

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт автоматики и электрометрии
Сибирского отделения Российской академии наук

На правах рукописи

Шепелин Артем Витальевич

**Моделирование кинетики уровней атомов и ионов для спектральной
диагностики и расчета энергетического баланса в атмосферах экзопланет**

Специальность 1.3.6 — «Оптика»

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д.ф.-м.н. Шайхисламов Илдар Фаритович

Новосибирск — 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
Глава 1 ОБЗОР СОВРЕМЕННЫХ СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТОДОВ В АСТРОФИЗИКЕ ЭКЗОПЛАНЕТ	13
1.1 Экзопланетные атмосферы и их наблюдения	13
1.2 Спектроскопия экзопланет: методы и подходы	14
1.3 Влияние кинетики возбужденных уровней (не-ЛТР эффектов) на аэрономию атмосферы и интерпретацию наблюдательных данных .	17
1.4 Обзор существующих кинетических моделей	18
1.5 Проблемы обнаружения кислорода, металлов и линий других элементов	21
1.6 Роль возбужденных уровней в энергетическом балансе	24
1.7 Выводы к главе 1	26
Глава 2 МЕТОДЫ РАСЧЕТА СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ИЗЛУЧЕНИЯ В НЕРАВНОВЕСНОЙ ПЛАЗМЕ ЭКЗОПЛАНЕТ	28
2.1 Постановка задачи в рамках глобального моделирования	28
2.2 Описание входных данных: плотности, температура, геометрия	31
2.3 Методика расчета ЛТР и не-ЛТР населенностей	34
2.3.1 Кинетические уравнения	36
2.3.2 Уровни, переходы, квазистационарность	42
2.4 Описание баз данных химических элементов и спектров	44
2.4.1 Статьи и наборы проверенных данных	44
2.4.2 База данных NIST Atomic Spectra Database	45
2.4.3 Kurucz Atomic Spectral Line Database	45
2.4.4 CHIANTI	45
2.4.5 Opacity Project, IRON Project, TOPbase	46
2.4.6 VALD	46
2.4.7 Собственные расчеты и адаптация	46
2.4.8 Унификация и валидация данных	46
2.5 Алгоритмы численного решения	47
2.5.1 Общая структура решения	47
2.5.2 Решение системы уравнений не-ЛТР	48
2.5.3 Расчет радиационных коэффициентов и источников	48

2.5.4 Решение уравнений баланса энергии	50
2.5.5 Оптимизация и параллельные расчеты	50
2.5.6 Контроль сходимости и устойчивости	51
2.6 Архитектура программного обеспечения	51
2.6.1 Модуль геометрии и сетки	52
2.6.2 Модуль расчета гидростатической атмосферы	53
2.6.3 Модуль для работы с данными атмосфер	53
2.6.4 Модуль атомных и молекулярных данных	53
2.6.5 Модуль расчета населенностей	53
2.6.6 Модуль оптики атмосферы и спектрального синтеза	54
2.6.7 Модуль термодинамики и энергетического баланса	54
2.6.8 Модуль вывода и визуализации	54
2.6.9 Модуль управления расчетами	54
2.7 Верификация: сравнение с другими моделями	55
2.7.1 Верификация на простых тестах: ЛТР-равновесие	55
2.7.2 Тесты на искусственной двухуровневой модели	56
2.7.3 Сравнение с кодом Cloudy	56
2.7.4 Сравнение с опубликованными моделями атмосфер экзопланет	58
2.7.5 Чувствительность к изменениям входных параметров	58
2.8 Выводы к главе 2	58
Глава 3 АНАЛИЗ ЛИНИЙ АТОМА КИСЛОРОДА 130,4 нм и 777,4 нм ДЛЯ	
ДИАГНОСТИКИ АТМОСФЕР ЭКЗОПЛАНЕТ	60
3.1 Физика формирования поглощения в линиях O I 130,4 нм и 777,4 нм	60
3.2 Параметрическое создание гидростатических моделей 3D атмосфер	63
3.3 Расчет не-ЛТР населенностей атомарного кислорода	65
3.4 Зависимость взаимной интенсивности линий 130,4 нм и 777,4 нм от	
температуры	67
3.5 Определение температурных границ	70
3.6 Синтетические спектры и рекомендации для наземных и космических	
наблюдений	72
3.7 Выводы к главе 3	74
Глава 4 РОЛЬ ИОНА Fe II В АЭРОНОМИИ АТМОСФЕР УЛЬТРАГОРЯЧИХ	
ЮПИТЕРОВ	76

4.1 Описание типичного ультрагорячего юпитера KELT-9 b и его особенностей	76
4.2 Построение газодинамической ЛТР модели атмосферы	79
4.3 Расчет населенностей уровней Fe II	81
4.4 Расчет процессов охлаждения и нагрева	86
4.5 Анализ вклада отдельных уровней и отдельных процессов	89
4.6 Сравнение с предыдущими работами	90
4.7 Выводы к главе 4	92
Глава 5 УСИЛЕНИЕ ПОГЛОЩЕНИЯ ЛИНИЙ ВОДОРОДА В АТМОСФЕРАХ ЭКЗОПЛАНЕТ ПРИ ВСПЫШЕЧНОЙ АКТИВНОСТИ ЗВЕЗД	94
5.1 Влияние звездных вспышек на спектры поглощения Лайман-альфа и Н-альфа в атмосферах экзопланет	94
5.2 Методика моделирования вспышек	96
5.3 Результаты и интерпретация	97
5.4 Выводы к главе 5	100
Заключение	102
Список использованных источников	105
Приложение	120

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы

В последние десятилетия исследование экзопланет, т.е. планет за пределами Солнечной системы, из области гипотетической астрономии перешло в статус одного из центральных направлений наблюдательной астрофизики. Открытие первой достоверной экзопланеты 51 Пегаса b (Димидий), обращающейся вокруг звезды главной последовательности на расстоянии 50,1 световых лет от нас, в 1995 году положило начало новой эпохе, в которой изучение удаленных от нас планетных систем стало возможным благодаря бурному развитию методов фотометрии и спектроскопии, а также созданию специализированных космических обсерваторий [1]. На текущий момент (2025 год), в одном из наиболее актуальных каталогов экзопланет NASA Exoplanet Archive [2] числится более 5870 подтвержденных экзопланет, большая часть которых является так называемыми горячими юпитерами или теплыми нептонами — горячими газообразными планетами, вращающимися на близком расстоянии от звезды. При этом, наличие планет у звезд, скорее правило, чем исключение, и их количество в нашей галактике оценивается не менее чем 100 миллиардов [3]. Важно отметить, что большая часть найденных экзопланет предполагала технологических усилий на пределе их возможностей. Это означает, что зачастую наблюдаемых данных хватает исключительно на подтверждение факта существования экзопланеты. Для более подробного изучения, например химического состава атмосфер и других важных свойств экзопланет зачастую применяются подходы вычислительной физики, с помощью которых пытаются выявить неизвестные параметры путем согласования ограниченных данных наблюдений и уже известных теорий.

Одной из важнейших задач современной экзопланетологии (раздел астрономии и астрофизики, занимающийся изучением экзопланет) является определение физических и химических характеристик атмосфер экзопланет. Далее, по свойствам атмосферы возможно делать предположения о внутренней структуре планеты, ее эволюции и об условиях на поверхности. Для горячих экзопланет также является естественным деление атмосферы на нижнюю и верхнюю. При этом, ключевым инструментом изучения экзопланет является спектроскопия, позволяющая исследовать химический состав, температуру, структуру и динамику атмосфер, а также аэрономию. Детальное спектроскопическое исследование атмосфер может обнаружить элементы, потенциально сопутствующие биомаркерам, такие как

молекулярный кислород, озон, метан и водяной пар, а также выделить потенциально обитаемые объекты.

Однако для получения достоверной информации из спектральных данных необходимо создание реалистичных моделей атмосфер экзопланет. Проблема осложняется тем, что, в отличие от относительно близких нам планет Солнечной системы, атмосферы экзопланет, доступные в настоящее время для исследований, часто находятся в экстремальных условиях — они подвержены интенсивному ультрафиолетовому и рентгеновскому излучению от родительской звезды, могут демонстрировать большие температурные градиенты, а также испытывать интенсивное истечение вещества.

Особую значимость представляет разработка спектральных методов, способных интерпретировать наблюдаемые спектры с учетом неравновесных процессов. Первое поколение моделей экзопланетных атмосфер основывались на предположении о локальном термодинамическом равновесии (ЛТР, local thermodynamic equilibrium, LTE). Это допущение сильно упрощает расчет энергетических уровней атомов и ионов, но не соответствует реальным условиям, особенно в верхних слоях атмосферы. Это актуально не только для верхних атмосфер горячих экзопланет, но и ионосфер планет Солнечной системы. Для получения более точных моделей, способных правильно интерпретировать наблюдательные данные, необходимо учитывать не-ЛТР (неравновесное, НЛТР, NLTE, non-LTE) распределение населенностей возбужденных уровней элементов, которое зависит не только от температуры, но и от множества дополнительных факторов: плотности, поля излучения, столкновительных процессов. Именно в этих условиях и становятся актуальными спектральные методы с применением кинетических моделей.

Таким образом, задача создания физически полных моделей для анализа не-ЛТР процессов в экзопланетных атмосферах с возможностью синтеза спектра и расчета теплового баланса имеет первостепенное значение как для фундаментальной науки, так и для практики интерпретации наблюдательных данных современных телескопов, таких как космический телескоп «Джеймс Уэбб» (JWST), космический телескоп «Хаббл» (HST), а также будущих миссий ARIEL (Атмосферный инфракрасный исследователь экзопланет дистанционного зондирования), LUVOIR (Большой ультрафиолетовый оптический инфракрасный исследователь) и Российской космической миссии «Спектр-УФ».

Степень разработанности проблемы

Разработка методов спектроскопического анализа атмосфер восходит к классическим работам по моделированию звездных атмосфер [4,5], где впервые были описаны численные схемы расчета кинетики квантовых переходов, учитывающие сразу и ударные и радиационные процессы для многоуровневых атомов и ионов. Спектральные исследования атмосфер экзопланет активно развиваются, начиная с работ по детектированию натрия в атмосфере HD 209458 b [6] до недавних наблюдений JWST, охватывающих молекулярный состав суперземель и горячих юпитеров. В рамках моделирования пространственной структуры и динамики атмосфер экзопланет подходы варьируются от простых изотермических моделей [7] до сложных 3D гидродинамических и магнитогидродинамических расчетов [8,9]. Важным аспектом является возможность перекрытия линий спектров различных веществ при наблюдениях, которая также решается с помощью моделирования радиационного переноса.

Однако большинство теоретических моделей ограничивается предположением ЛТР, что не отражает реальных условий верхних атмосфер горячих экзопланет, где прямые и обратные кинетические процессы зачастую не уравниваются друг друга, поскольку происходит передача энергии от излучения звезды в нагрев и течение вещества. Не-ЛТР модели широко применяются для звездных атмосфер и солнечной короны [10], но их адаптация к экзопланетным условиям все еще находится на начальной стадии. Известны отдельные попытки учета не-ЛТР эффектов, например, в расчетах линий водорода [11,12], гелия [13,14], металлов (Fe II, Mg II) [15,16], резонансных линий O I, C II, Si III [17,18], но в большинстве случаев модели не включают полную кинетику с десятками или сотнями уровней. Кроме того, они редко интегрируются с расчетом термодинамических характеристик атмосферы (нагрев и охлаждение).

Некоторые из моделируемых линий возможно обнаружить с помощью наземных телескопов, что усиливает практический смысл данной задачи. Впервые таким методом была детектирована линия He I 10 830 Å [13], но уже вскоре более 30 новых объектов было исследовано с положительным обнаружением поглощения в более чем половине случаев [16].

