

谱线基本公式

国家天文台
钱磊
(qianlivan@gmail.com)

Chapter 1

基本理论

1.1 爱因斯坦系数

谱线的自发辐射、受激辐射（也称为负吸收）和吸收可以用三个爱因斯坦系数 A_{ul} 、 B_{ul} 和 B_{lu} 描述。自发跃迁系数由单位时间在单位立体角内发射频率 $\nu_{ul} = \frac{E_u - E_l}{h}$ 的光子的概率 dp_s 定义

$$dp_s = A_{ul} \frac{d\Omega}{4\pi}. \quad (1.1)$$

因此，自发跃迁系数的量纲为 s^{-1} 。

类似地，受激辐射吸收和受激吸收系数由下面两个公式定义

$$dp_i = B_{ul} I_\nu(\Omega) \frac{d\Omega}{4\pi}, \quad (1.2)$$

$$dp_a = B_{lu} I_\nu(\Omega) \frac{d\Omega}{4\pi}, \quad (1.3)$$

其中 $I_\nu(\Omega)$ 是 Ω 方向的辐射强度。注意，爱因斯坦系数和发射谱线的原子、分子的微观性质有关，和物质的宏观性质无关。我们可以在某些特殊的情况下确定这三个系数之间的关系，但这些关系是普遍适用的。

假设处于上能级 E_u 的粒子数密度为 n_u ，处于下能级 E_l 的粒子数密度为 n_l ，在热平衡时，吸收的光子数等于发射的光子数

$$n_u(A_{ul} + B_{ul}I_\nu) \frac{d\Omega}{4\pi} = n_l B_{lu} I_\nu \frac{d\Omega}{4\pi}. \quad (1.4)$$

热平衡时上下能级粒子数满足玻尔兹曼公式

$$\frac{n_u}{n_l} = \frac{g_u}{g_l} \exp\left(-\frac{E_u - E_l}{kT}\right), \quad (1.5)$$

辐射强度 $I_\nu(\Omega, T) = B_\nu(T)$ 。在 $T \rightarrow \infty$ 的极限下， $I_\nu \rightarrow \infty$ ，可以得出

$$B_{ul} = B_{lu} \frac{g_l}{g_u}. \quad (1.6)$$

另一方面，将这个关系式带入方程 1.4 可以得到

$$I_\nu = \frac{A_{ul}}{(n_l/n_u)B_{lu} - B_{ul}} = \frac{A_{ul}}{B_{ul}} \left(e^{h\nu/kT} - 1 \right)^{-1}. \quad (1.7)$$

参考黑体辐射强度公式

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (1.8)$$

可以得到

$$A_{ul} = \frac{2h\nu^3}{c^2} B_{ul}. \quad (1.9)$$

1.2 含爱因斯坦系数的辐射转移方程

可以通过含爱因斯坦系数的辐射转移方程建立爱因斯坦系数和发射系数以及吸收系数之间的关系。自发辐射能量可以表示为

$$dE_s = h\nu_0 n_u A_{ul} \phi_s(\nu) dV \frac{d\Omega}{4\pi} d\nu dt. \quad (1.10)$$

总的受激发射能量为

$$dE_i = h\nu_0 n_u B_{ul} I_\nu \phi_s(\nu) dV \frac{d\Omega}{4\pi} d\nu dt, \quad (1.11)$$

总的吸收能量为

$$dE_a = h\nu_0 n_l B_{lu} I_\nu \phi_a(\nu) dV \frac{d\Omega}{4\pi} d\nu dt \quad (1.12)$$

其中跃迁频率 $\nu_0 \equiv \frac{E_u - E_l}{h}$ ，体积元 $dV = ds d\sigma$ ，其中 $d\sigma$ 是垂直于传播方向的面元。假设 $\phi_s(\nu) = \phi_a(\nu) = \phi(\nu)$ 。在稳态情形下，

$$dE_s + dE_i - dE_a = dI_\nu d\Omega d\nu dt \quad (1.13)$$

将 dE_s 、 dE_i 、 dE_a 的表达式带入整理后可得

$$\frac{dI_\nu}{ds} = -\frac{h\nu_0}{4\pi} (n_l B_{lu} - n_u B_{ul}) I_\nu \phi(\nu) + \frac{h\nu_0}{4\pi} n_u A_{ul} \phi(\nu). \quad (1.14)$$

可以看出，通常辐射转移方程中的吸收系数 κ_ν 可以表示为

$$\kappa_\nu = \frac{h\nu_0}{4\pi} N_l B_{lu} \left(1 - \frac{g_l n_u}{g_u n_l} \right) \phi(\nu), \quad (1.15)$$

