a elektronová hustota se musí tedy iterovat rovněž (viz obr. 6.1).

Počátečním odhadem elektronové hustoty N_e je její LTE hodnota (4.41), obdržená procedurou **SAHANE**. Elektronová teplota je přitom položena rovna teplotě záření T_* . Pomocná proměnná N_e^0 je rovna hodnotě N_e na začátku předchozí teplotní iterace a při startu je vynulována. Pokud se nově získaná hodnota N_e liší od N_e^0 relativně méně, než je předepsaná relativní tolerance δ_{N_e} , je výpočet ukončen. Teplota T_e^{in} je odhad elektronové teploty na vstupu teplotní iterace **SOLVTE**.

Poté, co je nalezena teplota T_e , při které nastává energetická rovnováha (pro elektronovou hustotu N_e), musí být ještě splněna podmínka počtu částic (2.22). Řešení soustavy ESE, vyjadřující populace jednotlivých hladin, obsahuje totiž i obsazení kontinua, tj. koncentraci volných iontů N^+ . Ta je ale pro vodík rovna koncentraci volných elektronů N_e (viz. (2.21)). Hodnota jednotlivých prvků matice ESE (tj. rejty) však implicitně závisí na N_e . Musíme tedy ještě provést iteraci N_e (ve smyslu nalezení pevného bodu této implicitní závislosti), aby se hodnota N_e vstupující do soustavy ESE lišila od jejího řešení méně než je předepsaná relativní tolerance (tu pro jednoduchost vezmeme stejnou jako v hlavním cyklu). Tuto iteraci vyjadřuje vedlejší větev diagramu na obr. 6.1. N_e^1 je hodnota N_e při předchozí hustotní iteraci (jiná než N_e^0). Pro zahlazení značných numerických oscilací, kterými tato procedura trpí (zvláště při vysokých elektronových hustotách) je pro následující iterační krok použit průměr staré a nové hodnoty N_e .

Experimentováním bylo zjištěno, že celý výpočet lze značně urychlit, když obě iterace (teplotní a hustotní) budou provedeny nejprve nahrubo s velkými tolerancemi $\delta_{N_e}^c, \Delta_{T_e}^c$ (c — coarse), které po nalezení odhadu selfkonzistentního řešení (N_e, T_e) zmenšíme na jemnější (fine) hodnoty $\delta_{N_e}^f, \delta_{T_e}^f$ a celý proces obou iterací se identicky zopakuje (tato část již není pro přehlednost na obr. 6.1 zobrazena). Tolerance jsou zadány v parametrech include souboru **params.for**. Je třeba poznamenat, že δ_{N_e} je relativní tolerance (procentuální), zatímco Δ_{T_e} je absolutní v jednotkách Kelvinů.



Obr. 6.1: Schéma procedury **NONLTE**

6.3 Procedura SOLVTE

Vlastní hledání elektronové teploty T_e , pro kterou nastává energetická rovnováha (bez ohledu na splnění podmínky počtu částic), je možno rozdělit do dvou etap. V první (viz. obr. 6.2) je nalezen interval teplot (T_1, T_2) v okolí počátečního odhadu T_E^{in} , v němž určitě leží hledaný kořen.

Poté již jednoduše aplikujeme metodu půlení tohoto intervalu (obr. 6.3), kterou máme navíc zjednodušenu tím, že zkoumaná funkce je klesající.

Použitý heuristický algoritmus hledání intervalu (obr. 6.2) si zasluhuje několik vysvětlujících poznámek:

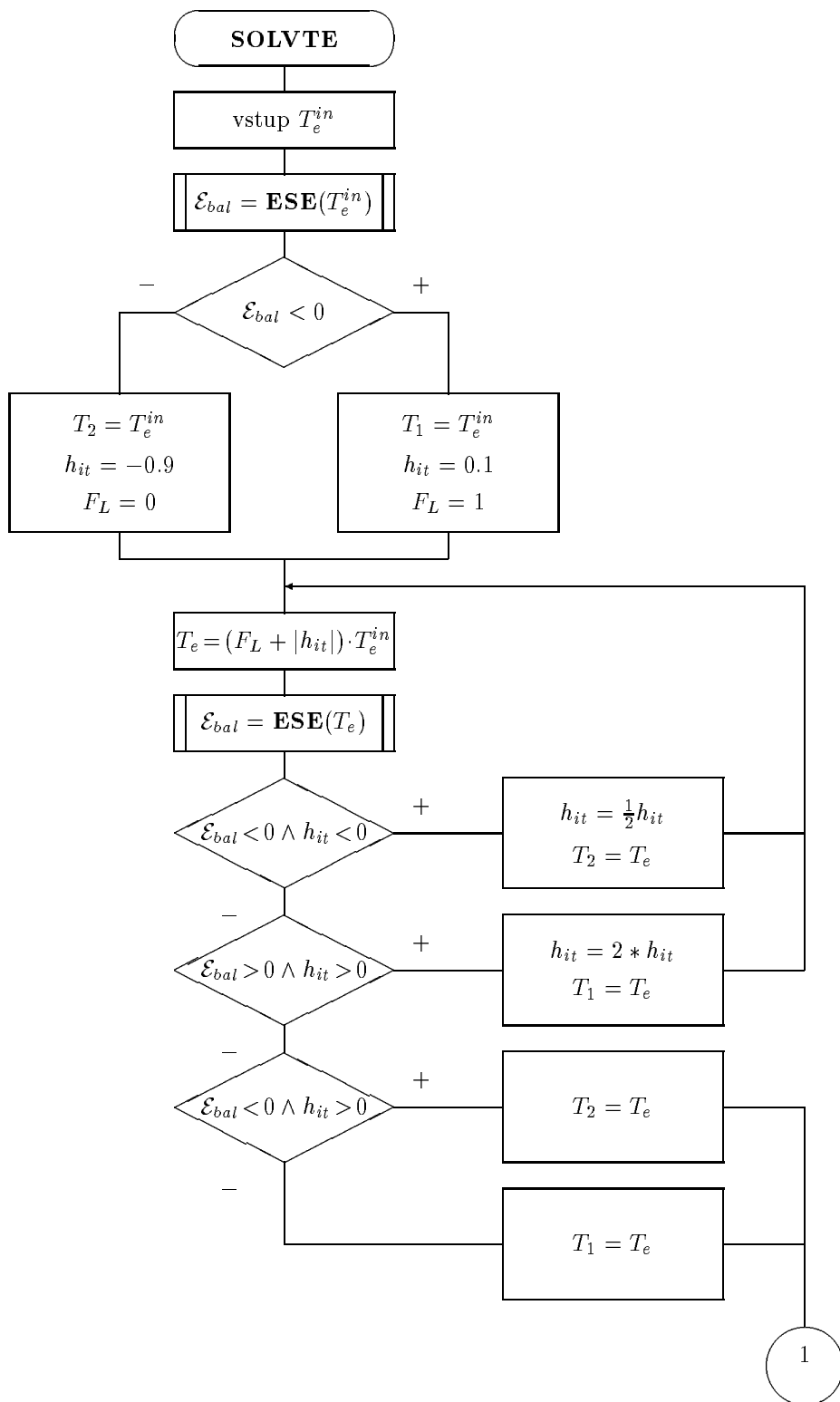
Podle znaménka $\mathcal{E}_{bal}$ rozhodneme, zda řešení leží vpravo či vlevo od počátečního vstupního odhadu T_e^{in} . Podle toho zvolíme relativní krok h_{it} o kolik změníme T_e^{in} v dalším pokusu. Jeho znaménko určuje směr kterým musíme kořen hledat. Zároveň tak vymezíme jednu mez hledaného intervalu. Jak je z diagramu vidět, zkoumáme nejprve teplotu o 10% větší (tj. 1.1-násobek počátečního odhadu) pro případ, že jsme nalevo od kořene nebo o 10% menší (tj. 0.9-násobek), jsme-li vpravo. Pokud se ukáže (podle znaménka $\mathcal{E}_{bal}$ a směru hledání), že je třeba hledat ještě více vpravo, relativní krok zdvojnásobíme (a činíme tak až do okamžiku, kdy se dostaneme vpravo od kořenu) a zároveň posuneme levou mez intervalu na novou hodnotu. Pokud jsme na začátku od kořene vpravo a nová 90% hodnota odhadu taktéž, budeme hodnotu nového odhadu stále půlit, dokud se nedostaneme na opačnou stranu kořenu. Přitom posouváme i pravou mez intervalu. V okamžiku, kdy při výše popsáném postupu kořen přeběhneme, máme fixovanou i druhou mez intervalu a můžeme již použít metody půlení — ta nám již najde přesnou hodnotu kořenu s tolerancí δ_{T_e} . Tu použijeme jako nový odhad vstupní teploty při novém volání procedury SOLVTE.

6.4 Výpočty jednotlivých rejtů

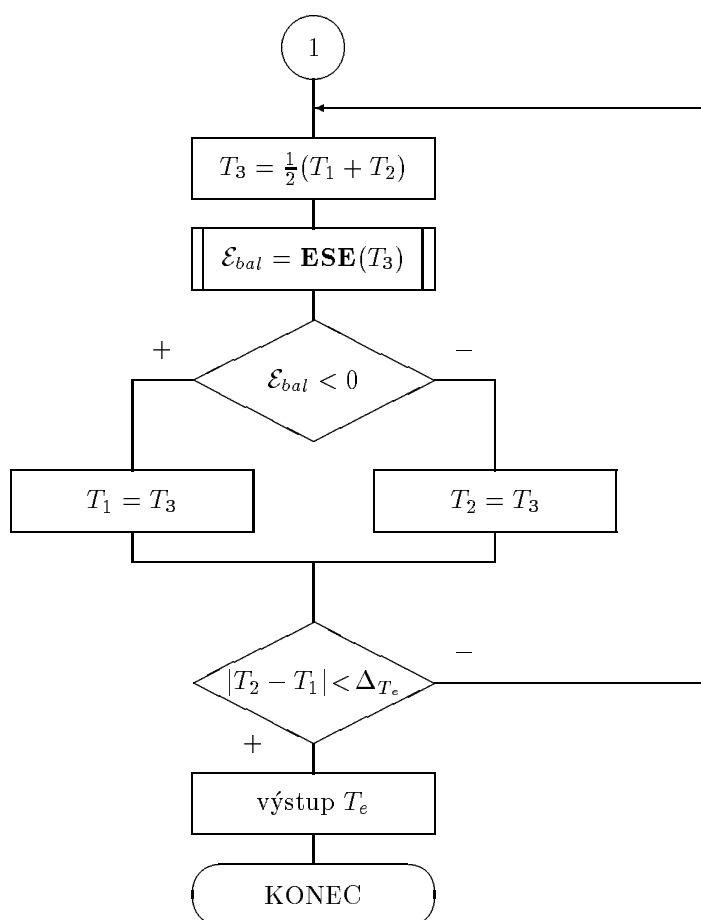
Zde uvedeme jen stručný popis - podrobnosti lze najít v komentářích programu. V některých případech slouží daná funkce k volání integrační procedury DNAGQUAD — příslušný funkcionální argument pak začíná písmenem F.

6.4.1 Zářivé přechody

Pro zářivé přechody je určující intenzita záření, jež je v současné verzi programu nahrazena součinem faktoru zředění a Planckovy funkce. Korektnost vyčíslování Planckovy funkce je zajištěna mimo rozsah vnitřní numerické přesnosti použitím standardní Rayleigh-Jeansovy a Wienovy aproximace. Pro každý typ přechodu je deklarována samostatná funkce PLNK** vytvářející hodnotu frekvence z různých vstupních argumentů (dvě hladiny pro vázaně-vázané, hladinu a energii elektronu v Rydbergových jednotkách pro vázaně-volné a pomocná proměnná u pro volně-volné přechody).



Obr. 6.2: Schéma procedury **SOLVTE** — hledání intervalu obsahujícího kořen



Obr. 6.3: Schéma procedury **SOLVTE** — vlastní hledání kořene půlením intervalu

Vázaně-vázané rejty počítají funkce **RIF**, **RFI** na základě intenzit záření z funkce **PLNKBB**. Vázaně-volné jsou záležitostí funkcí **PRAION** — zářivá ionizace a **PRAREC** (rekombinace). Příslušné integrační argumenty jsou **FION**, **FREC**. Intenzitu záření určuje **PLNKBF**. Přitom se využívá Gauntových faktorů **GAUNTI**, **GAUNT2**.

Energetické rejty (volně-vázané) jsou záležitostí funkcí **WRAION**, **WRAREC** s integrandy **FENION**, **FENREC**. Volně-volné přechody jsou spojeny se soustavou funkcí **FFEMIS**, **FFABS**, integrandů **FG3AVE**, **FG3JNU** a Gauntovým faktorem **GAUFF** (příslušnou tabulku Čebyševových koeficientů zadává procedura **COMPCJ**, která je volána vždy při změně elektronové teploty — změnu určuje logická proměnná **l1gff**; jinak zůstává pole koeficientů nezměněno, což urychluje výpočet).

6.4.2 Srážkové rejty

Vázaně-vázané rejty zajišťují funkce **CIF**, **CFI** s voláním vlastních algoritmů srážkové excitace podle Johnsona (procedura **COLBB**), resp. Scholze a Walterse (1991) (pro přechod $1 \rightarrow 2$ **COLE12**). Vázaně-volné rejty vyjdou z funkcí **PCOION**, **PCOREC**, které volají srážkovou ionizaci **COLBF** a **COLI1** (pro základní hladinu — opět Scholz a Walters). Pro úsporu výpočtu těchto hodnot při iteraci, kdy se mění N_e , ale ne T_e , se tyto hodnoty ukládají do pole **cext** a **cion**, odkud si je **CIF**, **CFI**, **PCOION**, **PCOREC** jenom vytahují a násobí elektronovou hustotou.

Energetické srážkové rejty se počítají ve funkcích **WCOION**, **WCOREC** (tam se vlastně jenom násobí číselné rejty příslušnou energií přechodu).

6.5 Pomocné procedury

Při výpočtu výše uvedených rejtů jsou volány i pomocná funkce **GA** počítající zintegrováný Johnsonův rozvoj Gauntova faktoru podle tabulky 5.1, integrální exponenciála **EXPINT** (podle Kuruczova ATLASU), resp. procedura numerické integrace **DNAGQUAD**, která je vlastně přípravnou procedurou pro volání NAG routiny **D01AMF**. Je-li nastaven logický příznak **ldebug**, je možno v souboru ***.LOG** najít i výpis matice rejtů, transformované matice a vektor řešení populací. To zajišťují procedury **PRINTMATRIX**, **PRINTVEC**.

Kapitola 7

Modelové příklady

V této kapitole ukážeme příklady výpočtu některých zajímavých modelů a provedeme diskusi zjištěných fakt. Zaměříme se nejprve na jednodušší případ se zadanou hodnotou elektronové hustoty

7.1 Modely se zadanou elektronovou hustotou

V tomto případě je třeba provádět pouze teplotní iteraci na základě celkové energetické bilance $\mathcal{E}_{bal}$. Nabízí se zde proto možnost studia charakteru konvergence teploty v závislosti na vstupující elektronové hustotě a dopadajícím záření (teplota T_* , hustota zředění W). Uvažujme dva odlišné modely.

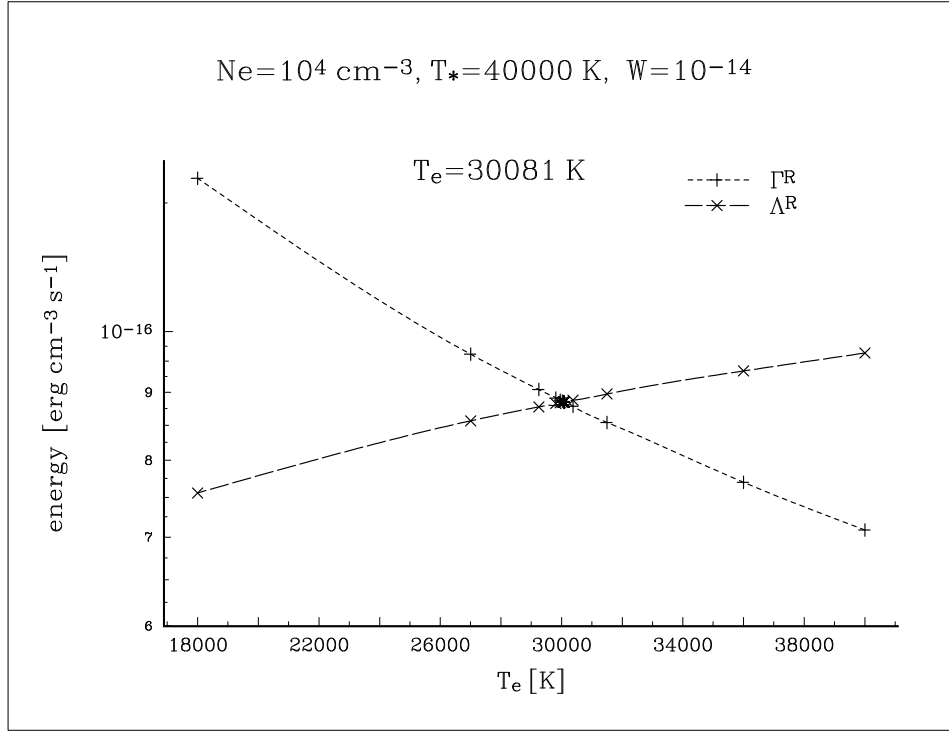
Jedním bude typická planetární mlhovina s hustotou $N_e = 10^4 \text{ cm}^{-3}$, na kterou dopadá záření centrální hvězdy o teplotě $T_* = 40\,000 \text{ K}$ s faktorem zředění $W = 10^{-14}$.

Druhý model bude představovat typickou obálku Be hvězdy s parametry $N_e = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, $T_* = 15\,000 \text{ K}$, $W = 10^{-3}$.

Pro účely podrobnějšího studia si celkovou energetickou bilanci $\mathcal{E}_{bal}$ rozdělíme na energetický zisk Γ a ztrátu Λ a tyto ještě na příspěvek zářivých přechodů (Γ^R, Λ^R) a srážek (Γ^C, Λ^C). Oba modelové případy budeme pro názornost zkoumat i pro model se zanedbanými srážkami (tzv. zero density model). Výsledky jsou uvedeny na obrázcích 7.1–7.11.

Podívejme se nejprve na model planetární mlhoviny. Z obr. 7.1 je vidět, že při zanedbání srážek se ustaví energetická rovnováha při poměrně vysoké teplotě 30081 K a přitom lze snadno najít bod energetické rovnováhy jako průsečík funkce energetického zisku a ztráty (podobnou grafickou metodu pro analyticky vyjádřené funkce použili i Baker et al. (1938)). Pozice jednotlivých bodů jsou přímo převzaty z výstupu běhu programu a proto přímo ukazují průběh konvergence elektronové teploty.

Na obr. 7.2 jsou uvedeny příspěvky zářivých i srážkových energetických procesů k celkové energetické bilanci, na obr. 7.3 jsou tyto hodnoty vysčítány do funkcí



Obr. 7.1: Energetické zářivé zisky Γ^R a ztráty Λ^R planetární mlhoviny se zanedbanými srážkami

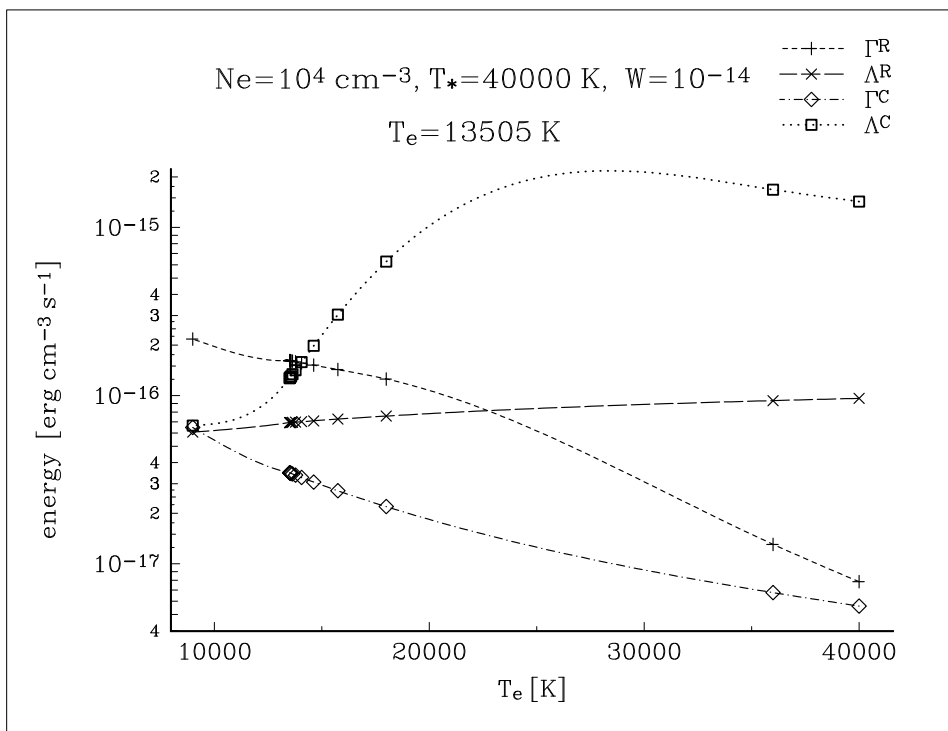
celkových energetických zisků i ztrát. Opět je vidět, že okamžik rovnováhy je jasně definovaný jejich průsečíkem. Přitom výsledná elektronová teplota je podstatně nižší (13505 K). Zároveň je z obrázků vidět silný vliv srážkových ztrát na celkovou bilanci.

Průběhy populací hladin v podobě b -faktorů jsou pro čistě zářivý model (R) i model se zahrnutými srážkami (RC) uvedeny na obr. 7.4. Není zde uvedena základní hladina, neboť její b -faktor nabývá hodnoty řádově 10^{10} . Zajímavý průběh modelu RC ukazuje zářivou depopulaci spodních hladin až do oblasti 40. hladiny, směrem k vyšším hladinám pak začínají již dominovat srážky, které nakonec pro vysoké hladiny ustaví lokální termodynamickou rovnováhu (hodnoty b_n se začínají asymptoticky blížit jedné). Právě v oblasti okolo 30–40. hladiny je očekáváno maserové zesilování čar.

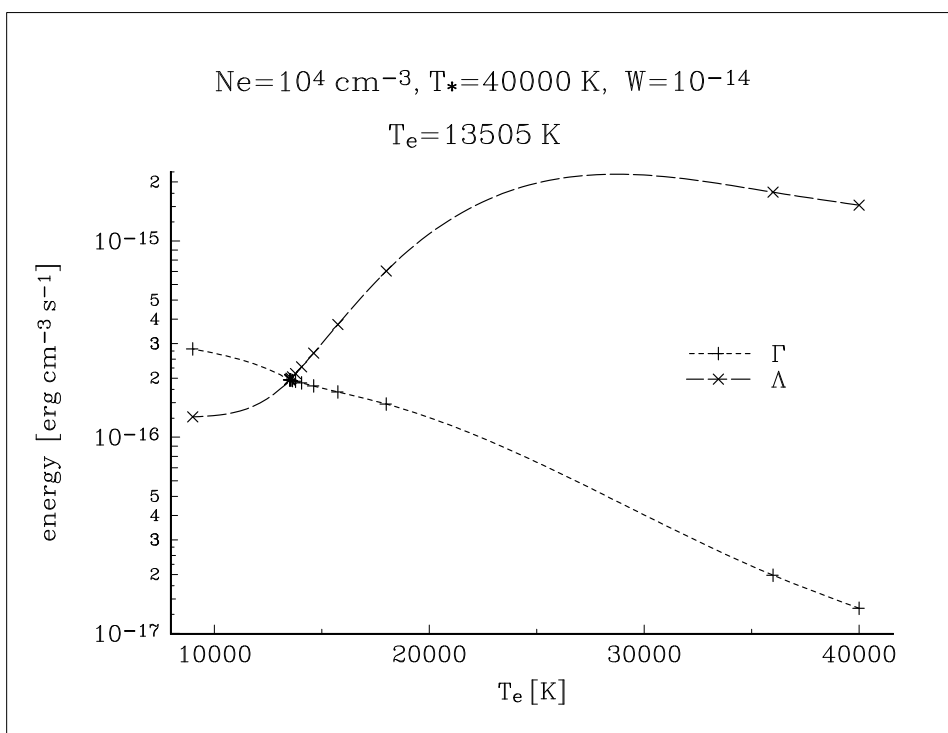
Podstatně odlišné jsou poměry v obálce Be hvězdy. Pokud zanedbáme srážky (což zde určitě nemůžeme), dostaneme opět jasně definovaný bod energetické rovnováhy (viz obr. 7.5).

Elektronová teplota se přitom ustálí na hodnotě 12805 K (tedy lehce pod teplotou záření). V případě modelu se srážkami — obr. 7.6 je vidět dominantní postavení srážkových procesů nad zářivými (v tomto případě činí rozdíl 6 řádů).