Также важным направлением является создание 1D и 3D моделей атмосфер с учетом излучения и химических реакций (например, программы PHOENIX, HELIOS и др.) [19,20]. Однако ни один из известных кодов не сочетает в себе

одновременно: 3D магнитную гидродинамику, не-ЛТР кинетику возбужденных состояний, возможность расчета нагрева и охлаждения, синтеза спектра, анализа вклада отдельных атомов и ионов в тепловой баланс, учета эффектов спектральной переменности (например, звездных вспышек).

Цель работы

Исследование физико-химических процессов в атмосферах экзопланет в условиях, далеких от термодинамического равновесия, путем разработки и применения кинетической модели, основанной на прямом расчете населенностей возбужденных уровней атомов и ионов.

Основные задачи

Для достижения цели поставлены следующие задачи:

1. Разработать вычислительную библиотеку, реализующую решение системы уравнений кинетики возбужденных состояний атомов и ионов в условиях атмосфер экзопланет, и космической плазмы в целом.
2. Организовать взаимодействие кинетического кода с сторонними моделями гидростатических и гидродинамических атмосфер (например, ECHO3D).
3. Создать модуль расчета спектров поглощения с учетом рассчитанных населенностей и геометрии атмосферы.
4. Разработать модуль для расчета процессов нагрева/охлаждения атмосферы за счет возбужденных уровней.
5. Организовать возможность учета переменных спектров звезд для исследования влияния вспышечной активности на динамику населенностей уровней в атмосферах экзопланет.
6. Исследовать температурные условия, при которых возможна регистрация линий атомарного кислорода 130,4 нм и 777,4 нм в атмосферах экзопланет.
7. Исследовать вклад уровней Fe II в процессы нагрева и охлаждения атмосфер ультрагорячих юпитеров на примере KELT-9 b.
8. Исследовать влияние звездных вспышек на поглощение линий Лайман-альфа и H-альфа атомарного водорода.

Объект и предмет исследования

Объектом исследования являются атмосферы горячих и ультрагорячих экзопланет, в первую очередь транзитных объектов, у которых можно наблюдать

линии поглощения в УФ- и ближнем ИК-диапазонах.

Предметом исследования выступают физико-химические процессы, связанные с возбуждением и ионизацией атомов и ионов, их влиянием на спектры поглощения и на энергетический баланс атмосфер экзопланет в условиях не-ЛТР.

Методы исследования

В работе применяются: методы моделирования гидростатических атмосфер (распределение температуры и плотности химических элементов в зависимости от гравитационного поля планеты и звезды) в 1D, 2D и 3D; численные методы решения системы уравнений баланса населенностей уровней атомов и ионов с учетом радиационных и столкновительных переходов; алгоритмы синтеза спектра (интегрирование уравнений переноса излучения) на основе рассчитанных населенностей уровней; расчет процессов охлаждения и нагрева атмосферы; генерация синтетических спектров поглощения и их сопоставление с наблюдательными данными; учет звездных вспышек путем вариации звездных спектров в УФ диапазоне.

Научная новизна

Впервые получены следующие результаты:

1. Создан программный комплекс, объединяющий не-ЛТР кинетику, синтез спектра и детальный анализ энергетического баланса атмосферы с учетом вклада отдельных процессов и энергетических уровней элементов и возможностью использования многомерных 1D/2D/3D входных данных (скалярные поля плотностей, температур и векторные поля скоростей).
2. Обнаружено, что соотношение линий кислорода 130,4 нм и 777,4 нм чувствительно к температуре верхних слоев атмосферы, что важно для планирования наблюдений и обнаружения кислорода в атмосферах экзопланет.
3. Установлено, что процессы с участием иона железа оказывают значительное влияние на тепловой баланс ультрагорячих экзопланет за счет специфической кинетики возбужденных уровней.
4. Определен диапазон параметров звездных вспышек и рекомендации по их наблюдениям для обнаружения линии Н-альфа в атмосферах экзопланет.

Практическая значимость

Разработанный методический аппарат может быть использован: для планирования и интерпретации наблюдений с помощью современных и планируемых к запуску космических и наземный телескопов (HST, JWST, VLT (Очень Большой Телескоп), ARIEL, LUVOIR, Спектр-УФ); в задачах автоматического поиска кислорода в атмосферах экзопланет, а также других биомаркеров; для более точных расчетов аэрономии, термодинамики и эволюции атмосфер экзопланет; в качестве базы для расширения существующих МГД пакетов моделирования космической плазмы и атмосфер.

Положения, выносимые на защиту

1. Одновременное измерение поглощения в двух линиях атомарного кислорода 130,4 нм и 777,4 нм позволяет независимо определять температуру атмосферы горячих юпитеров в диапазоне 2000–12 000 К.
2. Из всех примесных элементов, вклад ионов железа Fe II, благодаря его уникальной структуре уровней, является наибольшим в энергетическом балансе атмосфер ультра-горячих юпитеров, и приводит к эффективному охлаждению за счет переизлучения в ультрафиолетовом спектре на большом количестве переходов. Полный учет кинетики уровней Fe II необходим для корректной интерпретации наблюдаемых линий поглощения этого иона.
3. Звездные вспышки энергией 10^{30} – 10^{34} эрг вызывают увеличение поглощения в линии H-альфа водорода в атмосферах экзопланет на величину около 0,25 % с характерным временем релаксации 1–3 часа, что доступно для детектирования современными телескопами.

Личный вклад автора включает в себя полную разработку программного комплекса Astrea, в ядре которого лежит кинетический модуль для расчета населенностей квантовых уровней, с дополнительными модулями для создания гидростатических моделей атмосфер экзопланет, работы с 3D гидростатическими и гидродинамическими моделями атмосфер, спектрального синтеза, энергетического баланса, моделирования звездных вспышек. Проводилось тестирование и сравнение с многочисленными работами по исследованиям экзопланет и звезд, а также с другими программными кодами.

Апробация результатов и публикации

Работа освещалась на 13 международных и всероссийских конференциях: Семнадцатая ежегодная конференция “физика плазмы в солнечной системе”, Москва 2022; The thirteenth moscow solar system symposium 13M-S3, Moscow 2022; Конференция «физика плазмы в солнечной системе», Москва 2023; The fourteenth moscow solar system symposium 14M-S3, Moscow 2023; Двадцать восьмая всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых учёных, Новосибирск 2024; Международная школа “Исследования экзопланет – 2022” для молодых ученых и студентов, Москва 2022; Конкурс-конференция ИЛФ СО РАН 2022, Новосибирск 2022; Конференция «Исследование звезд с экзопланетами», Москва 2022; I-ая Всероссийская школа Национального центра физики и математики для студентов и молодых учёных по экспериментальной лабораторной астрофизике и геофизике, Саров 2023; Всероссийская астрономическая конференция 2024 года «Современная астрономия: от ранней Вселенной до экзопланет и черных дыр», Нижний Архыз 2024; Конференция «XXV ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ ПО МАТЕМАТИЧЕСКОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ И ИНФОРМАЦИОННЫМ ТЕХНОЛОГИЯМ», Новосибирск 2024; Конференция «Исследование звезд с экзопланетами», Москва 2024; Конференция молодых учёных ИЛФ СО РАН, Новосибирск 2024.

Публикации

Основные материалы работы опубликованы в 9 печатных изданиях, 4 из которых изданы в журналах рекомендованных ВАК, 5 — в трудах конференций. В рамках работы разработана и опубликована под лицензией GPL-3.0 программная библиотека Astrea. Дальнейшим развитием данного продукта стал Программный комплекс для спектральной диагностики атмосфер экзопланет «Астрей: Экзопланеты», который прошел государственную регистрацию (свидетельство о государственной регистрации № 2025684208 от 11.09.2025).

Структура диссертации

Диссертационная работа состоит из **введения**, пяти глав, **заключения**, **приложения**, содержит 123 страницы, 20 рисунков, 12 таблиц и **библиографический список** из 129 пунктов.

Глава 1 посвящена теоретическим основам спектроскопии, не-ЛТР процессам

и особенностям атмосфер экзопланет. [Глава 2](#) описывает разработку численных методов для моделирования не-ЛТР процессов и его применение для синтеза спектра и анализа энергетического баланса атмосфер экзопланет. [Глава 3](#) обсуждает температурные ограничения на обнаружение кислорода в линиях 130,4 нм и 777,4 нм в атмосферах экзопланет. [Глава 4](#) содержит анализ влияния Fe II на энергетический баланс атмосфер ультрагорячих экзопланет. [Глава 5](#) включает исследование влияния вспышечной активности звезд на поглощение слабых линий H I в атмосферах экзопланет. В [заключении](#) сформулированы основные выводы и перспективы будущих исследований. В [приложении](#) находятся таблицы с информацией об использованных аппроксимациях и источниках данных.

Глава 1 ОБЗОР СОВРЕМЕННЫХ СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТОДОВ В АСТРОФИЗИКЕ ЭКЗОПЛАНЕТ

1.1 Экзопланетные атмосферы и их наблюдения

Атмосферы экзопланет являются одним из ключевых объектов изучения в современной астрофизике, поскольку позволяют получать информацию о составе, физических условиях и процессах, происходящих в околопланетных оболочках вне Солнечной системы, что открывает путь к оценке состава, параметров и их эволюции. Особенно важной является возможность выявления атомов молекул, которые могут быть связаны с биомаркерами и потенциальной обитаемостью, таких как вода, кислород, углекислый газ и метан.

Несмотря на значительные достижения в наблюдении самих экзопланет, исследование их атмосфер остается сложной задачей из-за малых угловых размеров планет и яркого фона их родительских звезд. Однако спектроскопические методы позволяют выделить вклад атмосферы даже при таких ограничениях. В зависимости от разрешения, можно выделить основные типы наблюдений:

- спектроскопия высокого разрешения (HRS): разрешение $R > 25\,000$, позволяет разрешать отдельные спектральные линии и изучать динамику атмосферы (спектрографы VLT/ESPRESSO, HARPS (High Accuracy Radial velocity Planet Searcher), CARMENES (Calar Alto high-Resolution search for M dwarfs with Exoearths with Near-infrared and optical Echelle Spectrographs));
- спектроскопия низкого и среднего разрешения (LRS): $R \sim 100\text{--}1000$, используется для выявления широких спектральных особенностей, таких как полосы поглощения молекул (спектрографы HST/WFC3 (Wide Field Camera 3), JWST/NIRSpec (Near Infrared Spectrograph));
- мультиспектральные наблюдения: комбинирование данных в различных диапазонах (УФ, видимый, ИК) для получения грубой оценки спектральных особенностей (спектрографы TESS, CHEOPS (CHaracterising ExOPlanet Satellite), Spitzer/IRAC).

Наибольший интерес на данный момент вызывают атмосферы горячих юпитеров и ультрагорячих юпитеров, поскольку их можно наблюдать с высоким спектральным разрешением в различных диапазонах. Эти объекты отличаются экстремальными температурными и радиационными условиями. Это приводит к ионизации атомов, возбуждению высоких уровней, фотохимическим процессам и интенсивным радиационным взаимодействиям, оказывающим влияние на

энергетический баланс и наблюдаемый спектр.

В последние годы благодаря работе космических телескопов (HST, Spitzer, JWST) и наземных обсерваторий стало возможным обнаружение отдельных линий атомов, металлов, молекулярных полос и ионов в спектрах экзопланет. Это позволило перейти от качественного к количественному анализу атмосфер, включая определение их температуры, давления, химического состава, а также изучение процессов нагрева и охлаждения.

