

4.3. Excitación térmica. Formula de Boltzmann

Intensidad de una línea depende de (“al menos” en sentido cualitativo):

- Número de átomos del elemento en el estado de ionización correspondiente
- Número de átomos en el estado de excitación que da lugar a la transición.

• *Ley de Boltzmann*: distribución (en equilibrio termodinámico) de la población de átomos entre los distintos estados energéticos (niveles de excitación) para un estado de ionización.

$$\frac{N_{i,m}}{N_{i,1}} = \frac{g_{i,m}}{g_{i,1}} e^{(-\frac{\chi_{i,m}}{kT})} \quad (4.1)$$

- $N_{i,m}$ = número de átomos por unidad de volumen en el grado de ionización i que se encuentran en el nivel de excitación m
- $N_{i,1}$ = nivel fundamental
- g = peso estadístico
- $\chi_{i,m}$ = energía de excitación $E_1 - E_m$
- $\chi_i = E_1 - E_\infty$ = energía de ionización del ión
- k = cte. de Boltzmann = $1,38 \times 10^{-16} \text{ erg/K} = 8,6174 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$

Si consideramos el número total de átomos en ese estado de ionización:

$$\frac{N_{i,m}}{N_i} = \frac{g_{i,m}}{u_i(T)} e^{(-\frac{\chi_{i,m}}{kT})} \quad (4.2)$$

– $u_i(T) = \sum g_{i,m} e^{(-\frac{\chi_{i,m}}{kT})}$ = función de partición (suma de estados).

Tomando logaritmos (decimales) en la ley de Boltzmann:

$$\log \frac{N_{i,m}}{N_{i,1}} = \log \frac{g_{i,m}}{g_{i,1}} - \chi_{i,m} \theta \quad (4.3)$$

– $\theta = \frac{5040}{T}$, $\chi_{i,m}$ (eV)

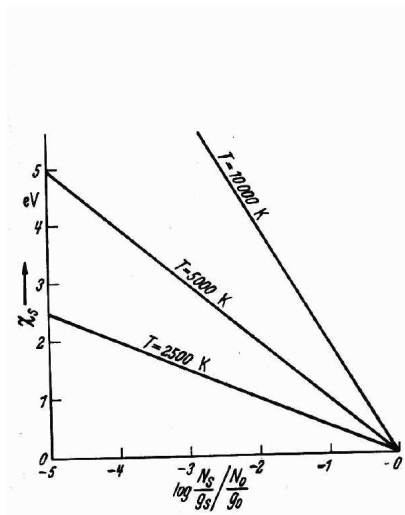


Figura 4.1: Fracción de átomos en función de la temperatura de excitación

• Ejemplo: NaI en la atmósfera del Sol

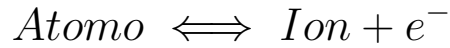
Línea NaI D2, $\lambda = 5890 \text{ \AA}$ ($3^2P_{3/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$). $T = 6000 \text{ K}$ ($\sim T_{\odot}$)

– $\Delta E = 2.10 \text{ eV}$, $g(J = 3/2) = 2J + 1 = 4$, $g(J = 1/2) = 2$

– Boltzmann: $\frac{N(P_{3/2})}{N(S_{1/2})} \approx 0,034$

4.4. Ionización. Ley de Saha

Describe el equilibrio de la reacción:



.

– La diferencia de energía entre el estado fundamental y un estado en el continuo es:

$$\chi_0 + E_c \quad ; \quad (E_c = -\frac{1}{2}mv^2)$$

• Relación entre las poblaciones de los estados fundamentales de un átomo una vez ionizado y el átomo neutro es (*Saha*):

$$\frac{N_{1,1}}{N_{0,1}} P_e = 2 \frac{g_{1,1}}{g_{0,1}} \frac{(2\pi m_e)^{3/2} (kT)^{5/2}}{h^3} e^{-\chi_0/kT} \quad (4.4)$$

donde $P_e = N_e kT$ es la presión electrónica (*dinas cm⁻²*).