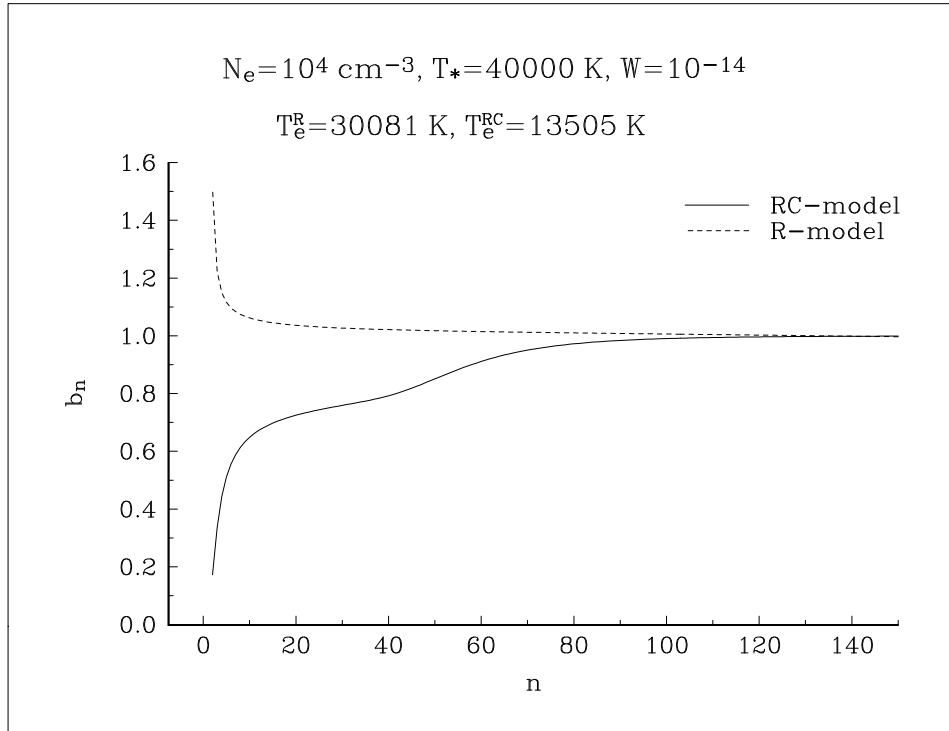
Vzhledem ke stavu velmi blízkému lokální termodynamické rovnováze spolu funkce zisku a ztrát velmi silně koincidují a nalezení stavu energetické rovnováhy je tak velmi obtížné. Energetická rovnováha je v podstatě řízena pouze srážkovými



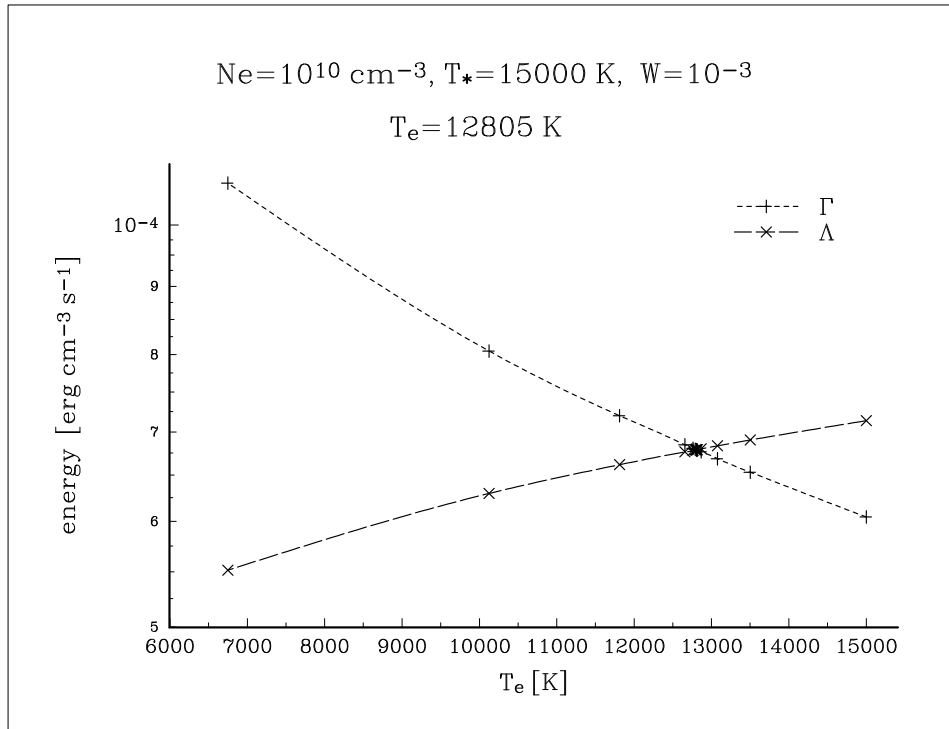
Obr. 7.2: Energetické zisky Γ^R a ztráty Λ^R zářivé i srážkové (Γ^C , Λ^C) v planetární mlhovině



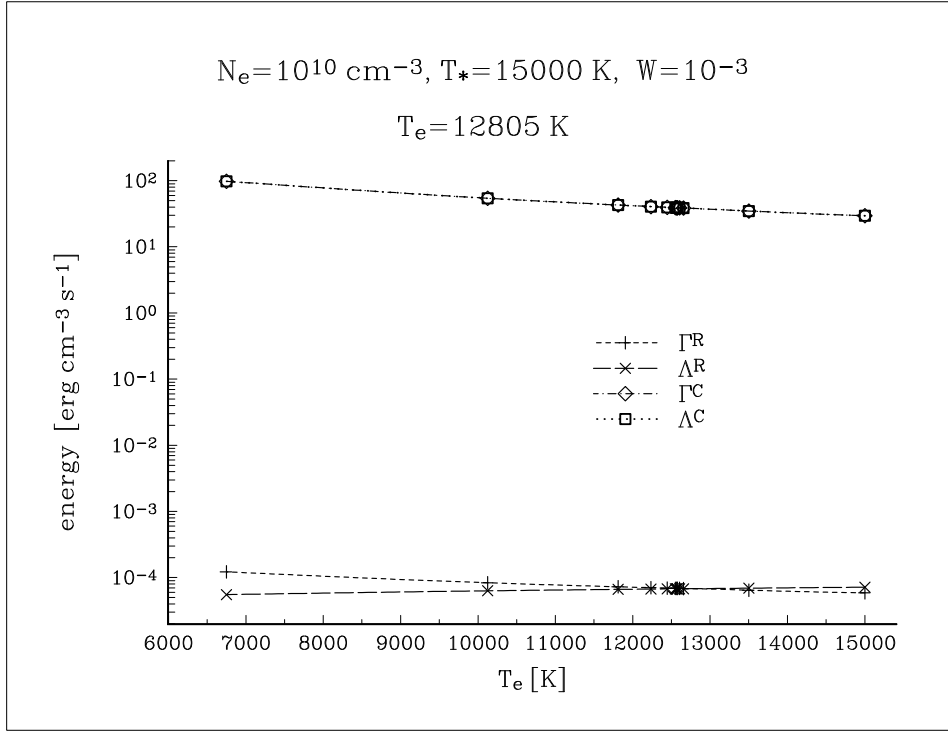
Obr. 7.3: Celkové energetické zisky Γ a ztráty Λ planetární mlhoviny



Obr. 7.4: Průběhy b -faktorů v závislosti na čísle hladiny n pro model planetární mlhoviny. Model R zanedbává srážky, model RC je zahrnuje



Obr. 7.5: Energetické zářivé zisky Γ^R a ztráty Λ^R obálky Be hvězdy se zanedbanými srážkami



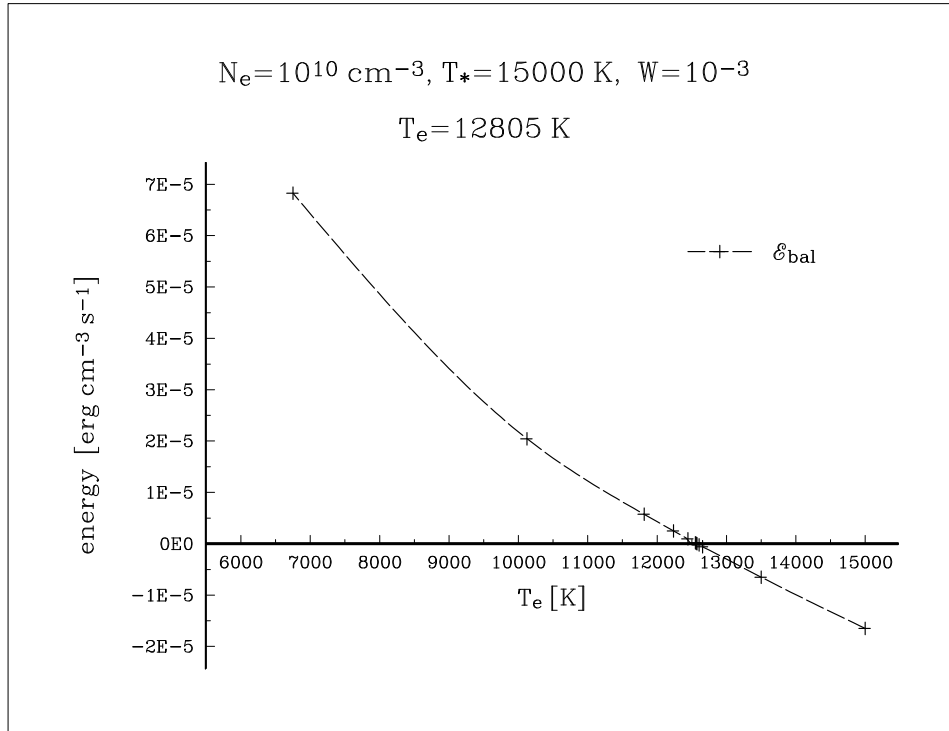
Obr. 7.6: Energetické zisky Γ^R a ztráty Λ^R zářivé i srážkové (Γ^C , Λ^C) v obálce Be hvězdy.

procesy a jejich zisky i ztráty jsou vlivem blízkosti LTE velmi vyrovnané. Na základě namátkově stanovené hodnoty rozdílu energií $\mathcal{E}_{bal}$ je téměř nemožné průsečík najít, je proto nezbytná velká přesnost výpočtu a systematické sledování okolí bodu energetické rovnováhy, aby mohly být vyloučeny náhodné numerické chyby. Jak ukazuje obr. 7.7, je potom možné okamžik nulové energetické bilance najít poměrně úspěšně.

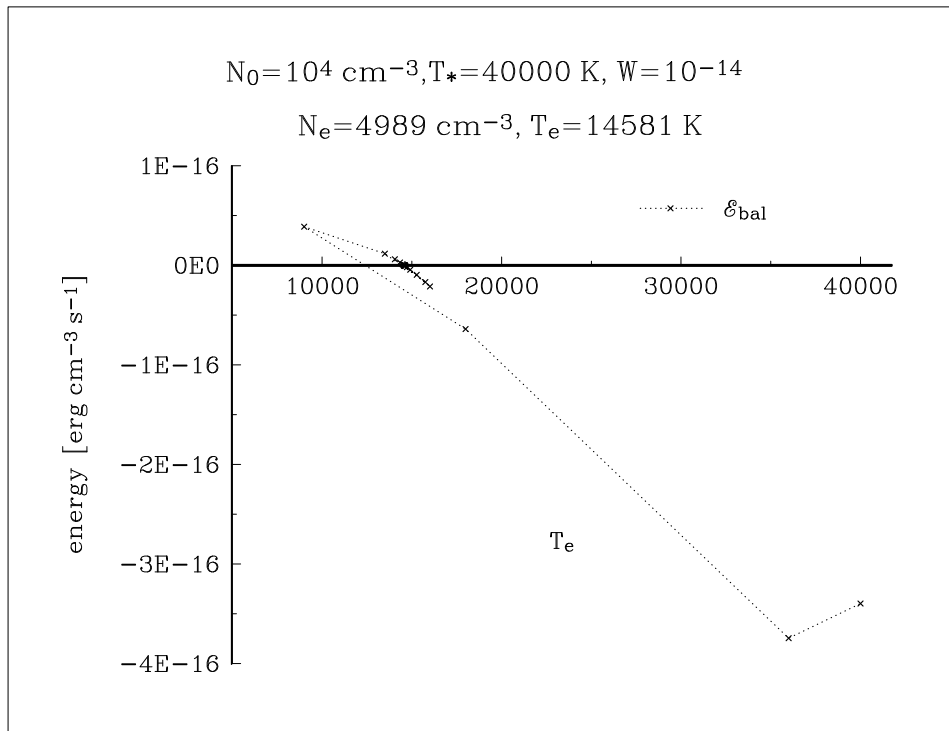
7.2 Modely se zadanou koncentrací všech částic

V těchto modelech se nepředpokládá zadaná hustota elektronů, ale je počítána konzistentně s rovnicemi statistické rovnováhy. Řešíme tak vlastně navíc i NLTE ionizační rovnováhu. Výpočet takového modelu je nutno provádět použitím celého postupu nelineární iterace elektronové teploty i hustoty tak, jak byl popsán v předchozích kapitolách. Pro jednoduchost zvolíme číselné hodnoty parametrů modelu planetární mlhoviny i Be hvězdy stejné, jen u Be hvězdy dosadíme celkovou koncentraci částic rovnou $N_0 = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, u mlhoviny 10^4 cm^{-3} . Průběh iterace elektronové teploty je zachycen na obr. 7.8 pro mlhovinu a na obr. 7.9 pro Be hvězdu.

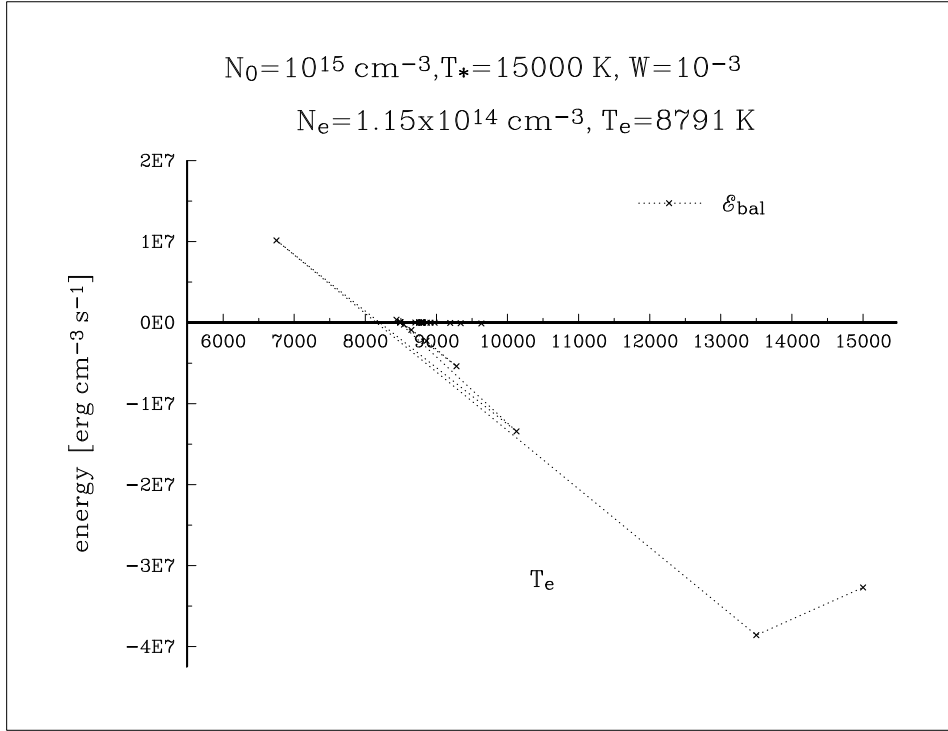
Výsledné hodnoty obsazení hladin pak zachycují obr. 7.10 a 7.11.



Obr. 7.7: Celková energetická balance $\mathcal{E}_{bal}$ obálky Be hvězdy



Obr. 7.8: Průběh celkové energetické balance $\mathcal{E}_{bal}$ během iterace elektronové teploty. Model planetární mlhoviny se zadanou hustotou částic N_0



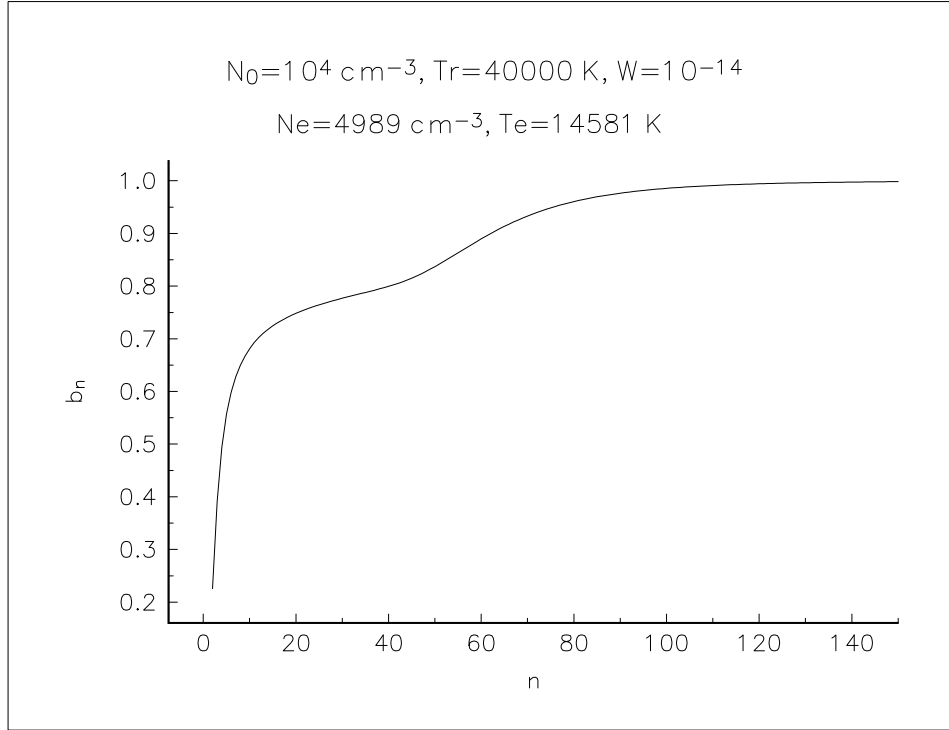
Obr. 7.9: Průběh celkové energetické bilance $\mathcal{E}_{bal}$ během iterace elektronové teploty. Model Be hvězdy se zadanou hustotou částic N_0

Z obrázků plyne velká podobnost těchto modelů s výše uvedenými modely se zadanou elektronovou hustotou. Byly proto námi zvolené hodnoty parametrů zvoleny správně a vystihují stále tentýž objekt. To potvrzují i výsledné teploty 14581 K pro mlhovinu a 8791 K pro Be hvězdu. Z výsledných hustot je zřejmé, že planetární mlhovina je silně ionizována (počet elektronů i iontů tvoří téměř polovíčku všech částic, čili jejich součet dá téměř celek, zatímco v Be hvězdě dají elektrony a ionty dohromady jen asi 20% všech částic. Z průběhu b -faktorů je zřejmé rychlé přiblížení populací hladin lokální termodynamické rovnováže již u zhruba 7. hladiny.

7.3 Ověření správnosti programu

Jako kontrolu korektnosti použitého postupu můžeme použít případ lokální termodynamické rovnováhy, kdy bude $W = 1$. Pak by měla být pro všechny hustoty elektronová teplota rovna teplotě záření a výsledné b -faktory by měly nabýt rovněž hodnoty jedna. To skutečně bylo potvrzeno a výsledná chyba teploty byla vždy na úrovni předepsané tolerance pro velký rozsah parametrů (T_* mezi 4000 K a 160 000 K, N_e od 1 cm^{-3} do 10^{12} cm^{-3}). Pouze v případě hustoty nad 10^{12} cm^{-3} se výsledná teplota lišila od teploty záření o 5% až 10%.

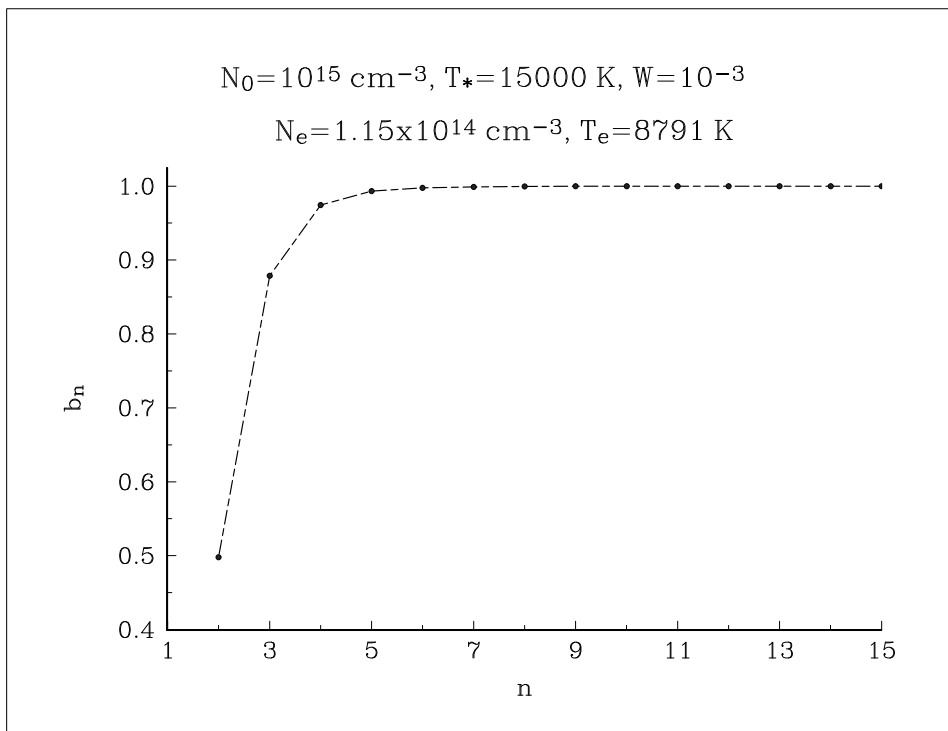
Správnost modelů planetární mlhoviny ověříme srovnáním s výsledky Bakera et



Obr. 7.10: Průběh b -faktorů v závislosti na čísle hladiny pro planetární mlhovinu - model ze zadanou celkovou hustotou částic N_0 . Uvedeny jsou i výsledné iterované parametry

T^* [K]	Přesný model se srážkami	Přesný model beze srážek	Model pro $g=1$ beze srážek	Baker et al. (1938)
10000	4983	8825	9438	9500
20000	8320	16580	18011	18000
40000	13505	30081	33237	34000
80000	21789	51240	57520	57000
160000	35780	80256	91162	92000
320000	59724	116249	132977	132000

Tabulka 7.1: Porovnání našich modelů planetární mlhoviny s modely Bakera et al. (1938)



Obr. 7.11: Průběh b -faktorů v závislosti na čísle hladiny pro Be hvězdu - model ze zadanou celkovou hustotou částic N_0 . Uvedeny jsou i výsledné iterované parametry

al. (1938), kteří uvažovali čistě vodíkovou mlhovinu získávající energii fotoionizací základní hladiny a ztrácející brzdným zářením a rekombinací s následnými deexcitacemi. Srážky zanedbali stejně jako excitace a ionizace z vyšších hladin. Pro zjednodušení položili Gauntovy faktory (všech typů) rovné jedné. Zanedbáním srážek. V Tabulce 7.3 jsou vedle hodnot Bakera et al. uvedeny i výsledky našeho programu s Gauntovými faktory rovnými jedné i modelů s přesnými hodnotami Gauntových faktorů. Pro srovnání je uveden i přesný případ se zahrnutím srážek. Výsledky ukazují velmi dobrou shodu naší metody s analyticky (a graficky) určenou teplotou Bakera et al. (1938). Dále je vidět prudký pokles elektronové teploty při započtení srážek.

7.4 Několik slov ke konvergenci metody

Počet iteračních kroků je dán požadovanou tolerancí teploty a hustoty. Pro naše účely byla hrubá tolerance 100 K a 10% je relativní tolerance hustoty. Stačí zhruba asi 5-7 iterací teploty, aby bylo nalezeno okolí kořene. Poté nastupuje druhá fáze — hledání hustoty. Hustota se většinou zafixuje velice rychle, typicky po 3. iteraci je blízko konečného řešení (s výjimkou velmi husté látky) Pak následuje tentýž proces s tolerancí teploty 1 K, a hustotní tolerancí 1%. Jelikož má procedura již

dobře odhadnutý kořen, bývá i tato část rychlá. Limitujícím faktorem, který zdržuje výpočet, je numerická integrace velkého množství rejtů. Ukázalo se, že i při 300 hladinách (tzn. matice ESE 300x300) je provedena Gaussova eliminace v mnohem kratším čase než jsou napočteny příslušné rejty. Proto se očekávaný efekt metody grupování hladin nedostavil. Je lépe proto výhodnější zahrnout větší množství explicitních hladin a pouze jednu hladinu pseudokontinnua. Průběh konvergence modelu Be hvězdy lze najít v dodatku D.

Kapitola 8

Závěr

Problematika tvorby astrofyzikálních modelů je obecně velmi náročná. Obsahuje v sobě značné množství kvantově-mechanických problémů a s tím souvisejících komplikovaných výpočtů, z nichž mnohé není možno nikdy provést exaktně a je nutno se uchýlit k různým (více či méně přesným) aproximacím. Vytvoření konsistentního modelu pozorované reality uvažujícího všechny známé skutečnosti je prakticky téměř nemožné a proto je nutno se spokojit i s velmi zjednodušenými modely (pokud nejsou v přímém rozporu s pozorováním). Jednoduchý model řídkých obálek horkých hvězd se předkládá i tato práce.

- V práci je provedeno shrnutí dostupné literatury související se studovaným tématem. Kompilačních prací shrnujících danou problematiku je velmi málo a proto je uvedený přehled velkým přínosem pro lepší orientaci v problematice. Cenný je zejména přehled zdrojů atomárních dat pro vodík a metod jejich výpočtu (Gauntovy faktory, srážkové účinné průřezy a rejty, síly oscilátorů atd.). Přehled ukazuje vývoj teorie rekombinačních čar atomu vodíku a možnosti její aplikace na problémy soudobé astrofyziky.
- Podává ucelený a přehledný popis teorie výpočtu pravděpodobností přechodů, resp. příslušných rejtů dovedený až do konkrétní numerické a rozměrové podoby. Takový přístup v literatuře chybí, jednotlivé vztahy a vyjádření jsou v různých pracích značeny odlišně popř. jsou naopak používány stejné symboly pro různé veličiny, číselné konstanty jsou uváděny velmi nepřesně a bez uvedení fyzikálního rozměru, některé vztahy jsou hrubě zjednodušeny (např. zanedbáním stimulované emise). Orientaci při srovnávání výsledků různých prací navíc značně komplikují složité substituce a autory nově zaváděné funkce. Většinou také není rozlišováno mezi klidovou a redukovanou hmotností elektronu.
- Nejdůležitějším produktem je program umožňující určení elektronové teploty a hustoty vodíkové plazmy vystavené působení záření (v současné verzi popsaného Planckovou funkcí s příslušným koeficientem zředění). Nezávislé testy

LTE modelů potvrzují korektnost a dobrou přesnost výstupů tohoto programu. Použitý heuristický algoritmus konverguje ve všech testovaných případech i pro velmi extrémní hodnoty parametrů (v rámci postulované teorie — je však sporné, zda je při těchto hodnotách náš zjednodušený model ještě použitelný na reálné objekty). Poměrně silné oscilace při hustotní iteraci se podařilo účinně potlačit pomocí průměrování dvou po sobě následujících hodnot.

- Výsledky programu ukázaly, že k ochlazení planetárních mlhovin na elektronovou teplotu zhruba 13 000 K stačí jen samotný vliv srážek vodíkového atomu s volnými elektrony, ačkoli se většinou za hlavní mechanismus ochlazování považují elektronové srážkové excitace těžších iontů (hlavně O_{II} , O_{III} , N_{II}). (Tyto mechanismy způsobí zřejmě dodatečný pokles teploty na pozorované hodnoty asi 10 000 K.). Podobně i u obálek Be hvězd se dá podle výpočtů očekávat elektronová teplota asi 10 000 K.
- Numerické experimenty upozornily na dominantní vliv srážkových procesů na energetickou bilanci plazmy a s tím související problematiku určení okamžiku energetické rovnováhy pro plazmu s vysokou koncentrací volných elektronů.

