

ВЛИЯНИЕ СТОЛКНОВЕНИЙ С ВОДОРОДОМ НА ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТИТАНА В ХОЛОДНЫХ ЗВЕЗДАХ

© 2020 г. Т. М. Ситнова^{1*}, С. А. Яковлева², А. К. Беляев², Л. И. Машонкина¹

¹Институт астрономии РАН, Москва, Россия

²Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 25.11.2019 г.

После доработки 26.11.2019 г.; принята к публикации 05.12.2019 г.

Исследуется возможность решения проблемы расхождения не-ЛТР содержания по линиям Ti I и Ti II у звезд с дефицитом металлов путем применения более точных данных для учета столкновений с атомами водорода. Для этого впервые были рассчитаны константы скоростей для связанно-связанных переходов при неупругих столкновениях атомов и ионов титана с атомами водорода, а также для процессов перезарядки: $Ti\ I + H \leftrightarrow Ti\ II + H^-$ и $Ti\ II + H \leftrightarrow Ti\ III + H^-$. Влияние этих данных на определение не-ЛТР содержания было проверено для Солнца и четырех звезд с дефицитом металлов. Для Ti I и Ti II применение полученных констант привело к увеличению отклонений от ЛТР и увеличению содержания титана по сравнению с тем, что получается с использованием приближенных формул для расчета скоростей. У звезд с дефицитом металлов так и не удалось согласовать не-ЛТР содержание по линиям двух стадий ионизации. Известная в литературе проблема не может быть решена только на основе уточнения скоростей столкновений с атомами водорода в не-ЛТР расчетах с классическими моделями атмосфер.

Ключевые слова: содержание титана в звездах, формирование спектральных линий в неравновесных условиях, неупругие столкновения с атомами водорода.

DOI: 10.31857/S0320010820010052

ВВЕДЕНИЕ

У звезд в широком диапазоне спектральных классов от K до A титан наблюдается в спектральных линиях двух стадий ионизации (Ti I и Ti II). Линии титана могут быть использованы для определения параметров атмосфер звезд — эффективной температуры ($T_{\text{эфф}}$) и ускорения силы тяжести ($\log g$). Однако у звезд с дефицитом металлов существует проблема расхождения содержания по линиям Ti I и Ti II (Бергеманн и др., 2011; Ситнова и др. 2016а, б). В атмосферах звезд с $T_{\text{эфф}} > 4000$ K титан сильно ионизован, и концентрация Ti I может сильно отличаться от равновесной, если средняя интенсивность ионизирующего излучения отличается от функции Планка. В работах Бергеманн и др. (2011) и Ситновой и др. (2016а) показано, что для расчетов формирования спектральных линий Ti I и Ti II важно учитывать отклонения от локального термодинамического равновесия (не-ЛТР эффекты). Причина отклонений для Ti I — сверх-ионизация уровней низкого возбуждения ультра-

фиолетовым (УФ) излучением, которая приводит к недонаселенности атомных уровней и ослаблению спектральных линий по сравнению с равновесным случаем. Точность не-ЛТР расчетов зависит от полноты и качества используемых атомных данных. В не-ЛТР расчетах для Ti I–II (Бергеманн и др., 2011, 2012; Ситнова и др. 2016а, б; Машонкина и др., 2017) неупругие столкновения с водородом учитывались с помощью дравиновского приближения (Дравин, 1968, 1969; Стинбок, Холвегер, 1984) с применением масштабирующего коэффициента к скоростям (S_H). Применение этого приближения для описания неупругих столкновений с атомами водорода критикуется в литературе как физически необоснованное (Барклем и др., 2011). Однако оно применяется астрофизиками для не-ЛТР расчетов при отсутствии точных квантово-механических расчетов.

В работах Бергеманн и др. (2011) и Ситновой и др. (2016а) показано, что не-ЛТР ведет к согласию содержания по линиям Ti I и Ti II у звезд спектральных классов от G до A и металличностью, близкой к солнечной. Однако для звезд

*Электронный адрес: sitnova@inasan.ru

гало с низкой металличностью, $[\text{Fe}/\text{H}]^1 < -2$, с хорошо известными параметрами атмосфер не удалось согласовать не-ЛТР содержание по линиям Ti I и Ti II ни с $S_{\text{H}} = 1$ (Ситнова и др., 2016а), ни с $S_{\text{H}} = 3$ (Бергеманн и др., 2011). Проблема расхождения не-ЛТР содержания по линиям Ti I и Ti II в зависимости от металличности обсуждалась Ситновой (2016б). Для звезд-карликов в окрестности Солнца с металличностью в диапазоне $-2.6 < [\text{Fe}/\text{H}] < 0.2$ мы получили согласующееся содержание по двум стадиям ионизации для звезд с $[\text{Fe}/\text{H}] > -2$ и расхождение в среднем не-ЛТР содержании по линиям Ti I и Ti II, $\Delta_{\text{Ti I-Ti II}}$ до 0.35 dex для звезд с более низкой металличностью. Похожее поведение $\Delta_{\text{Ti I-Ti II}}$ было также получено и для холодных гигантов в работе Машонкиной и др. (2017). Интересно отметить, что из-за более низкой эффективной температуры гигантов содержание по двум стадиям ионизации начинает расходиться при более низкой металличности, $[\text{Fe}/\text{H}] < -3$.

В настоящий момент не-ЛТР расчеты неверно предсказывают величину отклонений от ЛТР для Ti I, а возможно, и для Ti II у звезд с дефицитом металлов. Отклонения от ЛТР увеличиваются с понижением металличности из-за роста УФ-потока, а также из-за уменьшения скоростей столкновений с электронами. Из-за меньшей концентрации электронов точность учета столкновений с атомами водорода становится определяющим фактором в не-ЛТР расчетах для звезд с низкой металличностью. В этой работе впервые проведены расчеты констант скоростей для связанно-связанных переходов при неупругих столкновениях атомов и ионов титана с атомами водорода, а также для процессов перезарядки: $\text{Ti I} + \text{H} \leftrightarrow \text{Ti II} + \text{H}^-$ и $\text{Ti II} + \text{H} \leftrightarrow \text{Ti III} + \text{H}^-$. Эти результаты имеют важное практическое значение для моделирования формирования линий титана в атмосферах холодных звезд.

Расчеты констант скоростей для переходов при неупругих столкновениях атомов и ионов титана с атомами водорода представлены в разделе 1. Краткое описание выборки звезд, на которых мы проверяли влияние полученных констант на не-ЛТР содержание, дано в разделе 2. Метод расчета спектров описан в разделе 3. Результаты не-ЛТР расчетов и полученное не-ЛТР содержание титана представлены в разделах 4 и 5 соответственно.

¹ Мы используем стандартное обозначение для элементных отношений $[\text{X}/\text{H}] = \log(N_{\text{X}}/N_{\text{tot}}) - \log(N_{\text{X}}/N_{\text{tot}})$.