- Alternativamente, en función de la densidad electrónica:

$$\frac{N_{1,1} N_e}{N_{0,1}} = 2 \frac{g_{1,1}}{g_{0,1}} \frac{(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3} e^{-\chi_0/kT} \quad (4.5)$$

- Extendiendo todos los estados de excitación en los iones y para grados más elevados de ionización ($i = \text{grado de ionización} \leftrightarrow \text{número de veces ionizado}$):

$$\frac{N_{i+1}}{N_i} P_e = 2 \frac{u_{i+1}}{u_i} \frac{(2\pi m_e)^{3/2} (kT)^{5/2}}{h^3} e^{-\chi_i/kT} \quad (4.6)$$

- En función de N_e

$$\frac{N_{i+1} N_e}{N_i} = 2 \frac{u_{i+1}}{u_i} \frac{(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3} e^{-\chi_i/kT} \quad (4.7)$$

- Tomando logaritmos se llega a la expresión:

$$\log \frac{N_{i+1}}{N_i} = \log 2 + \log \frac{u_{i+1}}{u_i} + \frac{5}{2} \log T - \chi_i \theta - \log P_e - 0,48 \quad (4.8)$$

Ejemplo: Atomo de Na ($\chi_0 = 5,14 \text{ eV}$, $\chi_1 = 47,29 \text{ eV}$) en condiciones solares ($T = 6000 \text{ K}$, $P_e = 10 \text{ dinas/cm}^2$).

- Tomamos: $u_{0,1} \approx g_{0,1} = 2$, $u_1 \approx g_{1,1} = 1$ $u_2 = g_{2,1} = 4$.
- Aplicando Saha:

$$\frac{N_1}{N_0} \approx 4 \cdot 10^3$$

$$\frac{N_2}{N_1} \approx 4 \cdot 10^{-31}$$

$\Rightarrow Na$ predominantemente una vez ionizado en la atmósfera de estrellas tipo solar.

Podemos comparar Na e H en condiciones solares:

$$T = 6000\text{ K} \quad ; \quad [Na/H]_{\odot} \sim 10^{-6}$$

$$N(Na^+) \sim e^{-5,14/kT} \quad ; \quad N(H^+) \sim e^{-13,6/kT}$$

\Downarrow

$$\frac{N(Na^+)}{N(H^+)} \sim 10^7$$

.

\Rightarrow Ionización de los átomos de Na con respecto al H compensa aproximadamente la deficiencia en la abundancia.

$\Rightarrow e^-$ libres en la atmósfera solar provienen prácticamente de los átomos de baja ionización en la atmósfera solar.

– Estos e^- libres (procedentes de metales) determinan la ionización de H en la ecuación de Saha a través de $P_e(N_e)$.

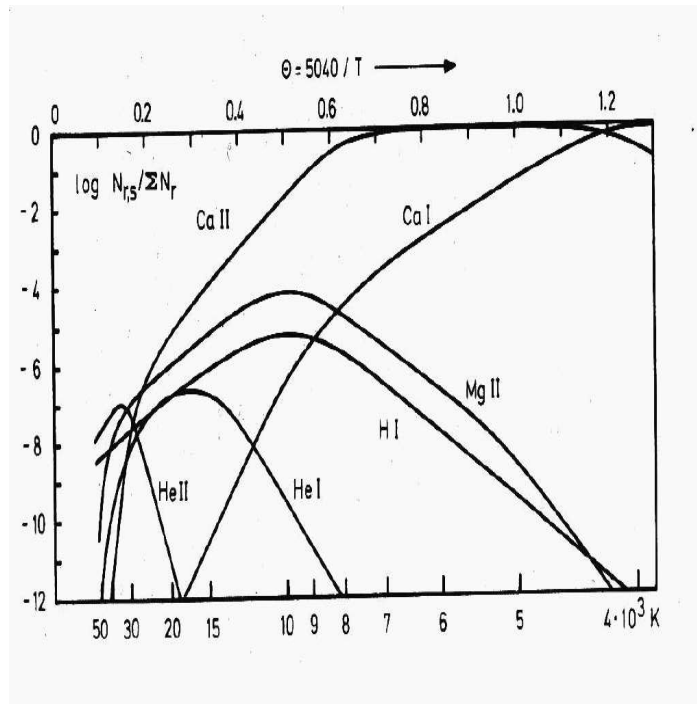


Figura 4.2: Ionización y excitación térmica en función de la temperatura para distintos iones. ($P_e = 100 \text{ dinas/cm}^2$)