Presentovaný fyzikální model je však zatím poměrně jednoduchý a je zde několik námětů k budoucímu vylepšení. V současnosti nejsou zkoumány spodní hladiny rozlišené na jednotlivé podstavy podle vedlejšího kvantového čísla a je explicitně postulováno statistické přerozdělení energie v těchto podstavech. Pro nízké hustoty by však tento stav nemusel platit. Dalším omezujícím předpokladem je malá optická tloušťka zkoumané plazmy. Pro účely interpretace pozorování cirkumstelární hmoty v okolí Be hvězd bude v budoucnu do modelu zabudována Sobolevova metoda koeficientu pravděpodobnosti úniku (escape probability coefficient) a uvažovány by měly být i další astrofyzikálně významné atomy (He, C_{IV} aj.). Dílčí vylepšení se naskýtá v oblasti formulace soustavy rovnic statistické rovnováhy pro vysoké hladiny použitím *occupation probability* formalismu Hummera a Mihalase. Bezprostředně naskýtající se aplikací popisovaného programu bude jeho propojení s programem **KAPKA** Dr. Hadravy umožňující výpočet spekter plynných proudů ve dvojhvězdách.

Dodatek A

Přehled literatury související se
studovanou problematikou

Přehled literatury související se studovanou problematikou

Většinu literatury, která souvisí se studovanou problematikou, lze rozdělit do několika skupin. Obecně astrofyzikálně použitelné jsou práce uvádějící vztahy popř. tabulky pro výpočet pravděpodobností přechodů v astrofyzikální plazmě (kvantově-mechanické výpočty, různé aproximace atd.). Jsou to spíše práce fyzikální povahy. Další skupinu tvoří práce snažící se určit obsazení hladin v plynných mlhovinách a obálkách Wolf-Rayetových hvězd a z nich Balmerovy dekrementy, síly čar atd. To všechno se započtením řádově desítek hladin atomu vodíku. Jiná skupina novějších prací hledá především obsazení velmi vysokých hladin v souvislosti s čarami v radiovém a mikrovlnném oboru. Jejich autoři se snaží potvrdit hypotézu možného zesílení těchto čar maserovým efektem. A v neposlední řadě je zde mnoho experimentálních prací, které upozorňují na nesrovnalosti měření v radiovém oboru s teorií, a tak motivují autory předchozí skupiny. Následující výčet si nečiní nároky na úplnost, ale je určen spíše k rychlejší orientaci v dané problematice.

Práce počítající pravděpodobnosti přechodů

Zářivé přechody

Základ většiny pozdějších prací položili Menzel a Pekeris (1935) tím, že vyjádřili sílu oscilátoru i Gauntovy faktory pro všechny typy přechodů jednotným způsobem zavedením imaginárního kvantového čísla pro stavy volného elektronu. Spojili výsledky Gaunta, Kramerse a Gordona do ucelené podoby a navíc se pokusili o asymptotický rozvoj složité hypergeometrické funkce odvozené Gordonem (tam se dopustili chyby, opravené až Burgessem (1958)). Uvedli také tabulku sil oscilátoru vázaně-vázaných přechodů pro prvních 14 hladin a pro Lymanovu, Balmerovu a Paschenovu sérii do 35. hladiny. Jejich práci rozšířili Baker a Menzel (1938), kteří uvádějí tabulku Gauntových faktorů pro $n < 30$.

Green, Rushová a Chandlerová (1957) uvádějí tabulky sil oscilátorů do 20. hladiny a pro Balmerovu sérii do 60. včetně síly Balmerových čar. Pro stavy odlišené vedlejšími kvantovými čísly uvádějí také tabulku radiálních integrálů.

Burgess (1958) znovu přepočítal asymptotické aproximace radiálních integrálů a objevil přitom chybu v aproximaci Menzela a Pekerise. Uvádí proto novou tabulku maticových elementů i s dělením podle l do 13. hladiny a aplikuje je na výpočet rekombinačního koeficientu a účinného průřezu fotoionizace. Nakonec počítá obsazení hladin (viz násl. kap.).

Karzas a Latter (1961) se zabývají vázaně-volnými přechody (fotoionizací) a publikují tabulku $g_{II}(n, \varepsilon)$ pro $n < 15$ a energii elektronu od 10^{-16} do 10^{12} Rydbergů. Počítají i síly oscilátorů nezávisle na Greenovi et al. (1957) a uvádějí tabulku $f_{nl, n'l'}$ do 16. hladiny. Kromě toho popisují i výpočet volně-volných Gauntových fak-

torů (v návaznosti na Bergera (1956) avšak pro mnohem větší rozsah parametrů). Vše dokládají přehlednými grafy.

Na základě jejich vzorců odvozuje Boardman (1964) rekombinační koeficienty (do 10. hladiny včetně podhladin pro $T_e = 10^3 - 10^6$ K) a Glasco, Zirin (1964) tabelují Gauntovy faktory $\bar{g}_{nl}$ zprůměrované přes Boltzmannovo rozdělení pro 15 hladin včetně podhladin a teplotu od 2500 do 2 560 000 K.

Více astrofyzikálně zaměřené (vedle již uvedeného Burgesse (1958)) jsou výpočty Seatona (1959a), který tabeluje pomocné proměnné použité k výpočtu rekombinačních koeficientů a účinných průřezů fotoionizace pro jednotlivé hladiny i celkový rekombinační koeficient. Vychází přitom z asymptotického (Burgessem opraveného) rozvoje $g_{II}(n, \epsilon)$ Menzela a Pekerise. Spolu s Burgessem se pokouší Seaton o obecné vyjádření i pro složitější atomy — např. Burgess a Seaton (1960).

Burgess (1965) není spokojen se svými předchozími aproximacemi pro vodík a počítá přesné maticové elementy pomocí rekurentních vztahů. Fotoionizační a rekombinační průřezy získává numerickou integrací (s proměnným krokem) těchto elementů. Vše uvádí v rozsáhlých tabulkách (i podle l).

Velmi podrobně se procesy ve vodíkové plazmě zabývá Ivanov-Cholodnyj et al. (1960) včetně snížení ionizačního kontinua. Velikost jednotlivých atomárních procesů (zářivé i srážkové) demonstrují v názorných grafech.

Cox a Tucker (1969) se zabývají ionizační rovnováhou ve vysokoteplotní nízkohustotní vodíkové plazmě obsahující H, He, C, N, O, Ne, Mg, Si a S. Vedle ionizačních stupňů pro tyto elementy se zabývají i jejich celkovými zářivými energetickými ztrátami v závislosti na teplotě. Zahrnují i dvouelektronovou rekombinaci a brzdné záření a diskutují její vliv. Nakonec uvádějí graf pro celkovou zářivou ztrátu plasmy s kosmickými abundancemi výše uvedených prvků. Upozorňují na silné zvýšení (o 2 řády) těchto ztrát při teplotě 10^5 K způsobené přechody 2s-2p v ionizovaném kyslíku.

Podobným výzkumem se nezávisle zabývá i Burgess a Summers (1969). Podrobně studuje dvouelektronovou rekombinaci a její vliv na obsazení hladin jednotlivých iontů.

Nové, jednoduché aproximace pro Gauntovy faktory (získané fitováním tabulek Green et al. (1957) a Karzas, Latter (1961)) získává Johnson (1972). Uvádí i jednoduché vzorce pro pravděpodobnost zářivé rekombinace i pro sílu oscilátoru. Navíc se zabývá i srážkovými přechody (viz dále).

Nový zájem o zpřesnění atomárních parametrů nastává v 80. letech.

Van Regemorter, Hoang-Binh a Prud'homme studují znovu analytické vztahy pro radiální integrály v Coulombovské aproximaci a nacházejí rekurentní vztah pro přesnější výpočet jinak těžko vyčíslitelné hypergeometrické funkce potřebné pro určení síly oscilátoru (Van Regemorter et. al. (1979), Hoang-Binh et. al. (1979)).

Nové vztahy pro ionizační rovnováhu a jednoduché aproximace pro jednotlivé rejty (i srážkové) u několika těžších prvků (C, N, O, Ne, Mg, Si, S, Ar, Ca, Fe, Ni)

uvádí Shull a van Steenberg (1982) a podobným výzkumem se zabývá i Arnaud a Rothenflug (1985). Vše uvádějí v přehledných tabulkách.

Carson (1988) tabeluje přesné analytické výrazy pro sílu oscilátoru $f_{nl,n'l'}$ pro $n \leq 5$ a n' libovolné, vázaně-volné Gauntovy faktory $g_{II}(nl, \kappa, l')$, kde $n \leq 5$ a κ libovolné a pro celkovou sílu čáry $S(n, n')$ $n \leq 7$, n' libovolné.

Rozsnyai a Jakobs (1988) zpřesňují výpočty pravděpodobnosti fotoionizačního účinného průřezu a pravděpodobnosti fotorekombinace použitím explicitního rekurentního vztahu pro Gauntův faktor. Navíc studují i problematiku atomů vodíku nepodobných. Výsledky dokumentují množstvím grafů.

Hummer (1988) publikuje rychlou a přesnou metodu výpočtu volně-volných Gauntových faktorů zprůměrovaných přes Maxwellovo rozdělení rychlostí elektronů pro vodíku podobné atomy pomocí rozvoje do Čebyševových polynomů. Vše shrnuje do podrobných tabulek příslušných koeficientů.

Rychlý algoritmus i část programu ve FORTRANU pro výpočet volně-volných a volně-vázaných Gauntových faktorů publikuje i Janicki (1990).

Hoang-Binh (1990) na základě své předchozí analýzy rekurentního chování hypergeometrické funkce v radiálním integrálu potvrzuje možnost snadného výpočtu přesné síly oscilátoru až do hladiny $n \sim 1000$. Jako testovací příklad uvádí síly oscilátoru, maticové elementy a Einsteinovy koeficienty spontánní emise pro přechod $111 \rightarrow 110$ pro různá l . Navíc rozepisuje i analytické rekurenční vztahy pro přechody nejběžnějších vodíkových sérií.

Storey a Hummer (1991) používají vlastní rekurentní vztahy pro přesný výpočet vázaně-vázaných pravděpodobností přechodů a fotoionizačního účinného průřezu libovolných vodíku-podobných atomů (dělených podle l , včetně korekce na redukovanou hmotu) a podrobně popisují program **RADZ1** který navíc obsahuje i optimalizovanou proceduru pro výpočet volně-volného Gauntova faktoru (použitím Čebyševových polynomů).

Péquignot et al. (1991) popisují jednoduché funkce 4 parametrů pro totální rekombinační koeficienty u H, He, C, N, O iontů. Podobně tabelují koeficienty pro popis efektivních rekombinačních koeficientů důležitých UV přechodů.

Dumont (1992) počítá funkci celkových zářivých ztrát (cooling function) horkého a hustého srážkově ionizovaného plynu se zahrnutím efektů optické tloušťky. Ukazuje, že na rozdíl od opticky tenkého případu Coxe a Tuckera (1969) výrazné maximum na 10^5 K zmizí a ztráty jsou tedy podstatně menší. Výsledky aplikuje na akreční disk těsných dvojhvězd a ukazuje, že vysokoteplotní řešení disku je teplotně nestabilní.

Zatím nejpresnější hodnoty totálních rekombinačních koeficientů a koeficientů rekombinačních ztrát (energy-loss coefficient) pro velký rozsah teplot ($10 - 10^7$ K) se zahrnutím až 800 hladin (u nízkých teplot) uvádí Hummer (1994). Používá přitom numerické integrace přesných rekombinačních účinných průřezů a volně-volných Gauntových faktorů ze svého programu **RADZ1**.

Z kompilačních prací je významným zdrojem atomárních parametrů přehled Wiese, Smith, Glennon (1966), cenná je však spíše pro studium problematiky těžších prvků. Pro vodík lze všechny uváděné parametry velmi snadno a rychle vypočítat použitím přesných vzorců např. Hummerovým programem **RADZ1**. Zdrojem pro data vodíku jsou práce Green, Rush, Chandler (1957), Karzas a Latter (1961) a Menzel a Pekeris (1935), tedy nic podstatně nového. Obecně se začíná projevovat trend používat raději programy než činit programy závislé na rozsáhlých datových souborech. V tomto duchu je přínosné i budování on-line serverů kam je možno systematicky ukládat atomární data. Příkladem je např. tt TOP-BASE systém vytvořený v rámci OPACITY projektu (Seaton 1987), jenž si klade za cíl vytvořit a udržovat databázi nejnovějších atomárních dat.

Srážkové přechody

Zde je situace značně nepřehledná, všechny vzorce jsou jen aproximativní, některé upravené s ohledem na výsledky laboratorních experimentů (tzv. semiempirické modely). Navíc je situace komplikována rezonancemi při jistých energiích elektronů. Většina výpočtů je značně složitých a nevhodných k praktickému programování.

Pengelly a Seaton (1964) aplikují metodu impaktního parametru a provádějí odhady pravděpodobnosti srážkové excitace.

Sampson (1969) provádí kritické zhodnocení nových metod výpočtu účinných průřezů srážek 60. let, které shrnuly i objevené rezonance, mimo jiné i na základě rozporných výsledků výpočtů hvězdných atmosfér provedených Mihalasem a Kafem.

Vzápětí si Sampson a Golden (1970) uvědomili, že při výpočtu pravděpodobností srážkových přechodů, kdy se integrují účinné průřezy přes Maxwellovo rozdělení rychlostí volných elektronů, se rezonanční efekty stejně zahladí, a kladou proto důraz především na jednoduchost vztahů pro pravděpodobnosti přechodů. Pracují s tzv. efektivním volně-volným Gauntovým faktorem $\bar{g}$. Uvádějí tabulku pravděpodobnosti excitace do 10. hladiny.

Předchozí metodu upřesňují dále (Golden a Sampson (1971)) pro přechody mezi prvními třemi hladinami a opravují tabulku. Další rozšíření metody (Sampson a Golden (1971)) zahrnuje i ostatní vodíku podobné ionty, hlavně HeII.

Johnson (1972) poukazuje na nekonzistentnost mnoha předchozích prací (včetně Sampsona a Goldeny) při některých přechodech a nabízí velmi elegantní a jednoduché vyjádření pravděpodobností srážkové excitace a ionizace pomocí Betheho koeficientů. Bere v úvahu i tzv. redukci ionizačního limitu (zahrnutí nejvyšších hladin jako části kontinua). Vzorce uvádí pro přechody typu $n \rightarrow n'$. Pro svou jednoduchost a dostatečnou přesnost jsou používány dodnes.

Gee et al. (1976) se zaměřili na vysoké hladiny a uvádějí vztahy pro účinné průřezy a pravděpodobnosti srážkové excitace mezi hladinami atomu vodíku s $n > 5$ při vysokých energiích a doplňují tak Johnsona.

Percival a Richards (1978) tyto vztahy rozšiřují i pro další vodíku podobné prvky (se zahrnutím náboje jádra). Jejich vzorce platí pro teplotu $1.6 \cdot 10^5/Z^2 \leq T \ll 3 \cdot 10^9 \text{ K}$ a hladiny vyšší než 5.

Sampson a Golden svoji teorii dále rozvíjejí pro další vodíku podobné atomy a publikují v tabulkách (Golden et al. (1981) – síly srážek pro $3 < Z < 74$, dělené podle l . Sampson a Zhang (1988) – zpřesnění pro vodíku podobné atomy s velkým Z , snaha o jednoduché výrazy). Na jejich práci navazuje i Clark (1990), používající tzv. Distorted Wave aproximaci.

Gionavardi et al. (1987) provedli analýzu všech dostupných zdrojů atomárních dat pro srážky a vyjádřili pravděpodobnosti srážkové excitace (přesněji sílu srážky) pomocí polynomu 3. stupně v elektronových teplotách. Zvláště pro nízké teploty (5000–72000 K) a pro vysoké (55 000–500 000 K). Tabulky příslušných koeficientů uvádějí do 15. hladiny (pro prvních 5 i dělené podle vedlejšího kvantového čísla). Později uveřejnil Gionavardi a Palla (1989) rozšíření pro teploty od 2000 do 5000 K a provedli korekce pro přechody z 1. a 2. hladiny do 3.

S jejich hodnotami pro přechod $1 \rightarrow 2$ polemizují Scholz et al. (1990) a uvádějí vlastní rozvojové vztahy pro $1s \rightarrow 2s$ a $1s \rightarrow 2p$. Nejnovější účinné průřezy pro tyto přechody odvodil Jung (1992) pro vodíku podobné ionty se $Z \rightarrow \infty$.

Chang, Avrett a Loeser (1991) našli velké nekonzistentnosti ve výpočtech Gionavardiho et al. (1987) pro hladiny 1–4, které jsou patrně způsobeny výběrem zdrojů pro nízké přechody. Zároveň potvrdili správnost Johnsonových vztahů a doporučili je k používání s výjimkou přechodu $1 \rightarrow 2$. Pro něj doporučují použít výsledky, které uvádí Scholz et al. (1990). Vzhledem k tomu, že Gionavardi et al. (1987) používají pro $n \geq 5$ vzorce Johnsona, je doporučena jejich polynomická aproximace alespoň pro vyšší hladiny.

Scholz a Walters (1991) ještě zlepšili svoje výpočty a rozšířili jejich použitelnost až na rozsah teplot $2 \cdot 10^3 - 1 \cdot 10^8 \text{ K}$. Kromě vztahů pro srážkovou excitaci $1 \rightarrow 2$ uvádějí i aproximaci pro srážkovou ionizaci základní hladiny. Oboje pomocí jednoduché funkce polynomu 6. stupně v logaritmech teploty, pro který tabelují příslušné koeficienty. Pro excitaci jsou sady koeficientů rozdílné pro 3 teplotní rozsahy ($2 \cdot 10^3 - 6 \cdot 10^4 \text{ K}$, $6 \cdot 10^4 - 6 \cdot 10^6 \text{ K}$, $6 \cdot 10^6 - 1 \cdot 10^8 \text{ K}$). Tvrdí o svých aproximacích, že jsou s současností nejlepší z hlediska přesnosti i jednoduchosti naprogramování. Pro přechody ze základní hladiny do vyšších než druhé doporučují na základě různých testů opět používat vztahy Johnsona (1972). Zabývají se rovněž srážkovým ochlazením vodíkové plazmy a uvádějí jednoduchou aproximaci celkových energetických ztrát kontinua (collisional cooling rate) způsobených srážkovou excitací a ionizací základní hladiny. Ukazují, že v rozsahu uvažovaných teplot se excitace z první do druhé hladiny spolu s ionizací základní hladiny podílí na celkových ztrátách více než 80%. Pro teploty do 10 000 K se pak uplatňuje pouze excitace.

Velmi podrobně se metodikou výpočtu srážkových sil a rejtů zabývá Burgess a Tully (1992). Popisují metody škálování sil srážek pro jednoduché středování přes

Maxwellovo rozdělení, rozebírají numerické metody integrace přes silně oscilující rezonance a prezentují program pro interaktivní testování nových fitů a slepování různých numerických aproximací v různých oblastech energií. Hojně dokumentují jeho použití při testování různých vztahů převzatých z předchozí literatury (pro různé ionty).

Práce počítající podrobně obsazení nízkých hladin atomu vodíku

Motivací většiny prací byla zpočátku snaha o vypracování teorie Balmerova dekrementu (poměrné intenzity dané Balmerovy čáry k čáře $H\beta$).

První se touto otázkou zabýval Cillié (1932) pro atom vodíku se 7 hladinami a kontinuem. Konstatuje relativně dobrou shodu s tehdejšími měřeními čar $H\alpha$ až $H\gamma$. Navíc ukazuje silnou závislost spektra Balmerova kontinua na elektronové teplotě a navrhuje využít ji pro přímé určování teploty (na rozdíl od Zanstrový nepřímé metody). Dále vysvětluje i malý vliv volně-volných přechodů na pozorovatelné spektrum (záření je rozptýleno ve velkém rozsahu frekvencí v infračervené oblasti).

Průkopnickou prací ve výzkumu fyzikálních procesů v plynných mlhovinách je série článků Bakera a Menzela (Menzel (1937), Menzel a Baker (1937), Baker a Menzel (1938)), ve kterých shrnuli předchozí pokusy Plasketta, Carrola a Cilliého do ucelené teorie. Zavedli významné zjednodušení problému definováním tzv. aproximací A a B (pro mlhovinu opticky tenkou resp. tlustou v Lymanových čarách) a vyřešili otázku nekonečně mnoha vázaných hladin a kontinua převedením sumací v rovnicích statistické rovnováhy (ESE) na integrál. Takto spočítali b -faktory a Balmerovy dekrementy prvních 30 hladin atomu vodíku pro elektronové teploty v rozsahu 5000–320 000 K (uvažovány pouze zářivé rekombinace a deexcitace, hladiny dělené podle n). Později zavádějí ještě případ C (Baker, Menzel, Aller (1938)) představující opticky tenkou mlhovinu, která je ozařována zředěným zářením černého tělesa za Lymanovou limitou.

Burgess (1958) použil vlastních aproximativních výpočtů pro maticové elementy (viz výše) a spočítal obsazení hladin i Balmerovy dekrementy pro atom s 12 hladinami a kontinuem při teplotě 10 000 a 20 000 K. Nepřítomnost hladin nad 12 nahradil vynásobením výsledných b_{nl} hodnotou b_{∞}/b_{12} , kde b_{∞} vzal z Menzelova a Bakerova odhadu pro A . Zahrnul však i dělení hladin podle l a ukázal tak, že obsazení jednotlivých podhladin nejsou stejná (což postulovali Baker a Menzel implicitním předpokladem $N_{nl} = \frac{2l+1}{n^2} N_n$ – tzv. degenerace orbitálního momentu hybnosti), ale v případě A jsou dokonce p -podhladiny výrazně podpopulovány (pravděpodobnost přechodu $np \rightarrow 1s$ je velmi vysoká). Upozornil také na nekonzistentnost Bakerova a Menzelova přechodu od konečného počtu hladin k nekonečnému pro B , vzhledem k vlivu srážek rostoucím se vzrůstajícím n . Nicméně připustil, že pro velmi vysoká n dojde vlivem srážek k redistribuci momentu hybnosti, a potom by Bakerův a Menzelův přístup mohl mít jisté oprávnění. Nakonec srovnal Balmerovy dekrementy

(opravené o mezihvězdné zčervenání) s pozorováními 6 mlhovin a konstatoval dobrý souhlas s případem B .

Seaton (1959b) záměrně postuloval platnost redistribuce orbitálního momentu hybnosti, aby mohl zopakovat výpočty Bakera a Menzela, ale s novým aparátem. Provedl zásadní průlom do problému řešení nekonečného počtu lineárních rovnic zavedením tzv. kaskádové matice vyjadřující pravděpodobnost zářivé deexcitace $n \rightarrow n', n > n'$ přes všechny možné kaskádové přechody. Tato matice je nezávislá na konkrétním mechanismu populace daného excitovaného stavu a stačí ji spočítat pouze jednou (ale liší se pro A a B). Je tak použitelná nejen pro řešení zářivé rekombinace, ale i např. pro srážkovou excitaci základní hladiny. Jediným předpokladem její použitelnosti je depopulace excitovaných hladin pouze zářivými přechody. Seaton pak opravil výsledky Bakera a Menzela a doplnil tabulku svých b -faktorů o hodnoty pro teplotu 2500 K (30 hladin). Používá přitom jejich Gauntovy faktory.

Následně zjištěné neshody svých výpočtů s měřením intenzit vyšších hladin H I a He II pro NGC 7027 (Seaton 1960) se pokouší vysvětlit Seaton systematickými chybami ve fotograficky určených intenzitách slabých čar. “

Další rozpracování metody kaskádové matice publikuje Pengelly a Seaton v roce 1964 (série 3 článků v jednom svazku M.N.R.A.S za sebou – Pengelly (1964), Pengelly a Seaton (1964), Seaton (1964)).

Pengelly (1964) zopakoval Seatonův výpočet se zahrnutím dělení na l -podhladiny, s použitím tabulek sil oscilátoru Green et al. (1957) a rekombinačních koeficientů Burgesse (1964). Tabeluje b_{nl} a Balmerovy dekrementy Balmerovy a Paschenovy série pro vodík a Pickeringovy a Pfundovy série pro He II (vůči $I_{4,3}$). Po srovnání s hodnotami případu B pro NGC 7662 dospívá k závěru, že lepší výsledky dávají Seatonovy výpočty nerozlišující l -podstavy, a je tedy pro typickou planetární mlhovinu s elektronovou hustotou 10^4 cm^{-3} nutno uvažovat i vliv srážek. Předpokládá však, že jeho nl -metoda je správná pro velmi řídkou mlhovinu.

To ukazují ve druhém článku Pengelly a Seaton (1964) po zahrnutí srážek metodou impaktního parametru. Odhadují, že pro mlhovinu s hustotou 10^4 cm^{-3} jsou srážky $n, l \rightarrow n, l \pm 1$ rychlejší než zářivé přechody už od 15. hladiny.

Ve 3. článku Seaton (1964) studuje průběh b -faktorů pro vysoké hladiny vodíku s $n > 40$ pomocí jednoduchých limitních aproximací. Ukazuje, že při zahrnutí srážek mezi podhladinami téže hladiny se monotonní růst b -faktorů zastaví na hodnotě 1 (tedy LTE případ), zatímco při uvažování pouze zářivých přechodů poroste nade všechny meze. Předpovídá, že při zahrnutí srážek i mezi hladinami s různým n se situace podstatně nezmění.

Konec těmto diskusím učinil Kaler (1966) svými měřeními spekter 33 planetárních mlhovin. Ukázal, že všechny pozorované intenzity čar H I a He II jsou podstatně jasnější než předvíдалy teorie a to zvláště pro vyšší hladiny. Teoretické intenzity jsou nanejvýš dolní mezí intenzit pozorovaných. Navíc zjistil, že procentuální zesílení vy-

sokých čar je stejné u vodíku i HeII (které je počítáno jako vodík pro teploty $1/Z^2$ tedy $1/4$ teploty vodíku). Nenašel ani žádnou závislost na parametrech studovaných mlhovin (např. elektronová hustota, elektronová teplota, povrchová jasnost, expanzní rychlost, poloměr, vzdálenost, teplota centrální hvězdy, galaktická poloha atd.). Nezbylo mu tedy nic jiného, než konstatovat, že současné teorie nejsou schopny tato pozorování vysvětlit.

Zásadní zlepšení nastalo i v oblasti teorie. Mihalas (1967a,b) formuluje exaktní teorii výpočtu NONLTE hvězdných atmosfér horkých hvězd. Používá přitom úplné soustavy rovnic statistické rovnováhy i přenosu záření.

Proto se pozornost teoretiků obrací k zanedbávanému případu *C*, který připouští možnost přímé excitace Balmerových čar absorpcí čárového záření centrální hvězdy planetární mlhoviny.

Seaton (1968) připouští, že by tento mechanismus mohl vysvětlit nesrovnalosti pro těžší atomy (CII, CIII, CIV, OII, OIII, OIV, OV), ale rozhodně popírá (Seaton (1969)) možnost vysvětlit absorpci stelárního záření velké (až $10\times$ větší než teoretické) intenzity vyšších čar vodíku a hélia. Argumentuje přitom poměrem pravděpodobnosti populace dané hladiny absorpci stelárního kvanta k pravděpodobnosti její populace rekombinací volného elektronu, který mu vyšel velmi malý.

