

Rozšíření spektrálních čar

Pavel Slavíček

email: ps94@physics.muni.cz

Úvod

Parametry, využití

- určování parametrů T , n_e
- využití diagnostika plazmatu, astronomie, tenké vrstvy,...

Jednotky

- **nm** = 10^{-9} m
- **Å** = 10^{-10} m
- **pm** = 10^{-12} m

Spektrometry

- malé rozlišení
- **střední rozlišení**
- **vysoké rozlišení**

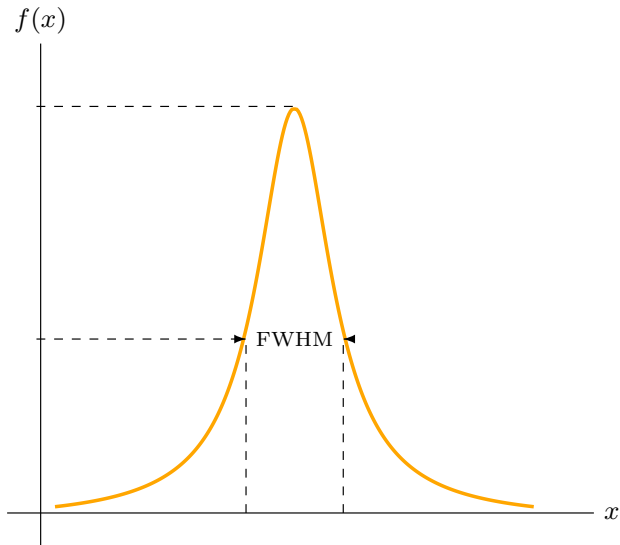
Spektrometry

- Hamamatsu C12666MA, **Rowland**,
 $\Delta\lambda = 15 \text{ nm}$, $R \sim 37$,
rozměry 20.1 x 12.5 x 10.1 mm, hmotnost 5 g
- Jobin Yvon Horiba, FHR 1000, **Czerny Turner**,
 $\Delta\lambda = 0.01 \text{ nm}$, $R \sim 54\,000$,
rozměry 1160 x 430 x 350 mm, hmotnost 70 kg
- VTT - Vacuum Tower Telescope, Tenerife,
astronomie, primární zrcadlo 70 cm, výška asi 38 m, **Echelle + FP**
 $R \sim 750\,000$



FWHM

$$\text{HWHM} = \text{FWHM}/2$$



Rozšíření spektrálních čar

Typy rozšíření spektrálních čar

- přirozené
- přístrojové
- Dopplerovo
- Starkovo
- Van der Waalsovo
- rezonanční
- u hvězd: mikroturbulence, rotace
- ...

Přirozené rozšíření spektrální čáry

- konečná doba setrvání atomu v excitovaném stavu způsobuje neurčitost energie stavu:

$$\Delta E_i \tau_i \approx \hbar$$

rozšíření je potom

$$\Delta \nu_N = \frac{1}{h}(\Delta E_i + \Delta E_j) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_j} \right) = \frac{1}{2\pi} \left(\sum_k A_{ik} + \sum_k A_{jk} \right)$$

Lorentzův profil $\sim 10^{-5}$ nm

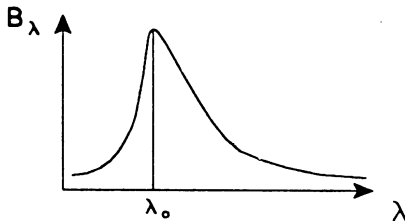
Přístrojová funkce



Real spectrum of a monochromatic light source.



Recorded spectrum of a monochromatic light source with a perfect instrument.



Recorded spectrum of a monochromatic light source with a "real" instrument.