КОНСТАНТЫ СКОРОСТЕЙ НЕУПРУГИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ С ВОДОРОДОМ

Расчеты констант скоростей проведены для связанно-связанных переходов при неупругих столкновениях атомов и ионов титана с атомами водорода, а также для процессов перезарядки: $\text{Ti I} + \text{H} \leftrightarrow \text{Ti II} + \text{H}^-$ и $\text{Ti II} + \text{H} \leftrightarrow \text{Ti III} + \text{H}^-$. Для расчетов мы использовали квантовый модельный подход, предложенный в работах Беляева и Яковлевой (2017а, б) и базирующийся на применении асимптотического полуэмпирического подхода и двухканальной модели Ландау–Зинера в рамках подхода Борна–Оппенгеймера. Данный подход позволяет провести расчеты констант скоростей неупругих процессов, связанных с переходами за счет дальнедействующего ионно-ковалентного взаимодействия электронных состояний квазимолекул, образованных при столкновениях атомов и ионов различных химических элементов с атомами и анионами водорода.

При рассмотрении столкновений Ti I с водородом в расчеты включены 107 молекулярных состояний квазимолекулы TiH, два из которых соответствуют ионной паре: $\text{Ti II} (3d^2 4s \ ^4F) + \text{H}^-$ и $\text{Ti II} (3d^3 \ ^4F) + \text{H}^-$. Модельный подход позволяет учесть только одноэлектронные переходы между различными состояниями квазимолекулы, в связи с чем проведены два расчета констант скоростей, в один из которых включены состояния $\text{Ti I} (3d^2 4s \text{ nl } \ ^{3,5}L) + \text{H}$ и $\text{Ti II} (3d^2 4s \ ^4F) + \text{H}^-$, в другой — состояния $\text{Ti I} (3d^3 \text{ nl } \ ^{3,5}L) + \text{H}$ и $\text{Ti II} (3d^3 \ ^4F) + \text{H}^-$. Отметим, что состояния $\text{Ti I} (3d^3 4s \ ^{3,5}L)$ включены в оба рассмотрения. Переходы между электронными состояниями могут происходить внутри различных молекулярных симметрий, однако, так как обе ионные конфигурации порождают молекулярные состояния симметрий $^4\Sigma^-$, $^4\Pi$, $^4\Delta$ и $^4\Phi$, в рассмотрение включены ковалентные состояния только таких же молекулярных симметрий. Переходы, происходящие внутри каждой молекулярной симметрии, рассмотрены отдельно, а константы скоростей для каждого неупругого процесса просуммированы по молекулярным симметриям.

При исследовании столкновений Ti II с водородом рассмотрено 90 молекулярных состояний квазимолекулы TiH^+ , в том числе одно состояние, соответствующее ионной паре $\text{Ti III} (3d^2 \ ^3F) + \text{H}^-$. Ионное состояние обладает молекулярными симметриями $^4\Sigma^-$, $^4\Pi$, $^4\Delta$ и $^4\Phi$, поэтому расчеты проведены внутри каждой из молекулярных симметрий.

Графические представления рассчитанных констант скоростей всех неупругих процессов представлены на рис. 1. Значение константы скорости

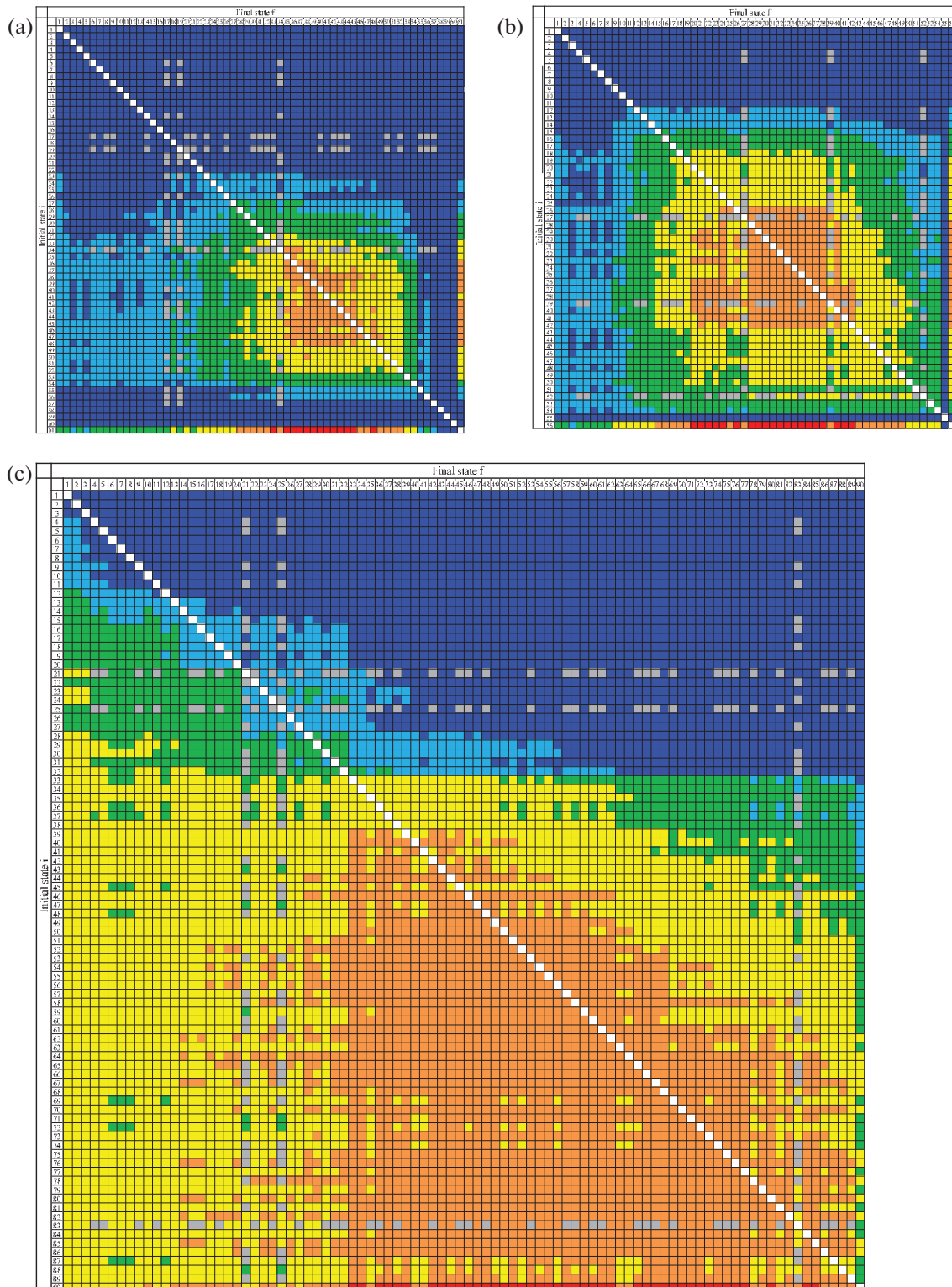


Рис. 1. Графическое представление констант скоростей неупругих процессов, происходящих при столкновениях Ti I (a, b) и Ti II (c) с водородом. Константы скоростей со значениями, превышающими 10^{-8} $\text{см}^3/\text{с}$, показаны красным, со значениями 10^{-9} – 10^{-8} $\text{см}^3/\text{с}$ — оранжевым, 10^{-10} – 10^{-9} $\text{см}^3/\text{с}$ — желтым, 10^{-11} – 10^{-10} $\text{см}^3/\text{с}$ — зеленым, 10^{-12} – 10^{-11} $\text{см}^3/\text{с}$ — голубым, синим показаны константы со значениями меньше 10^{-12} $\text{см}^3/\text{с}$.