Среди ярких примеров успешных наблюдений: детектирование натрия (Na I), водорода (Лайман-альфа), кислорода и углерода у HD 209458 b [6], водяного пара в WASP-39 b [21], водяного пара и угарного газа в HD 189733 b [22,23], гелия (He I 1083 нм) и даже атомарного железа и магния в атмосфере KELT-9 b [15,16]. Особую роль играет УФ-диапазон, где присутствуют линии атомарного кислорода (130,4 нм), иона углерода (133,5 нм), водорода (Лайман-альфа) и металлов (Mg II, Fe II). Однако анализ таких спектров требует комплексного анализа радиационных и ударных процессов с привлечением сложных взаимосвязанных систем моделирования с подробными базами данных, так как температура, плотность, излучение и столкновения влияют на возбуждение множества уровней, и, следовательно, на наблюдаемую спектральную картину.

Таким образом, наблюдение атмосфер экзопланет представляет собой важный источник информации о физике и химии внесолнечных планет, а также о механизмах, определяющих их эволюцию и потенциальную обитаемость. Однако без достаточно точного и глубокого моделирования на основе физических принципов, интерпретация таких ценных данных не даст научно обоснованных результатов.

1.2 Спектроскопия экзопланет: методы и подходы

Из всех методов исследования экзопланетных атмосфер спектроскопия занимает центральное место, поскольку именно она позволяет получить прямую информацию о составе, температуре, плотности и динамике атмосферного газа. Основным достоинством спектроскопических методов является их чувствительность к различным физическим процессам, происходящим в атмосфере планеты: столкновения, накачка внешним излучением, эффекты доплеровского сдвига и уширения.

Наиболее распространенным методом спектроскопии экзопланет является транзитная спектроскопия (transit spectroscopy), в рамках которой изучается изменение спектра звезды при прохождении планеты перед ее диском. Во

время транзита часть света звезды проходит сквозь верхние слои атмосферы планеты. Если в этих слоях присутствуют поглощающие атомы или молекулы, то в интегральном спектре системы появляются дополнительные поглощения, соответствующие длинам волн резонансных переходов. Однако следует учитывать, что часть излучения звезды может обойти атмосферу планеты и попасть в спектр, что может привести к смещению сигналов. Для минимизации этого эффекта исследователи используют модели, которые помогают отделить сигналы звезды и планеты. Такой спектр называется спектром пропускания. Именно таким способом обнаруживается большая часть элементов в Солнечной атмосфере. Его форма зависит от распределения температуры и состава вдоль линии наблюдатель — планета, а также от геометрической толщины атмосферы на данных высотах. В частности, амплитуда сигнала пропускания часто масштабируется с барометрической высотой атмосферы, которая в первом приближении определяется как:

$$H = \frac{k_B T}{\mu g} = \frac{k_B T}{G M \mu} r r_0, \quad (1)$$

где H — шкала высот атмосферы, k_B — постоянная Больцмана T — температура, μ — средняя молекулярная масса, g — ускорение свободного падения, G — гравитационная постоянная, M — масса источника гравитационного поля (например, планеты), r — расстояние от источника гравитации, r_0 — радиус источника гравитации.

В транзитах горячих экзопланет часто хорошо проявляются резонансные линии легких и легко-ионизируемых элементов (H, Na, K), широко распространенных элементов (O, C) а также молекулярные полосы (H_2O , CO, CO_2 , CH_4) в инфракрасном диапазоне. Однако следует отметить, что в зависимости от условий наблюдения и характеристик исследуемого объекта, другие вещества, такие как металлы (Fe, Mg, Ca, Ti) и молекулы (NH_3 , H_2S), также могут вносить значительный вклад в спектр. Наиболее яркие транзитные измерения спектров поглощения получены телескопами HST и JWST.

Второй подход — эмиссионная спектроскопия или спектроскопия вторичных затмений (emission spectroscopy), основанная на наблюдении момента, когда планета скрывается за звездой. До затмения наблюдается совокупное излучение звезды и планеты, а во время затмения — только звезды. Вычитание этих спектров позволяет получить спектр собственного излучения планеты, включая как отраженный свет, так и тепловое излучение ее атмосферы.

Этот метод особенно эффективен в инфракрасном диапазоне, где атмосферы горячих юпитеров излучают интенсивно благодаря высоким температурам (1000–4000 K), и успешно использовался космическим телескопом Spitzer. Эмиссионные спектры чувствительны к температурному профилю на дневной стороне планеты, а также позволяют различить наличие инверсии температуры, что может указывать на присутствие высокоэффективных поглотителей (например, TiO, VO).

Фазовая спектроскопия (phase-resolved spectroscopy) предполагает анализ изменения светимости планеты по мере ее орбитального движения. Изменения яркости позволяют получить информацию о перераспределении тепла между дневной и ночной сторонами, определить наличие ветров и оценить тепловую инерцию атмосферы. При высокой точности возможно даже спектроскопическое картирование температурной структуры, особенно в случае приливно-захваченных (tidally locked) планет, где температура существенно различается по долготе.

Все перечисленные методы требуют сложной обработки наблюдательных данных. Методика анализа спектров зависит от конкретной задачи: при обнаружении молекул (H_2O , CH_4 , CO_2) применяются методы корреляционного анализа, а для атомов — сравнение с модельными профилями поглощения линии. В настоящее время развитие моделей позволяет рассчитывать атмосферы в 3D геометрии с учетом зональных ветров, вращения планеты и звездного излучения [24].

Также большое значение имеет перенос излучения (radiative transfer), решаемый численно. В простейших случаях используется однолучевая схема с предположением о ЛТР, однако при высоких температурах и низкой плотности эти допущения теряют обоснованность.

В общем случае, основные этапы анализа измеренных спектров включают:

1. Калибровку спектров: вычитание фона, коррекция по длине волны, нормировка.
2. Удаление систематических помех: влияние земной атмосферы и соответствующих посторонних линий вблизи наблюдаемой, шумы и дефекты приборов.
3. Сопоставление с моделями: спектры поглощения и излучения сравниваются с синтетическими спектрами, полученными из расчетов с различными параметрами.
4. Оценка достоверности выводов, например используя байесовский подход.

Качественная интерпретация спектральных данных невозможна без точного физического моделирования. В особенности это касается расчета неравновесных

населенностей уровней (не-ЛТР), учета эффектов переизлучения на резонансных переходах с учетом реального распределения плотностей и температур.

1.3 Влияние кинетики возбужденных уровней (не-ЛТР эффектов) на аэрономию атмосферы и интерпретацию наблюдательных данных

Во многих слоях атмосфер экзопланет, особенно в их верхних областях подверженных радиации и нагреву, не выполняется условие локального термодинамического равновесия (ЛТР). В рамках ЛТР предполагается, что все уровни возбуждения и ионизации определяются только локальной температурой и описываются функцией Больцмана и уравнением Саха. Однако в разреженной плазме и при интенсивном внешнем излучении это приближение становится некорректным. Эта особенность хорошо известна в исследовании звездных атмосфер [25–27].

В реальных атмосферах экзопланет условия часто далеки от равновесных: в верхних слоях низкая плотность частиц, при которой столкновительные процессы не успевают уравновесить уровни [16]. Излучение не находится в равновесии с веществом, даже на резонансных переходах. Для горячих экзопланет особенно актуально интенсивное звездное излучение (особенно в УФ), возбуждающее и ионизирующее атомы. Эти аспекты зачастую предполагают увеличение влияния переходов радиационного возбуждения и фотоионизации, что приводит к отклонению населенностей энергетических уровней от распределения Больцмана и к необходимости решать кинетические уравнения вида:

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{j \neq i} (n_j R_{ji} - n_i R_{ij}),$$

где n_i и n_j — населенности уровней i и j , соответственно, R_{ij} — скорость перехода между уровнями i и j , включающая радиационные (спонтанные, вынужденные, фотоионизацию) и столкновительные (электроны, атомы) процессы. Система уравнений решается совместно с уравнением ионизационного баланса и переноса излучения.

Расчет не-ЛТР состояний особенно важен в моделировании линий метастабильных уровней (O I, Fe II, He I), расчетах теплового баланса, так как возбуждение и последующая релаксация уровня может поглощать или выделять значительное количество энергии, что влияет на общее распределение температуры. Например, как показано в атмосфере KELT-9 b [15,16], линия кислорода O I 777,4 нм

чувствительна к не-ЛТР условиям. Таким образом, без учета не-ЛТР эффектов возможно неправильное определение состава и структуры атмосферы. Другой известный эффект — избыточное поглощение в линиях $\text{H}\alpha$ или He I при интенсивном фотоионизирующем потоке звезды. В атмосферах ультрагорячих экзопланет с температурами $\sim 4000\text{--}5000\text{ K}$ и выше, доля ионизованного металла и особенности структуры уровней требуют учета даже высоко возбужденных состояний [28,29].

Возбужденные состояния играют ключевую роль в энергетическом балансе атмосферы при температурах несколько тысяч градусов. Их влияние проявляется через процессы, приводящие к дополнительному нагреву (передача энергии возбужденного атома/молекулы другой частице при столкновении, возвращаясь в основное состояние, либо фотоионизация с гораздо более низкими энергиями ионизации, чем основное состояние) или охлаждению атмосферы (передача энергии атомам/молекулам при столкновениях, приводя их в возбужденное состояние).

В моделях атмосферы с ЛТР подобные эффекты оказываются недооцененными или вовсе игнорируемыми, что приводит к существенным ошибкам в расчете скоростей нагрева/охлаждения и температур. Ошибки при использовании ЛТР моделей могут достигать десятков процентов в определении состава и до сотен кельвинов в температуре. В случае ультрагорячих экзопланет ЛТР модели дают принципиально неверный результат.

Применение не-ЛТР моделей может также существенно менять интерпретацию измеряемого спектра, как за счет влияния на температуру атмосферы, так и за счет прямого изменения населенности соответствующих уровней.

Поэтому для точного моделирования спектров и восстановления физических условий в атмосферах экзопланет необходимо использовать не только модели переноса излучения, но и детальную кинетику возбужденных уровней.

1.4 Обзор существующих кинетических моделей

Кинетическое моделирование возбужденных и ионизованных состояний в астрофизических средах основано на решении системы уравнений баланса населенностей. Такие уравнения учитывают различные радиационные и столкновительные процессы, приводящие к перераспределению населенностей по уровням.

Классическая кинетическая модель включает столкновительное возбуждение и релаксацию (электронами, протонами, атомами, ионами), радиационные переходы (спонтанные, индуцированные), фотоионизацию, ударную ионизацию,

рекомбинационные процессы (радиационные, диэлектронные и трехчастичные).

Несмотря на важность не-ЛТР эффектов, лишь немногие численные коды реализуют их в полном объеме. Они различаются по сложности, области применения и степени универсальности. Ниже кратко описаны ключевые программы.

Библиотека CHIANTI [30] представляет собой один из наиболее полных и широко используемых наборов атомных данных и утилит для расчета спектров и кинетики ионизованных атомов в условиях солнечной и звездной короны. Основана на обширной базе переходов и сечений реакций для ионов большинства элементов до Fe. Библиотека предполагает стационарное состояние (плазма не эволюционирует во времени), при этом применима для высокотемпературной плазмы с низкой плотностью. CHIANTI хорошо подходит для расчета эмиссионных спектров в ЛТР и частично не-ЛТР условиях (только предварительно вычисленные населенности), но не включает многомерную геометрию (только 1D).

Код Cloudy [31] — одна из самых известных универсальных программ для моделирования фотоионизованных и частично ионизованных астрофизических объектов (H II-области, активные ядра галактик, кометы, планеты). Он позволяет рассчитывать уровни и спектры в условиях, далеких от ЛТР, решая полную радиационно-кинетическую задачу с включением большого количества атомов и молекул. При этом, осуществляется самосогласованный расчет термодинамики и спектра. Однако Cloudy имеет ограничения на рассматриваемые уровни, не всегда пригоден для анализа отдельных линий. Более того, код полноценно поддерживает лишь 1D геометрию (для экзопланет это ограничение частично обходится благодаря набору отдельных скриптов Cloudy for Exoplanets [15,16]). Тем не менее, Cloudy оставался единственной платформой, комбинируя которую с газодинамическими кодами атмосфер, можно было решать рассматриваемые в данной работе задачи.