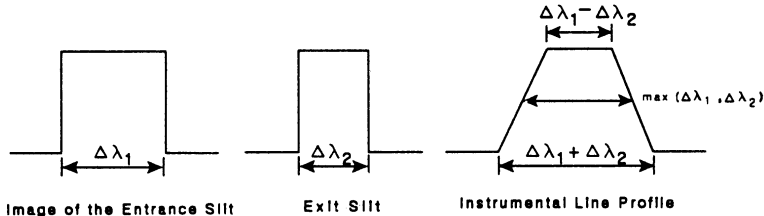
Vliv přístrojové funkce na signál

Každý infinitezimálně monochromatický element spektra (spektrálního profilu) je rozšířen přístrojovou funkcí:

$$m(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \cdot f(y - x) dx,$$

kde $m(y)$ je měřený spektrální profil, $p(x)$ původní (skutečný) profil a $f(y)$ přístrojová funkce. Přístrojová funkce je dána mnoha faktory. Aproximuje se pomocí Gaussova profil.

V případě uvážení vlivu pouze štěrbin:



Dopplerovo rozšíření spektrální čáry

Atomy se vůči detektoru pohybují tepelnou rychlostí.

Pro pravděpodobnost, že atom má rychlost v intervalu $\langle v_x, v_x + dv_x \rangle$ lze použít Maxwellovo rozdělení

$$f_v(v, T, m_0) = \frac{1}{N} \frac{dN}{dv}$$

pravděpodobnost, že dN molekul má rychlost v intervalu $\langle v, v + dv \rangle$

$$f_v(v, T, m_0) = 4\pi \left(\frac{m_0}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{m_0 v^2}{2kT} \right)$$

Spektrální čára má profil Gaussův.

Z pološířky (FWHM) Dopplerova rozšíření lze stanovit tzv. kinetickou teplotu atomů T :

$$\Delta\lambda_D = \frac{2\lambda_0}{c} \sqrt{\frac{2kT \ln 2}{m_a}}$$

Doppler FWHM [nm]

	M	300 K	1000 K	10 000 K
H	1	0.0062	0.0113	0.036
He	4	0.0031	0.0057	0.018
Ar	40	0.0010	0.0018	0.006
Cd	112	0.0006	0.0011	0.003
Hg	200	0.0004	0.0008	0.002

Starkovo rozšíření

Starkovo rozšíření je způsobeno

- mikropoli elektronů a iontů v blízkosti zářícího atomu
- mikropoli dipólů, kvadrupólů
- lineární, kvadratické
- Lorentzův profil

Pro vodíkové čáry H_α a H_β přibližný vztah:

$$n_e = 10^{13}(\Delta\lambda)^{\frac{3}{2}}[C_0(T) + C_1(T)\ln(\Delta\lambda)] \quad [\text{cm}^{-3}]$$

Pro H_β a HWHM [nm], n_e [cm^{-3}]

$$\Delta\lambda_{Stark} = 1.0 \times 10^{-11} (n_e)^{0.668}$$

Van der Waalsovo rozšíření

- srážky a působení ostatních neutrálních částic
- Lorentzův profil
- Pro H_β a HWHM [nm]

$$\Delta\lambda_{Waal} = 1.8 \times P / T_g^{0.7}$$

kde P je tlak v [atm], T_g je teplota plynu [K]

Rezonanční rozšíření

- srážky působení s ostatními atomy stejného druhu
- Lorentzův profil
- Pro H_β a HWHM [nm]:

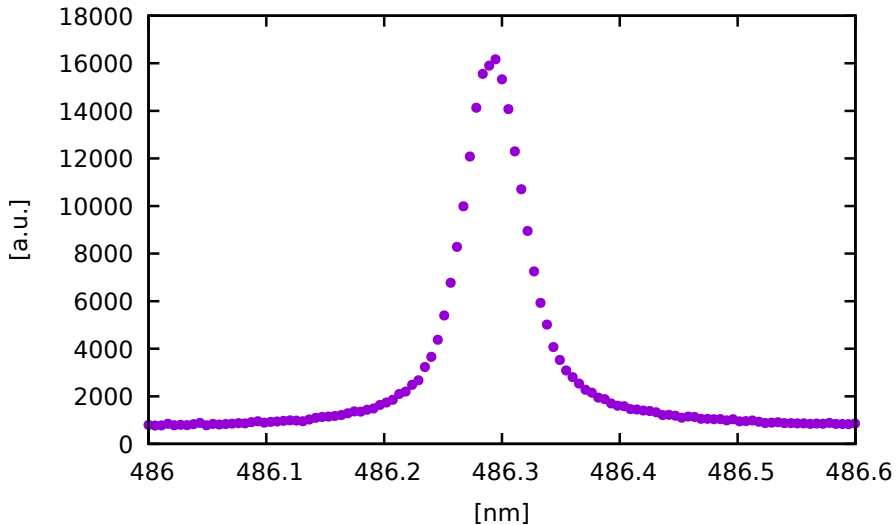
$$\Delta\lambda_{rez} = 30.2 \times X_H (P/T_g),$$