Podrobněji se celou záležitostí zabýval van Blerkom (1969). Zahrnuje do soustavy ESE i přechody $1 \rightarrow n$ vyvolané absorpcí záření centrální hvězdy i blending blízkých čar u hrany série a řeší přenos tohoto záření pomocí tzv. NOS aproximace (Normalized on-the-spot approximation — resonanční foton je buď absorbován v místě své emise, nebo volně unikne z mlhoviny). Záření hvězdy aproximuje zředěnou Planckovou funkcí a předpokládá degeneraci orbitálního momentu hybnosti atomu (tím velice hrubě nahrazuje vliv srážek). Výsledky ukázaly, že Balmerovy dekrementy (i b-faktory) pro průhlednou mlhovinu ozařovanou hvězdou (případ *C*) jsou velmi podobné hodnotám pro mlhovinu opticky tlustou v Lymanových čarách (případ *B*) a tedy problém vysokých pozorovaných Balmerových dekrementů stále trvá. Navíc se zdá, že intenzity Paschenových čar (přesněji jejich Balmerovy dekrementy) odpovídají velmi dobře standardní teorii. Van Blerkom tedy vyslovuje domněnku, že by vysvětlení anomálních intenzit Balmerových čar mohlo spočívat v přepopulování vysokých hladin atomu, neumí si ale představit mechanismus, který by zároveň neovlivnil Paschenovy čáry. Zdůrazňuje proto nutnost dalších pozorování.

Celou problematiku výpočtu obsazení hladin znovu zkoumá Brocklehurst. Ve své první práci (Brocklehurst (1970) – viz níže) řešil ESE pro velké množství hladin za předpokladu statistického rozdělení energie podhladin (tzv. *n*-metoda) a ukázal důležitost zahrnutí srážek mezi vysokými hladinami s různým *n* (asi pro $n > 40$). Pro inverzi matice s řádově 1000 hladinami použil metodu kondenzace matice, zavedenou Burgessem a Summersem (1969), založenou na Lagrangeově interpolaci hodnot blízkých prvků matice.

Jelikož vždy existuje takové n_c , nad nímž jsou srážkové procesy redistribuce momentu hybnosti mnohem účinnější než zářivé procesy, je použití n -metody oprávněné pro vysoké hladiny, ale pro určení Balmerových dekrementů je nutno vzít v úvahu i dělení podle l . Proto Brocklehurst (1971) formuluje problém Balmerova dekrementu v případě B pomocí nl -metody pro $n < n_c$ se zahrnutím jak srážkového rozdělení energie působením elektrony (srážková excitace a deexcitace) pro přechody $n \rightarrow n \pm 1$ tak i rozdělení momentu hybnosti srážkami s protony pro přechody $n, l \rightarrow n, l \pm 1$. Navíc uvažuje i zářivou ionizaci základního stavu vlivem stelárního UV záření. Pro hladiny s $n > n_c$ používá n -metodu (pro kaskádování) až do jakéhosi n_{max} , pro které je příspěvek kaskádování z ještě vyšších hladin na populaci n -té hladiny zanedbatelný. Zde povoluje všechny srážkové přechody $n \rightarrow n'$ (používá poměrně složité úvahy a aproximace s použitím iterativního schématu). Výsledky v grafické podobě ilustrují přibližování obsazení podhladin ke svému statistickému rozdělení s rostoucím hlavním kvantovým číslem i přibližování LTE hodnotě pro vysoká $n \sim 40$. Pro astrofyzikální aplikace jsou tabulovány Balmerovy dekrementy Balmerových a Paschenových čar pro 40 hladin při hustotě elektronů $10^2, 10^4, 10^5$ a 10^6 cm^{-3} a elektronové teplotě 5 000 K, 10 000 K a 20 000 K, i poměry intenzit $I_{n,4}$ Pickeringovy série k intenzitě čáry $I_{4,3}$ pro HeII (bez hustoty 10^2). Nakonec provádí Brocklehurst srovnání s pozorováními NGC 7662. Ukazuje, že ve fotografických určeních intenzit, které dávaly velké odchylky od teorie, je systematická chyba, zatímco nové fotoelektricky určené Balmerovy intenzity nejen splňují různá testovací kritéria (např. $n^3 I_{n,n'}$ musí konvergovat k jisté konstantě pro velké n), ale souhlasí dobře i s teorií. Pro NGC 7662 jsou fotoelektrické intenzity o třetinu nižší než fotografické, což dává Brocklehurstovi odchylku od jeho teorie max 5% (nejvíce problematická mlhovina NGC 7027, dávající vysoké Balmerovy čáry až $5 \times$ silnější, nyní vykazuje neshodu maximálně 40%).

Tak byl nakonec vyřešen problém, jenž byl po celé desetiletí silnou motivací neustálého vylepšování teorie. Pozornost teoretiků i pozorovatelů se nyní obrátila směrem k vysokým hladinám atomu vodíku v podobě určování intenzit radio-rekombinačních čar v milimetrovém oboru radiových vln (viz následující kapitola).

K návratu problematiky nízkých hladin vodíku dochází ve snaze vysvětlit spektra obálek hvězd, nov a quasarů již se zahrnutím přenosu záření (alespoň aproximativně), popř. rozšířením výpočtů na extrémní rozsahy elektronových teplot a hustot.

V oblasti vysokých hustot provedli Drake a Ulrich (1980) rozsáhlé výpočty populací a intenzit hlavních vodíkových sérií čar pro elektronové teploty 5 000 K – 40 000 K a elektronové hustoty v rozsahu $10^8 - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ pro atom s 20 hladinami, z nichž první 4 jsou děleny podle l (vzhledem k vysokým hustotám to stačí). Počítají přitom všechny srážkové přechody $n \rightarrow n'$ a $n \rightarrow \kappa$ (podle Johnsona (1972)) a pro první 4 hladiny i srážky $n, l \rightarrow n', l'$ (řada kompilací). Zanedbání hladin nad 20 kompenzují Johnsonovým vztahem pro ionizaci do sníženého kontinua. Berou v úvahu také fo-

toionizaci z první hladiny (fotoionizaci dalších hladin úmyslně zanedbávají, aby se vyhnuli konkrétnímu tvaru kontinua ionizujícího záření). Na rozdíl od dosavadního přístupu *A*, či *B* však počítají s konečnou optickou tloušťkou všech čar použitím Sobolevovy aproximace (escape probability method) navíc se zahrnutím Starkova rozšíření křídel čar. To odpovídá geometrii nekonečné, konečně tlusté vrstvy plynu. Celý proces řešení rovnic statistické rovnováhy probíhá iterativně s počáteční hodnotou pravděpodobnosti úniku fotonu $\beta_{ij} = 1$ pro $j > 1$ a $\beta_{ij} = 0$ pro $j = 1$, jež odpovídá případu *B*. Výsledky jsou rozsáhle tabelovány s cílem poskytnout tabulky pro rychlé odhady fyzikálních parametrů odpovídajících pozorovaným intenzitám čar pro rozsáhlou škálu astrofyzikálních výzkumů.

Hummer a Storey se rozhodli znovu podrobit atom vodíku (a atomy vodíku podobné) analýze z pohledu současných znalostí atomových parametrů a lepších výpočetních možností. Proto publikují sérii článků v M.N.R.A.S pojmenovanou Recombination-line intensities for hydrogenic ions:

V první práci (Hummer a Storey 1987) se zabývají již klasickým případem *B* pro H I a He II, přičemž navazují na Brocklehursta (1971). Pro účely interpretace infračervených spekter Wolf-Rayetových hvězd, jejichž fyzikální parametry jsou mimo rozsah dosavadních výpočtů (a je nutno zahrnout vysoký počet hladin), zpřesňují Brocklehurstovu metodu zahrnutím dalších vlivů. Především zahrnují všechny elektronové srážkové přechody (Brocklehurst jenom $n \rightarrow n \pm 1$) i pro výpočet *nl*-metodou tj. pro $n < n_c$ a používají konzistentní sadu novějších srážkových účinných průřezů. Uvažují i srážkovou excitaci vyšších hladin z hladiny 2 a 3 a srážkovou ionizaci i tříčásticovou rekombinaci. Odhad rekombinace z hladin blízkých hranici kontinua provádějí numerickou integrací. Postupují iterativně, nejprve *n*-metodou, pak spočtená b_{nl} vstupují do *nl*-metody. Nekonečný počet rovnic ESE redukuje použitím metody kondenzace matice. Nakonec řeší i problém přenosu záření v čáře Lyman α pomocí odhadu parametru úniku β a ukazují, že případ *B* lze dobře použít pro všechny Lymanovy čáry kromě $L\alpha$. Výsledky tabelovali v mikrofiších pro přechody $n_U \rightarrow n_L$, kde $n_U \leq 50$ a $n_L \leq 29$.“Uvádějí tam i opacitu středu čáry, ale později zjistili (Storey a Hummer 1988), že se dopustili chyby s faktorem 2–3 ve výpočtu opacit. Nicméně pro mnoho přechodů vychází opacita záporná, což přisuzují možné inverzi populací a tedy potenciálnímu maserovému efektu. Shoda hodnot b_n s Brocklehurstem (1970) (hladiny 40–300) vychází s přesností asi 1% pro 10^4 K, a max. 3% pro 5000 K. Přitom změna hustoty o 50% způsobila změnu b_n max. o 2.5%. Tu navíc přisuzují použití jiných účinných průřezů pro srážky mezi různými hladinami *n*. Relativní intenzity čar Balmerovy série se liší od Brocklehurstových (1971) o max. 1%, pro hodnoty $n < n_c$, jinak kolem 5%, což přisuzují Brocklehurstovu nekonzistentnímu svázání *n*-metody a *nl*-metody pro $n = n_c$.

V další práci (Storey a Hummer 1988) své výpočty rozšířili i na vodíku-podobné atomy CIV, NVII a OVIII. Výpočty opět tabulovali v mikrofiších pro $N_e = 10^4$ až 10^{13} , T_e od 10 000 K do 500 000 K pro přechody $n_U \rightarrow n_L$, kde $n_U \leq 50$ a $n_L \leq 29$.

Konečně práce Hummer a Storey (1992) se podrobně zabývá otázkou konečné optické tloušťky Lymanových čar, překryvem těchto čar u hrany série, jejich absorpcí vlivem fotoionizace i působením prachu a v neposlední řadě i vlivem dlouhovlnného záření prachu. Ukazují, že všechny tyto efekty způsobují pozorovatelné změny ve spektru vodíku a hélia. Překvapivě dospívají k závěru, že relativní abundance hélia vzhledem k vodíku určené z pozorovaných rekombinačních čar pomocí klasických aproximací mohou být mnohem méně přesné než se dosud předpokládalo, což může mít vliv na současnou kosmologii. Pro výpočet optické tloušťky Lymanových čar používají metodu pravděpodobnosti úniku rozšířenou o vliv opacity kontinua (prach, fotoionizace) nazývanou metoda pravděpodobnosti ztráty – loss probability method (Hummer a Rybicki (1985)). Motivováni rovněž zájmem o radiové čáry, zahrnují ke všem předešlým efektům také fotoionizaci a stimulovanou fotorekombinaci. Zajímavé je srovnání hodnot b_n , které získali jako součet b_{nl} určených nl -metodou (totiž $b_n = \sum_l (2l+1)/n^2 b_{nl}$) a hodnot b'_n získaných n -metodou, tj. za apriorního předpokladu statistického obsazení l -podhladin, pro případy A a B . Z jejich grafů je vidět, že pro nízké hladiny jsou tyto b -faktory různé a shodují se teprve nad jistou vysokou hladinou závislou na elektronové hustotě (pro $T_e = 10^4$ K to je při $N_e = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ 50. hladina, při $N_e = 10^2 \text{ cm}^{-3}$ až 75. hladina). Přitom hodnoty pro případ A jsou vždy nižší než B , ale rozdíl je mnohem menší pro b_n než pro (n -metodou získané) b'_n a navíc jsou vždy b_n menší než b'_n . To je důsledek působení srážek mezi podhladinami (typu $n, l \rightarrow n, l'$). Je známo, že přechody typu $np \rightarrow 1s$ jsou mnohem pravděpodobnější než ostatní. Předpokládáme-li rychlou srážkovou redistribuci obsazení podhladin, budou mít všechny stavy menší životní dobu vlivem velmi krátké životní doby stavů s nízkým l . Naopak, při absenci srážkové redistribuce, nebude (dlouhá) životní doba stavů s vysokým l ovlivněna přechody $np \rightarrow 1s$, což povede k velké populaci těchto stavů, nezávislé na druhu případu (A či B). Protože se podle výše uvedené definice podílí stavy s vysokým l více na hodnotě b_n , bude proto i b_n vyšší a nezávislé od případu. Pro velmi vysoké hladiny je rychlost srážkové redistribuce úhlového momentu tak vysoká, že jsou podhladiny populovány ve shodě s Boltzmannovým rozdělením (které je předpokladem n -metody), a proto pro vysoká n platí $b_n = b'_n$. Zajímavý je i efekt neúplné absorpce čáry La vlivem konečné optické tloušťky a vlivem prachu. Ukazuje snižování obsazení i relativních intenzit čar okolo 40. hladiny, které je přímo úměrné koeficientu úniku a nepřímo úměrné elektronové hustotě. Lze tedy očekávat pro tyto hladiny snížení Balmerova dekrementu asi o 30%. Proto je jasné, že pro určování abundance vodíku v prашných oblastech vesmíru je spolehlivější použití čáry $\text{H}\beta$, než dosud užívaných čar 41α , 53α atd. Působení dlouhovlnné emise prachu se projevuje přepopulováním vyšších hladin na úkor nižších, přičemž oblast zvrátu je poměrně úzká, ležící okolo 30. hladiny. Intenzita efektu vzrůstá s klesajícím zředěním chladného záření a více citlivé jsou $n\alpha$ čáry než Balmerovy. Pro hustotu 100 cm^{-3} lze očekávat odchylky až 25% v infračervené a submilimetrové oblasti.

Rozšíření metod Pengelly, Seaton (1964) a Hummer, Storey (1987) pro teploty nižší (až do 70 K) provedl Martin (1988) motivován spektrem staré obálky novy DQ Her 1934 s teplotou 500 K. Výpočty provedl se zanedbáním všech srážkových členů (tzv. aproximace nulové hustoty). Uvádí tabulky relativních intenzit čar vodíku a hélia do 20. hladiny pro případ *A* i *B* pro teploty 20 000 K až 70 K. Zářivé rekombinace uvažoval přesně až do 60. hladiny, zbytek odhadl numerickou integrací. Tabeluje i rekombinační koeficienty, které dosud nebyly pro tyto nízké teploty uvedeny. Na základě srovnání různých pozorování novy DQ Her, dospívá k závěru, že pozorovaný Balmerův dekrement nejlépe vystihuje případ *A*, řešený *n*-metodou, která však pro limitně nízké hustoty nemá pro nízké čáry oprávnění! Stejná shoda nastává u obálky novy CP Pup 1942. Proto Martin konstatuje záhadu a vyzývá k dalším pozorováním.

Problém nízkohustotního chladného vodíku znovu zkoumá Smits (1991) použitím vlastního kaskádového modelu. Jeho přístup vychází z Brocklehursta a na rozdíl od Martina uvažuje i srážkové procesy pro nízké teploty. Jeho model se liší od modelů Brocklehursta (1970) i Hummera a Storeye (1987) použitím Johnsonových vzorců pro srážkové excitace a ionizace a zavedením maximálního n_{max} , pro které se ještě řeší rovnice ESE. To položil rovné 496, a příspěvek vyšších hladin nahradil numerickou integrací. Dále položil $n_c = 50$, tj. pro prvních 50 hladin řeší *nl*-problém, pro další už *n*-problém. Vzniklých 496 rovnic převedl kondenzací matice na matici 100×100. Získané výsledky se liší o méně než 1% od modelu Hummera a Storeye (1987) a jsou i ve výborné shodě s Martinem (1988) pro velmi nízké hustoty. Při zvyšování hustoty dochází ke zplošťování Balmerova dekrementu vlivem srážek. Počítá i model pro HeI a C,N,O. Výsledky konfrontuje se spektry několika obálek nov a opět zjišťuje neshodu ve strmosti Balmerova dekrementu jako Martin pro DQ Her. Snaží se ji vysvětlit konečnou optickou tloušťkou nízkých čar (pokud je mlhovina opticky tlustá v Balmerových čarách, ale tenká v Lymanových, bude každý absorbovaný Balmerův foton $2s \rightarrow np$ přeměněn na Lymanův $np \rightarrow 1s$, následkem čehož Balmerovy fotony ubudou. To by ale musela být základní hladina vyprazdňována mnohem rychleji než hladina $2s$). Na to je však potřeba podrobnější řešení přenosu záření. Alternativní výklad předpokládá mlhovinu obsahující dvě oblasti o různé teplotě. Nicméně opět konstatuje neuspokojivý stav současné teorie.

Randich et al. (1991) se konečně zabývají i otázkou zářivé excitace a ionizace ze všech hladin a reabsorpcí lokálně produkovaných fotonů kontinua. Jejich model obsahuje i koeficient pravděpodobnosti úniku, který má zahrnovat i gradient rychlosti v pohybujícím se prostředí tvaru konečně tlusté vrstvy. Řeší kompletní soustavu rovnic ESE pro atom s 15 hladinami, z nichž jsou první 4 dělené do podhladin. Počítají všechny vázaně-vázané a vázaně-volné interakce (i fotoexcitaci a fotoionizaci ze všech hladin vlivem dopadajícího zředěného záření) zářivé i srážkové (srážková ionizace a rekombinace podle Johnsona (1972), excitace a deexcitace podle Gionavardiho et al. (1987), srážky mezi *l*-podhladinami stejné *n*-hladiny podle

Brocklehursta (1971)). Zahrnuli dokonce i srážky s protony. Zjistili citlivost relativních intenzit čar na elektronové hustotě (např. poměr $H\alpha/H\beta$ je nejprve nízký pro nízké hustoty, kdy je mlhovina opticky tenká v Balmerových čarách, pak se začíná zvyšovat, protože se i Balmerova série stává opticky tlustou). Pro nízké teploty záření pozadí (zředěné záření hvězdy), tj. asi pod 5500 K, ve vrstvě opticky tlusté v Lymanových čarách ale tenké v ostatních jsou zářivé excitace vyvolané dopadajícím zářením mnohem efektivnější než rekombinace při populování excitovaných stavů. Proto jsou silně přepopulovány proti případu *B*. Poměrné intenzity čar jako $H\alpha/Br\alpha$, $H\alpha/H\beta$, $Br\alpha/Br\gamma$ jsou pak větší než v případě *B* a závisejí pouze na dopadajícím záření. Při zvyšování teploty záření pro danou hustotu se poměry intenzit čar blíží svým hodnotám z případu *B*, neboť rekombinační procesy se stávají důležitější než zářivé excitace. Simulaci případu *B* porovnávají s výsledky Hummera a Storeye (1987), aby si ověřili správnost svého přístupu pro případ velmi zředěného a velmi horkého záření dopadajícího na silně zředěný vodík. Konstatují výbornou shodu. Nakonec se snaží prokázat vliv dopadajícího záření srovnáním s prací Drake, Ulrych (1980), jež je svým pojetím dosti podobná. Zjišťují silné rozdíly. Obsazení 1. a 2. hladiny jim vycházejí nižší, zatímco pro hladiny vyšší než 2 je tomu naopak, což prokazuje vliv zahrnutí všech zářivých vázaně-vázaných přechodů. Zajímavé, že tento efekt trvá i pro vysoké elektronové teploty, což znamená že jsou vyšší hladiny svázány s 2. hladinou více zářivě než prostřednictvím srážek. Podobně byl prokázán i nezanedbatelný vliv fotoionizace z excitovaných hladin.

Použití teorie rekombinačních čar vodíku (a vodíku podobných atomů) pro určení relativních intenzit nízkých čar se objevuje (většinou se zahrnutím koeficientu pravděpodobnosti úniku) v celé další řadě astrofyzikálních aplikací jako např. při řešení obálek Wolf-Rayetových hvězd (Castor (1970), Castor a Van Blerkom (1970)), obálek Be hvězd (Kříž (1979)), opticky tenkých akrečních disků (Williams a Shipman (1988)) či dokonce quasarů a aktivních galaktických jader (Krolik a McKee (1978)).

Práce zabývající se velmi vysokými hladinami atomu vodíku, pozorování radiových čar

Zájem o studium velmi vysokých hladin silně zředěného vodíkového plazmatu v HII oblastech vzbudil Goldberg (1966). Zjistil, že velmi vysoké čáry mohou být značně zesíleny působením maserového efektu, což by znamenalo nepoužitelnost pozorovaných intenzit radio-rekombinačních čar pro určování elektronové teploty HII oblastí. Podle jeho odhadů je poměr intenzity čáry $H 109\alpha$ k intenzitě za podmínky LTE asi 1.4 pro mlhovinu v Orionu ($2.8 u H 164\alpha$), zatímco pro mlhovinu Rossete a čáru $H 600\alpha$ to je více než 1200. Indikátorem těchto procesů jsou velmi blízké hodnoty b_n popř. záporná excitační teplota pro dvě sousední vysoké hladiny (pro mlhovinu v Orionu, přechod $110 \rightarrow 109$, $T_e = 10^4$ K je $b_{110}/b_{109} = 1.00072$, $T_{exc} = -360$ K. Silný vliv stimulované emise (která je pak větší než spontánní emise i než absorpce)

je očekáván při velmi nízkých elektronových hustotách (řádově 10 cm^{-3}), kdy vliv srážkových přechodů, které normálně u vysokých hladin převládají, je zanedbatelný a obsazení vysokých hladin je ovlivňováno výhradně zářivými přechody.

Pro ověření vlivu stimulované emise je nezbytné znát velmi přesně obsazení velmi vysokých hladin a to předpokládá i značnou přesnost v určení atomárních parametrů (hlavně pravděpodobnosti srážkových přechodů). Již výše citovaný Brocklehurst (1970) počítá b-faktory a míru stimulované emise (vyjádřené veličinou $C_n = -\log\left(\frac{d \ln b_n}{dn}\right)$ pro hladiny 40–300, elektronovou teplotu 2500–20 000 K a elektronovou hustotu $10\text{--}10^5 \text{ cm}^{-3}$.

Interpretaci pozorování vysokých hladin vodíku se podrobně zabývá práce Brocklehursta a Seaton (1972). Obsahuje diskusi přesnosti určení atomárních parametrů vůči chybám pozorování, výpočty profilů čar a přenosu záření, a nakonec i konstrukci modelů mlhoviny v Orionu (s konstantní i proměnnou hustotou). Autoři konstatují, že chyby v určení atomárních parametrů nejsou větší než chyby pozorování. Pomocí sféricky symetrického modelu s elektronovou hustotou klesající se vzdáleností od středu se jim úspěšně daří reprodukovat intenzity a profily vysokých čar (H 109 α , H 134 α , H 166 α , H 220 α , H 137 β , H 157 γ , H 172 δ a jiných) naměřených v této mlhovině.

Velmi podrobně se problémem zabývali Burgess a Summers (1976). Do výpočtu zahrnuli veškeré možné procesy zářivé (včetně fotoexcitace, fotoionizace a stimulované emise) i srážkové. Na rozdíl od všech předchozích prací mají zahrnut i vliv externího záření dopadajícího z okolního prostředí (geometricky zředěné záření černého tělesa). Vedle silně zředěného horkého záření hvězdného uvažují dokonce i reliktové kosmologické záření (teplota 3 K, zředění 1). Jeho vliv na populace hladin je však zanedbatelný, protože velmi vysoké hladiny, kde by se mohl efekt projevit nejvíce, jsou již silně svázány srážkami. Autoři odvozují i nové aproximativní vztahy pro Gauntovy faktory s důrazem na velmi vysoké přechody. Pro výpočty používají 500 hladin, ale pomocí metody kondenzace matice jim stačí řešit soustavu pouze 30–50 rovnic. Výsledné obsazení hladin prezentují pomocí mnoha tabulek a grafů za různých fyzikálních podmínek. Simulují i případy *A*, *B* a provádějí srovnání s předchozími pracemi. V celém článku je důsledně používána *n*-metoda. Hodnoty b_n jsou tabelovány a zobrazeny v grafech pro $N_e = 10^4 \text{ cm}^{-3}$, $T_r = 5 \cdot 10^4 \text{ K}$. Je zobrazen vliv elektronové teploty pro hodnoty $T_e = 5 \cdot 10^3, 10^4$ a $2 \cdot 10^4 \text{ K}$ a zředění horkého záření velikosti $W = 10^{-12}, 10^{-16}$ a 10^{-20} . Z výpočtů vyplývají tyto závěry: Obsazení 1. hladiny je závislé na mechanismu jejího vyprazdňování (zářivý či srážkový). Je-li tento mechanismus srážkový (případ *A*), nemění se obsazení vyšších hladin se zředěním záření. Velmi je tím ale ovlivněno b_1 . Při zářivém mechanismu se hodnoty b_n se zvyšující hustotou záření zvyšují, ale pro vysoké hladiny se vliv hustoty záření neprojevuje. To je dáno tím, že srážková depopulace 1. hladiny nejvíce ovlivní obsazení nejbližších vyšších hladin. Zajímavé je, že řešení pro případ *A* s populací základní hladiny ovlivněnou zředěním záření, leží blízko Seatonova zářivého řešení,

ačkoli toto vychází z případu *B* s depopulovanou 2. hladinou.

Summers (1977) předchozí práci rozšířil o zahrnutí rozdělení spodních hladin na podhladiny podle vedlejšího kvantového čísla. Simuluje i případ *B* umělým vynulováním populace hladin $2s$ a $2p$. Konstatuje dobrou shodu s Brocklehurstem (1971). Pro atom vodíku uvažuje 220 hladin, z toho 35 nedegenerovaných. Výsledky ukazují nepoužitelnost případu *B* pro popis vysokých hladin. Velmi názorně je demonstrován vliv zředění dopadajícího záření na depopulaci základní hladiny a hladin $2s$, $2p$. Pro $T_e = 10^4$ K, teplotu záření $T_r = 5 \cdot 10^4$ K a $N_e = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ je obsazení základní hladiny při zředění záření větším než 10^{-20} asi $b_1 = 10^{13}$. Při zředění asi 10^{-20} začíná $\log b_1$ klesat téměř lineárně a pro zředění $W = 10^{-15}$ je již $b_1 = 10^9$! Pro hladiny $2s$ a $2p$ se při dalším zahušťování záření nad 10^{-16} depopulace zastaví vlivem dvoufotonového rozpadu. Autor provádí podobnou diskusi i pro hélium.