на данном рисунке приведено цветом от красного (со значениями больше 10^{-8} см³/с) до синего (со значениями меньше 10^{-12} см³/с). Отметим, что константы скоростей упругих процессов в данном исследовании не рассчитывались, в связи с чем обозначены белым цветом, а константы скоростей процессов, связанных с переходами между состояниями различной молекулярной симметрии, равны нулю и обозначены серым цветом.

На двух верхних рисунках показаны константы скоростей процессов, происходящих при столкновениях Ti I с водородом: на рис. 1а приведены константы процессов, связанных с переходами за счет взаимодействия ковалентных состояний Ti I ($3d^2 4s\ n\ l\ 3,5L$) + H с первым ионным состоянием Ti II ($3d^2 4s\ 4F$) + H⁻, на рис. 1б — за счет взаимодействия состояний Ti I ($3d^3\ n\ l\ 3,5L$) + H со вторым ионным состоянием Ti II ($3d^3\ 4F$) + H⁻. Для использования в дальнейших расчетах составлена полная матрица констант скоростей для переходов между всеми 107 рассмотренными состояниями. Для процессов возбуждения и деактивации, связанных с переходами между состояниями Ti I ($3d^3 4s\ 3,5L$), которые осуществляются за счет взаимодействия с обеими ионными конфигурациями, произведено суммирование. Константы скоростей процессов, связанных с переходами между состояниями, взаимодействующими с различными ионными конфигурациями, равны нулю. На рис. 1с приведены константы скоростей неупругих процессов, происходящих при столкновениях Ti II с водородом.

Из графических представлений, приведенных на рис. 1, видно, что наибольшие константы скоростей соответствуют процессам взаимной нейтрализации в состоянии, для которых энергии связи электрона с атомом попадают в оптимальное окно, а также процессам, связанным с переходами между этими состояниями. Как показано в работах Беляева и Яковлевой (2017а, б), энергия связи электрона в таких состояниях составляет около 2 эВ для столкновений нейтральных атомов с водородом, что соответствует энергиям возбуждения Ti I в интервале 4–5 эВ, и около 4 эВ для столкновений однозарядных положительных ионов с водородом, что соответствует энергиям возбуждения Ti II в интервале 8–10 эВ.

Полученные константы скоростей доступны на сайте http://www.non-lte.com/ti_h.html.

ВЫБОРКА ЗВЕЗД, ПАРАМЕТРЫ АТМОСФЕР, НАБЛЮДЕНИЯ

Выборка звезд включает в себя четыре звезды с дефицитом металлов и Солнце. Параметры их атмосфер приведены в табл. 1. Для HD 84937,

HD 140283 и HD 122563 мы используем параметры атмосфер, как в работе Машонкиной и др. (2019). Здесь мы только отметим, что на основе фотометрических измерений (Касагранде и др., 2010), измерений угловых диаметров звезд (Каровикова и др., 2018; Кривей и др., 2012, 2015) и расстояний (Байлер-Джонс и др., 2018), полученных по тригонометрическим параллаксам из архива Gaia DR2 (Браун и др., 2018), эффективная температура (T_{eff}) и ускорение силы тяжести ($\log g$) для этих звезд надежно зафиксированы в пределах 50 К и 0.05 dex. Для гиганта с ультранизкой металличностью CD-38245 параметры были определены нами ранее (Ситнова и др., 2019) на основе калибровок цвет-звездная величина, расстояния, изохрон, а также не-ЛТР анализа профилей балмеровских линий и ионизационного равновесия Ca I–Ca II.

Для определения содержания мы используем наблюдения высокого спектрального разрешения ($\lambda/\Delta\lambda > 45\ 000$) с отношением сигнал/шум $S/N > 60$. Спектры взяты из архивов спектрографов UVES². Мы также использовали спектры в ультрафиолетовом (УФ) диапазоне (1875–3158 Å) с отношением сигнала к шуму $S/N = 52$ и 90 для HD 84937 и HD 140283 соответственно, полученные на телескопе Хаббл со спектрографом STIS. УФ-спектры были обработаны Томасом Айресом и находятся в открытом доступе на сайте <http://casa.colorado.edu/~ayres/ASTRAL>. Солнечное содержание определено с использованием спектра Солнца как звезды (Куруц и др., 1984).

МЕТОД РАСЧЕТА СПЕКТРА

В этой работе содержание титана по линиям Ti I и Ti II определено в неравновесном случае, когда населенность каждого уровня в модели атома вычисляется путем совместного решения системы уравнений статистического равновесия (СР) и переноса излучения. Решение такой системы уравнений в заданной модели атмосферы осуществлялось по программе DETAIL, разработанной Батлером и Гиддингсом (1985). Расчеты коэффициента непрозрачности в непрерывном спектре усовершенствованы, как описано Машонкиной и др. (2011). Полученные в DETAIL населенности уровней использовались далее для расчета профилей линий по программе synthV_NLTE (Цымбал и др., 2019). Для сравнения теоретического спектра с наблюдаемым мы используем программу Олега Кочухова

² http://archive.eso.org/eso/eso_archive_main.html

Таблица 1. Параметры атмосфер и содержание титана у звезд выборки

Звезда	$T_{\text{эф}}, \text{K}$	$\log g$	$[\text{Fe}/\text{H}]$	$\xi_t, \text{км/с}$	ЛТР		не-ЛТР	
					$\log A_{\text{Ti I}}$	$\log A_{\text{Ti II}}$	$\log A_{\text{Ti I}}$	$\log A_{\text{Ti II}}$
Солнце	5777	4.44	0.0	0.9	-7.12 ± 0.06	-7.05 ± 0.05	-7.09 ± 0.08	-7.06 ± 0.05
HD 84937	6350	4.09	-2.18	1.7	-8.81 ± 0.03	-8.86 ± 0.10	-8.65 ± 0.03	-8.82 ± 0.09
HD 140283	5780	3.70	-2.43	1.3	-9.34 ± 0.08	-9.31 ± 0.07	-9.16 ± 0.08	-9.27 ± 0.06
HD 122563	4600	1.40	-2.55	1.6	-9.81 ± 0.06	-9.42 ± 0.08	-9.60 ± 0.11	-9.40 ± 0.07
CD-38 245	4850	1.80	-3.70	1.7	-10.80 ± 0.04	-10.86 ± 0.11	-10.43 ± 0.05	-10.68 ± 0.10

Таблица 2. Список линий Ti II в УФ-диапазоне

$\lambda, \text{\AA}$	$E_{\text{exc}}, \text{эВ}$	$\log gf$	Источник	$\log \gamma_r, \text{с}^{-1}$	$\log \gamma_4/N_e, \text{с}^{-1} \text{см}^{-3}$	$\log \gamma_6/N_H, \text{с}^{-1} \text{см}^{-3}$
2041.47	0.57	-1.12	P	8.41	-6.38	-7.84
2043.23	0.57	-1.82	K	8.41	-6.38	-7.84
2054.53	0.61	-0.87	P	8.41	-6.38	-7.84
2135.71	1.18	-1.56	P	8.42	-6.35	-7.83
2162.68	1.24	-0.49	P	8.42	-6.35	-7.83
2229.24	1.08	-1.21	P	8.41	-6.38	-7.84
2261.19	1.89	0.21	K	8.52	-6.34	-7.83
2534.62	0.12	-0.93	W	8.35	-6.47	-7.86
2884.10	1.13	-0.23	W	8.45	-6.54	-7.83
3046.68	1.16	-0.81	W	8.32	-6.44	-7.86
3148.04	0.00	-1.22	P	8.16	-6.41	-7.85

Примечание. P — Пикеринг и др. (2001), K — база Р. Куруца (kurucz.harvard.edu), W — Вуд и др. (2013).

binmag³. Мы используем классические одномерные модели атмосфер, интерполированные из сетки MARCS (Густафсон и др., 2008).