kde X_H je podíl atomů H v mol, P je tlak v [atm], T_g je teplota plynu [K]

Shrnutí

- Lorentzův profil: Starkovo, Van der Waals, rezonanční, přirozené
- Gaussův profil: Dopplerovo, přístrojové
- tlakové rozšíření - obecně působení okolních částic:
Starkovo, Van der Waals, rezonanční

Reálný profil



The Voigt profile

The *Voigt line profile* occurs in the modelling and analysis of radiative transfer in the atmosphere. It is the convolution of a Gaussian profile, $G(x; \sigma)$ and a Lorentzian profile, $L(x; \gamma)$:

$$V(x; \sigma, \gamma) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x'; \sigma) L(x - x'; \gamma) dx' \quad \text{where}$$

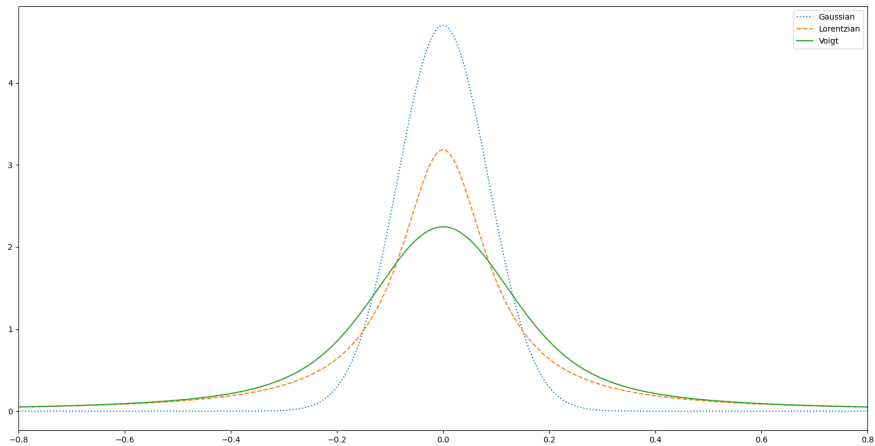
$$G(x; \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \quad \text{and} \quad L(x; \gamma) = \frac{\gamma/\pi}{x^2 + \gamma^2}.$$

Here γ is the half-width at half-maximum (HWHM) of the Lorentzian profile and σ is the standard deviation of the Gaussian profile, related to its HWHM, α , by $\alpha = \sigma\sqrt{2 \ln 2}$. In terms of frequency, ν , $x = \nu - \nu_0$ where ν_0 is the line centre.

There is no closed form for the Voigt profile, but it is related to the real part of the Faddeeva function, $w(z)$ by

$$V(x; \sigma, \gamma) = \frac{\operatorname{Re}[w(z)]}{\sigma\sqrt{2\pi}}, \quad \text{where } z = \frac{x + i\gamma}{\sigma\sqrt{2}}.$$

$\alpha = 0,1$; $\gamma = 0,1$



$$G(x) = \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2 \ln 2}{\alpha^2}\right)$$

konvoluce Gauss

$$G_1 * G_2 = G_3$$

pak $\alpha_3^2 = \alpha_1^2 + \alpha_2^2$

konvoluce Lorentz

$$L_1 * L_2 = L_3$$

pak $\gamma_3 = \gamma_1 + \gamma_2$

Další efekty:

- vliv přístrojové funkce (Fredholmova integrální rovnice 1. druhu)
- vliv detektoru (Volterrova integrální rovnice 1. druhu)
- oscilace plazmatu
- válcová symetrie – Abelova transformace
- samoabsorpce
- hyperjemná a multiplenní struktura komponent