Brocklehurst a Salem (1977) se zaměřili na velmi vysoké hladiny v chladných mezihvězdných oblacích. Pro výpočty srážkových členů používají nově uveřejněné účinné průřezy podle Gee et al. (1976), jsou si však vědomi jejich nesprávnosti pro nízké energie. Pro řešení soustavy až 507 hladin používají metodu kondenzace matice, která počet rovnic redukuje na max. 75. Celé řešení je hlavně zamýšleno pro výpočet maserového zesílení vysokých čar v HI oblastech. Pro případ dotyku s horkou HII oblastí uvažují i vliv externího horkého záření přilehlé HII oblasti (s geometrickým zředěním $1/2$). Uvažují však pouze zářivé přechody $n \rightarrow n \pm 1$. Podrobně popisují použitý program a jeho jednotlivé procedury. Pro vyjádření stimulované emise používají veličinu $\beta_n = 1 - \frac{kT_e}{h} \frac{d \ln b_n}{dn}$. Jako testovací příklad uvádějí obsazení b_n a faktor stimulované emise $1-\beta$ hladin 30–207 pro oblak s hustotou 10^{-2} cm^{-3} a teplotou 500 K a k němu přiléhající zdroj záření o teplotě 10 000 K s emisní mírou $10^7 \text{ cm}^{-6} \text{ pc}$.

Značným rozšířením předchozí práce je studie Salem, Brocklehurst (1979), která se zabývá výpočtem populací vysokých hladin v obecném mezihvězdném oblaku. Uvažovány jsou pouze hladiny vodíku, neboť pro velmi vysoké hladiny je již vzdálenost dané elektronové slupky od jádra tak velká, že můžeme atom považovat za vodíku podobný. Na rozdíl od většiny předchozích prací (aproximace přenosu záření případem *A* nebo *B*) je zde řešen přenos záření (exponenciální pokles záření černého tělesa při průchodu oblakem), uvažován Voigtův profil čar a zahrnuty volně-volné přechody. K chladnému oblaku může přiléhat zdroj horkého záření. Celý problém je ale závislý na geometrickém uspořádání. Pokud je zdroj horkého záření (HII oblast) za oblakem, budou pozorované vysoké čáry zesíleny stimulovanou emisí (která sníží hodnoty b_n), bude-li před oblakem, mohou být pozorované čáry zeslabeny absorpcí. Pro ulehčení výpočtů podrobných modelů HI a HII oblastí uvádějí autoři rozsáhlé tabulky b_n a $1 - \beta_n$ hladin 50–300 pro různé modely — HII oblasti s $\log T_e = 3.0, 3.5, 3.9, 4.0, 4.1, 4.2, 4.3, 4.5$ a $\log N_e = 1.0$ až 5.0 s krokem 0.5 . Model HI oblasti je reprezentován parametry $\log T_e = 1.0$ až 3.0 s krokem 0.5 a $\log N_e = -4.0, -2.0, -1.0$ až $+2.5$ s krokem 0.5 . Na oblast dopadá záření černého tělesa 100 K teplé

a v posledních tabulkách je navíc uvažován zezadu přiléhající (zředění $W = 1/2$) zdroj horkého záření o teplotě 10 000 K s emisní mírou $10^6 \text{ cm}^{-6} \text{ pc}^{-1}$.

Podle teoretických výpočtů by tedy mělo mít zředěné záření dopadající na silně zředěné vodíkové plasma jasný vliv na obsazení vysokých čar v důsledku stimulované emise. Z hlediska pozorování však byla situace nejasná. Většina soudobých měření rádiových čar u jasných HII oblastí dávala za předpokladu LTE velice nízké elektronové teploty (pod 5000 K), zatímco výsledky optických pozorování se blížily 10 000 K. Zdálo se proto, že vliv stimulované emise je prokázán.

Shaver (1980) však řadou argumentů tento závěr zpochybnil. Vedle nepřesností pozorovacích (rádiové čáry na frekvencích kolem 1 GHz byly pozorovány jen pár let a vývoj techniky šel rychle) se odvolává na vliv tlakového rozšíření vysokých čar. Za projevy stimulované emise jsou obecně považovány nízké hodnoty poměru intenzit čar α a β se stejnou frekvencí (např. $\text{H } 137\beta/\text{H } 109\alpha$). Shaver ukazuje, že mnohem významnější redukci tohoto poměru může způsobit tlakové rozšíření, které je určeno lokální elektronovou hustotou. Stačí, aby lokální elektronová hustota byla $3 \times$ vyšší než průměrná hustota oblasti, a tlakové rozšíření vysokých čar zakryje vliv stimulované emise pro oblasti s $N_e \geq 600 \text{ cm}^{-3}$. Pro oblasti řidší jsou zase pozorovatelné čáry (i na frekvencích nižších než 1 GHz) stimulovanou emisí i tlakovým rozšířením téměř neovlivněny. Proto není možno pozorovat v galaktických HII oblastech non-LTE efekty způsobené tlakovým rozšířením ani stimulovanou emisí (což dosavadní pozorování potvrdila). Nejsilnější stimulovaná emise je totiž skryta v čarách, jež jsou tak rozšířeny, že splývají s kontínuem. Pozorovatelné jsou tedy jen čáry vznikající za podmínky LTE. Shaver tedy vyslovuje závěr, že galaktické HII oblasti jsou v LTE i pro vysoké hladiny, a jako takové se také pozorují. Proto se lze spolehnout na klasickou analýzu určování parametrů HII oblastí. Jako důkaz ukazuje modely mlhoviny v Orionu a NGC 6604 složené z několika částí s různou elektronovou hustotou. Výsledné poměry intenzit čar jsou velmi blízko LTE hodnotám, což je i ve výborné shodě s pozorováními. Shaver nicméně přiznává, že vliv stimulované emise může být značný pro zbytky supernov a hlavně pro extragalaktické objekty (podle něj je čára $\text{H } 166\alpha$ z M 82 stimulována z více jak 95 %).

V 80. letech se opět dostává do popředí otázka příspěvku absorpce Lymanových čar k populaci vysokých hladin vodíku, kterou předtím zodpověděl negativně pro Balmerovy čáry Seaton (1969).

Hoang-Binh (1983) provedl výpočty poměru R_n pravděpodobnosti populace dané hladiny absorpcí Lymanova kvanta záření centrální hvězdy k pravděpodobnosti její populace zářivou rekombinací pro různé Mihalasovy modely hvězdných atmosfér. Zjišťuje, že pro horké centrální hvězdy s $T_r > 5 \cdot 10^4 \text{ K}$ je R_n značně malé a tedy absorpce Lymanova záření nebude ovlivňovat vysoké Balmerovy čáry. (Tento závěr učinil již dříve Seaton (1969), přímé srovnání však není možné pro chyby v Seatonových výpočtech). Je-li však centrální hvězda pozdnějšího spektrálního typu s teplotou menší než $4 \cdot 10^4 \text{ K}$, může být značná velikost Lymanova skoku $J = F_{\nu+}/F_{\nu-}$

toků z obou stran hrany Lymanovy série, což podle Hoang-Binhových výpočtů vede ke změně množství stimulované emise (a tedy i sklonu závislosti b_n na n). Tento efekt, nazvaný Lymanovo pumpování, je nejvíce patrný pro čáry okolo 50. hladiny. Pro extrémně velké Lymanovy skoky může dokonce dojít k antimaserové akci, kdy jsou čáry zeslabovány a $\beta_n > 0$. V závěru upozorňuje Hoang-Binh na nutnost vzít v úvahu vliv zářivé absorpce Lymanových kvant při výpočtu modelů HII oblastí s centrální hvězdou pozdnějšího typu než O6 a zdůrazňuje lepší shodu modelu mlhoviny v Orionu s pozorováními při zahrnutí tohoto efektu, i když přesná měření této mlhoviny v milimetrovém oboru zatím chybějí.

V další práci se proto Hoang-Binh, Encrenaz a Linke (1985) zaměřili na získání milimetrových spekter molekulového mračka Orion A. Podle dosavadních LTE teorií totiž vycházela elektronová teplota z radiových pozorování asi 10 000 K, zatímco z optických asi 8500 K. Z měření množství čar α -přechodů okolo 40. hladiny usoudili na průkazný non-LTE stav těchto hladin (např. $b_{60}/b_{41} = 1.24$, $b_{63}/b_{43} = 1.7$). Při započtení non-LTE efektů pak je teplota mlhoviny asi 8500–9000 K. Vliv Lymanova pumpování však neprokázali.

Vzhledem k neúspěšnosti nalezení vlivu Lymanova pumpování v oblasti milimetrových vln studuje teoreticky Hoang-Binh (1986) jeho vliv na oblast větších vlnových délek — pro vyšší hladiny než 100. Zde již jsou všechny b-faktory velmi blízké jedné (vlivem srážek), takže zajímavý je pouze průběh diferenciální veličiny β_n , jejíž negativní hodnota představuje zesílení stimulované emise. Hoang-Binh ukázal, že v oblasti vysokých čar způsobí Lymanovo pumpování pokles stimulované emise a tedy i pokles jejich pozorovaných intenzit. Takovýto pokles by přiblížil intenzity čar jejich LTE hodnotám. Efekt Lymanova pumpování je tak ekvivalentní zvýšení elektronové hustoty o jistý faktor, ale (na rozdíl od působení více elektronů) se zde neprojeví tlakové rozšíření čar. Pro HII oblast s hvězdou o teplotě 40 000 K a hustotě $N_e = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ představuje příspěvek Lymanova pumpování pro 110. hladinu stejný pokles β_n jako vzrůst elektronové hustoty 1.6 násobně. Tím by došlo i k lepší shodě Shaverova modelu Orion A s pozorováními na nízkých frekvencích, kde se neprojevuje vliv tlakového rozšíření, na které se Shaver (1980) snaží svést odchylky od LTE modelu.

Soročenko et al. (1988) zdůrazňují nezbytnost znalosti průběhu b_n na n pro interpretaci pozorování radio-rekombinačních čar. Hlavní důraz přitom kladou na přechodovou zónu mezi 30. a 60. hladinou, kde působí ještě vliv zářivých procesů (dominujících u nízkých hladin) ale začínají mít vliv i srážky (ustavující LTE nad 80. hladinou). Z jejich měření Orionu A v čarách H 39 α , H 40 α , H 41 α , H 42 α , H 56 α , H 66 α , H 76 α , H 109 α a H 110 α vyplývá, že tyto hladiny jsou průkazné v non-LTE stavu, který je nejlépe popsán modelem Salema a Brocklehursta (1979), nicméně příspěvek fotoexcitace, propagovaný Hoang-Binhem je zanedbatelný. Pro elektronovou teplotu Orionu A pak dostali $8000 \pm 100 \text{ K}$ (i se zahrnutím Starkova rozšíření a konečné optické tloušťky).

Také Gordon (1989) se zabýval problematikou vysokých α -čar vodíku. Tyto čáry jsou většinou opticky tenké a jejich intenzity jsou určeny výslednicí dvou vzájemně si konkurujících procesů. Podpopulování vysokých hladin vzhledem k LTE populacím odpovídajícím teplotě volných elektronů způsobuje zeslabení čar, zatímco maserové zesílení dopadajícího záření jejich intenzitu zvyšuje. Pro typickou HII oblast s elektronovou teplotou 10^4 K a hustotou 10^3 cm $^{-3}$ dochází k zeslabení vlivem podpopulace pro frekvence větší než 3 GHz a maserové zesílení, účinné pro nízké frekvence mizí pro frekvence vyšší než 20 GHz. Gordon pozoroval čáry H 40 α a He 40 α (frekvence 99 GHz tj. délka 3 mm), pro které by měl být maserový efekt zanedbatelný, v radiově jasných HII oblastech W3, NGC 1976, NGC 2024, Sgr B2, M17, W49A a W75/DR21. Tato měření použil pro srovnání s pozorováními centimetrových čar H 66 α (22.3 GHz, 1.3 cm) a H 76 α (15.28 GHz, 1.96 cm), kde by se maserové zesílení již mělo projevit. Pro LTE elektronovou teplotu středu NGC 1976 (Orion A) mu z poměru b_{67}/b_{41} a b_{77}/b_{41} “ při zanedbání maserového efektu vyšlo asi 3000 K, což je velmi málo ve srovnání s 8200 K uváděnou i více jinými autory (např. Shaver 1980). Aby obdržel kýžených 8200 K, musila by intenzita čáry H 66 α zahrnovat 10% maserové zesílení. Pro H 76 α by to muselo být ještě více. Naopak pro H 40 α je maserové zesílení zcela zanedbatelné. Jelikož pro všechny HII oblasti s výjimkou NGC 2024 jsou uvedené poměry velmi odlišné od 1.0, jsou populace vodíkových hladin odlišné od LTE (to potvrzují i předchozí práce). Pro ověření možného Lymanova pumpování je nutno znát skutečnou elektronovou teplotu HII oblasti (ne teplotu za předpokladu LTE) a z ní určenou hodnotu b_n . Pro teplotu 8200 K u NGC 1976 dostaneme $b_{41} = 0.699$. Tato hodnota je podstatně nižší než b_{41} získané se započtením Lymanova pumpování. Lze tedy ve shodě s předchozími pracemi konstatovat, že pro NGC 1976 nemá Lymanovo pumpování vliv a všechny oblasti lze dobře popsat non-LTE rekombinačními modely Salema a Brocklehursta (1979).

Garay et al. (1989) pozorovali radiové kontinuum a rekombinační čáru H 76 α v kompaktních planetárních mlhovinách NGC 6369, 6543, 7009 a IC 418. Radiové mapy v čáře a kontinuu jsou si podobné pro NGC 6369 a IC 418, což svědčí o malých odchylkách od LTE u těchto objektů. Naopak u NGC 6543 je poměr intenzity čáry vůči kontinuu vyšší o 20%. Po zvážení různých možností se autoři kloní k názoru, že zvýšený poměr je způsoben stimulovanou emisí vznikající v oblasti s vyšší emisní mírou (a patrně vyšší elektronovou hustotou). Pro NGC 7009 je poměr intenzity čáry H 76 α vůči intenzitě kontinua dokonce v její severní části vyšší o 50 %. Ten autoři vysvětlují lokálním poklesem elektronové teploty zřejmě v oblasti přechodové zóny mezi neutrálním halem a plně ionizovanou oblastí. Nicméně myšlenka maserového zesílení vysoké rekombinační čáry se zde objevila i pro případ planetární mlhoviny.

Další potvrzení maserového zesilování čar provedli Martín-Pintado et al. (1989a) při pozorování emisního zdroje MWC 349, který je patrně tvořen ionizovaným hvězdným větrem s konstantní expanzní rychlostí. Zjistili, že pozorované čáry H 29 α ,

H 30 α a H 31 α jsou 50–70 $\times$ intenzivnější než H 41 α a mají navíc profil s dvěma píky, zatímco H 41 α má profil Gaussovský. Srovnáním s různými modely autoři vyvozují, že H 41 α vzniká LTE emisí v izotermální expandující obálce, zatímco nižší čáry jsou zesíleny maserovou emisí s optickou hloubkou asi -2.5 . To, že se maser objevuje i pro tak nízké milimetrové čáry (v normálních HII oblastech začíná působit až v oblasti centimetrových vln), vysvětlují na základě práce Walmsley (1990) vysokou elektronovou hustotou (asi 10^7 cm^{-3}) a expandující obálkou.

Aby mohly být interpretovány radiové čáry při tak vysoké hustotě, dopočítal Walmsley (1990) hodnoty b_n a $1 - \beta_n$ pro hladiny 20–80, elektronové teploty 5000, 10 000 a 15 000 K a elektronové hustoty $10^4 - 10^{8.5} \text{ cm}^{-3}$ (za předpokladu případu B) použitím programu Brocklehurst, Salem (1977), a doplnil tak dosud nejpodrobnější tabulky Salema a Brocklehursta (1979) o nový rozsah modelových parametrů. Zjišťuje, že pro elektronovou teplotu 10 000 K může být populace 30. hladiny ovlivněna maserem až do hustoty $3 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$. Odhaduje i vliv srážkového rozšíření čar. Ukazuje se, že 30. hladina bude znatelně srážkově rozšířena až při hustotě nad 10^8 cm^{-3} , kdy už je maserové zesílení zanedbatelné. To znamená, že pro nízké hladiny jsou oblasti ovlivněné maserem separovány od zdrojů srážkově rozšířených čar. Naopak pro vysoké čáry (nad asi 60. hladinu) mohou být pozorované profily ovlivněny srážkami v oblastech s potenciálně účinným maserovým zesílením (negativním absorpčním koeficientem). Z tohoto pohledu je možné objevit maserové zesílení spíše na vyšších frekvencích (milimetrové vlny) než v oblasti centimetrových vln, kde byly dosud rekombinační čáry studovány. Podle Walmsleye však bude hledání maseru na milimetrových vlnách ztíženo velkou nepřesností v určení intenzity kontinua v důsledku silné emise mezihvězdného prachu.

Při dalším pozorování MWC 349 (Martín-Pintado et al. (1989b)) se vliv maseru potvrdil. Odvozené LTE elektronové teploty pro milimetrové čáry jsou asi 1300 K. Navíc bylo zjištěno, že se intenzita modrého píku zvýšila za 6 měsíců skoro 2.5-násobně. Z časových změn je možno odhadnout velikost maserové oblasti na méně než $4 \cdot 10^{14} \text{ cm}$, což ale dává povrchovou jasovou teplotu vyšší než 10^6 K (tedy $28 \times$ vyšší, než efektivní teplotu horké komponenty — 35 000 K). Proto autoři začali tento objekt systematicky sledovat.

Výsledky jejich 1000-denního monitorování čar H 30 α , H 34 α , H 35 α (a pro kontrolu LTE čáry H 41 α) jsou velmi zajímavé — Thum et al. (1992). Intenzity maserem zesilovaných čar se nepravidelně mění na škále menší než 30 dní více než 4-násobně (na 1.3 mm) až 10-násobně (na 2 mm). Poměr intenzit modrého a červeného píku se měnil rychle v první polovině monitorovaného období, pak se ustálil s malými oscilacemi na hodnotě 0.9. Charakter změn tohoto poměru je ve všech čarách podobný a nebylo prokázáno žádné časové zpoždění mezi nástupem efektů na různých frekvencích. Radiální rychlosti modrého a červeného píku se mění nepravidelně ale vzájemně antisymetricky, takže průměrná centrální rychlost píků zůstává konstantní na hodnotě 8.2 km s^{-1} (patrně reprezentující radiální rychlost

centrální hvězdy). Rozdíl rychlostí obou píků systematicky roste od 43.6 km s^{-1} (pro $\text{H}35\alpha$) do 49.3 km s^{-1} (pro $\text{H}30\alpha$). Vedle vysokých maserem zesílených čar byly detekovány i slabé, velmi široké “podstavcové” struktury podobné LTE rekombinačním čarám isotropního ionizovaného větru detekovaným na 3 mm, přičemž emise v nejnižším bodu čáry (mezi píky) je asi 2-krát silnější než vrchol extrapolovaného “podstavce”. Ve křídle LTE čáry $\text{H}41\alpha$ je patrná slabá emise vysvětlitelná sekundární komponentou větru expandující rychlostí 200 km s^{-1} k pozorovateli, nebo spíše jako héliová čára $\text{He}41\alpha$. Z předchozích VLA pozorování plyne existence tenkého disku postaveného k nám hranou, z jehož roviny vystupují na obě strany ionizované laloky. Podle autorů v těchto lalocích vznikají “podstavce” a čára $\text{H}41\alpha$, přičemž laloky lze dobře popsat standardním modelem sféricky symetrického větru. Zajímavější je otázka vzniku maserové emise. Po odečtení Gaussovské extrapolace “podstavce” od profilu maserových čar (např. od silné $\text{H}30\alpha$) vznikne profil silně připomínající optické emisní čáry pozorované u Be hvězd, o kterých se všeobecně soudí, že vznikají v rotujícím disku. Po řadě dalších argumentů dospívají autoři k závěru, že maserová emise vzniká v ionizované povrchové vrstvě neutrálního rotujícího cirkumstelárního disku, jehož rotace se směrem od středu zpomaluje. Pokud by disk rotoval Keplerovou rotací, vycházela by centrální hvězda jako masivní objekt o hmotnosti asi 34 hmot Slunce (tedy O hvězda na hlavní posloupnosti nebo B veleobr). Modrý a červený pík čar pocházejí ze dvou protilehlých skvrn na okraji disku tečném k ose pohledu. Rychlá proměnnost maserové emise svědčí o nestabilitě disku, popř. o možných putujících poruchách či nehomogenitách. Ty by se však musely pohybovat rychlostí mnohem větší než je pro hvězdný vítr (asi 50 km s^{-1}) obvyklé. Aby se autoři vyhnuli exotickým spekulacím (vysokorychlostní proudy částic, komplikovaná geometrie) přicházejí s hypotézou malých variací (faktor asi 4) luminosity centrální hvězdy v Lymanovu kontinuu. Této hypotéze nahrávají i již dříve pozorované změny optického toku MWC349.

První detailní model MWC349 vytvořili Ponomarev et. al. (1994). Zkusili podrobně propočítat syntetický model maserového záření vystupujícího z rychle rotujícího Keplerovského disku, na který hledíme z boku. Ukazují, že veškeré záření opravdu vystupuje z jakési horké skvrny a odhadují parametry plazmy v místě vzniku maseru na $N_e = 3 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 11\,000 \text{ K}$.

V poslední době pokročily i pokusy prokázat vliv Lymanova pumpování, které by se mělo podle Hoang-Binha (1983) projevit pro HII oblast s centrální hvězdou pozdnějšího typu s teplotou nižší než $40\,000 \text{ K}$. Dobrým kandidátem se proto jeví oblast NGC 2024, kde na chladnější centrální hvězdu (která ovšem nebyla pozorována) ukazuje extrémně nízký poměr ionizovaného hélia k vodíku. Proto pozorovali Wilson et al. (1990) tuto oblast v čarách $\text{H}40\alpha$, $\text{H}64\alpha$ a $\text{H}90\alpha$. Porovnání výsledků měření s modelem (dvě oblasti s elektronovými hustotami 1000 a 5000 cm^{-3} a teplotou 7000 K) používajícím b-faktory podle Brocklehursta (1970) spočtené z klasické rekombinační teorie dává shodu (s chybou menší než 10 %) lepší než při započtení

Lymanova pumpování, jehož vliv tak byl popřen. Tento neúspěch Hoang-Binhovy teorie se snaží autoři vysvětlit velkou šířkou Lymanova skoku v záření ionizující hvězdy. Pro hvězdu s teplotou 30 000 K (a elektronovou teplotu mlhoviny 8000 K) by bylo pumpování výrazné při šířce Lymanova skoku menší než 0.6 Å. Pak je hloubka Lymanova skoku asi 24. Je-li však šířka skoku větší než 3 Å, bude jeho hloubka rovna 1 — tedy velikost toku záření před Lymanovou hranou je stejná jako za ní — a vliv pumpování se projeví zvýšením hodnoty b_{40} jen asi o 12 %, takže se skryje v nepřesnosti určení pozorované hodnoty. Částečnou roli může hrát i nižší elektronová teplota a vyšší hustota.

Optimistickou zprávu potvrzující možný vliv Lymanova pumpování přinesli Cersosimo a Magnani (1990) svým pozorováním třicítky HII oblastí pomocí 305 m radioteleskopu v Arecibu na vlnové délce 1.62 GHz. Z měření určili poměry intenzit blízko sebe ležících čar $H 200\beta$ a $H 159\alpha$ u 13 objektů. Přestože by teoretická hodnota tohoto poměru měla být za předpokladu LTE (Shaver 1980) asi 0.28, naměřili pro 8 objektů hodnoty podstatně nižší, ukazující tak na non-LTE efekty. Pro ostatní objekty však nejsou odchylky od LTE příliš výrazné. Podle Shavera může být vliv stimulované emise silně potlačen v důsledku existence lokálních zhuštěnin v HII oblasti obsahujících vyšší elektronové hustoty a případné snížení poměru intenzit β a α čar by mohlo být vyvolané i tlakovým rozšířením. Nicméně pozorované šířky čar u 5 objektů z oněch 8 o možném tlakovém rozšíření nesvědčí. U dvou oblastí je uvedený poměr dokonce vyšší (asi 0.35) než pro LTE. Naskýtá se proto jako jediné možné vysvětlení působení Lymanova pumpování. Přestože se jedná o dosud první pátrání po vlivu Lymanova pumpování na vlnové délce 18 cm, zdá se, že tento hypotetický efekt byl observačně potvrzen (alespoň u některých HII oblastí).

* * *

Z výše uvedených faktů je vidět, že výzkum radiových rekombinačních čar je poměrně velmi mladý, avšak velmi nadějný, slibující mnoho nových poznatků o stavu a struktuře mezihvězdného plazmatu v plynných mlhovinách i cirkumstelárních obálkách, přičemž zasahuje i do širší astrofyzikální problematiky (Be hvězdy, hvězdné větry, Wolf-Rayetovy hvězdy aj.). Pro další rozvoj tohoto výzkumu jsou vedle citlivých pozorování v oblasti milimetrových a centimetrových vln nezbytné i co nejpresnější modely vodíkové plazmy zahrnující velké množství velmi vysokých hladin. Vzhledem k možnosti maserového zesílení a ovlivnění vysokých čar Lymanovým pumpováním je nutné určovat s vysokou přesností velikosti a průběhy b-faktorů a diferenciální veličiny β_n .