Мы взяли многоуровневую модель атома Ti I–II из нашей предыдущей работы (Ситнова и др., 2016а). Разница в не-ЛТР расчетах между Ситновой и др. (2016а) и этой работой заключается в способе учета неупругих столкновений с атомами водорода. Ситнова и др. (2016а) применяли дравиновскую формулу с масштабирующим коэффициентом $S_H = 1$. В этой работе мы рассчитали скорости неупругих процессов столкновений по приближенному, но физически обоснованному методу, предложенному Беляевым и Яковлевой (2017а, б) на основании квантово-механических расчетов (см. раздел 1).

Список линий Ti I и Ti II в видимом диапазоне взят из нашей предыдущей работы (Ситнова, 2016б). Атомные данные для переходов — длина волны λ , сила осциллятора ($\log gf$), энергия возбуждения нижнего уровня (E_{exc}) были взяты из базы атомных данных VALD (Купка и др., 1999; Рябчикова и др., 2015). Отметим, что gf -величины для Ti I (Лоулера и др., 2013) и Ti II (Вуд и др., 2013) были получены в одной и той же лаборатории. В табл. 2 мы приводим атомные данные для линий Ti II в ультрафиолетовой области спектра, которые впервые использовались для определения не-ЛТР содержания у HD 84937 и HD 140283. Силы осцилляторов взяты из работ: Вуд и др. (2013), Пикеринг и др. (2001) или базы данных Р. Куруца (kurucz.harvard.edu), для каждой линии источник указан в табл. 2.

³ <http://www.astro.uu.se/~oleg/download.html>

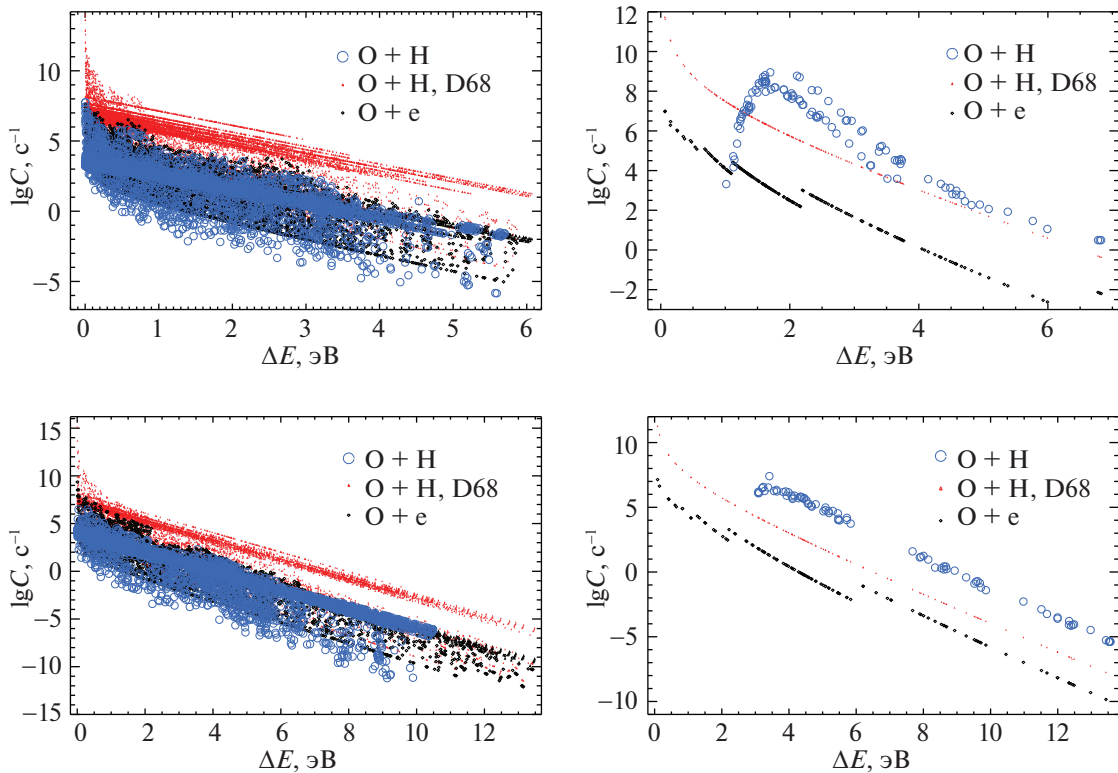


Рис. 2. Левая колонка: скорости возбуждения переходов Ti I (верхний ряд) и Ti II (нижний ряд) при неупругих соударениях с атомами водорода (кружки) и электронами (черные ромбы). Для сравнения приведены скорости возбуждения при столкновениях с атомами водорода, рассчитанные по формулам Дравина и Такеды (красные треугольники). Правая колонка: скорости образования пары ионов при столкновениях с атомами водорода и ионизации при электронных ударах с использованием аналогичных символов. Данные приведены для температуры 5000 К, электронной концентрации $\log N_e = 11.9$ и концентрации атомов водорода $\log N_H = 16.8$.

СТАТИСТИЧЕСКОЕ РАВНОВЕСИЕ Ti I-II

В атмосферах звезд с $T_{\text{эф}} > 4000$ К титан сильно ионизован. Например, в солнечной атмосфере всюду доля $N_{\text{Ti II}}/N_{\text{Ti I}} \approx 10^2$. Из-за малой концентрации Ti I по сравнению с Ti II небольшое отклонение средней интенсивности ионизирующего излучения от функции Планка приводит к заметному отклонению концентрации Ti I от равновесной. Такой механизм отклонений от ЛТР называется сверхионизацией и приводит к недонаселенности атомных уровней по сравнению с ЛТР. Для Ti II, как для доминирующей стадии ионизации, отклонения от ЛТР невелики и происходят за счет связанно-связанных переходов.