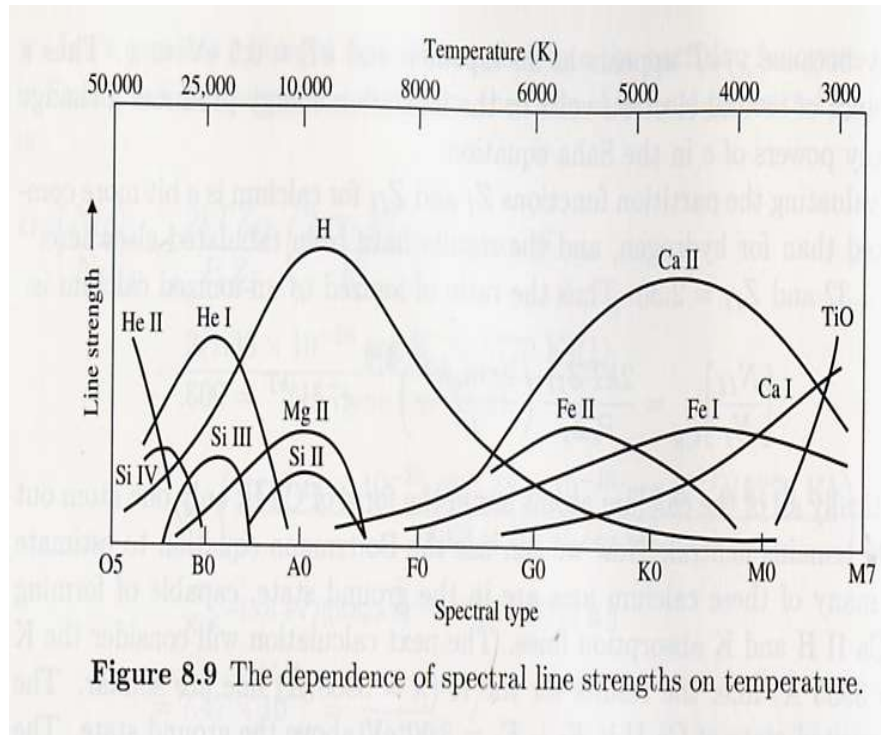


Figure 8.9 The dependence of spectral line strengths on temperature.