Dodatek B

Ukázka odvození některých vztahů
v programu Mathematica

Dodatek C

Výpis programu GRUPY v jazyce
Fortran-77


```

c      @(#)implic.for      1.3      94/08/21
c-----
c----- implic.for -----
c-----
c
      implicit real*8 (a-h,o-z),logical*4(1)
c

c      @(#)params.for      1.3      94/08/21
c-----
c----- params.for -----
c-----
c      various parameters and constants
c
      parameter (maxgr = 500, ! maximum number of groups
*               maxlev = 500, ! maximum number of all bound
c                                     ! (explicit + band) levels+1
*               expmax = 600, ! max exponent for exp(x)
*               expmin = -50) ! max exponent for exp(-x)
c

      parameter (ckion = 7.87298489d9, !ionisation
*               ckrec = 3.26043d-6, !recombination
*               cksah = 2.41456134d15, !saha's constant
*               ckabs = 1.572874d10, !absorption
*               ckenrec= 7.10734d-17, !rec energetic rate
*               ckenion= 1.71621d-1, !ionis energetic rate
*               ckenff = 1.42556d-27, !free-free energetic rate
*               rk = 157886.606d0, !Rydberg energy/Planck c.
*               ckcol = 5.46526239d-11, !colis. rate const.
*               ry = 2.179874d-11 ) !Rydberg energy

      parameter (IPRNF=7, !.LOG file
*               IDATA=8, !.DAT file
*               IMODF=4, !model description file
*               IOUT=9 ) !.OUT file

      parameter (pnef = 0.005d0, !fine rel. precision of Ne
*               ptef =1.d0, !fine Te precision (absol)
*               pnec =0.5d0, !coarse rel prec of Ne
*               ptec =1.d2 ) !coarse Te prec

```

```

c      @(#)common.for      1.5      94/09/29
c -----
c ----- common.for -----
c -----
c      common variables
c
c      common /modelpars/
*          t1,          ! temperature of hot radiation
*          t2,          ! temperature of cold rad.
*          w1,          ! dilution of hot rad.
*          w2,          ! dilution of cold rad.
*          te,          ! electron temperature
*          dne,         ! electron density
*          dn0,         ! particle density
*          mg,          ! number of level groups
*          mhl,         ! number of levels (incl. band)+1
*          nbel1,       ! first level of energy belt
*          nthr         ! threshold of bound levels
c      common /auxvars/
*          cion(maxlev), ! array of colion(i)
*          crec(maxlev), ! array of colrec(i)
*          cext(maxlev,maxlev), ! array of CIF,CFI
*          ligff,       ! first pass of gff computing cj
*          lisrad,      ! radiative rates included
*          liscol,      ! collisional rates included
*          lnefix,      ! if the ne is fixed
*          lfound,      ! interval of Te found
*          lexist,      ! exist model file
*          teprec,      ! precison for te
*          dnelrel      ! rel. error of ne

```

```

      program grup311
c    @(#)grup31.f      7.1      94/11/27
c    fortran version of non-lte optically thin hydrogen plasma
c    COMPLETELY CHANGE ESE !!! structure
c    LTE populations for upper range band recalculated
c    radiat rates by johnson
c    MAG D01AMF integration used for semiinfinite interval
c    energetic rates functions  used  !
c    correctly taken free-free
c    convergence for LTE ok
c    colisions included !
c    colisional excitation !
c    charge conservation defined
c    half-splitting method
c    options lnefix for 2 methods
c    heuristic algorithm for Te iteration
c    changed input file format
c    output b-fac,maser,balmerdec to *.OUT
c    output of convergence to *.DAT
c    output of log shorted to egain,ebal
c    main subroutine NONLTE solves all
c    coarse and fine precision for solution ne,te
c    only 1 radiative source in this version

      include 'implic.for'
      include 'params.for'
      include 'common.for'

c ***** start of MAIN *****

c      MAIN
c      =====

c    unit numbers : 5 default input
c                  6 default output
c                  4 model description (configuration) IMODF
c                  7 output log (printer) file IPRNF
c                  8 output of convergence *.DAT
c                  9 output of b-fac, maser,bdec to *.OUT

      character*50 SCCSID
      character*12 cfgname,logname,datname,outname  ! filenames
      character*80 remstring      ! model remarks in config file
      character colmode          ! collision mode: R only radiative
                                ! processes, C only collisional,

```

```

                                ! F full physics (i.e R+C)
character*2 fixmode           ! fixmode (Ne is given = NE,
                                ! N0 is given (ne iterated) =N0

character*20 pomstr1,pomstr2   ! auxiliary string
dimension oxvec(maxgr),opopvec(maxlev),obvec(maxlev),
&          odmvec(maxlev)
data SCCSID /"%Z%%M%          %I%          %E%          \n"/
c   ierr=ieee_handler("set","common",SIGFPE_ABORT)
print *, 'enter the name of model file:'
read (*, '(A10)') cfgname
inquire (file=cfgname, exist=lexists)
if (.not.lexists) then
    stop 'model config file does not exist !!! program aborted'
end if

open(IMODF,file=cfgname,access='sequential',form='formatted',
&    status='old')

read (IMODF, '(A)') remstring ! first line is parameter description
read (IMODF, '(A)') remstring ! second line is range description

c   ----- now repeating for each model line -----

100  read(IMODF,40,END=99999) pomstr1,nbel1,nthr,fixmode,colmode,
&    dn0,t1,w1
c
c          pomstr1 ! name of logfile without LOG suffix
c          nbel1,nthr ! first level of strip, threshold
c          fixmode ! should be NE,N0
c          colmode ! should be R,C,or F
c          dn0 ! atom (or electron) density
c          t1,w1 ! hot radiation parameters
c          t2,w2 ! cold radiation parameters
40  format(1x,A8,1x,2(i5,1x),A2,1x,A1,1x,g10.4,2x,2(g8.1,1x))
if ((colmode.ne.'R').and.(colmode.ne.'C').and.
&    (colmode.ne.'F')) then
    print *, 'bad colmode read, F assumed'
    colmode='F'
end if
logname=pomstr1(:8)//'.log'
datname=pomstr1(:8)//'.dat'
outname=pomstr1(:8)//'.out'
ldebug=.false.                !for debugging only

```

```

    if (fixmode.eq.'NE') then
        lnefix='.true.'
    elseif (fixmode.eq.'N0') then
        lnefix=.false.
    else
        print *, 'bad fixmode read, NE assumed '
        lnefix=.true.
    endif
    if (lnefix) then
        print 50, dn0,t1,w1
    else
        print 60, dn0,t1,w1
    endif
50  format (1x,'Ne=',1pe10.1,2x,'T1=',1pe10.1,2x,
* 'w1=',1pe10.1//)
60  format (1x,'N0=',1pe10.1,2x,'T1=',1pe10.1,2x,
* 'w1=',1pe10.1//)
c   print *, 'only 1 radiation source, t2=expmax, w2=0'
c       t2=expmax
c       w2=0d0
mg=nbel1+1           !number of groups
if (mg.gt.maxgr) then
    print *, 'number of groups exceeds limit maxgr!!!!'
    stop 'program aborted'
end if
mhl=nthr+1
c
c --- end of input model file -----
c
    open (IPRNF,file=logname,access='sequential',form='formatted',
&       status='unknown')
    open (IDATA,file=datname,access='sequential',form='formatted',
&       status='unknown')
    open (IOUT,file=outname,access='sequential',form='formatted',
&       status='unknown')
    write (IPRNF,'(A/)') 'HII B-B and B-F transitions'
    write (IPRNF,'(A,I5)') 'last included bound level is',nthr
    write (IPRNF,'(A,I5/)') 'last explicit bound level is',nbel1
    if (colmode.eq.'R') then
        pomstr1='included'
        pomstr2='omitted'
        lisrad=.true.
        liscol=.false.
    else if (colmode.eq.'C') then
        pomstr1='omitted'

```

```

        pomstr2='included'
        lisrad=.false.
        liscol=.true.
    else if (colmode.eq.'F') then
        pomstr1='included'
        pomstr2='included'
        lisrad=.true.
        liscol=.true.
    end if
    write (IPRNF,'(A,A)') 'radiative transitions ',pomstr1
    write (IPRNF,'(A,A/)') 'collisional transitions ',pomstr2
    if (lnefix) then
        write (IPRNF,'(A,1pe8.1,A)') 'Ne=',dn0,' cm-3 '
    else
        write (IPRNF,'(A,1pe8.1,A)') 'N0=',dn0,' cm-3 '
    end if
    write (IPRNF,'(A,1pe8.1,A,9x,A,1pe8.1/)')
&      'T1=',t1,' K','w1=',w1
    write (IPRNF,'(58(1H=)/)')

c ----- end of header -----
c      writing hedears for data columns
    write(IDATA,'(A10,16(A14))') 'Te','egbbc','egbfr',
&      'egbfc','egffr',
&      'elbbc','elbfr','elbfc','elffr',
&      'egrad','egcol','elrad','elcol',
&      'egain','eloss','balance','absbal'
c ===== The whole bunch =====
    call NONLTE(lnefix,mg,mhl,dn0,t1,w1,t2,w2,
&      teout,dneout,oxvec,opopvec,obvec,odmvec)

c ----- common output routine -----

    write(IPRNF,'(58(1H=)/)')
    write(IPRNF,'(//A,1pg12.6)') ' ultimate Te =',teout
    write(*,'(A,1pg12.6)') ' ultimate Te=',teout
    if (.not.lnefix) then
        write(IPRNF,'(A,1pe14.6)') ' ultimate Ne = ',dneout
        write(*,'(A,1pe14.6)') ' ultimate Ne = ',dneout
    end if
    write(IPRNF,'(//58(1H=)/)')
    write(IOUT,'(A5,3A13)') 'n','popul','bn','maser'
    write(IPRNF,'(3x,A,4x,A,8x,A,10x,A/)') 'level',
&      'population','b(n)','1-Mbeta'

```

```

do n=1,mhl-1
  write (IPRNF,'(i5,7x,1pe11.5,5x,1pg11.5,3x,1pe11.4)') n,
&      opopvec(n), obvec(n), odmvec(n)
  write(IOUT,'(i5,3(1pe13.5))') n,
&      opopvec(n), obvec(n), odmvec(n)
end do
write(IPRNF,'(A,6x,1pe11.5,5x,1pg11.5,3x,1pe11.4)//') ' cont.',
&      opopvec(mhl),obvec(mhl),odmvec(mhl)
write (IPRNF,'(58(1H-))')
c -----
  close(IPRNF)
  close(IOUT)
  close(IDATA)
  goto 100 ! read next model line
99999 close(IMODF)
  print *, 'END OF INPUT MODEL LINES!! , BYE'
  end

c =====
  subroutine NONLTE(lnemod,ng,nlev,dn0in,t1in,w1in,t2in,w2in,
&                  teout,dneout,xvec,popvec,bvec,dmvec)
c =====
c
c   main procedure solves all ESE and ENERGETIC equil.
c
c   include 'implic.for'
c   include 'params.for'
c   include 'common.for'
c   dimension xvec(maxgr),popvec(maxlev),bvec(maxlev),dmvec(maxlev)
c   start of computing
  dn0=dn0in
  t1=t1in
  w1=w1in
  t2=t2in
  w2=w2in
  lnefix=lnemod
  mg=ng
  mhl=nlev
  if (.not.lnefix) then
c
c ----- now iterating Ne as well as Te -----
c
  dne0=0d0
  telte =t1          ! initial value=LTE

```

```

write(*,'(A,1pg15.7)') ' *** Te (LTE) =',telte
write(IPRNF,'(A,1pg15.7)') ' *** Te (LTE) =',telte
dne=SAHANE(telte)      ! complete ioniz
write(*,'(A,1pe12.5)/') ' *** Ne (LTE) =',dne
write(IPRNF,'(A,1pe12.5)/') ' *** Ne (LTE) =',dne
te=telte

c=====
c      grand iteration Ne,te

      dnerel=pnec
      teprec=ptec
      lfine=.false.
300  continue
      dne0=dne
      tein=te
      write(*,'(A,1pe12.5)') ' *** Ne (iter) =',dne
      write(IPRNF,'(A,1pe12.5)') ' *** Ne (iter) =',dne
      call SOLVTE(tein,teout,xvec,popvec,bvec,dmvec)
      te=teout

c ---- now iterating Ne , Te is fixed!
c
      write (*,'(/A)') ' +++ Te fixed, iterating Ne...'
      write (IPRNF,'(/A)') ' +++ Te fixed, iterating Ne...'

      dne1=0d0
      do while (abs(dne-dne1)/dne.gt.dnerel)
      dne1=dne
      lnefix=.false.  !solving for Ne
      call ESE(ebal,xvec,popvec,bvec,dmvec)
      dne=(xvec(mg) + dne1)/2d0  ! new N+ = Ne, xvec(mg)==Ne
c                                     ! average to smooth oscillations
      write (*,'(A,3(1pe12.5))') ' Ne(old,new,ave)=',
&      dne1,xvec(mg),dne
      write (IPRNF,'(A,3(1pe12.5))') ' Ne(old,new,ave)=',
&      dne1,xvec(mg),dne
      end do          ! of Ne iteration
c ----- now compare to original Ne before iterating Te -----
      if ((abs((dne-dne0)/dne).gt.dnerel)) goto 300
c ----- now we have dne, te and go to new granditeration
      if (.not.lfine) then          ! coarse iteration done
      dnerel=pnef                  ! change precision
      teprec=ptef
      lfine=.true.

```

```

        write(IPRNF,'(//A)') ' *** coarse Ne,Te found -
&        solving precisely'
        write(*,'(//A)') ' *** coarse Ne,Te found - solving precisely'
        goto 300
    end if
else
c     .... here is the end of one method ... for Ne + Te iter.
c =====
c     for lnefix=true, Ne is given fixed, solving only Te
c =====
c
    dne=dn0
    tein =t1          ! initial value=LTE
    teprec=ptef
    write(*,'(A,1pg15.7)') ' *** Te (LTE) =' ,tein
    write(IPRNF,'(A,1pg15.7)') ' *** Te (LTE) =' ,tein
    call SOLVTE(tein,teout,xvec,popvec,bvec,dmvec)
    endif

c ----- common part - return -----

    dneout=dne
    teout=te
    return
end          ! of subroutine NONLTE

subroutine SOLVTE(tein,teout,xvec,popvec,bvec,dmvec)
c =====
c
c     solves the Te by half-splitting method
c
c
    include 'implic.for'
    include 'params.for'
    include 'common.for'

    dimension popvec(maxlev),bvec(maxlev),dmvec(maxlev),xvec(maxgr)
    lnefix=.true.
    lfound=.false.      ! the interval with the radix is found
    llgff=.true.
    te=tein
    write(*,'(A,1pg15.7)') ' T0(init)=' ,te
    write(IPRNF,'(A,1pg15.7)') ' T0(init)=' ,te

```

```

c  ----- first find the right interval with root -----

call ESE(ebal,xvec,popvec,bvec,dmvec) ! energetic function
if (ebal.lt.0d0) then
    tin2=tein      ! we have Te above the correct value
    hit=-0.9d0     ! and the radix is to the left,
    fleft=0d0      ! new interval is <0,0.9>*te
else
    tin1=tein      ! we have Te below the correct value
    hit=0.1d0      ! and the radix is to the right
    fleft=1.d0     ! new interval is <1,1.1>*te
end if
do while (.not.lfound) ! looking for interval limits
te=(fleft+abs(hit))*tein
write(*,'(A,1pg15.7)') ' T0(iter)=' ,te
write(IPRNF,'(A,1pg15.7)') ' T0(iter)=' ,te
l1gff=.true.
call ESE(ebal,xvec,popvec,bvec,dmvec)
if (ebal.lt.0d0.and.hit.lt.0d0) then
    hit=hit*0.5d0 ! halving the step, look left
    tin2=te       ! the temporary right edge is here
elseif (ebal.lt.0d0.and.hit.gt.0d0) then
    lfound=.true. ! we have both edges now
    tin2=te       ! but Te is to the right of the root
elseif (ebal.gt.0d0.and.hit.lt.0d0) then
    lfound=.true. ! we have both edges now
    tin1=te       ! Te is to the left of the root
elseif (ebal.gt.0d0.and.hit.gt.0d0) then
    hit=2d0*hit   ! we must go more to the right
    tin1=te       ! but we have the left edge
end if
end do

c  ----- now we have the smallest interval around the root

write(*,'(/A,2(1pg15.7))') ' *** interval for Te is',tin1,tin2
write(IPRNF,'(/A,2(1pg15.7))') ' *** interval for Te is',tin1,tin2

c  ----- now iteration of Te by half-splitting -----

do while (abs(tin2-tin1).gt.teprec)
tin3=(tin1+tin2)/2.d0
te=tin3
l1gff=.true.
write(IPRNF,'(A,1pg15.7)') ' Te (iter) =' ,te
write(*,'(A,1pg15.7)') ' Te (iter) =' ,te
lnefix=.true. ! now fix the ne

```

```

call ESE(ebal,xvec,popvec,bvec,dmvec) ! Ne is fixed
ebal3=ebal
if (ebal3.gt.0d0) tin1=tin3 ! root in right halfinterval
if (ebal3.lt.0d0) tin2=tin3 ! root in left halfinterval
end do ! end of iteration Te with fixed ne
write(*,'(A,1pg15.7)') ' *** final Te =',te
write(IPRNF,'(A,1pg15.7)') ' *** final Te =',te
teout=te
return
end ! of subroutine SOLVTE

c =====

double precision function SAHANE(teq)
c =====
c
c computes the partition sum and quadratic equation for dne (==Ne)
c
include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'
sum=0d0
do n=1,nthr
an=dfloat(n)
sum=sum+exp(rk/teq/an**2)*an**2
end do
sum=sum/cksah/teq**1.5d0
c now the ionization fraction and dne
pom=(sqrt(1.d0+dn0*sum)-1.d0)/sum
SAHANE=pom
end

c =====

subroutine ESE(ebalan,xvec,popvec,bvec,dmvec)
c =====
c
c computes system of ESE and energetic balance
c
include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'
dimension amat(maxgr,maxgr)
dimension popvec(maxlev),bvec(maxlev),dmvec(maxlev),xvec(maxgr)

```

```

c      assembling of rate matrix amat (probability grouping)
c      note ! transposition of the matrix is done already here !
c
      call COLBF(nthr+1)          ! prepares array of collisional rates
      call COLBB                  ! ionization with lowered continuum
      do ni=1,mg-2
        do nf=ni+1,mg-2
          amat(ni,nf)=PFI(ni,nf)
          amat(nf,ni)=PIF(ni,nf)
        end do
        amat(ni,mg-1)=PRI(ni)
        amat(mg-1,ni)=PIR(ni)
        amat(ni,mg)= PCI(ni)
        amat(mg,ni)= PIC(ni)
      end do
      amat(mg-1,mg)=PCR()
      amat(mg,mg-1)=PRC()

      if (ldebug) then
        call PRINTMATRIX(amat)
      end if
      call TRANSMAT(amat)
      call GAUSS(amat,xvec)
      if (ldebug) then
        call PRINTVEC(xvec)
      end if
      call POPLTE(xvec,popvec)
      call BFACTORS(popvec,bvec)
      call MASERBETA(bvec,dmvec)
      ebalan=EBALANCE(popvec)
      return
      end      ! of subroutine ESE

function PLNKBB (ni,nf)
c      =====
c
c      value of Planck function in frequency corresp. to transition i->f
c
      include 'implic.for'
      include 'params.for'
      include 'common.for'
      ai=dfloat(ni)
      af=dfloat(nf)

```

```

factor=(af*af-ai*ai)/af/af/(ai*ai)
pomex1=rk/t1*factor
pomex2=rk/t2*factor
if (pomex1.gt.expmax) then
    Print *, 'PLANKBB-of (ni,nf)=' ,ni,nf,pomex1
    PLNKBB=exp(-pomex1)
elseif (pomex1.lt.expmin) then
    Print *, 'PLANKBB-uf (ni,nf)=' ,ni,nf,pomex1
    PLNKBB=1.d0/pomex
else
    if (pomex2.gt.expmax) pomex2=expmax
c   PLNKBB=w1/(exp(pomex1)-1.0)+w2/(exp(pomex2)-1.0)
    PLNKBB=w1/(exp(pomex1)-1.d0)
endif
end

function PLNKBF (n,en)
c   =====
c
c   Plack function for b-f transition
c   n .... bound level
c   en .. energy in Ry
c
    include 'implic.for'
    include 'params.for'
    include 'common.for'
    an=dfloat(n)
    factor=1.d0/an/an+en
    pomex1=rk/t1*factor
    pomex2=rk/t2*factor
    if (pomex1.gt.expmax) then
c       Print *, 'PLANKBF-of (ni,en)=' ,n,en,pomex1
        PLNKBF=exp(-pomex1)
    elseif (pomex1.lt.expmin) then
        Print *, 'PLANKBF-uf (ni,en)=' ,n,en,pomex1
        PLNKBF=1.d0/pomex
    else
        PLNKBF=w1/(exp(pomex1)-1.d0)
c   PLNKBF=w1/(exp(pomex1)-1.d0)+w2/(exp(pomex2)-1.d0)
    endif
end

```

```

function PLNKFF (u)
c =====
c
c Plack function for f-f transition
c zatim je tvar pro planckovo zarení
c include 'implic.for'
c include 'params.for'
c include 'common.for'
c pomex1=te/t1*u
c pomex2=te/t2*u
c if (pomex1.gt.expmax) pomex1=expmax
c if (pomex2.gt.expmax) pomex2=expmax
c PLNKFF=w1/(exp(pomex1)-1.d0)+w2/(exp(pomex2)-1.d0)
c if (pomex1.gt.expmax) then
c   Print *, 'PLANKFF-of (te,t1,u)=' ,te,t1,u,pomex1
c   PLNKFF=exp(-pomex)
c elseif (pomex1.lt.expmin) then
c   Print *, 'PLANKFF-of (te,t1,u)=' ,te,t1,u,pomex1
c   PLNKFF=1.d0/pomex
c else
c   PLNKFF=w1/(exp(pomex1)-1.d0)
c endif
c end

function EXPINT(n,x)
c =====
c
c exponential integral for positive arguments after
c KURUCZ, program ATLAS, SAO special report No. 309 1970

c include 'implic.for'
c parameter(
+ a0=-44178.5471728217,a1=57721.7247139444,a2=9938.31388962037,
+ a3=1842.11088668000,a4=101.093806161906,a5=5.03416184097568,
+ b0=76537.3323337614,b1=32597.1881290275,b2=6106.10794245759,
+ b3=635.419418378382,b4=37.2298352833327,

+ c0=4.65627107975096e-7,
+ c1=0.999979577051595,c2=9.04161556946329,c3=24.3784088791317,
+ c4=23.0192559391333,c5=6.90522522784444,c6=0.430967839469389,

+ d1=10.0411643829054,d2=32.4264210695138,d3=41.2807841891424,
+ d4=20.4494785013794,d5=3.31909213593302,d6=0.103400130404874,

+ e0=-0.999999999998447,

```

```

+ e1=-26.6271060431811,e2=-241.055827097015,e3=-895.927957772937,
+ e4=-1298.85688746484,e5=-545.374158883133,e6=-5.66575206533869,

+ f1=28.6271060422192,f2=292.310039388533,f3=1332.78537748257,
+ f4=2777.61949509163,f5=2404.01713225909,f6=631.657483280800)

x1=-1d20
if (x.ne.x1) then
    ex=exp(-x)
x1=x
if (x.gt.4.0) then
pom=(x+f1+(f2+(f3+(f4+(f5+f6/x)/x)/x)/x)/x)
ex1=(ex+ex*(e0+(e1+(e2+(e3+(e4+(e5+e6/x)/x)/x)/x)/x)/x)/pom)/x
elseif (x.gt.1.0) then
pom=d6+(d5+(d4+(d3+(d2+(d1+x)*x)*x)*x)*x)
ex1=ex*(c6+(c5+(c4+(c3+(c2+(c1+c0*x)*x)*x)*x)*x)/pom
elseif (x.gt.0.) then
pom=b0+(b1+(b2+(b3+(b4+x)*x)*x)*x)
ex1=(a0+(a1+(a2+(a3+(a4+a5*x)*x)*x)*x)/pom-log(x)
else
ex1=0.0
endif
endif
endif
expi=ex1
if (n.ge.2) then
do i=1,n-1
expi=(ex-x*expi)/i
enddo
endif
EXPINT=expi
end

```

```

function GAUNTI (m,n)
c =====
c
c b-b Gaunt factor after Johnson 1972

include 'implic.for'

am=dfloat(m)
an=dfloat(n)
x=1-(am/an)**2

```

```

    if (m.ge.3) then
      g0=(-0.1296/am+0.2328)/am+0.9935
      g1=-((0.5299/am-0.5598)/am+0.6282)/am
      g2=((1.470/am-1.181)/am+0.3887)/(am**2)
    elseif (m.eq.2) then
      g0=1.0785
      g1=-0.2319
      g2=0.02947
    elseif (m.eq.1) then
      g0=1.1330
      g1=-0.4059
      g2=0.07014
    endif
    GAUNTI=(g2/x+g1)/x+g0
  end

function GA (m,n)
c =====
c
c Integrated GAUNTI in aproximated polyniomial
c
  include 'implic.for'

  am=dfloat(m)
  an=dfloat(n)
  x=1-(am/an)**2
  if (m.ge.3) then
    g0=(-0.1296/am+0.2328)/am+0.9935
    g1=-((0.5299/am-0.5598)/am+0.6282)/am
    g2=((1.470/am-1.181)/am+0.3887)/(am**2)
  elseif (m.eq.2) then
    g0=1.0785
    g1=-0.2319
    g2=0.02947
  elseif (m.eq.1) then
    g0=1.1330
    g1=-0.4059
    g2=0.07014
  endif
  GA=((g2/x/5+g1/4)/x+g0/3)/x/x/x
end

```

```

function GAUNT2 (m,en)
c =====
c
c bound-free Gaunt factor after Johnson 1972
c
include 'implic.for'

am=dfloat(m)
x=1d0+en*am**2
if (m.ge.3) then
g0=(-0.1296/am+0.2328)/am+0.9935
g1=-((0.5299/am-0.5598)/am+0.6282)/am
g2=((1.470/am-1.181)/am+0.3887)/am**2
elseif (m.eq.2) then
g0=1.0785
g1=-0.2319
g2=0.02947
elseif (m.eq.1) then
g0=1.1330
g1=-0.4059
g2=0.07014
endif
GAUNT2=(g2/x+g1)/x+g0
end

subroutine COMPCJ(x,cj)
c =====
c computes coefficients for free-free gaunt factors
c after Hummer 1991

include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'
double precision dij(0:7,0:10),cj(0:7)
data dij /
* 8.986940175d00,-4.009515855d00, 8.808871266d-1, 2.640245111d-2,
* -4.580645915d-2,-3.568055702d-3, 2.827798067d-3, 3.365860195d-4,
* -8.006936989d-1, 9.466021705d-1, 9.043402532d-2,-9.608451450d-2,
* -1.885629865d-2, 1.050313890d-2, 2.800889961d-3,-1.078209202d-3,
* -3.781305103d-1, 1.102726332d-1,-1.543619180d-2, 8.310561114d-3,
* 2.179620525d-2, 4.259726289d-3,-4.181588794d-3,-1.770208330d-3,
* 1.877213132d-2,-1.004885705d-1,-5.483366378d-2,-4.520154409d-3,
* 8.366530426d-3, 3.700273930d-3, 6.889320423d-4, 9.460313195d-5,
* 7.300158392d-2, 3.576785497d-3,-4.545307025d-3,-1.017965604d-2,

```

```

* -9.530211924d-3,-3.450186162d-3, 1.040482914d-3, 1.407073544d-3,
* -1.744671550d-3, 2.864013856d-2, 1.903394837d-2, 7.091074494d-3,
* -9.668371391d-4,-2.999107465d-3,-1.820642230d-3,-3.874082085d-4,
* -1.707268366d-2,-4.694254776d-3, 1.311691517d-3, 5.316703136d-3,
* 5.178193095d-3, 2.451228935d-3,-2.277321615d-5,-8.182359057d-4,
* 2.567331664d-4,-9.155339970d-3,-6.997479192d-3,-3.571518641d-3,
* -2.096101038d-4, 1.553822487d-3, 1.509584686d-3, 6.212627837d-4,
* 4.098322531d-3, 1.635218463d-3,-5.918883504d-4,-2.333091048d-3,
* -2.484138313d-3,-1.359996060d-3,-5.371426147d-5, 5.553549563d-4,
* 3.837562402d-5, 2.938325230d-3, 2.393747064d-3, 1.328839809d-3,
* 9.135013312d-5,-7.137252303d-4,-7.656848158d-4,-3.504683798d-4,
* -8.491991820d-4,-3.615327726d-4, 3.148015257d-4, 8.909207650d-4,
* 9.869737522d-4, 6.134671184d-4, 1.068883394d-4,-2.046080100d-4/
do j=0,7
  sum=dij(j,0)/2.d0
  tnm1=1.d0
  tn=x
  do i=1,10
    sum=sum+tn*dij(j,i)
    tnp1=2*x*tn-tnm1
    tnm1=tn
    tn=tnp1
  end do
  cj(j)=sum
end do
return
end

double precision function GAUFF(g2,u)
c =====
c
c computes free-free Gaunt factor after Hummer

include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'
double precision cj(0:7)
save cj,xg ! save for reusing
xu=(2*u+2.5d0)/5.5d0
if (l1gff) then ! new value of Te given
  xg=g2/3.d0 ! recalculate array cj
  call COMPCJ(xg,cj)
  l1gff=.false.
end if
sum=cj(0)/2.d0