На рис. 2 показаны скорости возбуждения, вызванного столкновениями с электронами и атомами H I, а также скорости образования пары ионов при столкновениях с электронами и атомами H I при физических условиях, соответствующих глубине формирования линий в атмосферах холодных звезд с дефицитом металлов. Для сравнения мы показываем скорости возбуждения при неупругих столкновениях с атомами водорода, которые применяли раньше из-за отсутствия более точных данных. Для

расчета скоростей радиативно разрешенных переходов мы использовали формулу Дравина (1968, 1969), а для радиативно запрещенных переходов — подход, предложенный в работе Такеды (1994). Он заключается в том, что скорость неупругих соударений с атомами водорода (C_H) вычисляется через электронную скорость (C_e) из соотношения $C_H = C_e \sqrt{m_e/m_H} N_H/N_e$, где m_H , m_e и N_H , N_e — массы и концентрации атомов водорода и электронов. Для Ti I и Ti II скорости возбуждения при столкновениях с атомами водорода, полученные в этой работе, равны по порядку величины скоростям при столкновениях с электронами и на три порядка меньше дравиновских скоростей. Скорости образования пары ионов при столкновениях с атомами водорода превышают скорости ионизации при электронных ударах примерно на три порядка в диапазоне энергий ионизации более 2 эВ.

Полученные в этой работе скорости принципиально отличаются от тех, что мы применяли раньше, поскольку основаны на физически реалистичном предположении. Во-первых, процесс превращения, например Ti I в Ti II, происходит посредством перезарядки: $\text{Ti I} + \text{H} \longleftrightarrow \text{Ti II} + \text{H}^-$,

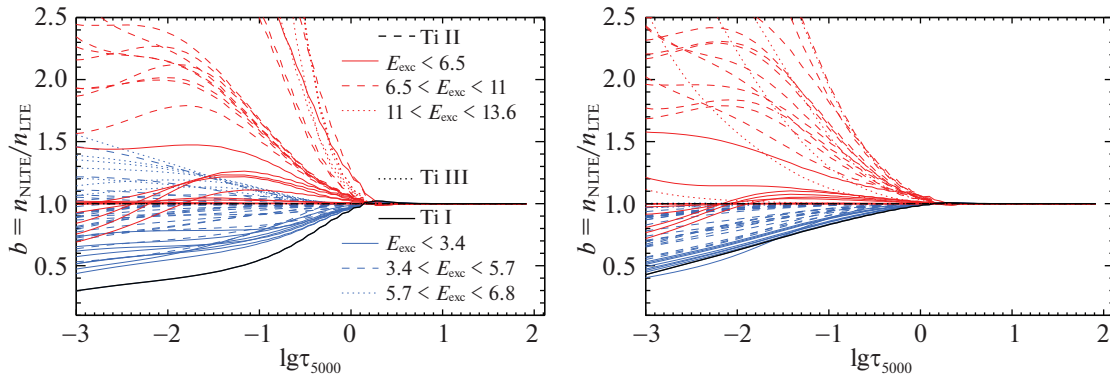


Рис. 3. b -факторы уровней Ti I и Ti II в атмосфере с $T_{\text{eff}} = 6350$ K, $\log g = 4.09$, $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.1$, рассчитанные со скоростями неупругих столкновений с атомами водорода из этой работы (слева) и по приближенным формулам (справа). Разными линиями показаны b -факторы уровней в разных диапазонах энергии возбуждения.

а формула Дравина получена для ионизации: $\text{Ti I} + \text{H} \longleftrightarrow \text{Ti II} + \text{H} + e$. Во-вторых, при расчете скоростей возбуждения по формулам Дравина и Такеды все уровни в модели атома связаны между собой посредством столкновений. Квантово-механические расчеты предсказывают, что переходы при неупругих столкновениях с атомами водорода происходят между уровнями, которые удовлетворяют правилам отбора для молекулярной симметрии. В результате уменьшения количества переходов, для которых неупругие столкновения с атомами водорода эффективны, вместе с уменьшением самих скоростей этих переходов происходит усиление отклонений от ЛТР.

Величину отклонения населенностей уровней от равновесных принято характеризовать b -факторами, $b_i = N_{i,\text{non-LTE}}/N_{i,\text{LTE}}$, где $N_{i,\text{non-LTE}}$ и $N_{i,\text{LTE}}$ — населенности уровня i в не-ЛТР и ЛТР случаях соответственно. На рис. 3 показаны b -факторы уровней Ti I и Ti II в атмосфере с $T_{\text{eff}} = 6350$ K, $\log g = 4.09$, $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.1$, рассчитанные со скоростями неупругих столкновений с атомами водорода из этой работы и по приближенным формулам. Уровни Ti I с энергией возбуждения $E_{\text{exc}} < 5$ эВ опустошены в результате сверхионизации УФ-излучением. Чем меньше энергия возбуждения уровня, тем больше его недонаселенность, что приводит к ослаблению линий Ti I за счет уменьшения коэффициента непрозрачности в линии ($\kappa_\nu \simeq b_l$, где b_l — b -фактор нижнего уровня). Уровни Ti II, наоборот, перенаселены из-за радиативной накачки тем больше, чем больше их энергия возбуждения. С одной стороны, коэффициент непрозрачности в линии растет из-за перенаселенности нижнего уровня, а с другой — функция источников превышает функцию Планка на частоте перехода из-за большей перенаселенности верхнего уровня по сравнению с нижним ($S_\nu/B_\nu \simeq b_u/b_l$, где S_ν — функция источников,

B_ν — функция Планка, b_u и b_l — b -факторы верхнего и нижнего уровней соответственно). Поэтому для линий Ti II не-ЛТР может приводить как к ослаблению, так и усилению линий. Основной уровень доминирующей стадии ионизации — Ti II сохраняет равновесную населенность во всех слоях атмосферы.

С применением новых данных отклонения от ЛТР усиливаются из-за уменьшения столкновительных скоростей. Наряду с усилением отклонений от ЛТР в целом, важно, что ослабевает связь между уровнями с близкими энергиями. Сильнее всего этот эффект проявляется для основного уровня Ti I, который отделился от уровней с энергией возбуждения $E_{\text{exc}} < 3.4$ эВ (рис. 3).

СОДЕРЖАНИЕ ТИТАНА У ЗВЕЗД ВЫБОРКИ

Для Солнца и четырех звезд с дефицитом металлов мы определили содержание титана в ЛТР и не-ЛТР случаях по линиям Ti I и Ti II. Применение точных данных привело к увеличению среднего не-ЛТР содержания по линиям Ti I и Ti II у всех звезд выборки. Для Солнца среднее не-ЛТР содержание увеличилось всего на 0.01 dex как по линиям Ti I, так и по линиям Ti II. Несмотря на малое изменение в среднем не-ЛТР содержании, для отдельных линий Ti I разница в столкновительных скоростях приводит к изменениям в не-ЛТР содержании до 0.09 dex как в большую, так и в меньшую сторону. У Солнца не-ЛТР поправки к содержанию ($\Delta_{\text{non-LTE}} = \log A_{\text{non-LTE}} - \log A_{\text{LTE}}$) для линий Ti I и Ti II не превышают 0.1 dex по абсолютной величине.