Ionization potential (electron volts)											
Element	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI
H	13.598										
He	24.587	54.416									
Li	5.392	75.638	122.451								
Be	9.322	18.211	153.893	217.713							
B	8.298	25.154	37.930	259.368	340.217						
C	11.260	24.383	47.887	64.492	392.077	489.981					
N	14.534	29.601	47.448	77.472	97.888	552.057	667.029				
O	13.618	35.116	54.934	77.412	113.896	138.116	739.315	871.387			
F	17.422	34.970	62.707	87.138	114.240	157.161	185.182	953.886	1,103.089		
Ne	21.564	40.962	63.45	97.11	126.21	157.93	207.27	239.09	1,195.797	1,362.164	
Na	5.139	47.286	71.64	98.91	138.39	172.15	208.47	264.18	299.87	1,465.091	
Mg	7.646	15.035	80.143	109.24	141.26	186.50	224.94	265.90	327.95	367.53	1,648.659
Al	5.986	18.828	28.447	119.99	153.71	190.47	241.43	284.59	330.21	398.57	1,761.802
Si	8.151	16.345	33.492	45.141	166.77	205.05	246.52	303.17	351.10	401.43	442.07
P	10.486	19.725	30.18	51.37	65.023	220.43	263.22	309.41	371.73	424.50	476.06
S	10.360	23.33	34.83	47.30	72.68	88.049	280.93	328.23	379.10	447.09	479.57
Cl	12.967	23.81	39.61	53.46	67.8	97.03	114.193	348.28	400.05	455.62	504.78
Ar	15.759	27.629	40.74	59.81	75.02	91.007	124.319	143.456	422.44	478.68	529.26
K	4.341	31.625	45.72	60.91	82.66	100.0	117.56	154.86	175.814	503.44	538.95
Ca	6.113	11.871	50.908	67.10	84.41	108.78	127.7	147.24	188.54	211.270	564.13
Sc	6.54	12.80	24.76	73.47	91.66	111.1	138.0	158.7	180.02	225.32	591.25
Ti	6.82	13.58	27.491	43.266	99.22	119.36	140.8	168.5	193.2	215.91	249.832
V	6.74	14.65	29.310	46.707	65.23	128.12	150.17	173.7	205.8	230.5	265.23
Cr	6.766	16.50	30.96	49.1	69.3	90.56	161.1	184.7	209.3	244.4	255.04
Mn	7.435	15.640	33.667	51.2	72.4	95	119.27	196.46	221.8	248.3	270.8
Fe	7.870	16.18	30.651	54.8	75.0	99	125	151.06	235.04	262.1	286.0
Co	7.86	17.06	33.50	51.3	79.5	102	129	157	186.13	276	290.4
Ni	7.635	18.168	35.17	54.9	75.5	108	133	162	193	224.5	305
Cu	7.726	20.292	36.83	55.2	79.9	103	139	166	199	232	321.2
Zn	9.394	17.964	39.722	59.4	82.6	108	134	174	203	238	266
Ga	5.999	20.51	30.71	64							274
Ge	7.899	15.934	34.22	45.71	93.5						
As	9.81	18.633	28.351	50.13	62.63	127.6					
Se	9.752	21.19	30.820	42.944	68.3	81.70	155.4				
Br	11.814	21.8	36	47.3	59.7	88.6	103.0	192.8			
Kr	13.999	24.359	36.95	52.5	64.7	78.5	111.0	126	230.9		
Rb	4.177	27.28	40	52.6	71.0	84.4	99.2	136	150	277.1	
Sr	5.695	11.030	43.6	57	71.6	90.8	106	122.3	162	177	
Y	6.38	12.24	20.52	61.8	77.0	93.0	116	129	146.2	191	324.1
Zr	6.84	13.13	22.99	34.34	81.5						206
Nb	6.88	14.32	25.04	38.3	50.55	102.6	125				
Mo	7.099	16.15	27.16	46.4	61.2	68	126.8	153			
Te	7.28	15.26	29.54								
Ru	7.37	16.76	28.47								
Rh	7.46	18.08	31.06								
Pd	8.34	19.43	32.93								
Ag	7.576	21.49	34.83								
Cd	8.993	16.908	37.48								
In	5.786	18.869	28.03	54							
Sn	7.344	14.632	30.502	40.734	72.28						
Sb	8.641	16.53	25.3	44.2	56	108					
Te	9.009	18.6	27.96	37.41	58.75	70.7	137				
I	10.451	19.131	33								
Xe	12.130	21.21	32.1								
Cs	3.894	23.1									
Ba	5.212	10.004									
La	5.577	11.06	19.175								

Adapted from E. Novotny, *Introduction to Stellar Atmospheres and Interiors* (London: Oxford University Press, 1973). Originalization Potentials and Ionization Limits from the Analysis of Optical Spectra, NSRDS-NBS34 (Washington, D.C. e, 1970).

4.5. Cuestiones y ejercicios

1. ¿Podrías escribir los valores de l , j y m que caracterizan los subniveles del nivel $n = 2$ en el átomo de hidrógeno?

Respuesta:

$$\begin{aligned} n = 2 : l = 1, j = \frac{3}{2}, m = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \\ n = 2 : l = 1, j = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \\ n = 2 : l = 0, j = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \end{aligned}$$

2. ¿Sabrías estimar el orden de magnitud de la fracción de átomos de HI que se encuentran en el nivel $n = 2$ con relación al estado fundamental a una temperatura de 10000 K?