ATLAS [32] — классический код для расчета атмосфер звезд, часто используется как база данных, известная как Kurucz Atomic Spectral Line Database). Работает в ЛТР, но имеет модификацию TLUSTY [33] для не-ЛТР случаев.

Программа MULTI [34] и ее наследники RH [35,36] и NESSY [37] разработаны для не-ЛТР моделирования спектральных линий в атмосферах звезд. Они решают уравнения переноса излучения и кинетики уровней атомов в одномерной геометрии и хорошо подходят для моделирования не-ЛТР линий с резонансным рассеянием. При этом, включают фото- и автоионизацию, рекомбинацию (но с ограниченной детализацией). Коды основаны на методе Λ -повторений для ускорения сходимости решения. MULTI предполагает использование внешней 3D-гидродинамики и

ограничена по числу уровней (RH предполагает возможность использования гидродинамики Bifrost).

Коды PHOENIX, TARDIS, CMFGEN разработаны преимущественно для синтеза спектров звезд и сверхновых, но иногда применяются и к планетарным атмосферам. PHOENIX [19,38] реализует полное моделирование атмосферы, в том числе ЛТР и не-ЛТР (только для отдельных случаев), с возможностью 3D-гидродинамики. TARDIS [39] ориентирован на синтез спектров сверхновых. CMFGEN [40] выполняет расчет не-ЛТР населенностей и спектров с учетом расширения атмосферы.

Отдельный класс составляют модели, ориентированные на планетарные условия, включая аэрономические коды, например, Mars-GRAM [41]. Эти модели применяются в аэрономии планет Солнечной системы (Земля, Марс, Титан), включают молекулярную химию, фотохимию и вертикальные профили. Хотя они имеют развитую химию, атомная структура упрощена (мало возбужденных уровней) и практически не учитывается многоуровневая кинетика атомов металлов. Очевидно, это связано с относительно низкими температурами планет Солнечной системы.

Программы, разрабатываемые специально для экзопланетных атмосфер ATMO [42], Exo-Transmit [43], Exo-REM [44], HELIOS [20], PLATON [45] ориентированы на расчеты поглощения излучения со спектральным разрешением (синтез спектра), определение состава и термодинамики. В большинстве случаев они используют приближение ЛТР или простые корректировки, лишь частично учитывают не-ЛТР эффекты (часто в виде параметризации) и не решают уравнения кинетики в общем виде, а также, основаны на простых схемах охлаждения через столкновительное возбуждение по типу коронального равновесия.

MOLPOP-CER [46] и RADEX [47]: специализированные коды решения уравнений возбуждения, особенно для молекул (в основном в ИК и СВЧ-диапазонах).

Хотя многие из существующих моделей успешно применяются к различным астрофизическим объектам, при работе с экзопланетами, особенно с горячими и ультрагорячими юпитерами, возникает ряд проблем. В первую очередь, это ограниченное число уровней, особенно в многоуровневых ионах (например, Fe II), что недопустимо при сильной радиации. Отсутствует полная кинетика каскадов и автоионизаций, ведущих к перезаселению уровней. Недостаточная точность в УФ диапазоне, где наблюдаются ключевые линии (O I, C II, Mg II). Пренебрежение неоднородной геометрией атмосферы, что критично при 3D моделировании.

Недостатком большинства моделей является невозможность обработки

произвольных полей плотностей различных элементов и температур, что ограничивает анализ 2D и 3D моделей и критически важно для синтеза спектра. Кроме того, они не способны детализованно учитывать и анализировать влияние отдельных не-ЛТР процессов и уровней элементов при взаимодействиях в атмосферах экзопланет, что особенно важно в условиях высоких температур и низких плотностей. Большинство из ключевых программ не рассчитаны на расчет нагрева/охлаждения как функции возбужденных уровней.

Указанные выше ограничения обусловили необходимость разработки специализированного программного комплекса, ориентированного на точное моделирование не-ЛТР кинетики уровней атомов и ионов в условиях экзопланетных атмосфер с возможностью анализа вклада отдельных уровней и процессов. При этом, должна присутствовать поддержка произвольных входных распределений плотностей и температур, возможность интеграции с результатами гидродинамического и гидростатического моделирования, а также, расчет населенностей квантовых уровней, и, на их основе, спектров, радиационных потерь, нагрева и охлаждения.

Детальное описание реализованной модели и ее применения к конкретным задачам изложено в последующих разделах данной диссертации.

1.5 Проблемы обнаружения кислорода, металлов и линий других элементов

Обнаружение атомов и молекул в атмосферах экзопланет имеет ключевое значение как для понимания процессов формирования и эволюции планет, так и для поиска признаков возможной биосферы. Наибольший интерес вызывают следующие группы элементов:

- Кислород (O) — как индикатор фотодиссоциации воды и, в некоторых случаях, потенциальный биомаркер. Ряд исследований показывает его значительное влияние на формирование и эволюцию планет, а также, связи с другими химическими элементами [48–51]. На больших масштабах он также играет важную роль. Например, его вклад обнаружен на химическую эволюцию Млечного Пути [52,53]. На данный момент, атомарный кислород был обнаружен в атмосфере экзопланеты HD 209458 b [17,54] и HD 189733 b [55] с использованием телескопа Хаббл в линии 130,4 нм. Единственное наблюдение линии 777,4 нм было осуществлено телескопом KELT в атмосфере экзопланеты KELT-9 b [15].
- Металлы (Fe, Mg, Na, Ca, Ti и др.) — как следы высокотемпературных процессов, испарения, фотоабляции. Детальное моделирование аэрономии показало, что

легко ионизируемые металлы вроде Mg и Fe могут значительно влиять как на нагрев, так и на охлаждение [16,56].

- Молекулярные соединения (H_2O , CO, CO_2 , CH_4) — как главные носители информации о химическом равновесии и переносе энергии в нижних слоях атмосферы.

Однако идентификация и количественная интерпретация спектральных линий указанных компонентов в наблюдениях атмосфер экзопланет сталкиваются с рядом фундаментальных и технических трудностей. В частности, в транзитной спектроскопии линий кислорода, особенно O I 130,4 нм, могут накладываться спектральные особенности излучения звезды. Линия O I 777,4 нм является слабой и часто подвержена искажению атмосферой Земли (если наблюдение с поверхности). Металлы, наблюдаемые в линиях Na I (589,0 нм, 589,6 нм), K I (766,5 нм, 769,9 нм), Fe II (УФ диапазон), требуют высокой точности при выделении малоcontrastных сигналов ($\sim 10^{-4}$). Кроме того, такие линии часто поглощаются в режиме насыщения. Принципиальным фактором транзитных измерений является переменность и неоднородность излучения звезды.

Ультрагорячие юпитеры, такие как KELT-9 b, имеют сильно расширенные, динамические атмосферы, что приводит к доплеровскому уширению и смещению линий, усилению высоковозбужденных линий, и линии ионизованных элементов. Многие резонансные линии при транзите создают эффект экранирования (эффект «self-shielding»). Это требует сложных моделей для учета геометрии, кинематики и эффекта оптической глубины, без которых невозможно корректное извлечение химических профилей.

В атмосферах горячих экзопланет могут наблюдаться как первичные, так и вторичные компоненты, происхождение которых связано с фотодиссоциацией молекул (например, $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{O} + 2\text{H}$). Другим источником может выступать вертикальное перемешивание и подъем тяжелых элементов из нижней атмосферы. Многие соединения обладают низкой стабильностью. Например, CH_4 при высоких температурах преобразуется в CO и H_2 . Таким образом, даже если кислород или металлы первоначально присутствуют, они могут исчезнуть из спектроскопически доступной зоны, либо существовать в формах, недоступных для наблюдения (например, ионы без доступных разрешенных переходов в используемом диапазоне).

Как обсуждалось ранее, наличие и видимость тех или иных линий критически зависит от населенностей соответствующих уровней, которые не подчиняются

равновесной (ЛТР) статистике. Для кислорода, например линия O I 130,4 нм формируется на возбужденном уровне, чувствительном к фотоионизации энергичными фотонами, а населенность уровня, ответственного за линию 777,4 нм, подвержена перенаселению при резонансном рассеянии, каскадах между уровнями, и фотоионизации фотонами УФ диапазона. При этом в ЛТР приближении обе линии могут либо исчезать, либо переоцениваться на порядок. Металлы типа Fe II демонстрируют еще более сложное поведение, поскольку они имеют множество метастабильных и каскадных уровней, связанных с УФ-излучением и с радиационным охлаждением. Это ведет к значительному расхождению между ожидаемыми и наблюдаемыми профилями при использовании ЛТР моделей.

Кислородные линии, такие как O I 130,4 нм (УФ), O I 777,4 нм (ИК), могут быть детектированы при транзитных наблюдениях. Однако интерпретация требует знания температуры, плотности, ионизационного состава и условий возбуждения, так как относительная интенсивность этих линий сильно зависит от кинетики уровней, что далее будет продемонстрировано. Тем не менее, успешные наблюдения, такие как обнаружение линии кислорода 130,4 нм в атмосфере HD 189733 b с помощью телескопа Хаббл, или обнаружение линии 777,4 нм в атмосфере KELT-9 b демонстрируют возможности современных инструментов при условии правильной интерпретации данных.

Металлы (Fe, Mg, Na, Ca) также часто присутствуют в атмосферах газовых планет. Их линии (например, Fe II 2600 Å, Mg II 2800 Å) могут быть использованы для диагностики энергетического баланса. Однако эти линии формируются на разных высотах, при различных условиях возбуждения, и простое сопоставление с ЛТР-моделью может дать ошибочный результат.

Таким образом, для надежной идентификации элементов и интерпретации их линий требуется комплексное моделирование, включающее полную не-ЛТР кинетику с учетом всех значимых уровней и переходов. При этом кинетика должна сочетаться с расчетом гидродинамической и термодинамической структуры атмосферы, особенно в 3D. Такое моделирование позволяет прогнозировать появление или исчезновение линий в зависимости от условий, определить, какая часть атмосферы ответственна за формирование спектра, корректно оценивать состав, температурный профиль и динамику. Проблема обнаружения кислорода, металлов и других элементов в атмосферах экзопланет остается одной из наиболее сложных и нерешенных. Она требует сочетания точных наблюдательных данных, комплексных моделей кинетики возбужденных уровней и адекватного учета переноса излучения.

Основные направления развития в этой области включают повышение точности атомных данных (сечения и коэффициенты переходов), развитие 3D не-ЛТР моделей, объединение спектроскопических и фотохимических моделей, поиск новых индикаторов состава атмосферы, менее чувствительных к ЛТР-ошибкам.

В рамках данной работы предложен подход, сочетающий детальную многоуровневую кинетику возбужденных уровней с реалистичными профилями атмосфер экзопланет, что позволяет выявлять и интерпретировать ключевые элементы, такие как кислород, железо и магний, с учетом всех значимых неравновесных эффектов.

1.6 Роль возбужденных уровней в энергетическом балансе

Возбужденные уровни атомов и ионов не только определяют спектральные особенности, но и играют в определенных случаях ключевую роль в нагреве и охлаждении атмосферы. Основные механизмы нагрева и охлаждения атмосферы связаны с передачей энергии между сталкивающимися атомами/молекулами (ударное возбуждение и девозбуждение), излучением, фотоионизационным нагревом через поглощение УФ-фотонов и охлаждением путем ударной ионизации.

Энергетический баланс атмосферы экзопланеты можно представить как равновесие между поглощенной, переизлученной, рассеянной и утерянной энергией:

$$Q_H - Q_C = \frac{dE}{dt},$$

где Q_H — совокупность всех механизмов нагрева, Q_C — механизмов охлаждения, а dE/dt — изменение внутренней энергии среды.