На рис. 4 для звезд с дефицитом металлов показаны не-ЛТР поправки для разных линий, рассчитанные с точными и приближенными скоростями (по формулам Дравина и Такеды). Не-ЛТР

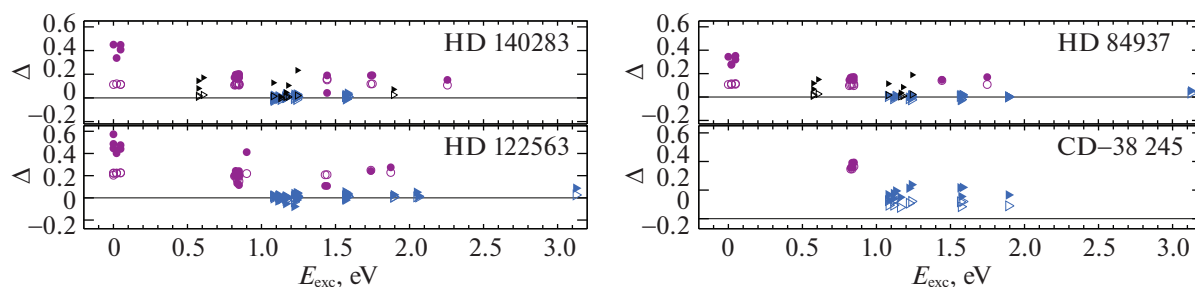


Рис. 4. He-ЛТР поправки к содержанию для разных линий Ti I (кружки) и Ti II (треугольники) у звезд с дефицитом металлов в зависимости от энергии возбуждения нижнего уровня. Поправки, полученные с точными скоростями неупругих соударений с атомами водорода и теми, что рассчитаны по приближенным формулам Дравина и Такеды, показаны закрашенными и незакрашенными символами соответственно. He-ЛТР поправки для линий Ti II в УФ-области спектра показаны треугольниками меньшего размера.

расчеты с приближенными скоростями приводят к одинаковым по величине не-ЛТР поправкам для линий, образующихся при переходах с разной энергией возбуждения нижнего уровня. Для большинства линий применение точных данных привело к увеличению не-ЛТР поправок. Наибольшее изменение в не-ЛТР содержании мы получили для линий Ti I, образующихся в переходах с основного уровня. Для этих линий не-ЛТР поправки увеличиваются на величину до 0.3 dex у HD 140283 и HD 122563. При этом с новыми данными сами не-ЛТР поправки у разных звезд составляют 0.3–0.5 dex и 0.1–0.2 dex для линий с основного уровня и уровней с $E_{\text{exc}} > 0.8$ эВ соответственно.

Для линий Ti II в видимой области спектра изменения в не-ЛТР содержании малы и не превышают 0.1 dex, в то время как для линий Ti II в УФ-области получены значительные изменения, например, 0.2 dex для Ti II 2162 Å у HD 140283. Сами не-ЛТР поправки либо положительные, до 0.25 dex, либо небольшие отрицательные — не больше 0.1 dex по абсолютной величине для сильных линий с эквивалентной шириной $100 \text{ мÅ} < EW < 120 \text{ мÅ}$.

На рис. 5 показано полученное не-ЛТР и ЛТР содержание по отдельным линиям у звезд выборки с дефицитом металлов. Изменения в скоростях привели к расхождению содержания по линиям Ti I с основного уровня и с энергией возбуждения $E_{\text{exc}} > 0.8$ эВ у всех четырех звезд. Такое поведение наблюдается у линий Fe I с $E_{\text{exc}} < 1.5$ эВ и может интерпретироваться как проявление конвекции (3D-эффектов, см., например, Коллет и др., 2007; Добровольская и др., 2013; Амарси и др., 2019). Эти линии не рекомендуют использовать для определения содержания с классическими моделями атмосфер. В этой работе среднее содержание по линиям Ti I вычислено без учета линий, образующихся при переходах с основного уровня. В табл. 1 мы приводим не-ЛТР и ЛТР

содержание по линиям Ti I и Ti II. Для HD 140284 и HD 84937, для которых доступны спектры в УФ-области, не-ЛТР содержание по линиям Ti II в видимой и УФ-области хорошо согласуется между собой.

Для звезд выборки мы сравниваем содержание титана, вычисленное отдельно по линиям Ti I и Ti II. Для Солнца не-ЛТР ведет к согласию содержания по линиям разных стадий ионизации. Средняя разница в содержании между Ti I и Ti II $\Delta_{\text{Ti I-Ti II}} = -0.07 \text{ dex} \pm 0.08$ и $-0.03 \text{ dex} \pm 0.09$ в ЛТР и не-ЛТР соответственно. Для HD 140283, HD 84937 и CD-38 245 содержание по двум стадиям ионизации согласуется в ЛТР. Для HD 122563 в ЛТР разница $\Delta_{\text{Ti I-Ti II}} = 0.4 \text{ dex}$. В не-ЛТР содержание по линиям Ti I и Ti II не согласуется, и $\Delta_{\text{Ti I-Ti II}} = 0.10 \text{ dex} \pm 0.10$, $0.17 \text{ dex} \pm 0.09$, $-0.20 \text{ dex} \pm 0.13$ и $0.25 \text{ dex} \pm 0.11$, для HD 140283, HD 84937, HD 122563 и CD-38 245 соответственно. Такое поведение нельзя объяснить ошибками в определении параметров атмосфер. Например, для CD-38 245, где неопределенности в T_{eff} и $\log g$ наибольшие по сравнению с другими звездами выборки, уменьшение T_{eff} на 250 K или увеличение $\log g$ на 0.3 позволяет уменьшить расхождение лишь на 0.15 dex и 0.09 dex соответственно. К тому же такие изменения в параметрах привели бы к неправдоподобному эволюционному статусу CD-38 245, который не соответствует ее металличности, возрасту и положению на соответствующей изохроне.

Проблема расхождения не-ЛТР содержания по линиям Ti I и Ti II у звезд с дефицитом металлов обсуждалась в литературе (Бергеманн и др., 2011; Ситнова и др., 2016а, б). В табл. 3 мы привели разницу в содержании $\Delta_{\text{Ti I-Ti II}}$ для трех звезд выборки, полученную в этой работе, в нашей предыдущей работе (Ситнова и др., 2016а) и в работе Бергеманн и др. (2011). Для сравнения мы также приводим аналогичные величины для железа $\Delta_{\text{Fe I-Fe II}}$, полученные Машонкиной и др. (2019) с