Respuesta: La población relativa de dos niveles viene dada por la ley de Boltzmann:

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{g_n}{g_m} e^{-\frac{E_n - E_m}{kT}}$$

Para $n = 2$, $E_n - E_m = 10,2 \text{ eV}$ y $g_n = 2n^2 = 8$. Por tanto:

$$N_2 \approx 5,8 \cdot 10^{-6}$$

3. ¿Sabrías estimar la población del nivel $3^2P_{3/2}$ de NaI en relación al estado fundamental $3^1S_{1/2}$ para una temperatura de 6000 K?

Respuesta: La diferencia de energía entre ambos niveles de NaI da lugar a la línea D_2 ($\lambda = 5890 \text{ \AA}$), que corresponde a $2,10 \text{ eV}$. El peso estadístico ($g = 2J + 1$) del nivel $3^2P_{3/2}$ es $g = 4(J = 3/2)$; para el nivel $3^1S_{1/2}$ es $g = 2(J = 1/2)$. Para $T = 6000 \text{ K}$, se obtiene (aplicando Boltzmann):

$$\frac{N(P_{3/2})}{N(S_{1/2})} \approx 0,035$$

4. ¿Cuál es el orden de magnitud de la razón de electrones procedentes de LiI e HI para una temperatura de 5000 K? ¿Cuántos electrones, en orden de magnitud, proceden de HeII?

Respuesta: Según Saha el factor exponencial para Li , H y He^+ es:

$$N(Li^+) \sim e^{-\frac{5,392}{kT}}$$

$$N(H^+) \sim e^{-\frac{13,6}{kT}}$$

$$N(He^{++}) \sim e^{-\frac{54,416}{kT}}$$

Con $T = 5 \cdot 10^3 \text{ K}$ y $k = 8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV deg}^{-1}$, se obtiene:

$$\frac{N(Li^+)}{N(Li)} \sim 3,7 \cdot 10^{-6}$$

$$\frac{N(H^+)}{N(H)} \sim 2 \cdot 10^{-4}$$

$$\frac{N(He^{++})}{N(He^+)} \sim 1,5 \cdot 10^{-55}$$

5. Una estrella de tipo G5V tienen una temperatura de 5520 K y una presión electrónica de 20 dinas/cm^2 . Estimar la P_e de una estrella gigante del mismo tipo espectral y temperatura $T = 4650 \text{ K}$ si la ionización del Fe es la misma en ambas estrellas. ¿Qué puede decirse de la ionización del Sr ?

Datos: $\chi_{Fe} = 7,87 \text{ eV}$, $\log 2u_1/u_0 = 0,40$; $\chi_{Sr} = 5,70 \text{ eV}$, $\log 2u_1/u_0 = 0,32$

– Con Saha se halla la ionización del Fe en la estrella enana:

$$\log(N_1/N_0)_{Fe} = -\frac{5040}{5520} \times 7,87 + 2,5 \log 5520 - 0,48 + 0,40 - \log 20 = 0,79$$

- Para la gigante la ionización tiene el mismo valor. Por Saha:

$$P_e = 0,59 \text{ dinas/cm}^2$$

– En el caso del Sr , aplicamos Saha en ambas estrellas:

Enana: $(N_1/N_0) = 489$

Gigante: $(N_1/N_0) = 1382$

6. El doblete de $MgII$ a $\lambda = 4481 \text{ \AA}$ proviene de la transición del término:

$$3^2D_{3/2,5/2} \rightarrow 4^2F_{3/2}$$

Suponiendo $P_e = 100 \text{ dinas cm}^{-2}$ y $T = 7200 \text{ K}$, calcular la fracción de átomos de Mg capaces de absorber fotones con $\lambda = 4481 \text{ \AA}$, sabiendo que el potencial de excitación del término más bajo de la transición es $\chi(3^2D) = 8,83 \text{ eV}$ y que el nivel fundamental del $MgII$ es un término $3^2S_{1/2}$.