Возбужденные уровни атомов и ионов играют ключевую роль в обоих компонентах левой части уравнения: они участвуют как в радиационном и ударном нагреве, так и в эффективном излучении энергии в виде фотонов. Их населенность (особенно в условиях не-ЛТР) существенно влияет на баланс энергии и определяет термодинамическое состояние атмосферы.

Например, уровни Fe II с энергией $\sim 3\text{--}5$ эВ эффективно возбуждаются при температурах 4000–6000 K, и излучают в УФ-диапазоне. Это может быть мощным каналом охлаждения в верхних слоях атмосферы.

Особенно важны резонансные линии и метастабильные уровни, которые способны накапливать энергию и излучать ее при переходах. Как будет показано далее, в атмосфере KELT-9 b охлаждение доминирует за счет линий Fe II и Mg II в УФ, в которых возможно эффективное излучение при высоких температурах ($\sim 10\,000$ K).

В нижних слоях атмосферы охлаждение также осуществляется за счет излучения в ИК-диапазоне от молекул, но при высоких температурах роль атомных линий резко возрастает. Даже небольшие изменения в населенности высоких уровней (на фоне не-ЛТР) могут привести к изменению баланса энергии на десятки процентов.

Парадоксально, но те же возбужденные уровни, которые способствуют охлаждению, в других условиях становятся источниками нагрева атмосферы. Это происходит, например, при фотоионизации из возбужденных состояний, приводящей к дополнительному выбросу электронов с кинетической энергией. Например, в УФ-облучаемых экзопланетах, таких как WASP-121 b или KELT-9 b, фотоабсорбция может привести к сильному нагреву верхних слоев атмосферы. Также, при высокой плотности электронов возможно нерадиационное рассеяние энергии, когда возбужденный уровень теряет энергию при столкновениях, передавая ее в тепловую составляющую газа.

В условиях термодинамического равновесия (ЛТР) населенности уровней определяются уравнением Больцмана и Саха. Однако атмосферы экзопланет содержат ряд особенностей, включая малые плотности, интенсивное и анизотропное излучение звезды (отклонение от закона Планка), сильные потоки вещества (ветры, интенсивная потеря вещества). Это ведет к существенным отклонениям от ЛТР, особенно для относительно долгоживущих ионных уровней (которые есть, например, у Fe II, Mg II), а также, в переходных зонах, где ионизация и рекомбинация не уравновешены. В таких условиях классические ЛТР-модели могут как недооценить охлаждение (если не учтены все уровни), так и переоценить его (если предполагается перенаселение возбужденных состояний, которого нет в реальности).

Реализация не-ЛТР расчетов позволяет выявить, какие уровни являются главными участниками энергетического обмена. В следующих главах продемонстрировано, что вклад Fe II в охлаждение может достигать 30–50 % в отдельных слоях атмосферы, а в некоторых случаях становится главным каналом энергетических потерь.

Отдельного внимания требуют процессы радиационных каскадов. Энергия каскада распределяется между различными диапазонами спектра, влияя на охлаждение в ИК, оптическом и УФ диапазоне. Метастабильные уровни — особый случай, так как они имеют долгие времена жизни, могут служить «резервуарами» энергии, и при ударном распаде в условиях высокой плотности могут отдавать энергию в виде кинетической, нагревая газ. Таким образом, правильный учет всех таких процессов необходим для количественного анализа энергии атмосферы и

предсказания ее устойчивости к нагреву и расширению.

Прямой расчет возбужденных уровней имеет значительное преимущество при интерпретации наблюдений. Он позволяет объяснить наблюдаемые сверхширокие профили линий металлов, предсказать линии, которые могут быть усилены или подавлены не-ЛТР эффектами, а также, интерпретировать наблюдаемый перегрев атмосферы (как в случае KELT-9 b) как результат резонансного или фотоионизационного нагрева через возбужденные состояния, а не через основное состояние атомов. Сравнение моделей с учетом и без учета не-ЛТР кинетики показывает, что разница в предсказанном охлаждении может достигать более трех порядков, особенно в слоях выше 1 мбар. Это критично для оценки потери массы атмосферой, термической структуры и возможности детектирования тех или иных элементов.

Разработанная в рамках данной диссертации модель позволила впервые количественно оценить вклад конкретных уровней и элементов (в частности, Fe II) в нагрев и охлаждение атмосфер горячих экзопланет, а также выявить новые потенциальные каналы энергетических потерь. Это открывает путь к более точной реконструкции физического состояния и эволюции атмосфер экзопланет.

1.7 Выводы к главе 1

Современные спектральные методы играют ключевую роль в исследовании атмосфер экзопланет, предоставляя уникальную информацию об их составе, температуре, динамике и энергетическом балансе. Как показано в обзоре, спектроскопия высокого, среднего и низкого разрешения, а также мультиспектральные наблюдения позволяют выявлять атомные и молекулярные компоненты, включая потенциальные биомаркеры, такие как вода, кислород и метан. Интерес представляют горячие и ультрагорячие юпитеры, где экстремальные условия приводят к сложным физико-химическим процессам, включая ионизацию, фотохимические реакции и интенсивное радиационное взаимодействие.

Транзитная и эмиссионная спектроскопия, а также фазовая спектроскопия являются основными подходами для изучения атмосфер экзопланет. Однако интерпретация наблюдательных данных требует учета множества факторов, включая влияние земной атмосферы, инструментальные эффекты и процессы переноса излучения. Особую сложность представляет анализ спектров в условиях, далеких от локального термодинамического равновесия (не-ЛТР), где населенности уровней определяются не только температурой, но и радиационными и столкновительными

процессами. В таких случаях классические ЛТР модели могут приводить к значительным ошибкам в определении состава и температурных профилей.

Обзор существующих кинетических моделей, таких как CHIANTI, Cloudy, ATMO и других, показал, что большинство из них имеют ограничения применительно к экзопланетным атмосферам, особенно в условиях не-ЛТР. Недостаточный учет многоуровневой кинетики, сложной геометрии и взаимодействия между различными процессами затрудняет точное моделирование спектров и энергетического баланса. Это подчеркивает необходимость разработки специализированных программных комплексов, способных решать полную систему кинетических уравнений для возбужденных состояний в условиях экзопланетных атмосфер.

Особое внимание уделено проблемам обнаружения элементов, таких как кислород и металлы, которые играют важную роль в диагностике атмосфер. Линии кислорода (O I 130,4 нм и 777,4 нм) и металлов (Fe II, Mg II) чувствительны к не-ЛТР-эффектам, что усложняет их интерпретацию, но открывает новые возможности для изучения физических условий в атмосферах. Успешные наблюдения этих линий, например, в атмосферах HD 189733 b, HD 209458 b и KELT-9 b, демонстрируют потенциал современных инструментов при условии корректного моделирования.

Возбужденные уровни атомов и ионов не только формируют спектральные особенности, но и играют важную роль в энергетическом балансе атмосфер, влияя на процессы нагрева и охлаждения. Учет этих эффектов позволяет более точно описывать наблюдаемые спектры и прогнозировать поведение атмосфер в экстремальных условиях. Таким образом, развитие методов не-ЛТР моделирования, включая детальную кинетику уровней и интеграцию с гидродинамическими моделями, является перспективным направлением для дальнейшего прогресса в исследовании атмосфер экзопланет.

В рамках данной работы предложен новый подход, сочетающий точное моделирование не-ЛТР кинетики с реалистичными профилями атмосфер, что открывает новые возможности для диагностики и интерпретации наблюдательных данных. Это создает основу для последующих глав, посвященных конкретным применениям разработанных методов, включая анализ линий кислорода, роль иона Fe II и влияние звездной активности на спектральные сигналы.

Глава 2 МЕТОДЫ РАСЧЕТА СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ИЗЛУЧЕНИЯ В НЕРАВНОВЕСНОЙ ПЛАЗМЕ ЭКЗОПЛАНЕТ

2.1 Постановка задачи в рамках глобального моделирования

Изучение спектральных характеристик излучения в атмосферах экзопланет представляет собой одну из наиболее актуальных задач современной астрофизики. Наблюдаемое излучение несет в себе богатую информацию о физико-химических условиях в атмосферах этих объектов, из которых можно сделать предположения о температурных профилях, составе, динамических и радиационных процессах. Однако для интерпретации наблюдаемых спектров, особенно в условиях неравновесной (не-ЛТР) плазмы, необходимо использовать комплексные численные модели, способные описать все ключевые физические процессы, происходящие в атмосфере экзопланеты. В данной работе рассматривается постановка задачи моделирования излучательных характеристик в рамках глобального подхода, включающего расчет гидростатических или гидродинамических атмосфер, определение населенностей квантовых уровней с учетом отклонений от локального термодинамического равновесия, а также синтез спектра.

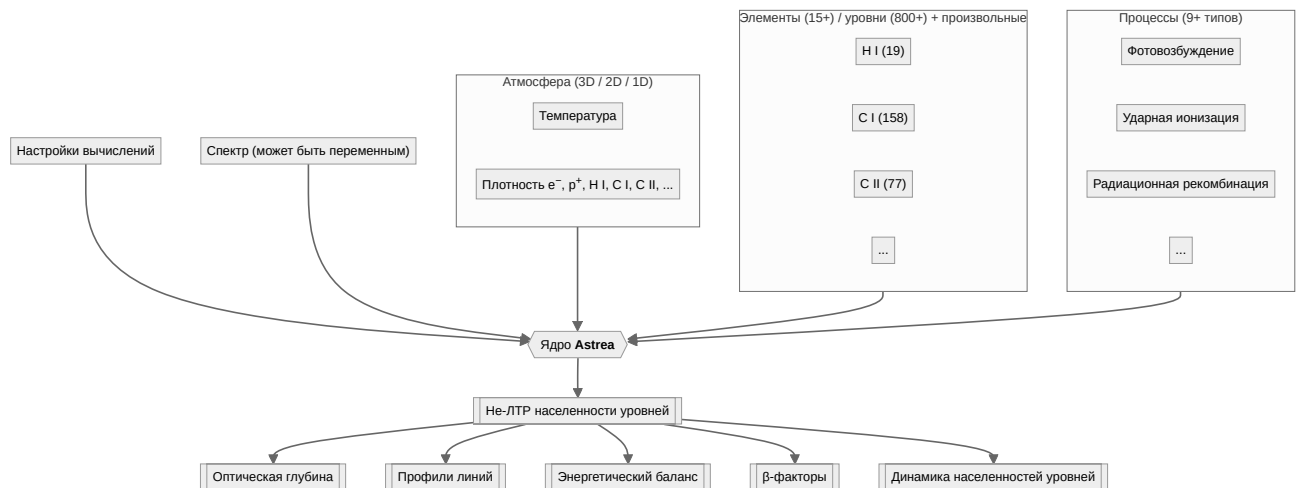


Рисунок 1: Архитектура и последовательность операций Astrea.

Глобальное моделирование атмосфер экзопланет представляет собой интеграцию различных физических модулей в единую вычислительную схему. Основной целью является получение самосогласованного описания состояния атмосферы, включая ее термодинамику, химический состав, радиационные потоки и процессы переноса энергии. В отличие от упрощенных локальных моделей, которые предполагают независимый расчет отдельных слоев или параметров, глобальный

подход предполагает учет связей между различными областями атмосферы и взаимодействие между всеми процессами.

Ключевым преимуществом такого подхода является возможность анализа глобального энергетического баланса, построения реалистичных профилей температуры и давления, а также прогнозирования спектральных характеристик, согласующихся с наблюдаемыми данными. При этом особое внимание уделяется корректному учету неравновесных эффектов, таких как перераспределение уровней, процессы фотоионизации и рекомбинации, которые оказывают определяющее влияние на формирование спектра в условиях разреженной плазмы верхней атмосферы экзопланет.