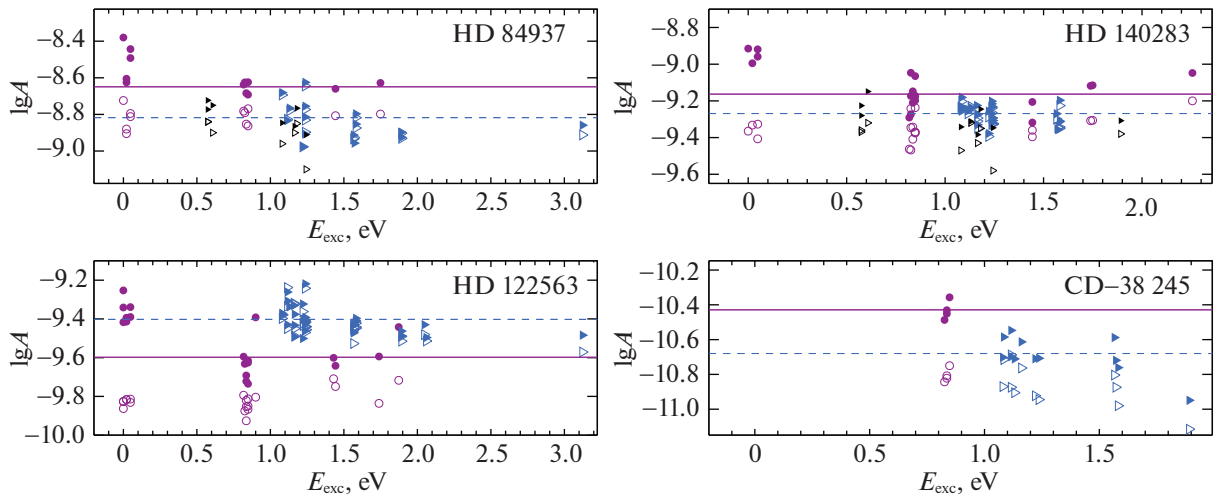


Рис. 5. Содержание титана у звезд с дефицитом металлов по разным линиям Ti I (кружки) и Ti II (треугольники) в зависимости от энергии возбуждения нижнего уровня. Не-ЛТР и ЛТР содержание показано закрашенными и незакрашенными символами соответственно. Для HD 84937 и HD 140283 содержание титана по линиям Ti II в УФ-области спектра показано треугольниками меньшего размера. Среднее не-ЛТР содержание по линиям Ti I (без учета линий с $E_{\text{exc}} = 0$ эВ) и Ti II показано сплошной и пунктирной линией соответственно.

применением точных квантово-механических данных для столкновений $\text{Fe I} + \text{H}$ и $\text{Fe II} + \text{H}$. Для титана ни в одной из работ не было получено согласия не-ЛТР содержания по разным стадиям ионизации. Бергеманн и др. (2011) предположили, что проблема может заключаться в недостаточной точности атомных данных. С того времени в атомных данных для расчетов линий Ti I и Ti II достигнут значительный прогресс и появились (i) лабораторные измерения сил осцилляторов переходов Ti I (Лоулер и др., 2013) и Ti II (Вуд и др., 2013); (ii) точные квантово-механические расчеты сечений фотоионизации для Ti I (Нахар, 2015) и Ti II (К. Батлер, частное сообщение, 2015); (iii) точные квантово-механические расчеты констант переходов при неупругих соударениях с атомами водорода (эта работа). Однако, как можно заметить из табл. 3, применение этих данных так и не позволило решить проблему расхождения содержания по линиям Ti I и Ti II у звезд с дефицитом металлов. Мы отмечаем, что для железа тоже наблюдается намек на более высокое содержание по линиям Fe I по сравнению с Fe II в не-ЛТР (Машонкина и др. 2011, 2019). Однако этот эффект для железа меньше, чем для титана, возможно, из-за меньших отклонений от ЛТР.

Проблема относится больше к линиям Ti I, нежели к Ti II. В пользу такого заключения свидетельствуют данные об элементных отношениях у звезд гало Млечного Пути. Из не-ЛТР анализа линий Mg I, Ca I, Ti II и Fe II Жао и др. (2016) нашли, что для звезд с $[\text{Fe}/\text{H}] < -1$, элементные отношения $[\text{Mg}, \text{Ca}, \text{Ti}/\text{Fe}] \approx 0.3$. Для HD 84937, HD 140283 и HD 122563 $[\text{Ti II}/\text{Fe}] = 0.44, 0.25$

и 0.26 соответственно и близки к $[\alpha/\text{Fe}]$ из Жао и др. (2016), в то время как по Ti I с $[\text{Ti I}/\text{Fe}] = 0.61, 0.36$ и 0.06 элементные отношения сильнее отличаются от среднего. Как и прежде, мы считаем, что у звезд с дефицитом металлов линии Ti II дают более надежное не-ЛТР содержание по сравнению с тем, что получается по линиям Ti I.

В зависимости от эффективной температуры звезды содержание по линиям Ti I либо переоценивается, как в случае HD 84937 с $T_{\text{eff}} = 6350$ К и в меньшей степени HD 140283 с $T_{\text{eff}} = 5780$ К, либо, наоборот, занижено, как в случае гиганта HD 122563 с $T_{\text{eff}} = 4600$ К. Надо отметить, что содержание титана у CD-38 245 не следует этой тенденции. Металличность этой звезды на порядок с лишним меньше, чем для других трех звезд с дефицитом металлов. Чтобы понять закономерность в поведении не-ЛТР содержания по линиям Ti I в зависимости от параметров атмосферы, нужно больше данных для звезд в разных диапазонах металличности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой работе мы предприняли попытку решить проблему расхождения не-ЛТР содержания по линиям Ti I и Ti II у звезд с дефицитом металлов путем применения более точных данных для учета столкновений с атомами водорода. Для этого были рассчитаны константы скоростей для связанно-связанных переходов при неупругих столкновениях атомов и ионов титана с атомами водорода, а также для процессов перезарядки: $\text{Ti I} + \text{H} \leftrightarrow \text{Ti II} + \text{H}^-$ и $\text{Ti II} + \text{H} \leftrightarrow \text{Ti III} + \text{H}^-$. Влияние точных

Таблица 3. Сравнение не-ЛТР содержания по линиям разных стадий ионизации у звезд выборки

Звезда	$\Delta_{\text{Ti I-Ti II}}$			$\Delta_{\text{Fe I-Fe II}}$	[Ti I/Fe]	[Ti II/Fe]
	C19	C16	B11	M19	C19 + M19	
HD 84937	0.17	0.15	0.24	0.10	0.61	0.44
HD 140283	0.10	0.09	0.16	0.09	0.36	0.25
HD 122563	-0.20	-0.18	-0.10	-0.07	0.06	0.26

Примечание. C19 — эта работа, C16 — Ситнова и др. (2016а), B11 — Бергеманн и др. (2011), M19 — Машонкина и др. (2019).

данных на определение не-ЛТР содержания было проверено для Солнца и четырех звезд с дефицитом металлов.

Применение полученных констант привело к увеличению отклонений от ЛТР и увеличению содержания титана по сравнению тем, что получается с использованием приближенных формул. Для Солнца среднее не-ЛТР содержание увеличилось всего на 0.01 dex как по линиям Ti I, так и по линиям Ti II. Мы получили существенное изменение в не-ЛТР содержании, до 0.3 dex, для линий Ti I, образующихся при переходах с основного уровня, у звезд с дефицитом металлов. Это привело к расхождению содержания по линиям Ti I с основного уровня и с энергией возбуждения $E_{\text{exc}} > 0.8$ эВ у всех четырех звезд.

Для звезд с дефицитом металлов среднее не-ЛТР содержание по линиям Ti II увеличилось на несколько сотых, от 0.01 dex до 0.07 dex, в зависимости от параметров атмосфер. Для линий Ti II в ультрафиолетовом диапазоне не-ЛТР поправки существенны и могут достигать 0.2 dex у звезд-карликов с $[\text{Fe}/\text{H}] = -2$. У HD 84937 и HD 140283 в не-ЛТР получено хорошее согласие между содержанием по линиям Ti II в видимой и УФ-области.