Datos:

– Primer potencial de ionización de Mg : $\chi_1 = 7,65 \text{ eV}$

– Segundo potencial de ionización Mg : $\chi_2 = 15,03 \text{ eV}$

– $\log \frac{2u_1}{u_0} = 0,43$; $\log \frac{2u_2}{u_1} = 0$

Se aplica Boltzmann para estimar la fracción de átomos de $MgII$ en el nivel 3^2D respecto del nivel 3^2S

$$g(3^2D) = (2J_1 + 1) + (2J_2 + 1) = (2L + 1)(2S + 1) = 10 \quad ; \quad g(3^2S) = 2$$

$$\log N(3^2D)N(3^2S) = -(5040/7200) \times 8,83 + \log(10/2) = -5,48$$

$$N(3^2D) = 10^{-5,48} \times N(3^2S)$$

– Aplicamos Saha para ver la fracción de $MgII$ y operando:

$$\log \frac{N_1}{N_0} = -\frac{5040}{7200} \times 7,65 + 2,5 \log 7200 - 0,48 - \log 100 + 0,43$$

$$\log \frac{N_1}{N_0} = 2,24 \quad \rightarrow \quad \frac{N_1}{n_0} = 173 \quad \rightarrow \quad \frac{N_1}{N_1 + N_0} = 173/174 = 0,994$$

– Para la segunda ionización:

$$\log \frac{N_2}{N_1} = -3,36$$

– se puede despreciar.

– Número de átomos capaces de absorber fotones con $\lambda = 4481$

$$\frac{N(3^2D)}{N_{total}} = \frac{10^{-5,48} \times N(3^2S)}{N_{total}} = 0,994 \times 10^{-5,48} = 3,4 \times 10^{-6}$$

7. Suponer gas hidrógeno puro con una presión gaseosa $P_g = 10^3$ dinas cm^{-2} y una temperatura $T = 10080$ K. Calcular la razón H^*/H y la presión electrónica $P_e = n_e kT$.

Nota: $n = n_e + H^+ + H$; $P_g = nkT$

Datos: $\chi_{ion} = 13,6 \text{ eV}$; $k = 1,36 \times 10^{-16} \text{ erg grados}^{-1}$

• Ley de Saha:

$$\log \frac{N^+}{N} = \log \frac{u^+}{u} + \log 2 + \frac{5}{2} \log T - \chi_{ion} \frac{5040}{T} - \log P_e - 0,48$$

– $u^+ = 1$; $u = 2$

– Operando: $\log \frac{N^+}{N} = 2,73 - \log P_e$

– Por otra parte:

$$P_g = nkT = (n_e + N^+ + N)kT = 2P_e + NkT \quad ; \quad (n_e = N^+)$$

$$\log \frac{N^+}{N} = 2,73 - \log \frac{P_g - P_H}{2} = 3,03 - \log(P_g - P_H)$$

– Operando:

$$\frac{N^+}{N} (P_g - NkT) = 1,07 \times 10^3$$

$$\frac{N^+}{N} (10^3 - N 1,37 \times 10^{12}) = 1,07 \times 10^3$$

– Podemos despreciar el segundo término del paréntesis. Operando con números:

$$N^+/N = 1,07 \rightarrow e^- = N^+ \approx N \rightarrow P_g \approx 3P_e \rightarrow P_e \approx 330 \text{ dinas } \text{cm}^{-2}$$

4.6. Apéndice: Función de partición

Sea N^0 el número total de átomos neutros (incluye todos los estados de excitación)

$$N^0 = N_1^0 + \sum_{n=2}^{\infty} N_n^0 = N_1^0 + \frac{N_1^0}{g_1} \sum_{n=2}^{\infty} g_n e^{-\chi_n/kT}$$

donde se ha aplicado la ley de Boltzmann. Reagrupando.

$$N^0 = \frac{N_1^0}{g_1} \left(g_1 + \sum_{n=2}^{\infty} g_n e^{-\chi_n/kT} \right) = \frac{N_1^0}{g_1} u_0(T)$$

$u_0(T)$ = función de partición. = suma pesada de las formas en las que se pueden localizar los electrones.