```

```

tnm1=1.d0
tn=xu
do j=1,7
  pom=cj(j)
  sum=sum+tn*pom
  tnp1=2.d0*xu*tn-tnm1
  tnm1=tn
  tn=tnp1
end do
GAUFF=sum
return
end

function RIF(ni,nf)
c =====
c
c radiative transition rate ni->nf upwards
c
  include 'implic.for'
  include 'params.for'
  include 'common.for'

  di=dfloat(ni)
  df=dfloat(nf)
  pom=1.0/(df*df-di*di)/df/(di*di*di)*GAUNTI(ni,nf)
  RIF=pom*ckabs*PLNKBB(ni,nf)
end

function RFI(ni,nf)
c =====
c
c radiative transition rate nf->ni downwards
c
  include 'implic.for'
  include 'params.for'
  include 'common.for'

  di=dfloat(ni)
  df=dfloat(nf)
  pom=1.0/(df*df-di*di)/di/(df*df*df)*GAUNTI(ni,nf)
  RFI=pom*ckabs*(PLNKBB(ni,nf)+1.0)
end

```

```

function COLI1()
c =====
c
c collisional ionization from 1s after Scholz T.T.,
c Walters H.R., ApJ 1991,380,302-306
c
c include 'implic.for'
c include 'params.for'
c include 'common.for'
c
c double precision acof(0:6)
c data acof /-9.61443d1,3.79523d1,-7.96885d0,
* 8.83922d-1,-5.34513d-2,1.66344d-3,-2.08888d-5 /
c y=log(Te)
c sum=acof(6)
c do i=6,1,-1
c   sum=sum*y+acof(i-1)
c end do
c gamma=exp(sum)*exp(-rk/Te)
c COLI1=gamma
c return
c end

function COLE12()
c =====
c
c collisional excitation 1s-2s,p after Scholz T.T
c Walters H.R., ApJ 1991,380,302-306
c
c include 'implic.for'
c include 'params.for'
c include 'common.for'
c
c double precision bcof(0:5,3)
c double precision ccof(0:5,3)
c data bcof/-3.299613d1, 1.858848d1, -6.052265d0,
* 8.603783d-1, -5.717760d-2, 1.45133d-3,
* 2.869759d2, -1.077956d2, 1.524107d1,
* -1.080538d0, 3.836975d-2, -5.467273d-4,
* -2.7604708d3, 7.9339351d2, -9.1198462d1,
* 5.1993362d0, -1.4685343d-1, 1.6404093d-3/
c data ccof/
* -1.630155d2, 8.795711d1, -2.057117d1,
* 2.359573d0, -1.339059d-1, 3.021507d-3,
* 5.279996d2, -1.939399d2, 2.718982d1,

```

```

* -1.883399d0,  6.462462d-2, -8.811076d-4,
* -2.8133632d3, 8.1509685d2, -9.4418414d1,
* 5.4280565d0, -1.5467120d-1, 1.7439112d-3/
if ((Te.ge.2d3).and.(Te.lt.6d4)) then
    itrng=1
elseif ((Te.ge.6d4).and.(Te.lt.6d6)) then
    itrng=2
elseif ((Te.ge.6d6).and.(Te.lt.1d8)) then
    itrng=3
else
    print *, 'Te out of definition for col rates'
endif
y=log(Te)
sum=bcof(5,itrng)
do i=5,1,-1
    sum=sum*y+bcof(i-1,itrng)
end do
gam12s=exp(sum)*exp(-rk/Te*0.75d0)
sum=ccof(5,itrng)
do i=5,1,-1
    sum=sum*y+ccof(i-1,itrng)
end do
gam12p=exp(sum)*exp(-rk/Te*0.75d0)
gama=gam12s+gam12p
COLE12=gama
return
end

subroutine COLBF(n0)
c =====
c
c collisional ionization after Johnson 1972
c n0 is the highest bound level in the false continuum
c
include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'

an0=dfloat(n0)
do m=2,mhl-1
    am=dfloat(m)
    x0=1-(am/an0)**2
    dAm=1.960280512*am*GA(m,n0)
    if (m.eq.1) then
        rn=0.45
    end if
end do

```

```

        bsn=-0.603
    else
        rn=1.94*exp(-1.57*log(am))
        bsn=((36.24-28.09/am)/am-18.63)/am+4.0)/am
    endif
    dBm=2d0/3d0*am**2/x0*((bsn/x0+2.0)/x0+3.0)
    ym=x0/am**2*rk/Te
    zm=x0*(rn+rk/Te/am**2)
    pom1=dAm*(EXPINT(1,ym)/ym-EXPINT(1,zm)/zm)
    pom2=(dBm-dAm*log(2d0*am*am/x0))
    pom3=EXPINT(2,ym)-2d0*EXPINT(1,ym)+exp(-ym)/ym
    pom4=EXPINT(2,zm)-2d0*EXPINT(1,zm)+exp(-zm)/zm
    pom=ckcol*sqrt(te)*2.0*am*am/x0*(ym**2)*
&      (pom1+pom2*(pom3-pom4))
    cion(m)=pom
    crec(m)=pom*dne*am**2*exp(rk/te/am**2)/te**1.5d0/cksah
end do
cion(1)=COLI1()
crec(1)=cion(1)*dne*exp(rk/te)/te**1.5d0/cksah
return
end

```

```

subroutine COLBB
c =====
c
c collisional excitation rate after Johnson 1972
c
include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'

do m=2,mhl-3
    do n=m+1,mhl-1
        am=dfloat(m)
        an=dfloat(n)
        x=1-(am/an)**2
        Amn=1.960280512d0*(am/an)**3*2.0/(x**4)*GAUNTI(m,n)
        if (m.eq.1) then
            rn=0.45
            bsn=-0.603
        else
            rn=1.94*exp(-1.57*log(am))
            bsn=((36.24-28.09/am)/am-18.63)/am+4.0)/am
        endif
    end do
end do

```

```

        Bmn=4*am**4/an**3/x**2*((bsn/x+4.0/3.0)/x+1.0)
        y=x/(am**2)*rk/Te
        z=x*(rn+rk/Te/(am**2))
        pom1=Amn*(EXPINT(1,y)*(1/y+0.5)-EXPINT(1,z)*(1/z+0.5))
        pom2=(Bmn-Amn*log(2d0*am*am/x))
        pom3=(EXPINT(2,y)/y-EXPINT(2,z)/z)
        pom=ckcol*sqrt(Te)*2*am*am/x*(y**2)
&        *(pom1+pom2*pom3)
        cext(m,n)=pom
        cext(n,m)=exp(rk/te*(1.d0/am**2-1.d0/an**2))
&        *pom*(am/an)**2
    end do
end do
cext(1,2)=COLE12()
cext(2,1)=cext(1,2)*0.25d0*exp(rk/te*0.75d0)
return
end

```

```

function CIF(ni,nf)
c  =====
c
c  collisional transition rate ni->nf upwards
c
    include 'implic.for'
    include 'params.for'
    include 'common.for'
    CIF=dne*cext(ni,nf)
end

```

```

function CFI(ni,nf)
c  =====
c
c  collisional transition rate nf->ni downwards
c
    include 'implic.for'
    include 'params.for'
    include 'common.for'
    integer ni,nf
    CFI=dne*cext(nf,ni)
end

```

```
c ===== now the block of integrands for D01AMF follows.=====.
```

```

      function FREC(en)
c      =====
c
c      recombination function
c      en is energy in Ry

      include 'implic.for'
      include 'params.for'
      include 'common.for'

      common /telnum/ kount
      common /nn/ n
      an=dfloat(n)
      kount=kount+1
      pomex=rk/te*en
      if (pomex.gt.expmax) pomex=expmax
      FREC=exp(-pomex)/(1d0+an**2*en)*GAUNT2(n,en)
&    *(1d0+PLNKBF(n,en))    !tady zatim bez stimulace
      end

```

```

      function FION(en)
c      =====
c
c      ionization function
c

      include 'implic.for'
      include 'params.for'
      include 'common.for'
      common /telnum/ kount
      common /nn/ n
      dn=dfloat(n)
      kount=kount+1
      FION=1d0/(1d0+dn*dn*en)*PLNKBF(n,en)*GAUNT2(n,en)
      return
      end

```

```

function FENREC(en)
c =====
c
c recombination energy function
c en is energy in Ry

include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'
common /telnum/ kount
common /nn/ n
an=dfloat(n)
kount=kount+1
pomex=rk/te*en
if (pomex.gt.expmax) pomex=expmax
FENREC=exp(-pomex)/(1d0+an**2*en)*en*GAUNT2(n,en)
& *(1d0+PLNKBF(n,en)) !tady zatim bez stimulace
end

function FENION(en)
c =====
c
c ionization energy function
c

include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'

common /telnum/ kount
common /nn/ n
dn=dfloat(n)
kount=kount+1
FENION=1d0/(1d0+dn*dn*en)*en*PLNKBF(n,en)*GAUNT2(n,en)
return
end

function FG3AVE(u)
c =====
c
c free-free Gaunt factor averaged

include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'

```

```

common /free/ gam2
FG3AVE=exp(-u)*GAUFF(log10(gam2),log10(u))
return
end

function FG3JNU(u)
c =====
c
c free-free Gaunt factor averaged with radiation factor

include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'
common /free/ gam2
FG3JNU=(1d0-exp(-u))*GAUFF(log10(gam2),log10(u))*
&      PLNKFF(u)
return
end

double precision function DNAGQUAD(FUNC,DLOWER)
c =====
c
c driver for D01AMF
* D01AMF Example Program Text
* Mark 14 Revised. NAG Copyright 1989.
* .. Parameters ..
INTEGER      LW, LIW
PARAMETER    (LW=800,LIW=LW/4)
INTEGER      NOUT
PARAMETER    (NOUT=6)
* .. Scalars in Common ..
INTEGER      KOUNT
* .. Local Scalars ..
DOUBLE PRECISION A,DLOWER, ABSERR, EPSABS, EPSREL, RESULT
INTEGER      IFAIL, INF
* .. Local Arrays ..
DOUBLE PRECISION W(LW)
INTEGER      IW(LIW)
* .. External Functions ..
DOUBLE PRECISION FUNC
EXTERNAL      FUNC
* .. External Subroutines ..

```

```

EXTERNAL          D01AMF
*    .. Common blocks ..
COMMON            /TELNUM/KOUNT
*    .. Executable Statements ..
EPSABS = 0.0D0
EPSREL = 1.0D-6
A = DLOWER
INF = 1
KOUNT = 0
IFAIL = -1
*
CALL D01AMF(FUNC,A,INF,EPSABS,EPSREL,RESULT,ABSERR,W,LW,IW,LIW,
+          IFAIL)
*
IF (IFAIL.NE.0) WRITE (NOUT,99996) 'IFAIL = ', IFAIL
DNAGQUAD=result
return
*
99999 FORMAT (1X,A,F10.4)
99998 FORMAT (1X,A,D9.2)
99997 FORMAT (1X,A,1pe20.10)
99996 FORMAT (1X,A,I4)
END

```

c ===== end of integrands =====

```

function PRAION(n)
c =====
c
c    radiative ionization
c
c    include 'implic.for'
c    include 'params.for'
c    include 'common.for'
c    common /nn/ np
c    external FION
c    np=n
c    an=dfloat(np)
c    allint=DNAGQUAD(FION,0D0)
c    PRAION=allint/an**3*ckion
c    return
c    end

```

```

function PRAREC(n)
c =====
c
c radiative recombination
c
include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'
common /nn/ np
external FREC
np=n
an=dfloat(np)
allint=DNAGQUAD(FREC,0D0)
PRAREC=allint/an/te**1.5*ckrec*dne
return
end

function FFEMIS()
c =====
c
c free-free emission = bremsstrahlung

include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'

common /free/ gam2
external FG3AVE
gam2=rk/te
allint=DNAGQUAD(FG3AVE,0D0)
FFEMIS=allint*sqrt(te)*ckenff*dne
return
end

function FFABS()
c =====
c
c free-free absorption

include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'

common /free/ gam2

```

```

external FG3JNU
gam2=rk/te
allint=DNAGQUAD(FG3JNU,0D0)
FFABS=allint*sqrt(te)*ckenff*dne
return
end

function PCOION(n)
c =====
c
c collisional ionization
c
c
c include 'implic.for'
c include 'params.for'
c include 'common.for'
PCOION=dne*cion(n)
return
end

function PCOREC(n)
c =====
c
c collisional recombination
c
c
c include 'implic.for'
c include 'params.for'
c include 'common.for'

PCOREC=dne*crec(n)
end

function WRAION(n)
c =====
c
c energy of radiative ionization

c include 'implic.for'
c include 'params.for'
c include 'common.for'

common /nn/ np
external FENION

```

```

np=n
an=dfloat(np)
allint=DNAGQUAD(FENION,0D0)
WRAION=allint/an**3*ckenion
return
end

function WRAREC(n)
c =====
c
c energy of radiative recombination
c
include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'

common /nn/ np
external FENREC
np=n
an=dfloat(np)
allint=DNAGQUAD(FENREC,0D0)
WRAREC=allint/an/t**1.5*ckenrec*dne
return
end

double precision function WCOION(n)
c =====
c
c energy of collisional ionization

include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'

an=dfloat(n)
pom=PCOION(n)*1d0/an**2*ry
WCOION=pom
return
end

```

```

double precision function WCOREC(n)
c =====
c
c energy of collisional recombination

include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'

an=dfloat(n)
pom=PCOREC(n)*1d0/an**2*ry
WCOREC=pom
return
end

function PIF(ni,nf)
c =====
c
c complete rate of b-b transition ni->nf
c
include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'

sum=0d0
radpart=0d0
colpart=0d0
if (lisrad) radpart=RIF(ni,nf)
if (liscol) colpart=CIF(ni,nf)
PIF=radpart+colpart
end

function PFI(ni,nf)
c =====
c
c complete rate of b-b transition nf->ni
c
include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'
sum=0d0
radpart=0d0

```

```

colpart=0d0
if (lisrad) radpart=RFI(ni,nf)
if (liscol) colpart=CFI(ni,nf)
PFI=radpart+colpart
end

function PIR(ni)
c =====
c
c complete rate transition from ni to reduced (lowered) continuum
c
  Include 'implic.for'
  include 'params.for'
  include 'common.for'

  sum=0d0
  di=dfloat(ni)
  do nf=nbel1,nthr
    radpart=0d0
    colpart=0d0
    if (lisrad) radpart=RIF(ni,nf)
    if (liscol) colpart=CIF(ni,nf)
    sum=sum+(radpart+colpart)
  end do
  PIR=sum
end

function PRI(ni)
c =====
c
c complete rate of transition from lowered continuum to n
c

  include 'implic.for'
  include 'params.for'
  include 'common.for'

  s1=0d0
  s2=0d0
  do nf=nbel1,nthr
    df=dfloat(nf)
    pom=df*df*exp(rk/te/df**2)
    radpart=0d0
    colpart=0d0

```

```

        if (lisrad) radpart=RFI(ni,nf)
        if (liscol) colpart=CFI(ni,nf)
        s1=s1+(radpart+colpart)*pom
        s2=s2+pom
    end do
    PRI=s1/s2
end

```

```

function PIC(ni)
c =====
c
c complete rate of transition from level i to continuum
c
    include 'implic.for'
    include 'params.for'
    include 'common.for'

    sum=0d0
    radpart=0d0
    colpart=0d0
    if (lisrad) radpart=PRAION(ni)
    if (liscol) colpart=PCOION(ni)
    PIC=radpart+colpart
end

```

```

function PCI(ni)
c =====
c
c complete rate of transition from continuum to level i
c
    include 'implic.for'
    include 'params.for'
    include 'common.for'

    radpart=0d0
    colpart=0d0
    if (lisrad) radpart=PRAREC(ni)
    if (liscol) colpart=PCOREC(ni)
    PCI=radpart+colpart
end

```

```

function PRC()
c =====
c
c transition from lowered continuum to continuum
c
include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'

s1=0d0
s2=0d0
do ni=nbell,nthr
    di=dfloat(ni)
    pom=di**2*exp(rk/te/di**2)
    radpart=0d0
    colpart=0d0
    if (lisrad) radpart=PRAION(ni)
    if (liscol) colpart=PCOION(ni)
    s1=s1+(radpart+colpart)*pom
    s2=s2+pom
end do
PRC=s1/s2
end

function PCR()
c =====
c
c complete rate from continuum to lowered continuum
c
include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'

sum=0d0
do ni=nbell,nthr
    radpart=0d0
    colpart=0d0
    if (lisrad) radpart=PRAREC(ni)
    if (liscol) colpart=PCOREC(ni)
    sum=sum+(radpart+colpart)
end do
PCR=sum
end

```

```

double precision function EBALANCE(popvec)
c =====
c
c energetic balance (gains-losses)
c egbfr=energy gain bf radiative
c elbbc=energy loss bb collisional
c
c include 'implic.for'
c include 'params.for'
c include 'common.for'
c
c dimension popvec(maxlev)
c egbfr=0d0
c elbfr=0d0
c egbbc=0d0
c elbbc=0d0
c egbfc=0d0
c elbfc=0d0
c egffr=0d0
c elffr=0d0
c ---- collisional deexcitation and excitation
c do ni=1,mhl-2
c   do nf=ni+1,mhl-1
c     ani=dfloat(ni)
c     anf=dfloat(nf)
c     term=1d0/ani**2-1d0/anf**2
c     if (liscol) then
c       elbbc=elbbc+popvec(ni)*CIF(ni,nf)*term*ry
c       egbbc=egbbc+popvec(nf)*CFI(ni,nf)*term*ry
c     end if
c   end do
c end do
c do ni=1,mhl-1
c ---- ionizations and recombinations
c   if (lisrad) then
c     egbfr=egbfr+WRAION(ni)*popvec(ni)
c     elbfr=elbfr+WRAREC(ni)*popvec(mhl)
c   end if
c   if (liscol) then
c     elbfc=elbfc+WCOION(ni)*popvec(ni)
c     egbfc=egbfc+WCOREC(ni)*popvec(mhl)
c   end if
c end do

```

```

c ----- free-free absorption and emission

      egffr=FFABS()*popvec(mhl)
      elffr=FFEMIS()*popvec(mhl)
c ----- various summaries -----
      egrad=egbfr+egffr
      egcol=egbbc+egbfc
      elrad=elbfr+elffr
      elcol=elbbc+elbfc
      egain=egrad+egcol
      eloss=elrad+elcol
      balance=egain-eloss
      rbalance=(egain-eloss)/(egain+eloss)*2.d0 ! relative error
      write(*,'(A,8(1pg18.4))') ' gain loss rbalance=',
&      egain,eloss,rbalance
      write(IPRNF,'( 4(1pg10.2),1x,2(1pg10.2),1x,1pg10.2)')
&      egrad,egcol,elrad,elcol,
&      egain,eloss,rbalance
      EBALANCE=balance
c ---- output of all energetic rates to *.DAT file
      write(IDATA,'(f10.1,16(e14.4))') Te,egbbc,egbfr,egbfc,egffr,
&      elbbc,elbfr,elbfc,elffr,
&      egrad,egcol,elrad,elcol,
&      egain,eloss,balance,abs(balance)
      return
      end

      subroutine TRANSMAT(amat)
c      =====
c
c      transformation of rate matrix for inversion
c
      include 'implic.for'
      include 'params.for'
      include 'common.for'
      dimension amat(maxgr,maxgr)
      do i=2,mg
        amat(i,i)=0d0
        do j=mg,1,-1
          if (i.ne.j) amat(i,i)=amat(i,i)+amat(j,i)
        end do
      end do

```

```

do i=2,mg
  do j=1,mg
    if(i.ne.j) amat(i,j)=-amat(i,j)
  end do
end do
do i=1,mg-1
  if (lnefix) then
    amat(1,i)=0d0          ! for fixed Ne last eq. N+=Ne
  else
    amat(1,i)=1d0          ! particle conservation
  end if
end do
if (lnefix) then
  amat(1,mg)=1d0
else
  amat(1,mg)=2d0          ! Ne+N+ = 2Ne = 2N+
end if
return
end

subroutine GAUSS(amat,xvec)
c =====

c  standard inversion of rate matrix by Gauss elimination

include 'implic.for'
include 'params.for'
include 'common.for'

dimension amat(maxgr,maxgr),xvec(maxgr)
do i=2,mg
  xvec(i)=0d0
end do
if (lnefix) then
  xvec(1)=dne              ! Ne = N+
else
  xvec(1)=dn0              ! N0 = sum(Nj)+N+
end if

```

```

do n=mg,2,-1
  pom=amat(n,n)
  xvec(n)=xvec(n)/pom
  do j=1,n
    amat(n,j)=amat(n,j)/pom
  end do
  do i=n-1,1,-1
    do j=n-1,1,-1
      amat(i,j)=amat(i,j)-amat(n,j)*amat(i,n)
    end do
    xvec(i)=xvec(i)-xvec(n)*amat(i,n)
  end do
end do
do i=1,mg
  xvec(i)=xvec(i)/amat(i,i)
  do j=i+1,mg
    xvec(j)=xvec(j)-xvec(i)*amat(j,i)
  end do
end do
return
end

subroutine POPLTE(xvec,popvec)
c =====
c
c calculates LTE populations of non-explicit levels
c from known nR=xvec(mg-1)
c
  include 'implic.for'
  include 'params.for'
  include 'common.for'

  dimension xvec(maxgr),popvec(maxlev)
  psum=0d0
  do ni=nbel1,nthr
    di=dfloat(ni)
    psum=psum+di**2*exp(rk/Te/di**2)
  end do
  do ni=nbel1,nthr
    di=dfloat(ni)
    popvec(ni)=xvec(mg-1)/psum*di**2*exp(rk/Te/di**2)
  end do

```

```

do i=1,nbel1-1
    popvec(i)=xvec(i)
end do
popvec(mhl)=xvec(mg)
return
end

subroutine BFACTORS(popvec,bvec)
c =====
c
c calculates vector of b-factors from population vector xvec
c
    include 'implic.for'
    include 'params.for'
    include 'common.for'

    dimension popvec(maxlev),bvec(maxlev)
    pomex=-rk/te
    if (pomex.lt.expmin) pomex=expmin
    do n=1,mhl-1
        an=dfloat(n)
        bvec(n)=popvec(n)/popvec(mhl)/dne*cksah*te**1.5d0
&        *exp(pomex/an**2)/an**2
    end do
    bvec(mhl)=0d0          !undefined, zero it
    return
end

subroutine MASERBETA(bvec,dmvec)
c =====
c
c calculates maser factor 1-beta
c
    include 'implic.for'
    include 'params.for'
    include 'common.for'

    dimension bvec(maxlev),dmvec(maxlev)
    pomex=rk/te
    if (pomex.gt.expmax) pomex=expmax
    do n=1,mhl-2
        an=dfloat(n)
        pom=exp(-pomex*(1d0/an**2-1d0/(an+1)**2))

```

```

        dmvec(n)=1d0-(1d0-bvec(n+1)/bvec(n)*pom)/(1d0-pom)
    end do
    dmvec(mhl-1)=0d0          ! undefined - clear for graph
    dmvec(mhl)=0d0           ! dtto
    return
end

subroutine PRINTMATRIX(amat)
c  =====
c  control print of matrix
c
    include 'implic.for'
    include 'params.for'
    include 'common.for'

    dimension amat(mg,mg)
    do i=1,mg
        do j=1,mg
            write(IPRNF,'(2i5,1pe10.3)/') i,j,amat(j,i)
        end do
        write(IPRNF,'(A)//') ' '
    end do
    return
end

subroutine PRINTVEC(xvec)
c  =====
c  control print af given vector
c
    include 'implic.for'
    include 'params.for'
    include 'common.for'

    dimension xvec(mg)
    do i=1,mg
        write(IPRNF,'(i5,1pe14.6)/') i,xvec(i)
    end do
    return
end

```

Dodatek D

Ukázka průběhu výpočtu pro vstupní
modelový soubor `modenlte`

----- MODENLTE -----

filename	nbel1	nthr	NE C	density	T1 (hot)	W1 (hot)
bshellN0	200	200	N0 F	1.d15	1.5d4	1.d-3
pnebulN0	200	250	NE R	1.d04	4.d4	1.d-14

----- BSHELLN0.LOG -----

HII B-B and B-F transitions

last included bound level is 200

last explicit bound level is 200

radiative transitions included

collisional transitions included

N0= 1.0E+15 cm-3

T1= 1.5E+04 K w1= 1.0E-03

=====

```

*** Te (LTE) = 15000.00
*** Ne (LTE) = 4.40401E+14
*** Ne (iter) = 4.40401E+14
T0(init)= 15000.00
  1.25E+04  8.72E+13  1.38E+05  8.72E+13  8.72E+13  8.72E+13  -3.75E-07
T0(iter)= 13500.00
  3.46E+04  1.02E+14  1.34E+05  1.02E+14  1.02E+14  1.02E+14  -3.78E-07
T0(iter)= 6750.000
  1.14E+06  2.71E+14  1.07E+05  2.71E+14  2.71E+14  2.71E+14  3.75E-08

*** interval for Te is 6750.000 13500.00
Te (iter) = 10125.00
  2.27E+05  1.56E+14  1.22E+05  1.56E+14  1.56E+14  1.56E+14  -8.64E-08
Te (iter) = 8437.500
  4.74E+05  2.01E+14  1.15E+05  2.01E+14  2.01E+14  2.01E+14  1.82E-09
Te (iter) = 9281.250
  3.26E+05  1.76E+14  1.19E+05  1.76E+14  1.76E+14  1.76E+14  -3.07E-08
Te (iter) = 8859.375
  3.91E+05  1.88E+14  1.17E+05  1.88E+14  1.88E+14  1.88E+14  -1.20E-08
Te (iter) = 8648.438
  4.30E+05  1.94E+14  1.16E+05  1.94E+14  1.94E+14  1.94E+14  -4.63E-09
Te (iter) = 8542.969