Для Солнца не-ЛТР ведет к согласию содержания по линиям Ti I и Ti II. Средняя разница в содержании между Ti I и Ti II $\Delta_{\text{Ti I-Ti II}} = -0.07$ dex и -0.03 dex, в ЛТР и не-ЛТР соответственно. Для звезд с дефицитом металлов нет согласия в не-ЛТР содержании по линиям Ti I и Ti II; $\Delta_{\text{Ti I-Ti II}} = 0.10$ dex, 0.17 dex, -0.20 dex и 0.25 dex для HD 140283, HD 84937, HD 122563 и CD-38 245 соответственно. Известная в литературе проблема расхождения содержания по линиям Ti I и Ti II у звезд с дефицитом металлов, по-видимому, не может быть решена только на основе уточнения скоростей неупругих столкновений с атомами водорода в не-ЛТР расчетах с классическими моделями атмосфер.

САЯ и АКБ благодарят за финансовую поддержку Министерство науки и высшего образования РФ (проекты 3.5042.2017/6.7, 3.1738.2017/4.6).

Мы благодарны Клаусу Фурману за предоставленные спектры, Олегу Кочухову за программу binmag. Мы использовали базы данных VALD, MARCS, ASTRAL.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Амарси и др. (A.M. Amarsi, P.E. Nissen, Á. Skúladóttir), *Astron. Astrophys.* **630**, A104 (2019).
2. Байлер-Джонс и др. (C.A.L. Bailer-Jones, J. Rybizki, M. Fouesneau, G. Mantelet, R. Andrae), *Astron. J.* **156**, 58 (2018).
3. Барклем и др. (P.S. Barklem, A.K. Belyaev, M. Guitou, N. Feautrier, F.X. Gadéa, A. Spielfiedel), *Astron. Astrophys.* **530**, A94 (2011).
4. Батлер и Гиддингс (K. Butler, J. Giddings), *Newsletter on Analysis of Astronomical Spectra* 9, University of London **723**, (1985).
5. Батлер (K. Butler), Сечения фотоионизации для Ti II, частное сообщение, (2015).
6. Беляев и Яковлева (A.K. Belyaev, S.A. Yakovleva), *Astron. Astrophys.* **606**, A147 (2017a).
7. Беляев и Яковлева (A.K. Belyaev, S.A. Yakovleva), *Astron. Astrophys.* **608**, A33 (2017b).
8. Бергеманн и др. (M. Bergemann, R.-P. Kudritzki, B. Plez, B. Davies, K. Lind, Z. Gazak), *MNRAS* **751**, 156 (2012).
9. Бергеманн (M. Bergemann), *Astrophys. J.* **413**, 2184 (2011).
10. Браун и др. (Gaia Collaboration A.G.A. Brown, A. Vallenari, T. Prusti, J.H.J. de Bruijne, C. Babusiaux, C.A.L. Bailer-Jones, M. Biermann, D.W. Evans, L. Eyer, et al.), *Astron. Astrophys.* **616**, A1 (2018).
11. Вуд и др. (M.P. Wood, J.E. Lawler, C. Sneden, J.J. Cowan), *Astrophys. J.* **208**, 27 (2013).
12. Густафссон и др. (B. Gustafsson, B. Edvardsson, K. Eriksson U.G., Jørgensen, Å. Nordlund, B. Plez), *Astron. Astrophys.* **486**, 951 (2008).
13. Добровольскас и др. (V. Dobrovolskas, A. Kučinskis, M. Steffen, H.-G. Ludwig, D. Prakashavičius, J. Klevas, E. Caffau, P. Bonifacio), *Astron. Astrophys.* **559**, A102 (2013).
14. Дравин (H.W. Drawin), *Z. Physik* **211**, 404 (1968).
15. Дравин (H.W. Drawin), *Z. Physik* **225**, 483 (1969).

16. Жао и др. (G. Zhao, L. Mashonkina, S. Alexeeva, Yu. Pakhomov, J.-R. Shi, T. Sitnova, K. Tan, H.-W. Zhang, et al.), *Astrophys. J.* **833**, 12, 225 (2016).
17. Каровикова и др. (I. Karovicova, T.R. White, T. Nordlander, K. Lind, L. Casagrande, M.J. Ireland, D. Huber, O. Creevey, D. Mourard, G.H. Schaefer, G. Gilmore, A. Chiavassa, M. Wittkowski, P. Jofré, U. Heiter, F. Thévenin, M. Asplund), *MNRAS* **475**, L81 (2018).
18. Касагранде и др. (L. Casagrande, I. Ramírez, J. Meléndez, M. Bessel, M. Asplund), *Astron. Astrophys.* **512**, A54 (2010).
19. Коллет и др. (R. Collet, M. Asplund, R. Trampedach), *Astron. Astrophys.* **469**, 687 (2007).
20. Кривей и др. (O.L. Creevey, F. Thevenin, T.S. Boyajian, P. Kervella, A. Chiavassa, L. Bigot, A. Merand, U. Heiter et al.), *Astron. Astrophys.* **575**, A17 (2012).
21. Кривей и др. (O.L. Creevey, F. Thevenin, P. Berio, U. Heiter, K. von Braun, D. Mourard, L. Bigot, T.S. Boyajian et al.), *Astron. Astrophys.* **575**, A26 (2015).
22. Купка и др. (F. Kupka, N.E. Piskunov, T.A. Ryabchikova, H.C. Stempels, W.W. Weiss), *Astron. Astrophys. Suppl.* **138**, 119 (1999).
23. Куруз и др. (R. Kurucz, I. Furenlid, J. Brault, L. Testerman), *National Solar Observatory Atlas, Sunspot, New Mexico: National Solar Observatory* (1984).
24. Лоулер и др. (J.E. Lawler, A. Guzman, M.P. Wood, C. Sneden, J.J. Cowan), *Astrophys. J. Suppl.* **205**, 11 (2013).
25. Машонкина и др. (L. Mashonkina, T. Gehren, J.R. Shi, A.J. Korn, F. Grupp), *Astron. Astrophys.* **528**, A87 (2011).
26. Машонкина и др. (L. Mashonkina, P. Jablonka, T. Sitnova, Y. Pakhomov, P. North), *Astron. Astrophys.* **608**, A89 (2017).
27. Машонкина и др. (L. Mashonkina, T. Sitnova, S.A. Yakovleva, A.K. Belyaev), *Astron. Astrophys.* **631**, A43 (2019).
28. Пикеринг и др. (J.C. Pickering, A.P. Thorne, R. Perez), *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **132**, 403 (2001).
29. Рябчикова и др. (T. Ryabchikova, N. Piskunov, R.L. Kurucz, H.C. Stempels, U. Heiter, Y. Pakhomov, P.S. Barklem), *Phys. Scr.* **90**, 054005 (2015).
30. Ситнова и др. (Т.М. Ситнова, Л.И. Машонкина, Т.А. Рябчикова), *MNRAS* **461**, 1000 (2016a).
31. Ситнова Т.М., Письма в Астрон. Журнал **42**, 734 (2016b).
32. Ситнова и др. (Т.М. Ситнова, Л.И. Машонкина, R. Ezzeddine, A. Frebel), *MNRAS* **485**, 3527 (2019).
33. Стинбок и Холвергер (W. Steenbock, H. Holweger), *Astron. Astrophys.* **130**, 319 (1984).
34. Такеда (Y. Takeda), *PASJ* **46**, 53 (1994).
35. Цымбал и др. (V. Tsymbal, T. Ryabchikova, T. Sitnova), *Software for NLTE Spectrum Fitting*. pp. 247–252 (2019).