Ejemplo: En el caso del Sol practicamente todo el H se encuentra en el nivel fundamental. Por tanto $u^0 \approx 2$.

Analogamente para los iones:

$$u^+(T) = g_1^+ \sum_{n=2}^{\infty} g_n^+ e^{-\chi_n^+/kT}$$

Para H^+ , $u^+ = 1$, ya que no quedan electrones.

4.7. Apéndice: Coeficientes de Einstein

La ley de Kirchhoff, $j_\nu = \alpha_\nu B_\nu$, relaciona los procesos de emisión y absorción para un emisor térmico. Einstein estableció esta relación de forma sencilla entre ambos procesos, analizando la interacción de radiación con un sistema atómico de dos niveles discretos de energía con su correspondiente peso estadístico. Einstein identificó tres procesos:

1. **Emisión espontánea:** El electrón experimenta espontáneamente una transición hacia el nivel de energía más bajo con la emisión de un fotón.
2. **Absorción estimulada:** Un fotón es absorbido produciéndose la correspondiente transición.
3. **Emisión estimulada:** Cuando un electrón experimenta una transición hacia abajo emite un fotón. Si ello ocurre en la presencia de un fotón del mismo tipo como el emitido en la transición, la probabilidad del evento se incrementa de forma notable (“resonancia”).

Supongamos un átomo con dos niveles energéticos n y m , siendo m el de más baja energía. Los procesos anteriores los podemos describir en términos de su probabilidad:

– El número de átomos que pasa del nivel n al nivel m por emisión espontánea lo podemos expresar como:

$$N_{n \rightarrow m} = A_{nm} N_n dt$$

– El número de átomos que absorbe un fotón y experimenta una transición hacia arriba:

$$N_{m \rightarrow n} = B_{mn} N_m I_\nu dt$$

– El número de átomos que experimenta una emisión inducida debido a la presencia del campo de radiación I_ν :

$$N_{n \rightarrow m} = B_{nm} N_n I_\nu dt$$

en estas expresiones:

A_{nm} = Coeficiente de Einstein de emisión espontánea
 B_{mn} = Coeficiente de Einstein de absorción (estimulada)
 B_{nm} = Coeficiente de Einstein de emisión estimulada

Los tres coeficientes no son independientes y dependen del átomo en cuestión. En equilibrio térmico el campo de radiación está dado por la función de Planck y la ley de Boltzmann da la distribución de átomos entre los distintos estados excitados. Se debe cumplir:

$$N_m B_{mn} B_\nu(T) = N_n [A_{nm} + B_{nm} B_\nu(T)]$$

Teniendo en cuenta las expresiones de las leyes de Boltzmann y Planck se llega a:

$$g_n B_{nm} = g_m B_{mn}$$

$$A_{nm} = \frac{2h\nu^3}{c^2} B_{nm}$$

- g_m y g_n son los pesos estadísticos.

4.8. Apéndice: Poblaciones invertidas: máseres

Para un sistema en equilibrio térmico:

$$\frac{n_2 g_1}{n_1 g_2} = \exp\left(\frac{-h\nu}{kT}\right) < 1$$

es decir:

$$\frac{n_1}{g_1} > \frac{n_2}{g_2}$$

Incluso cuando el material no está en equilibrio térmico, esta relación se suele satisfacer.

Cuando se invierte la relación anterior hay átomos suficientes en el nivel superior n_2 para causar una inversión en la población de los niveles:

$$\frac{n_1}{g_1} < \frac{n_2}{g_2}$$

$$\frac{n_1}{g_1} < \frac{n_2}{g_2}$$

En este caso, el coeficiente de absorción es negativo: $\alpha_\nu \leq 0$. En lugar de decrecer, la intensidad se incrementa a lo largo del camino. Tal sistema se llama maser (laser) **-microwave amplification by stimulated emission of radiation**.

La amplificación puede ser muy grande. Una profundidad óptica negativa de -100, lleva a un factor de amplificación de 10^{43} . Máseres astrofísicos se observan de moléculas tales como OH, H_2O, NH_3, SiO , etc.