发射系数 ϵ_ν 可以表示为

$$\epsilon_\nu = \frac{h\nu_0}{4\pi} n_u A_{ul} \phi(\nu). \quad (1.16)$$

根据爱因斯坦系数之间的关系，吸收系数也可以写为

$$\kappa_\nu = \frac{c^2}{8\pi\nu_0^2} \frac{g_u}{g_l} n_l A_{ul} \left(1 - \frac{g_l n_u}{g_u n_l} \right) \phi(\nu). \quad (1.17)$$

1.3 谱线强度

一个振荡电偶极子 $d(t) = ex_0 \cos \omega t$ 在整个 4π 立体角内的功率为

$$P(t) = \frac{2}{3} \frac{e^2 \dot{v}(t)^2}{c^3} \quad (1.18)$$

一个振荡周期内的平均辐射功率为

$$\langle P \rangle = \frac{64\pi^4}{3c^3} \nu_0^4 \left(\frac{ex_0}{2} \right)^2 \quad (1.19)$$

其中 $\frac{ex_0}{2} \equiv \mu_{ul}$ 为平均电偶极矩。另一方面，平均辐射功率可以用爱因斯坦系数表示为

$$\langle P \rangle = h\nu_0 A_{ul} \quad (1.20)$$

所以可以得到爱因斯坦系数

$$A_{ul} = \frac{64\pi^4}{3hc^3} \nu_0^3 |\mu_{ul}|^2. \quad (1.21)$$

知道了谱线的中心频率和爱因斯坦系数 A_{ul} 就可以计算辐射功率。 A_{ul} 的大小反映了谱线的比强度。

Chapter 2

柱密度的计算

2.1 基本公式

一般情况下，方程 1.17中的 n_u/n_l 是不确定的，因而粒子数密度（体密度） n_l 和发射系数 κ_ν 之间没有简单关系。但是在（局域）热动平衡条件下，上下能级粒子数密度按玻尔兹曼分布布居，

$$\frac{n_u}{n_l} = \frac{g_u}{g_l} \exp\left(-\frac{h\nu_0}{kT}\right) \quad (2.1)$$

于是由方程 1.17可以得到

$$\kappa_\nu = \frac{c^2}{8\pi\nu_0^2} \frac{g_u}{g_l} n_l A_{ul} \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu_0}{kT}\right)\right] \phi(\nu). \quad (2.2)$$

方程两边对光线传播路径积分，注意到 $\int \kappa_\nu ds = \tau_\nu$ ， $\int n_l ds = N_l$ ，可以得到

$$\tau_\nu = \frac{c^2}{8\pi\nu_0^2} \frac{g_u}{g_l} N_l A_{ul} \left[1 - \exp\left(-\frac{h\nu_0}{kT}\right)\right] \phi(\nu) \quad (2.3)$$

此方程两边再对频率积分并整理可以得到（注意到 $\int \phi(\nu) d\nu = 1$ ）

$$N_l = \frac{8\pi\nu_0^2}{c^2} \frac{g_l}{g_u A_{ul}} \frac{1}{[1 - \exp(-\frac{h\nu_0}{kT})]} \int \tau_\nu d\nu \quad (2.4)$$

将对频率 ν 的积分换为对速度 v 的积分，注意到 $d\nu = (\nu_0/c)dv$ ，

$$N_l = \frac{8\pi}{c^3} \frac{g_l \nu_0^3}{g_u A_{ul}} \frac{1}{[1 - \exp(-\frac{h\nu_0}{kT})]} \int \tau_\nu dv \quad (2.5)$$

将常数值带入，速度以km/s为单位，频率以GHz为单位，可以得到

$$N_l = 93.1 \frac{g_l \nu_0^3}{g_u A_{ul}} \frac{1}{[1 - \exp(-4.80 \times \nu_0/T)]} \int \tau_\nu dv. \quad (2.6)$$

分子中的 T 是谱线的激发温度（上下能级布居确定的温度，也就是热动平衡温度）。如果 $h\nu_0 \ll kT$ ，则

$$N_l = 1.94 \times 10^3 \frac{g_l \nu_0^2 T}{g_u A_{ul}} \int \tau_\nu dv. \quad (2.7)$$