Исходными данными для расчетов служат трехмерные, двумерные или одномерные распределения температуры, плотностей электронов, протонов и основных химических элементов, которые могут быть получены с использованием внешних гидродинамических или гидростатических моделей атмосферы. Например, в нашей лаборатории был разработан многожидкостный 3D МГД глобальный код Eхо3D, который, на данный момент, является единственным инструментом для моделирования атмосфер экзопланет, основывающимся в первую очередь на наблюдательных данных, что значительно улучшает качество самих моделей [57–61]. Однако интеграция не-ЛТР модуля с другими крупными пакетами вроде Eхо3D с возможностью полного согласования расчетов — отдельная масштабная задача, принципиальной сложностью которой является кардинальное различие временных масштабов процессов (для гидродинамики — от нескольких секунд до нескольких часов, для квантовых переходов — от 10^{-12} до 10^{-3} секунд), и требует как значительной переработки программных интерфейсов для передачи множества новых параметров, так и смену схемы оптимизации для разумной продолжительности вычислений. Дополнительно, в рамках данной работы, автором была разработана собственная упрощенная программа для моделирования гидростатических 3D-атмосфер, учитывающая гравитационное поле, давление, температуру и химический состав с высотной зависимостью, которая позволяет проводить более грубую (по сравнению с гидродинамикой) оценку, но за гораздо меньшее время вычислений, что оптимально для целей тестирования и предварительной оценки кинетики в атмосферах планет.

Параметры, такие как гравитационное ускорение, фотонный поток от звезды, химический состав (с возможностью варьирования долей металлов, молекулярного водорода, кислорода, углерода и др.), температура звезды и ее спектр, а также

геометрия атмосферы экзопланеты, задаются на этапе подготовки модели. Это позволяет адаптировать расчеты под конкретные наблюдаемые объекты, включая горячие юпитеры, суб-нептуны и землеподобные планеты.

Центральным элементом глобального моделирования является блок расчета населенностей квантовых уровней атомов и ионов в условиях, когда предположение локального термодинамического равновесия (ЛТР) неприменимо. В реальных атмосферных условиях, особенно в верхних слоях, наблюдаются значительные отклонения от ЛТР вследствие низкой плотности и интенсивного потока излучения. Эти отклонения существенно влияют на формирование поглощения в спектральных линиях, особенно в ультрафиолетовом и инфракрасном диапазонах.

Разработанная автором программа *Astrea* [62] решает систему кинетических уравнений (см. раздел 2.3), описывающих переходы между уровнями, включая радиационные процессы (спонтанное и вынужденное излучение), фотоионизационные процессы, процессы радиационной рекомбинации, столкновительные процессы (возбуждение, ионизация и рекомбинация путем соударений с электронами, протонами и атомами). Решение этих уравнений реализуется для заданного набора условий на сетке точек (температура, плотности электронов и вещества), охватывающих атмосферу планеты на несколько планетарных радиусов.

Выходной результат — распределение населенностей уровней для каждого химического элемента, необходимое для расчета коэффициентов поглощения и излучательной способности плазмы, что в конечном итоге позволяет синтезировать спектр излучения. Полученные данные также используются для анализа энергетического баланса атмосферы, включая механизмы нагрева и охлаждения.

Следующим шагом является решение задачи распространения излучения в среде (см. раздел 2.5.3). В рамках глобального подхода важно учитывать не только локальное взаимодействие излучения с веществом, но и трехмерную геометрическую структуру атмосферы в целом.

Решение уравнения переноса излучения в среде проводится с учетом произвольной оптической глубины. Модуль синтеза спектра, также представляемый в рамках диссертации, использует методы численного интегрирования по траекториям лучей и позволяет получать спектры поглощения как отдельных линий, так и в заданных спектральных интервалах.

Важно подчеркнуть, что результаты синтеза спектра непосредственно зависят от точности расчета населенностей уровней и используемых атомных данных.

Поэтому в программе реализована возможность работы с внешними базами данных, такими как NIST ASD, Kurucz Atomic Spectral Line Database и др., наборами данных из статей (например, [63]), а также предусмотрены методы ручной настройки и создания своих моделей химических элементов и процессов.

Глобальное моделирование реализовано в модульной архитектуре, что обеспечивает гибкость и расширяемость подхода. Каждый физический блок (гидростатика, кинетика, синтез спектра, термодинамика) может быть адаптирован или заменен в зависимости от специфики задачи. Это особенно важно при переходе от расчетов для идеализированных моделей к конкретным наблюдаемым экзопланетам.

Интеграция блоков проводится с помощью унифицированной системы передачи данных, где каждый модуль принимает входные параметры из предыдущих этапов и формирует выходные данные для последующих (рис. 1). Такой подход позволяет легко настраивать модель, регулировать ее пространственное разрешение и адаптировать под различные физические условия (например, переход от горячих экзопланет к холодным суб-нептунам или землеподобным мирам).

2.2 Описание входных данных: плотности, температура, геометрия

Корректная постановка задачи численного моделирования радиационных процессов в атмосфере экзопланеты требует задания полной совокупности входных параметров, описывающих физическое состояние среды. К числу таких параметров относятся пространственные распределения температуры, плотности электронов, ионов и нейтральных атомов, а также геометрическая структура атмосферы. Эти данные формируют основу для расчета кинетики возбужденных состояний, оптических характеристик среды и последующего синтеза спектра.

В данной работе используется набор входных параметров, представленных на регулярной сетке в одном, двух или трех измерениях, в зависимости от выбранной конфигурации модели и поставленной задачи (например, для полноценного исследования оптических, гидродинамических и магнитных явлений необходима 3D (иногда 2D) геометрия, в то время как для изучения термодинамических эффектов может быть достаточна 1D геометрия). В качестве экспериментального режима возможно использование нерегулярных сеток, создаваемых с помощью алгоритма Боуэра — Ватсона, что в ряде случаев может увеличить точность, расширить возможности для параллелизации и упростить визуализацию.

В качестве примера рассмотрим гидростатическую атмосферу. На условной

границе атмосферы задается начальное давление (давление на поверхности планеты) P_0 , которое, также пропорционально концентрации водорода N_0 (чаще всего, используются их оценки из других работ, выбираются по аналогии с исследованными планетами, либо выявляются путем «калибровки» с результатами наблюдений). Далее, с помощью барометрической формулы получаем распределение водорода N при заданной температуре T :

$$N(r) = N_0 \exp \left(-\frac{GmM}{k_B T} \left(\frac{1}{r_0} - \frac{1}{r} \right) \right),$$

где m — молекулярная масса, M — масса планеты, G — гравитационная константа, r — высота, r_0 — радиус объекта (планеты), k_B — постоянная Больцмана. Плотности остальных элементов обычно вычисляются предполагая их стандартное солнечное содержание относительно водорода. Таким образом возможно учитывать широкий набор элементов, включая H, He, C, N, O, Mg, Fe и другие по необходимости.

Плотность электронов N_e является ключевым параметром в задачах кинетики квантовых уровней, поскольку от нее напрямую зависят скорости ударных процессов (возбуждение, ионизация, рекомбинация), а также зарядовое равновесие. Для атмосфер экзопланет в гидростатическом равновесии ее упрощенно можно описать с помощью баланса фотоионизации — радиационной рекомбинации [57,64]:

$$N \langle \sigma F \rangle = \alpha_B(T) N_e^2, \quad (2)$$

где $\langle \sigma F \rangle \approx t^{-1} / (1 + (\sigma N L)^{3/2})$ — скорость фотоионизации водорода, t — среднее время ионизации (несколько часов для типичных экзопланет), $\sigma \approx 6,3 \times 10^{-18} \text{ см}^2$ — сечение фотоионизации, $\alpha_B \approx 2,6 \times 10^{-13} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1} (10^4 \text{ К} / T)^{0,8}$ — скорость радиационной рекомбинации. Формула учитывает поглощение ионизирующего спектра в плотных слоях атмосферы, $N L \approx N \times H$ — интеграл плотности водорода до точки наблюдения (1), H — локальная шкала высот.

Для кислорода плотность ионов может быть приближенно найдена из равновесия с водородом как результат резонансной реакции перезарядки [65]:

$$\frac{N_{O II}}{N_{O I}} = \frac{k_H}{k_O} \frac{N_{p^+}}{N}, \quad (3)$$

где $N_{O I}$ — плотность атома кислорода, $N_{O II}$ — плотность иона кислорода, $N_{p^+} = N_e$ — плотность протонов, k_H/k_O — отношение скоростей перезарядки для прямой и обратной реакции ($k_H \approx k_O$ для $T > 1000 \text{ К}$).

Важно подчеркнуть, что здесь продемонстрирован алгоритм получения начальных данных с помощью простой гидростатической модели, однако, для полноценного моделирования конкретных атмосфер рекомендуется использовать результаты внешних расчетов (например, гидродинамического пакета типа ECHO3D, ATMO, HELIOS или PLATON). В пакете реализована поддержка чтения входных данных в виде таблиц (CSV, HDF5), что обеспечивает совместимость с большинством современных вычислительных кодов.

Для повышения точности в верхних слоях атмосферы, где плотности резко падают, используется логарифмическое масштабирование и интерполяция данных в логарифмическом пространстве, что позволяет избежать потерь точности при вычислениях.

Температура T является одним из ключевых параметров, определяющим как термодинамическое состояние плазмы, так и скорости всех термически зависимых процессов. В рамках модели Astrea температура также задается на регулярной сетке, как правило, в зависимости от вертикальной координаты (или радиуса r , если рассматривается сферическая геометрия). При этом возможны как изотермические, так и произвольно варьирующиеся профили, что позволяет моделировать широкий спектр физических условий — от холодных тропосфер до нагретых фотосфер и экзосфер.

Температура влияет на распределение частиц по уровням в приближении ЛТР, ударные сечения (через температурные зависимости скоростей столкновений) в приближении не-ЛТР, давление и, соответственно, масштаб высот.

В ряде случаев температура используется как искомый параметр при решении обратной задачи: определение диапазонов температур, при которых возможна регистрация конкретных линий (например, соотношение линий кислорода O I 130,4 нм и 777,4 нм).

В зависимости от цели расчета есть возможность использовать различную степень детализации геометрии (на выбор пользователя):

- 1D модель: вертикальный профиль, применяется при изучении среднеатмосферных условий и для тестирования кинетических моделей;
- 2D модель: симметрия относительно оси вращения, позволяет учитывать дневную и ночную стороны планеты;
- 3D модель: полное описание с возможностью учета звездного потока по направлению, углового распределения, теней и потоков.

Геометрия влияет на расчет оптической глубины и путей распространения

излучения. В частности, в сферической геометрии интегрирование вдоль лучей ведется с учетом изменения плотности и температуры вдоль траектории. Это особенно важно при моделировании атмосфер с разреженной экзосферой, где фотон может проходить большие расстояния до поглощения.

В программе реализована поддержка регулярных, нерегулярных и адаптивных сеток. Пространственная сетка может быть как равномерной (например, равные шаги по высоте), так и логарифмической (для более плотного покрытия областей с резкими градиентами). В 3D-режиме сетка строится в сферических координатах (r, θ, ϕ) или в декартовой системе (x, y, z) , в зависимости от задачи. Размерность и разрешение сетки выбираются в зависимости от компромисса между точностью и вычислительными затратами. Основным режимом является режим совместимости сетки с Eho3D (регулярная логарифмическая сферическая сетка).

Также возможно задание маски или области интереса, в пределах которой производятся расчеты. Это позволяет сосредоточить ресурсы на наиболее критичных областях, например, вблизи зоны поглощения ультрафиолетового излучения. В частности, в задаче о соотношении интенсивностей линий кислорода, такой областью была выбрана полость Роша — гравитационно связанная область в бинарных системах (планета — звезда).