```

```

4.51E+05 1.97E+14 1.16E+05 1.97E+14 1.97E+14 1.97E+14 -1.27E-09
Te (iter) = 8490.234
4.63E+05 1.99E+14 1.15E+05 1.99E+14 1.99E+14 1.99E+14 2.84E-10
*** final Te = 8490.234

+++ Te fixed, iterating Ne...
2.75E+04 1.19E+13 6.87E+03 1.19E+13 1.19E+13 1.19E+13 2.84E-10
Ne(old,new,ave)= 4.40401E+14 2.62308E+13 2.33316E+14
2.59E+04 6.72E+12 7.36E+03 6.72E+12 6.72E+12 6.72E+12 4.12E-09
Ne(old,new,ave)= 2.33316E+14 5.30310E+13 1.43173E+14
2.39E+04 4.15E+12 7.40E+03 4.15E+12 4.15E+12 4.15E+12 7.34E-09
Ne(old,new,ave)= 1.43173E+14 8.69753E+13 1.15074E+14
*** Ne (iter) = 1.15074E+14
T0(init)= 8490.234
2.45E+04 3.55E+12 7.87E+03 3.55E+12 3.55E+12 3.55E+12 8.95E-09
T0(iter)= 9339.258
1.85E+04 3.11E+12 8.12E+03 3.11E+12 3.11E+12 3.11E+12 -2.28E-08

*** interval for Te is 8490.234 9339.258
Te (iter) = 8914.746
2.12E+04 3.32E+12 8.00E+03 3.32E+12 3.32E+12 3.32E+12 -4.41E-09
Te (iter) = 8702.490
2.28E+04 3.43E+12 7.94E+03 3.43E+12 3.43E+12 3.43E+12 2.82E-09
Te (iter) = 8808.618
2.20E+04 3.37E+12 7.97E+03 3.37E+12 3.37E+12 3.37E+12 -6.57E-10
Te (iter) = 8755.554
2.24E+04 3.40E+12 7.95E+03 3.40E+12 3.40E+12 3.40E+12 1.10E-09
*** final Te = 8755.554

+++ Te fixed, iterating Ne...
2.23E+04 3.39E+12 7.92E+03 3.39E+12 3.39E+12 3.39E+12 1.10E-09
Ne(old,new,ave)= 1.15074E+14 1.14586E+14 1.14830E+14

*** coarse Ne,Te found - solving precisely
*** Ne (iter) = 1.14830E+14
T0(init)= 8755.554
2.22E+04 3.38E+12 7.92E+03 3.38E+12 3.38E+12 3.38E+12 1.15E-09
T0(iter)= 9631.110
1.68E+04 2.96E+12 8.17E+03 2.96E+12 2.96E+12 2.96E+12 -3.96E-08

*** interval for Te is 8755.554 9631.110
Te (iter) = 9193.332
1.93E+04 3.16E+12 8.05E+03 3.16E+12 3.16E+12 3.16E+12 -1.58E-08
Te (iter) = 8974.443

```

```

2.07E+04 3.27E+12 7.98E+03 3.27E+12 3.27E+12 3.27E+12 -6.59E-09
Te (iter) = 8864.999
2.15E+04 3.32E+12 7.95E+03 3.32E+12 3.32E+12 3.32E+12 -2.58E-09
Te (iter) = 8810.276
2.19E+04 3.35E+12 7.93E+03 3.35E+12 3.35E+12 3.35E+12 -7.38E-10
Te (iter) = 8782.915
2.21E+04 3.37E+12 7.93E+03 3.37E+12 3.37E+12 3.37E+12 2.12E-10
Te (iter) = 8796.596
2.20E+04 3.36E+12 7.93E+03 3.36E+12 3.36E+12 3.36E+12 -2.31E-10
Te (iter) = 8789.756
2.20E+04 3.36E+12 7.93E+03 3.36E+12 3.36E+12 3.36E+12 1.90E-11
Te (iter) = 8793.176
2.20E+04 3.36E+12 7.93E+03 3.36E+12 3.36E+12 3.36E+12 -8.54E-11
Te (iter) = 8791.466
2.20E+04 3.36E+12 7.93E+03 3.36E+12 3.36E+12 3.36E+12 -5.58E-11
Te (iter) = 8790.611
2.20E+04 3.36E+12 7.93E+03 3.36E+12 3.36E+12 3.36E+12 -3.29E-11
*** final Te = 8790.611

```

```

+++ Te fixed, iterating Ne...
2.22E+04 3.39E+12 8.00E+03 3.39E+12 3.39E+12 3.39E+12 -3.29E-11
Ne(old,new,ave)= 1.14830E+14 1.15863E+14 1.15347E+14

```

```

ultimate Te = 8790.61
ultimate Ne = 1.153469E+14

```

level	population	b(n)	1-Mbeta
1	7.50286E+14	1.7775	-1.0165E-06
2	1.18652E+09	0.49775	6.8835E-02
3	3.88937E+08	0.87862	7.8307E-02
4	3.20317E+08	0.97455	3.8592E-02
5	3.40534E+08	0.99328	1.8478E-02
6	3.95505E+08	0.99779	9.5484E-03
7	4.72223E+08	0.99914	5.3543E-03
8	5.66277E+08	0.99962	3.2205E-03
9	6.75833E+08	0.99981	2.0517E-03
10	8.00011E+08	0.99990	1.3701E-03
11	9.38345E+08	0.99994	9.5114E-04
12	1.09057E+09	0.99997	6.8201E-04

13	1.25652E+09	0.99998	5.0259E-04
14	1.43610E+09	0.99999	3.7911E-04
15	1.62923E+09	0.99999	2.9178E-04
16	1.83588E+09	0.99999	2.2853E-04
17	2.05600E+09	1.0000	1.8176E-04
18	2.28958E+09	1.0000	1.4654E-04
19	2.53659E+09	1.0000	1.1958E-04
20	2.79702E+09	1.0000	9.8647E-05
21	3.07087E+09	1.0000	8.2174E-05
22	3.35813E+09	1.0000	6.9058E-05
23	3.65879E+09	1.0000	5.8504E-05
24	3.97284E+09	1.0000	4.9927E-05
25	4.30028E+09	1.0000	4.2894E-05
26	4.64111E+09	1.0000	3.7081E-05
27	4.99532E+09	1.0000	3.2239E-05
28	5.36292E+09	1.0000	2.8177E-05
29	5.74390E+09	1.0000	2.4748E-05
30	6.13827E+09	1.0000	2.1836E-05
31	6.54601E+09	1.0000	1.9348E-05
32	6.96713E+09	1.0000	1.7212E-05
33	7.40162E+09	1.0000	1.5369E-05
34	7.84950E+09	1.0000	1.3772E-05
35	8.31075E+09	1.0000	1.2381E-05
36	8.78537E+09	1.0000	1.1165E-05
37	9.27337E+09	1.0000	1.0099E-05
38	9.77474E+09	1.0000	9.1592E-06
39	1.02895E+10	1.0000	8.3288E-06
40	1.08176E+10	1.0000	7.5926E-06
41	1.13591E+10	1.0000	6.9379E-06
42	1.19140E+10	1.0000	6.3539E-06
43	1.24822E+10	1.0000	5.8314E-06
44	1.30638E+10	1.0000	5.3629E-06
45	1.36588E+10	1.0000	4.9416E-06
46	1.42672E+10	1.0000	4.5618E-06
47	1.48889E+10	1.0000	4.2187E-06
48	1.55240E+10	1.0000	3.9081E-06
49	1.61725E+10	1.0000	3.6262E-06
50	1.68344E+10	1.0000	3.3699E-06
51	1.75096E+10	1.0000	3.1364E-06
52	1.81982E+10	1.0000	2.9233E-06
53	1.89001E+10	1.0000	2.7285E-06
54	1.96155E+10	1.0000	2.5500E-06
55	2.03442E+10	1.0000	2.3862E-06
56	2.10863E+10	1.0000	2.2357E-06
57	2.18417E+10	1.0000	2.0972E-06

58	2.26105E+10	1.0000	1.9696E-06
59	2.33927E+10	1.0000	1.8517E-06
60	2.41883E+10	1.0000	1.7428E-06
61	2.49973E+10	1.0000	1.6420E-06
62	2.58196E+10	1.0000	1.5485E-06
63	2.66552E+10	1.0000	1.4618E-06
64	2.75043E+10	1.0000	1.3812E-06
65	2.83667E+10	1.0000	1.3063E-06
66	2.92425E+10	1.0000	1.2365E-06
67	3.01317E+10	1.0000	1.1714E-06
68	3.10342E+10	1.0000	1.1107E-06
69	3.19501E+10	1.0000	1.0539E-06
70	3.28794E+10	1.0000	1.0008E-06
71	3.38221E+10	1.0000	9.5115E-07
72	3.47781E+10	1.0000	9.0460E-07
73	3.57475E+10	1.0000	8.6095E-07
74	3.67303E+10	1.0000	8.2000E-07
75	3.77264E+10	1.0000	7.8148E-07
76	3.87359E+10	1.0000	7.4529E-07
77	3.97588E+10	1.0000	7.1120E-07
78	4.07951E+10	1.0000	6.7910E-07
79	4.18447E+10	1.0000	6.4884E-07
80	4.29077E+10	1.0000	6.2033E-07
81	4.39841E+10	1.0000	5.9340E-07
82	4.50738E+10	1.0000	5.6797E-07
83	4.61769E+10	1.0000	5.4389E-07
84	4.72934E+10	1.0000	5.2113E-07
85	4.84232E+10	1.0000	4.9956E-07
86	4.95665E+10	1.0000	4.7912E-07
87	5.07231E+10	1.0000	4.5982E-07
88	5.18930E+10	1.0000	4.4144E-07
89	5.30764E+10	1.0000	4.2399E-07
90	5.42731E+10	1.0000	4.0747E-07
91	5.54831E+10	1.0000	3.9175E-07
92	5.67066E+10	1.0000	3.7686E-07
93	5.79434E+10	1.0000	3.6262E-07
94	5.91936E+10	1.0000	3.4914E-07
95	6.04572E+10	1.0000	3.3624E-07
96	6.17341E+10	1.0000	3.2388E-07
97	6.30244E+10	1.0000	3.1221E-07
98	6.43281E+10	1.0000	3.0107E-07
99	6.56451E+10	1.0000	2.9040E-07
100	6.69756E+10	1.0000	2.8027E-07
101	6.83193E+10	1.0000	2.7046E-07
102	6.96765E+10	1.0000	2.6123E-07

103	7.10470E+10	1.0000	2.5232E-07
104	7.24309E+10	1.0000	2.4383E-07
105	7.38282E+10	1.0000	2.3570E-07
106	7.52389E+10	1.0000	2.2786E-07
107	7.66629E+10	1.0000	2.2038E-07
108	7.81003E+10	1.0000	2.1326E-07
109	7.95510E+10	1.0000	2.0643E-07
110	8.10152E+10	1.0000	1.9989E-07
111	8.24927E+10	1.0000	1.9367E-07
112	8.39835E+10	1.0000	1.8752E-07
113	8.54878E+10	1.0000	1.8165E-07
114	8.70054E+10	1.0000	1.7615E-07
115	8.85364E+10	1.0000	1.7077E-07
116	9.00807E+10	1.0000	1.6560E-07
117	9.16385E+10	1.0000	1.6072E-07
118	9.32096E+10	1.0000	1.5591E-07
119	9.47940E+10	1.0000	1.5128E-07
120	9.63919E+10	1.0000	1.4695E-07
121	9.80031E+10	1.0000	1.4268E-07
122	9.96277E+10	1.0000	1.3853E-07
123	1.01266E+11	1.0000	1.3465E-07
124	1.02917E+11	1.0000	1.3078E-07
125	1.04582E+11	1.0000	1.2712E-07
126	1.06260E+11	1.0000	1.2366E-07
127	1.07951E+11	1.0000	1.2021E-07
128	1.09656E+11	1.0000	1.1694E-07
129	1.11374E+11	1.0000	1.1381E-07
130	1.13106E+11	1.0000	1.1072E-07
131	1.14851E+11	1.0000	1.0782E-07
132	1.16609E+11	1.0000	1.0504E-07
133	1.18381E+11	1.0000	1.0233E-07
134	1.20166E+11	1.0000	9.9714E-08
135	1.21964E+11	1.0000	9.7218E-08
136	1.23776E+11	1.0000	9.4733E-08
137	1.25601E+11	1.0000	9.2380E-08
138	1.27440E+11	1.0000	9.0025E-08
139	1.29291E+11	1.0000	8.7777E-08
140	1.31157E+11	1.0000	8.5599E-08
141	1.33035E+11	1.0000	8.3482E-08
142	1.34927E+11	1.0000	8.1633E-08
143	1.36833E+11	1.0000	7.9491E-08
144	1.38751E+11	1.0000	7.7454E-08
145	1.40684E+11	1.0000	7.5722E-08
146	1.42629E+11	1.0000	7.3932E-08
147	1.44588E+11	1.0000	7.2401E-08

148	1.46560E+11	1.0000	7.0584E-08
149	1.48546E+11	1.0000	6.8880E-08
150	1.50545E+11	1.0000	6.7280E-08
151	1.52557E+11	1.0000	6.5728E-08
152	1.54583E+11	1.0000	6.4232E-08
153	1.56622E+11	1.0000	6.2956E-08
154	1.58674E+11	1.0000	6.1322E-08
155	1.60740E+11	1.0000	6.0057E-08
156	1.62819E+11	1.0000	5.8830E-08
157	1.64912E+11	1.0000	5.7719E-08
158	1.67018E+11	1.0000	5.6561E-08
159	1.69137E+11	1.0000	5.5180E-08
160	1.71270E+11	1.0000	5.4027E-08
161	1.73416E+11	1.0000	5.2830E-08
162	1.75575E+11	1.0000	5.1589E-08
163	1.77748E+11	1.0000	5.0575E-08
164	1.79934E+11	1.0000	4.9610E-08
165	1.82134E+11	1.0000	4.8615E-08
166	1.84347E+11	1.0000	4.7590E-08
167	1.86573E+11	1.0000	4.6361E-08
168	1.88813E+11	1.0000	4.5777E-08
169	1.91066E+11	1.0000	4.4851E-08
170	1.93332E+11	1.0000	4.3842E-08
171	1.95612E+11	1.0000	4.2934E-08
172	1.97905E+11	1.0000	4.2135E-08
173	2.00212E+11	1.0000	4.1645E-08
174	2.02531E+11	1.0000	4.0563E-08
175	2.04865E+11	1.0000	3.9928E-08
176	2.07211E+11	1.0000	3.9153E-08
177	2.09571E+11	1.0000	3.8474E-08
178	2.11945E+11	1.0000	3.8073E-08
179	2.14331E+11	1.0000	3.7180E-08
180	2.16732E+11	1.0000	3.6605E-08
181	2.19145E+11	1.0000	3.6367E-08
182	2.21572E+11	1.0000	3.5355E-08
183	2.24012E+11	1.0000	3.4832E-08
184	2.26466E+11	1.0000	3.4279E-08
185	2.28933E+11	1.0000	3.3577E-08
186	2.31413E+11	1.0000	3.3120E-08
187	2.33907E+11	1.0000	3.2923E-08
188	2.36414E+11	1.0000	3.2210E-08
189	2.38934E+11	1.0000	3.1716E-08
190	2.41468E+11	1.0000	3.1024E-08
191	2.44015E+11	1.0000	3.0474E-08
192	2.46576E+11	1.0000	3.0027E-08

193	2.49150E+11	1.0000	2.9602E-08
194	2.51737E+11	1.0000	2.8972E-08
195	2.54338E+11	1.0000	2.8359E-08
196	2.56952E+11	1.0000	2.7577E-08
197	2.59579E+11	1.0000	2.5476E-08
198	2.62220E+11	1.0000	1.1361E-08
199	2.64874E+11	1.0000	1.5289E-07
200	2.67542E+11	1.0000	0.0000E+00
cont.	1.15863E+14	0.	0.0000E+00

Literatura

- Aller L.H.: 1987, *Physics of Thermal Gaseous Nebulae: Physical Processes in Gaseous Nebulae*, Astrophysics and space science library vol. 112, Reidel, Dordrecht
- Anderson L.S.: 1989, *Astrophys. J.* 339, 558–579
- Arnaud M., Rothenflug R.: 1985, *Astron. Astrophys. Suppl.* 60, 425-457
- Baker J.G., Menzel D.H.: 1938, *Astrophys. J.* 88, 52-64
- Baker J.G., Menzel D.H., Aller L.H.: 1938, *Astrophys. J.* 88, 422-428
- Berger J.M.: 1956, *Astrophys. J.* 124, No. 2, 550-554
- Boardman W.J.: 1964, *Astrophys. J. Suppl.* 9, 185-192
- Brocklehurst M.: 1970, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 148, 417-434
- Brocklehurst M.: 1971, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 153, No. 4, 471-490
- Brocklehurst M., Salem M.: 1977, *Computer Physics Communications* , No. 13, 39-48
- Brocklehurst M., Seaton M.J.: 1972, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 157, No. 2, 179-210
- Burgess A.: 1958, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 118, No. 5, 477-495
- Burgess A.: 1965, *Mem. Roy. Astron. Soc.* 69, 1-24
- Burgess A., Seaton M.J.: 1960, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 120, No. 2, 121-151
- Burgess A., Summers H.P.: 1969, *Astrophys. J.* 157, 1007-1021
- Burgess A., Summers H.P.: 1976, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 174, 345-391
- Burgess A., Tully J.A.: 1992, *Astron. Astrophys.* 254, 436-453
- Carson T.R.: 1988, *Astron. Astrophys. Suppl.* 75, No. 3, 385-389
- Castor J.I.: 1970, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 149, No. 2, 111-127
- Castor J.I., Van Blerkom D.: 1970, *Astrophys. J.* 161, No. 2, 485-502
- Cersosimo J.C., Magnani L.: 1990, *Astron. Astrophys.* 239, 287-300
- Chang E.S., Avrett E.H., Loeser R.: 1991, *Astron. Astrophys.* 247, 580-583
- Cillié G.: 1932, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 92, No. 8, 820-831
- Clark R.E.H.: 1990, *Astrophys. J.* 354, No. 1, 382-386
- Cox D.P., Tucker W.H.: 1969, *Astrophys. J.* 157, 1157-1167
- Drake S.A., Ulrich R.K.: 1980, *Astrophys. J. Suppl.* 42, 351-383
- Dumont A.M.: 1992, *Astron. Astrophys.* 254, 454-459
- Garay G., Gathier R., Rodriguez L.F.: 1989, *Astron. Astrophys.* 215, 101-112
- Gee C.S., Percival I.C., Lodge J.G., Richards D.: 1976, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 175, No. 1, 209-215
- Gionavardi C., Natta A., Palla F.: 1987, *Astron. Astrophys. Suppl.* 70, No. 2, 269-280
- Gionavardi C., Palla F.: 1989, *Astron. Astrophys. Suppl.* 77, No. 2, 157-160
- Glasco H.P., Zirin H.: 1964, *Astrophys. J. Suppl.* 9, 193-200
- Goldberg L.: 1966, *Astrophys. J. Letters* 144, No. 3, 1225-1229
- Golden L.B., Clark R.E.H., Goett S.J., Sampson D.H.: 1981, *Astrophys. J. Suppl.* 45, No. 4, 603-612
- Golden L.B., Sampson D.H.: 1971, *Astrophys. J.* 163, No. 2, 405-410

- Gordon M.A.: 1989, *Astrophys. J.* 337, 782-794
- Green L.C., Rush P.P., Chandler C.D.: 1957, *Astrophys. J.* 3, 37
- Hadrava P.: 1974, Diplomová práce, MFF UK, Praha
- Heinzel P.: 1993, Doktorská disertační práce, Astronomický ústav AVČR, Ondřejov
- Hoang-Binh D.: 1983, *Astron. Astrophys. Letters* 121, 19-22
- Hoang-Binh D.: 1986, *Astron. Astrophys.* 156, 393-394
- Hoang-Binh D.: 1990, *Astron. Astrophys.* 238, 449-451
- Hoang-Binh D., Encrenaz P., Linke R.A.: 1985, *Astron. Astrophys. Letters* 146, 19-21
- Hoang-Binh D., Prud'homme M., van Regemorter H.: 1979, *Astrophys. J. Letters* 230, 127-129
- Hubený I.: 1988, *Computer Physics Communications* 52, 103-132
- Hubený I.: 1994, *Astron. Astrophys.* 282, 151-167
- Hummer D.G.: 1988, *Astrophys. J.* 327, No. 1, 477-484
- Hummer D.G.: 1994, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 268, 109-112
- Hummer D.G., Mihalas D.: 1988, *Astrophys. J.* 331, 794-814
- Hummer D.G., Rybicki G.B.: 1985, *Astrophys. J.* 293, 258-267
- Hummer D.G., Storey P.J.: 1987, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 224, 801-820
- Hummer D.G., Storey P.J.: 1992, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 254, 277-290
- Ivanov-Cholodnyj G.S., Nikolskyj G.M., Gulayev R.A.: 1960, *Astronom. Žurnal* 37, 799-811
- Janicki C.: 1990, *Computer Physics Communications* 60, 281-296
- Johnson L.C.: 1972, *Astrophys. J.* 174, No. 1, 227-236
- Jung Y.-D.: 1992, *Astrophys. J.* 396, 725-729
- Kaler J.B.: 1966, *Astrophys. J.* 143, No. 3, 722-742
- Karzas W.J., Latter R.: 1961, *Astrophys. J. Suppl.* 6, 167-212
- Kříž S.: 1979, *BAC*, 30, No. 2, 83-94
- Krolik J.H., McKee C.F.: 1978, *Astrophys. J. Suppl.* 37, 459-483
- Kurucz R.L., 1970, *ATLAS, A Computer Program for Calculating Model Stellar Atmospheres*, SAO Special Report No. 309
- Lang K.R.: 1980, *Astrophysical Formulae*, 2nd ed. Springer
- Martin P.G.: 1988, *Astrophys. J. Suppl.* 66, No. 2, 125-138
- Martín-Pintado J., Bachiller R., Thum C., Walmsley M.: 1989, *Astron. Astrophys. Letters* 215, 13-16
- Martín-Pintado J., Thum C., Bachiller R.: 1989, *Astron. Astrophys. Letters* 222, 9-11
- Menzel D.H.: 1937, *Astrophys. J.* 85, 330-339
- Menzel D.H., Baker J.G.: 1937, *Astrophys. J.* 86, 70-77
- Menzel D.H., Pekeris C.L.: 1935, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 96, No. 1, 77-111
- Mihalas D.: 1967a, *Astrophys. J.*, 149, 169
- Mihalas D.: 1967b, *Astrophys. J.*, 150, 909

- Mihalas D.: 1970, *Stellar Atmospheres*, first ed., Freeman & Co., San Francisco
- Mihalas D.: 1978, *Stellar Atmospheres*, Second ed., Freeman & Co., San Francisco
- Mihalas D., Däppen W., Hummer D.G.: 1988, *Astrophys. J.* 331, 815-825
- Mihalas D., Heasley J.N., Auer L.H.: 1975, NCAR-TN/STR-104, NCAR Boulder
- Osterbrock D.E.: 1974, *Astrophysics of Gaseous Nebulae*, Freeman and Co., San Francisco
- Pengelly R.M.: 1964, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 127, No. 2, 145-163
- Pengelly R.M., Seaton M.J.: 1964, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 127, No. 2, 165-175
- Péquignot D., Petitjean P., Boisson C.: 1991, *Astron. Astrophys.* 251, 680-688
- Percival I.C., Richards D.: 1978, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 183, 329-334
- Ponomarev V.O., Smith H.A., Strelnitski V.S.: 1994, *Astrophys. J.* 424, 976-982
- Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P.: 1992, *Numerical recipes in FORTRAN – 2nd ed.*, Cambridge University Press
- Randich M.S., Gionavardi C., Natta A., Palla F.: 1991, *Astron. Astrophys. Suppl.* 88, 31-45
- Rozsnyai B.F., Jacobs V.L.: 1988, *Astrophys. J.* 327, No. 1, 485-501
- Salem M., Brocklehurst M.: 1979, *Astrophys. J. Suppl.* 39, No. 4, 633-651
- Sampson D. H.: 1969, *Astrophys. J.* 155, No. 2, 575-585
- Sampson D.H., Golden L.B.: 1970, *Astrophys. J.* 161, No. 1, 321-337
- Sampson D.H., Golden L.B.: 1971, *Astrophys. J.* 170, No. 1, 169-180
- Scholz T.T., Walters H.R.J., Burke P.B., Scott M.P.: 1990, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 242, 692-697
- Scholz T.T., Walters H.R.J.: 1991, *Astrophys. J.* 380, 302-306
- Seaton M.J.: 1959a, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 119, No. 2, 81-89
- Seaton M.J.: 1959b, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 119, No. 2, 90-97
- Seaton M.J.: 1960, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 120, No. 4, 326-337
- Seaton M.J.: 1964, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 127, No. 2, 177-184
- Seaton M.J.: 1968, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 139, No. 2, 129-134
- Seaton M.J.: 1969, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 145, No. 1, 91-93
- Seaton M.J.: 1987, *J. Phys. B* 20, 6363
- Shaver P.A.: 1980, *Astron. Astrophys.* 90, 34-43
- Shull J.M., van Steenberg M.: 1982, *Astrophys. J. Suppl.* 48, 95-107
- Smits D.P.: 1991, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 248, 193-216
- Sobolev V.V.: 1975, *Kurs teoreticheskoj astrofiziki*, Nauka, Moskva
- Sorochenko R.L., Rydbeck G., Smirnov G.T.: 1988, *Astron. Astrophys.* 198, 233-236
- Spitzer L., Jr.: 1948, *Astrophys. J.* 107, 6-33
- Spitzer L., Jr.: 1949, *Astrophys. J.* 109, 337-353
- Spitzer L., Jr., Savedoff M.P.: 1950, *Astrophys. J.* 111, 593-608
- Storey P.J., Hummer D.G.: 1988, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 231, 1139-1144
- Storey P.J., Hummer D.G.: 1991, *Computer Physics Communications* 66, 129-141
- Summers H.P.: 1977, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 178, 101-122

- Škoda P.: 1987, Diplomová práce MFF UK Praha
- Škoda P.: 1989, Práce podaná v soutěži mladých vědeckých pracovníků, ASÚ ČSAV, nepublikováno
- Škoda P.: 1990, Contrib. Astron. Obs. Skalnaté Pleso, 20, 151-154
- Škoda P.: 1993, Obsazení velmi vysokých hladin ve zředěné vodíkové plazmě, Práce pro kandidátské minimum
- Škoda P.: 1994, *in* Proceedings of the 18th stellar conference of Czech and Slovak Astronomical Societies, Silesian University, Opava 1994; *in press*
- Thum C., Martín-Pintado J., Bachiller R.: 1992, Astron. Astrophys. 256, 507-518
- van Blerkom D.: 1969, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 145, No. 1, 75-90
- van Regemorter H., Hoang-Binh D., Prud'homme M.: 1979, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 12, No. 7, 1053-1061
- Walmsley C.M.: 1990, Astron. Astrophys. Suppl. 82, No. 2, 201-206
- Wiese W.L., Smith M.W., Glennon B.M.: 1966, Atomic Transitions Probabilities, Vol. I, Hydrogen Through Neon, NSRDS-NBS 4, Washington D.C.
- Williams G.A., Shipman H.L.: 1988, Astrophys. J. 326, 738-750
- Wilson T.L., Hoang-Binh D., Stark A.A., Filges L.: 1990, Astron. Astrophys. 238, No. 331-336