这个式子在实际使用的时候并不方便，因为激发温度和光深都是未知的。在光深较小的情况下， $\tau \ll 1$ ，根据辐射转移方程的形式解，对于等温介质，亮温度为

$$T_b(v) = T[1 - e^{\tau(v)}] + T_c e^{\tau(v)}, \quad (2.8)$$

在忽略背景源 T_c 时， $T_b \approx T\tau(v)$ 。下能级粒子柱密度可以表示为

$$N_l = 1.94 \times 10^3 \frac{g_l \nu_0^2}{g_u A_{ul}} \int T_b dv. \quad (2.9)$$

由此公式只能计算出处于下能级的粒子的柱密度。为得到总的柱密度，还需要知道各能级的布居数之间的关系。对于一些特定情况，各能级的布居数之间有确定的关系，由此可以由下能级粒子的柱密度计算总的柱密度。

在热动平衡条件不成立时，从谱线强度（亮温度）只能确定上能级的粒子柱密度 N_u ！

2.2 二能级系统

对于只有两个能级的系统，如果处于热动平衡状态，并且知道激发温度 T_{ex} ，那么上下能级粒子的布居数之比（柱密度之比）为

$$\frac{N_u}{N_l} = \frac{g_u}{g_l} \exp\left(-\frac{h\nu_0}{kT_{ex}}\right). \quad (2.10)$$

因而总的柱密度

$$N(total) = N_u + N_l = N_l \left[1 + \frac{g_u}{g_l} \exp\left(-\frac{h\nu_0}{kT_{ex}}\right)\right]. \quad (2.11)$$

如果 $h\nu_0 \ll kT_{ex}$ ，总的柱密度近似为

$$N(total) \approx N_l \frac{g_u + g_l}{g_l}. \quad (2.12)$$

2.3 热动平衡系统

计算多个能级的热平衡系统总的柱密度需要知道所有态的求和，即配分函数

$$Z = \sum_0^\infty (2J+1) \exp\left[-\frac{hB_e J(J+1)}{kT}\right], \quad (2.13)$$

其中 h 是普朗克常数， $B_e \equiv \hbar/4\pi\Theta_e$ 是转动常数， Θ_e 是分子的转动惯量， $J(J+1)$ 是角动量平方算符的本征值， k 是玻尔兹曼常数。

总的柱密度可以用某个能级（量子数为 J ）粒子的柱密度表示为

$$N(total) = N(J) \frac{Z}{(2J+1) \exp \left[-\frac{hB_e J(J+1)}{kT} \right]}. \quad (2.14)$$

将配分函数的求和近似为积分可以得到

$$Z \approx \int_0^\infty \exp \left[-\frac{hB_e J(J+1)}{kT} \right] (2J+1) dJ = \frac{kT}{hB_e}. \quad (2.15)$$

因而总的柱密度可以近似表示为

$$N(total) = N(J) \frac{kT}{(2J+1)hB_e} \exp \left[\frac{hB_e J(J+1)}{kT} \right]. \quad (2.16)$$

2.4 光深改正

在下能级柱密度表达式（方程 2.9）中使用了近似 $T_b \approx T\tau(v)$ ，这个近似只在光深较小时成立，在光深 $\tau \sim 1$ 时，使用这个表达式需要进行光深改正。

光深改正的思想来源于亮温度的形式解，方程 2.8。由于在方程 2.9中积分函数是 T_b ，而严格表达式中积分函数是光深 τ ，一个简单的想法就是取改正因子为

$$f_\tau = \frac{\tau_0}{1 - e^{\tau_0}}. \quad (2.17)$$

改正后的柱密度为

$$N_c(total) = f_\tau N(total). \quad (2.18)$$

Chapter 3

动理学温度的计算

动理学温度¹是分子云的一个重要的物理参量。和柱密度的计算正好相反，动理学温度的确定需要使用光学厚谱线。

对于动理学温度为 T_K 的等温气体云，辐射转移方程的解可以写为

$$\frac{1}{e^{T_0/T_L} - 1} = \left(\frac{1}{e^{T_0/T_K} - 1} - \frac{1}{e^{T_0/T_c} - 1} \right) (1 - e^{-\tau(v)}), \quad (3.1)$$

其中 $T_0 = h\nu_0/k$ ， T_c 是背景连续谱亮温度。对于光线厚谱线， $\tau(v) \gg 1$ ，因此右边第二个括号可以近似为1，也就是和速度（频率）无关。因此，可以由光学厚谱线的峰值温度和背景连续谱亮温度（通常为宇宙微波背景辐射温度2.73K）计算动理学温度 T_K 。

¹为了区分Dynamic和Kinetic，这里按照等离子体里面的译法，把Kinetic译作动理学。