Перед началом моделирования входные данные проходят этап валидации и интерполяции на рабочую сетку. Реализованы следующие методы обработки: интерполяция линейная и кубическая сплайновая; сглаживание зашумленных данных; устранение отрицательных значений и физически невозможных комбинаций (например, отрицательных плотностей); масштабирование и нормализация по сравнению с эталонными параметрами.

Благодаря модульности программы возможно подключение новых источников данных через интерфейс загрузки, не требующий переписывания основного кода.

2.3 Методика расчета ЛТР и не-ЛТР населенностей

Для количественного моделирования излучательных характеристик атмосферы экзопланет необходимо точно определить населенности квантовых уровней атомов и ионов, так как они определяют интенсивности поглощения и излучения спектральных линий и ионизацию элементов. В приближении локального термодинамического равновесия населенности уровней рассчитываются по уравнению Больцмана (4). Для ионизационного состояния можно использовать, если необходимо, уравнение Саха (5). Этот подход служит в качестве базовой проверки, но не применим в условиях

разреженной плазмы и при наличии интенсивного излучения — в таком случае используется неравновесная (не-ЛТР) кинетика. В данном разделе описывается методика расчета населенностей обоих типов, с акцентом на численную реализацию не-ЛТР в разработанной модели.

Основные населенности уровней вычисляются по формуле Больцмана:

$$n_i = \frac{g_i \exp(-E_i/(k_B T))}{\sum_j g_j \exp(-E_j/(k_B T))}, \quad (4)$$

где n_i — населенность уровня i , g_i и g_j — статистические веса уровней i и j , E_i и E_j — энергии уровней i и j , k_B — постоянная Больцмана, T — температура.

При использовании сторонних гидродинамических или гидростатических кодов, отдельный учет ионизационного баланса не нужен, однако, при необходимости, он может быть рассчитан с помощью уравнения Саха [5]:

$$N_z = \frac{\prod_{i=z}^{Z-2} N_e \Phi_i}{\sum_{k=0}^{Z-1} \prod_{i=k}^{Z-2} N_e \Phi_i}, \quad (5)$$

где $z \in [0, Z - 2]$ — индекс стадии ионизации, Z — количество ионов элемента, N_e — плотность электронов, N_z — относительная концентрация иона z , Φ_i — относительная населенность иона, определяющаяся соотношением

$$\Phi_z = N_z / N_{z+1} = \frac{\sum_{i=0}^{k_z-1} g_{z,i} \exp(-E_{z,i}/(k_B T))}{\sum_{i=0}^{k_{z+1}-1} g_{z+1,i} \exp(-E_{z+1,i}/(k_B T))} \frac{\tilde{\lambda}^3}{2} \exp\left(\frac{I_z}{k_B T_e}\right),$$

где $g_{z,i}$ — статистический вес уровня i иона z , $E_{z,i}$ — энергия уровня i иона z , T_e — температура электронов, $\tilde{\lambda}$ — термальная длина волны де Бройля, I_z — энергия ионизации основного состояния иона z .

Длина волны де Бройля:

$$\tilde{\lambda} = \sqrt{\frac{h^2}{2\pi m_e k_B T_e}},$$

где h — постоянная Планка, m_e — масса электрона.

Важным параметром в задачах кинетики является коэффициент отклонения (β -фактор, departure coefficient, B-factor), связывающий населенности уровня при ЛТР (n_{LTE}) и не-ЛТР (n_{NLTE}):

$$\beta = n_{NLTE} / n_{LTE}. \quad (6)$$

2.3.1 Кинетические уравнения

В условиях, когда населенности квантовых уровней не подчиняются распределению Больцмана, необходимо решать систему кинетических уравнений, описывающих балансы поступлений и уходов частиц с каждого уровня. Обобщенное кинетическое уравнение для уровня i имеет вид:

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{j \neq i} (n_j R_{ji} - n_i R_{ij}), \quad (7)$$

где n_i — населенность уровня i , R_{ij} — суммарная скорость перехода из уровня i в уровень j , t — время, сумма ведется по всем уровням атома или иона.

Каждое R_{ij} включает вклад радиационных и ударных процессов. Для $i < j$:

$$R_{ij} = R_{ij}^{ce} + R_{ij}^{pe} + R_{ik}^{ci} + R_{ik}^{pi} - R_{ki}^{dr} - R_{ki}^{tbr} - R_{ki}^{rr},$$

$$R_{ji} = R_{ji}^{cd} + A_{ji} + R_{jk}^{ci} + R_{jk}^{pi} - R_{kj}^{dr} - R_{kj}^{tbr} - R_{kj}^{rr},$$

где k — континуум, R_{ij}^{ce} и R_{ji}^{cd} — скорости ударного возбуждения и девозбуждения (зависят от температуры и плотности частиц), R_{ij}^{pe} — скорость фотовозбуждения, A_{ji} — скорость спонтанной эмиссии (из каталога, например, NIST), R_{ik}^{ci} — скорость ударной ионизации, R_{ik}^{pi} — скорость фотоионизации, R_{ki}^{dr} — скорость диэлектронной рекомбинации, R_{ki}^{tbr} — скорость трехчастичной рекомбинации. R_{ki}^{dr} — скорость радиационной рекомбинации. Все рассматриваемые процессы имеют прямое и обратное направление.

В случае, когда речь идет о стационарных состояниях, система сводится к решению уравнений вида:

$$\sum_{j \neq i} (n_j R_{ji} - n_i R_{ij}) = 0, \forall i. \quad (8)$$

Эта система дополняется нормировочным условием:

$$\sum_i n_i = 1.$$

Абсолютная концентрация находится умножением на концентрацию элемента.

Таким образом, задача сводится к решению системы линейных уравнений (возможно с жесткими коэффициентами), которую необходимо решать отдельно в каждой точке атмосферы, на каждой итерации, и для каждого элемента.

В разработанной программе Astrea предлагается модифицированная формулировка задачи, основанная на выводе кинетического уравнения из первых принципов — непрерывной цепи Маркова. Этот подход аналогичен выводу управляющих/основных уравнений (Master equation) в квантовой механике, но с важными отличиями. Вместо традиционного представления системы уравнений в виде отдельных выражений для уровней, используется общее матричное уравнение, где матрицы представляют физически осмысленные операторы (например, диагональные элементы матрицы непосредственно связываются с процессами, влияющими на населенность уровней, что облегчает анализ динамики системы). Такая матричная запись позволяет объединить различные процессы (возбуждение, девозбуждение, ионизацию и рекомбинацию) в единую структуру. Это не просто переопределение R_{ij} , а создание более универсального инструмента, который может быть адаптирован к различным физическим системам. Матричная форма записи может привести к более эффективным алгоритмам для численного решения, особенно в случае больших систем. Использование специализированных библиотек для работы с матрицами может значительно ускорить вычисления по сравнению с традиционными методами решения систем обыкновенных линейных уравнений. Также, матричный подход позволяет легко добавлять новые процессы или уровни в модель без необходимости переработки всей системы уравнений. Это делает модель более гибкой и пригодной для исследования сложных систем. Традиционные подходы часто сталкиваются с ограничениями, такими как сложность учета взаимосвязей между различными процессами и необходимость ручного управления системой уравнений. Матричный подход автоматизирует этот процесс и снижает вероятность ошибок.

В новой формулировке уравнение (7) выражается как

$$\frac{d\mathbf{n}}{dt} = \hat{R} \mathbf{n}, \quad (9)$$

где $\mathbf{n}$ — вектор населенностей уровней, $\hat{R}$ — «матрица связей» (матрица скоростей переходов, оператор полной энергии системы), которая выражается через скорости переходов

$$\hat{R} = \begin{cases} -\sum_{k \neq i} R_{ik}, & i = j \\ R_{ji}, & i \neq j \end{cases},$$

и выполняется условие $\sum_{k=0} \hat{R}_{kj} = 0$.

В дискретном виде уравнение (9) с использованием неявной схемы сводится к нахождению населенностей на следующем шаге по времени:

$$\frac{\mathbf{n}_{\tau+1} - \mathbf{n}_{\tau}}{\Delta t} = \hat{R} \mathbf{n}_{\tau+1},$$

$$\mathbf{n}_{\tau+1} = (I - \hat{R}\Delta t)^{-1} \mathbf{n}_{\tau} = \hat{P} \mathbf{n}_{\tau}, \quad (10)$$

где τ — индекс итерации по времени, $\hat{P}$ — оператор скоростей квантовых переходов (оператор временной эволюции, пропагатор системы), I — единичная матрица, Δt — шаг по времени. Система уравнений для не-ЛТР — это в общем случае жесткая система линейных уравнений. Для ее решения используется LU-разложение с модифицированной итерацией Гаусса, либо метод обратной матрицы с предварительной нормализацией, в зависимости от размера задачи.

Далее, подробнее рассмотрим скорости переходов (недиагональные элементы матрицы $\hat{R}$). Начнем с универсального описания, а затем перейдем к частным процессам (список всех поддерживаемых типов квантовых переходов перечислен в таблице 1). Скорость перехода R_{if} (из уровня/континуума i в уровень/континуум f), в общем случае, это интеграл вида

$$R_{if} \sim \int_{E_{min}}^{\infty} \sigma_{if}(E) F(E) dE, \quad (11)$$

где E — энергия (или пропорциональная/обратная энергии величина вроде частоты или длины волны), E_{min} — минимальная энергия для осуществления перехода, σ_{if} — сечение перехода, F — статистическое распределение энергии (например, спектр излучения, или скорости электронов).

Таблица 1: Список поддерживаемых квантовых переходов в Astrea. X и Y — элементы, где нижний индекс или верхний индекс «*» означает возбужденный уровень, верхний индекс «+» означает ион, e^- — электрон, $h\nu$ — фотон (при необходимости, в нижнем индексе указана пара уровней, между которыми учитывается соответствующая энергия фотона).

Название перехода	Обозначение	Формула
Спонтанная эмиссия	SE	$X_j \rightarrow X_i + h\nu_{ji}$
Фотовозбуждение	PE	$X_i + h\nu_{ij} \rightarrow X_j$
Вынужденное излучение	PD	$X_j + h\nu_{ji} \rightarrow X_i + 2h\nu_{ji}$

Название перехода	Обозначение	Формула
Фотоионизация	PI	$X + h\nu \rightarrow X^+ + e^-$
Радиационная рекомбинация	RR	$X^+ + e^- \rightarrow X + h\nu$
Диэлектронная рекомбинация	DR	$X^+ + e^- \rightarrow X^{**} \rightarrow X + h\nu$
Ударное возбуждение	CE	$X_i + e^- \rightarrow X_j + e^-$
Ударное девозбуждение	CD	$X_j + e^- \rightarrow X_i + e^-$
Ударная ионизация	CI	$X + e^- \rightarrow X^+ + 2e^-$
Трехчастичная рекомбинация	TBR	$X^+ + e^- + e^- \rightarrow X + e^-$
Перезарядка	CTI/CTR	$X^+ + Y \leftrightarrow X + Y^+$

Скорости для некоторых типов переходов вычисляются относительно просто и не требуют больших вычислительных мощностей. Однако большинство переходов, особенно которые зависят от спектра излучения, требуют взятие интеграла.