Brablec et al, J.Phys.D., Appl.Phys.32(1999)1870-1875

Dekonvoluce - inverzní problém

$$\hat{K}\varphi = f$$

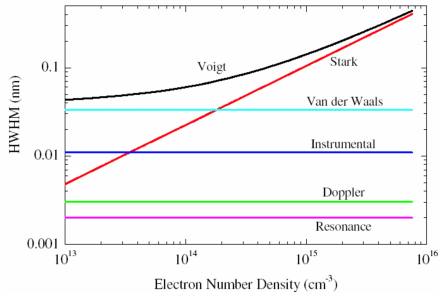
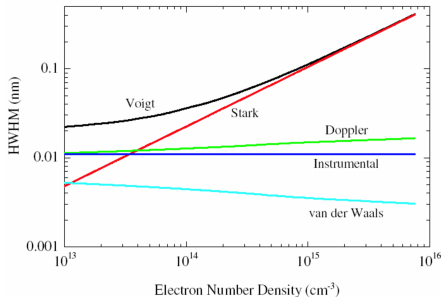
\hat{K} je operátor, f je naměřená funkce

Hadamardovy podmínky:

- řešení existuje pro libovolnou funkci f
- v daném prostoru existuje jen jedno řešení φ
- φ závisí na f spojitě
- řešení je stabilní

používá se: metoda nejmenších čtverců, FFT, regularizační metody, metoda maximální entropie , B-splines,...

Brablec et al, J.Phys.D., Appl.Phys.32(1999)1870-1875



H_{β} , přístrojová funkce 0.011 nm: vzduch při atmosférickém tlaku a) LTE (rezonanční rozšíření $\approx 2 \times 10^{-4}$ nm), b) non - LTE ($T_g = 300$ K)

HWHM v nm, P tlak v atm, T_g v K, n_e v cm^{-3} , X_H podíl atomů H v mol

$$\Delta\lambda_{Stark} = 1.0 \times 10^{-11} (n_e)^{0.668}, \quad \Delta\lambda_{rez} = 30.2 \times X_H (P/T_g),$$

$$\Delta\lambda_{Waals} = 1.8 \times P/T_g^{0.7}, \quad \Delta\lambda_{Natural} = 3.1 \times 10^{-5} \text{ nm},$$

$$\Delta\lambda_{Doppler} = 1.74 \times 10^{-4} T_g^{0.5}$$

C. O. Laux, T. G. Spence, Plasma Sources Sci. Technol. **12** (2003) 125 - 138.

Šířka izolovaných spektrálních čar

	$T = 10^4 \text{ K}$		$T = 4 \times 10^4 \text{ K}$	
$H_{\beta} \text{ } 4861 \text{ \AA}$	10^{14} cm^{-3}	10^{17} cm^{-3}	10^{14} cm^{-3}	10^{17} cm^{-3}
$w_s \text{ \AA}$	0.42	48	0.42	50
$w_D \text{ \AA}$	0.35	0.35	0.70	0.70
$O\text{I} \text{ } 7254 \text{ \AA}$	10^{14} cm^{-3}	10^{17} cm^{-3}	10^{14} cm^{-3}	10^{17} cm^{-3}
$w_s \text{ \AA}$	0.015	16	0.021	23.4
$w_D \text{ \AA}$	0.13	0.13	0.26	0.26
	$T = 2 \times 10^4 \text{ K}$		$T = 8 \times 10^4 \text{ K}$	
$\text{Ar}\text{II} \text{ } 4806 \text{ \AA}$	10^{15} cm^{-3}	10^{18} cm^{-3}	10^{15} cm^{-3}	10^{18} cm^{-3}
$w_s \text{ \AA}$	0.0014	1.4	0.002	2.1
$w_D \text{ \AA}$	0.08	0.08	0.15	0.15

Přibližné metody

Přibližné vztahy pro výpočet koncentrace elektronů z H_{β}
 W_m - je HWHM naměřené čáry v Å

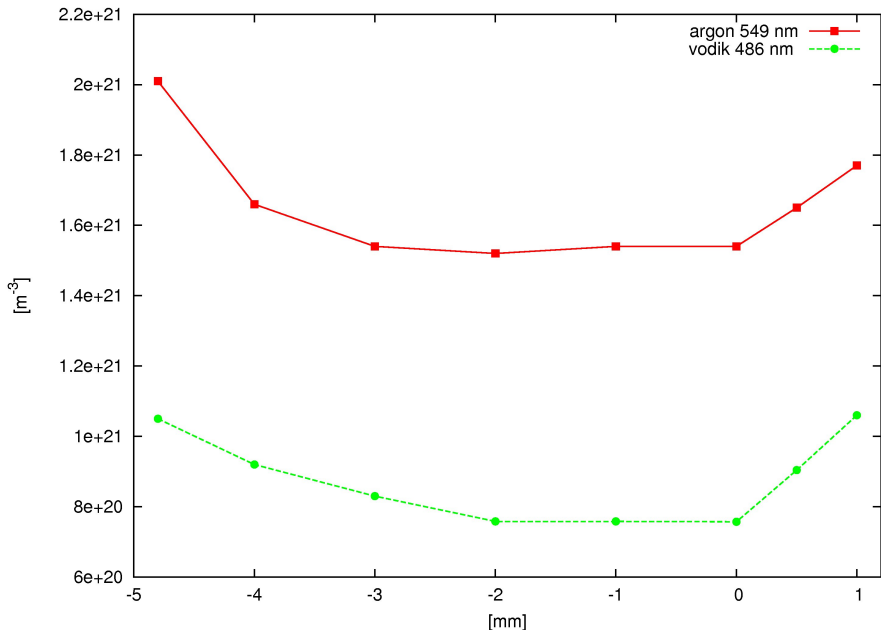
$$W_D = 3.58 \cdot 10^{-7} \lambda \left(\frac{T_g}{M} \right)^{0.5}$$

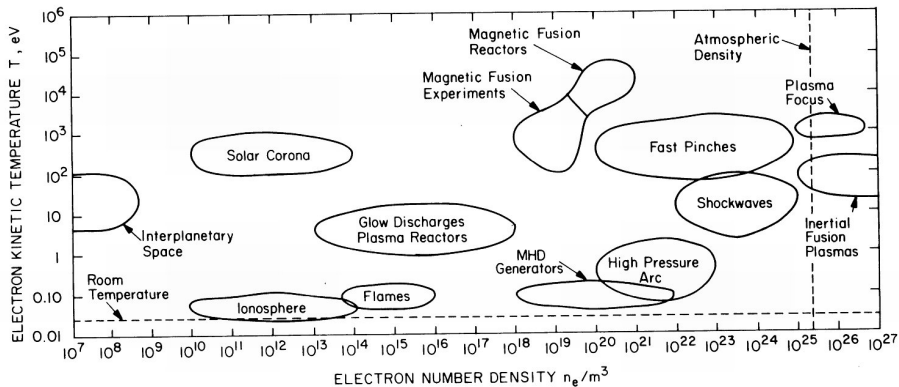
$$W_{DI} = (W_D^2 + W_I^2)^{0.5}$$

$$W_s = (W_m^{1.4} - W_{DI}^{1.4})^{\frac{1}{1.4}}$$

$$N_e [m^{-3}] = 10^{22} \left(\frac{W_s}{4.7333} \right)^{1.49}$$

M. Ivkovic, S. Jovicevic, N. Konjevic: Spectrochimica Acta Part B, 59, (2004) 591





elektronová teplota a koncentrace elektronů pro vybrané typy plazmatu

J. R. Roth, *Industrial Plasma Engineering*, 1995, Bristol: IOP Publishing

Literatura

- Marr, G. V. : Plasma Spectroscopy. Elsevier Publishing Company.(1963)
- Griem H.R.: Spectral Line Broadening by Plasmas, Academic Press, New York (1974)
- Jeremy Tatum: Stellar atmospheres, <https://LibreTexts.org>
- W.Lochte-Holtgreven: Plasma diagnostics, Amsterdam, NH (1968)
- ...
- články
- internet