Спонтанная эмиссия в плазме присутствует всегда, и является обязательным для включения в модель процессом. Скорости спонтанной эмиссии (spontaneous emission¹) A_{ji} в большинстве случаев известны, и их можно использовать из баз данных типа NIST [66] (см. более полный список источников в разделе 2.4). Однако верхние слои атмосфер экзопланет характеризуются разреженностью и высоким уровнем облучения от звезды, поэтому верхний уровень может «запираться» из-за быстрого обратного перехода (пленение излучения, radiation trapping). Это приводит к необходимости учитывать подавление («тушение») спонтанного излучения в зависимости от высоты и использовать R_{ji}^{rtse} вместо A_{ji} (rtse — radiation-trapped spontaneous emission)² [67]:

$$\begin{aligned}
 R_{ji}^{rtse} &= A_{ji} \frac{R_{loss}}{R_{loss} + \sigma_0 n_i c}, \\
 R_{loss} &= \frac{c}{H} \frac{1}{1 + \sqrt{n_i H \sigma_0 / \varepsilon}}, \\
 \sigma_0 &= f_{ij} \lambda_{ij} \frac{\pi e^2}{m_e c^2},
 \end{aligned} \tag{12}$$

где R_{loss} — скорость потерь населенности уровня j , σ_0 — сечение фотовозбуждения с уровня i , n_i — населенность уровня i , c — скорость света в вакууме, H — шкала

¹Некоторые авторы используют термин «радиационный распад» (radiative decay) из ядерной физики, связанный с нестабильностью ядра из-за слабого или сильного взаимодействия, однако, природа спонтанной эмиссии связана с взаимодействием возбужденного состояния атома или иона с вакуумными флуктуациями электромагнитного поля.

²Также встречаются названия: quenched spontaneous emission (подавленная спонтанная эмиссия), effective spontaneous emission (эффективная спонтанная эмиссия), saturation-modified spontaneous emission (спонтанная эмиссия, модифицированная насыщением).

высот (1), $\varepsilon \approx 4 \times 10^3$ — эмпирическая константа, f_{ij} — сила осциллятора перехода $i \rightarrow j$, e — заряд электрона, m_e — масса электрона, и выполняется условие

$$\frac{c}{H} \frac{1}{4\sigma_0 n_i H} \leq R_{loss} \leq \frac{c}{H}.$$

Здесь скорость потери резонансного фотона R_{loss} записана как эмпирическая формула, полученная из сравнения с прямым расчетом методом Монте-Карло пространственно-частотной диффузии [67]. В общем случае необходимо находить отдельным образом.

Баланс ударного возбуждения и ударного девозбуждения (столкновительные связанно-связанные переходы) дают формулу формулу локального термодинамического равновесия (ЛТР), и зная скорость одного, можно вычислить скорость другого через распределение Больцмана. Подобный принцип (теорема Онсагера) можно применять для любой пары прямого и обратного процесса. Чаще всего, ударные скорости приводятся в виде коэффициентов, которые, при умножении на плотность электронов, дают скорости (например, $R_{ij}^{ce} = N_e C_{ij}$). В частности, коэффициенты скоростей ударного возбуждения, вычисляются по формуле

$$C_{ij} = \frac{2\pi^{1/2} a_0 \hbar}{m_e} \left(\frac{Ry}{k_B T_e} \right)^{1/2} \frac{\gamma_{ij}(T)}{g_i} \exp \left(-\frac{E_j - E_i}{k_B T} \right),$$

где γ_{ij} — эффективная сила столкновений, a_0 — радиус Бора, E_i и E_j — энергии уровней i и j , g_i и g_j — статистические веса уровней i и j , $\hbar$ — постоянная Дирака, k_B — постоянная Больцмана, m_e — масса электрона, Ry — энергия Ридберга, T — температура частиц, T_e — температура электронов.

Через ЛТР связь коэффициентов C_{ij} и C_{ji} выражается как

$$C_{ij} = C_{ji} \frac{g_j}{g_i} \exp \left(-\frac{E_j - E_i}{k_B T} \right).$$

Стоит отметить, что эффективные силы столкновений часто вычисляются по формуле Ван Регемортера с учетом факторов Гаунта [68], что для температур $10^4 \text{ K} < T < 10^6 \text{ K}$ дает ошибку не более 20 %, и на данный момент, является наиболее оптимальным методом расчета ударных связанно-связанных скоростей переходов при отсутствии более точных табличных данных. Актуальные базы данных эффективных сил столкновений рассматриваются в разделе 2.4. Наиболее точные из них представлены как дискретная зависимость $\gamma_{ij}(T)$, из которой можно построить непрерывную функцию методами интерполяции.

Фотовозбуждение — это переход в возбужденное состояние при поглощении фотона. Его учет довольно важен, особенно в атмосферах экзопланет, освещаемых звездой в УФ/оптическом диапазоне, так как он значительно влияет на населенность возбужденных уровней и на формирование спектральных линий (например, линии Бальмера в водороде). В контексте атмосфер экзопланет, вынужденное излучение чаще всего имеет пренебрежимо маленькое влияние, однако применимо для окрестностей горячих звезд и мазеров в космических облаках. Скорость фотовозбуждения R_{ij}^{pe} описывается выражением (11), в котором поток излучения должен рассчитываться с учетом поглощения в атмосфере планеты, так называемый эффект self-shielding. В реализации Astrea используется также аппроксимационная формула, позволяющая заменить интеграл приближенным локальным выражением [67]:

$$R_{ij}^{pe} = \lambda_{ij}^2 \frac{F_{ij}}{hc} \sigma_0 \frac{g(x_{max})}{x_{max}},$$

$$g(x) \approx \begin{cases} x \exp(-0,58x), & x < 2,62, \\ 1/\sqrt{\pi \ln x}, & x \geq 2,62, \end{cases}$$

$$x_{max} = n_i x \sigma_{max},$$

$$\sigma_{max} = \sigma_0 \sqrt{\frac{m_i c^2}{2\pi k_B T}},$$

где λ_{ij} — длина волны линии, F_{ij} — спектральная плотность мощности на длине волны перехода, σ_0 — сечение фотовозбуждения (12).

Ударная (столкновительная) ионизация проявляется при столкновениях с быстрыми электронами. Она особенно важна в горячей плазме и является основным источником ионизации при отсутствии сильного излучения (например, в глубоких слоях горячих юпитеров). В Astrea, для вычисления скоростей ударной ионизации по-умолчанию используется аппроксимация Воронова [69]. Для водорода также применяются коэффициенты из работы Garcia Munoz [63]. Полный список возможных аппроксимаций перечислен в таблице 4.

Основным источником ионизации, формирующим ионный состав плазмы является фотоионизация. Для экзопланет, особенно близким к своим звездам, это один из наиболее важных процессов. В текущей реализации программы для

вычисления скоростей фотоионизации R_{ik}^{pi} по умолчанию берется интеграл по табличным данным (описаны в разделе 2.4)

$$R_{ik}^{pi} = \int_{\nu_{min}}^{\infty} \frac{\sigma}{h\nu} F(\nu) \exp(-\tau) d\nu,$$

где ν_{min} — минимальная частота фотоионизации, σ — сечение фотоионизации, $F(\nu)$ — спектральная плотность мощности, τ — оптическая глубина. При отсутствии соответствующих таблиц сечений фотоионизации, используются аналитические приближения Verner [70]. Полный список аппроксимационных формул для сечений фотоионизации в Astrea продемонстрирован в таблице 5.

Радиационная рекомбинация — это процесс захвата электрона ионом с излучением фотона. Этот тип квантовых переходов особенно актуален в низкотемпературной плазме ($T < 10^4$ К) и доминирует при рекомбинации легких ионов (H^+ , He^+). По умолчанию, в расчетах используется полуэмпирическая формула (степенная аппроксимация) для вычисления скоростей R_{ki}^{rr} , но также доступны другие варианты приближенного вычисления (см. таблицу 6).

$$R_{ki}^{rr} = N_e N_a \alpha g_i \frac{\exp(-E_i/(k_B T))}{\sum_j g_j \exp(-E_j/(k_B T))},$$

где N_i — плотность иона, $\alpha = 4,2 \times 10^{-10} (Z + 1)^2 / T^{0.6} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$.

Процессы излучательной рекомбинации сразу в основное состояние или с захватом электрона с временным образованием возбужденного состояния [71,72] и трехчастичной рекомбинации (рекомбинация с передачей избытка энергии третьей частице — электрону) [73] могут играть важную роль в атмосферах горячих юпитеров, в зависимости от условий. Например, трехчастичная рекомбинация может быть актуальна в плотной плазме глубоких слоев, а излучательная рекомбинация в высокоэнергетичной плазме ультрагорячих планет. Процессы, связанные с обменом заряда (перезарядка) обычно уже учитываются в гидростатических или гидродинамических моделях, поэтому в не-ЛТР кинетике обычно не рассматриваются напрямую.

2.3.2 Уровни, переходы, квазистационарность

Для каждого химического элемента в программе используется многоуровневая схема с реальными квантовыми уровнями, собранными из баз данных (NIST ASD, Kurucz Atomic Spectral Line Database и др.), либо агрегированных в эффективные

уровни («effective levels», «superlevels», «grouped levels», «collapsed levels») или квазиконтинуум (quasicontinuum) для ускорения расчетов (используемые базы данных описаны в разделе 2.4). Каждый уровень характеризуется электронной конфигурацией, термом, энергией, статистическим весом, типом (основной, возбужденный), а также связанными с ним переходами. Общее число уровней для одного элемента может достигать сотен, однако на практике часто используются схемы до 80 уровней, где остальные либо агрегированы в суперуровни, либо отброшены из-за незначительного вклада.

Одним из ключевых аспектов при работе с программой является создание «модели элемента», которая содержит все необходимые данные и инструкции по учету необходимых процессов, которые далее передаются в кинетическую модель.

В общем случае, кинетические уравнения (10) решаются как система дифференциальных уравнений, однако, в ряде случаев, возможно использование квазистационарного приближения (steady-state), то есть, временные производные в кинетических уравнениях полагаются равными нулю, что оправдано при масштабах времени процессов возбуждения/рекомбинации, малых по сравнению с масштабами эволюции атмосферы:

$$\sum_{j \neq i} (n_j R_{ji} - n_i R_{ij}) \approx 0.$$

Более того, обычно ищется стационарное состояние атмосферы, стартуя с некоторого приближенного начального состояния. Поэтому квазистационарное приближение дает в итоге верное решение. В модели возможно автоматическое переключение между ЛТР и не-ЛТР в зависимости от локальных параметров среды. Это особенно важно при моделировании элементов, где нижние уровни часто в ЛТР, а верхние — в не-ЛТР.

Для элементов с большим числом уровней (например, Fe I до 1000 уровней) используется усечение схемы до наиболее важных переходов, а также агрегирование близких уровней в суперуровни/квазиконтинуум. Это позволяет ускорить расчеты на порядок без значительной потери точности.

Устойчивость расчетов обеспечивается регулярной проверкой условий положительности населенностей и численного контроля сумм $\sum n_i = const$.

2.4 Описание баз данных химических элементов и спектров

Корректное численное моделирование спектральных характеристик атмосферы экзопланет в условиях ЛТР и не-ЛТР требует большого объема атомных и молекулярных данных. В их число входят энергии уровней, статистические веса, вероятности переходов, эффективные сечения, скорости ударных процессов, ионизационные потенциалы и спектральные константы. Получение этих данных из надежных источников является необходимым этапом подготовки входной информации для модели. В данной работе использован ряд специализированных баз данных, широко применяемых в астрофизике, спектроскопии и физике плазмы. По-умолчанию, *Astrea* использует следующий список элементов (в скобках указано количество уровней отдельное для атомов и ионов, и суммарное): H I–II (19 + 1 = 20), C I–III (158 + 77 + 1 = 236), N I–II (59 + 1 = 60), O I–II (51 + 1 = 52), Mg I–III (70 + 43 + 1 = 114), Fe I–III (239 + 89 + 1 = 329), всего 811 уровней с возможностью добавления новых элементов и уровней. Ниже приведен подробный обзор этих ресурсов, методов их использования и оценки качества данных.

2.4.1 Статьи и наборы проверенных данных

Ядро базы данных основано на проверенных данных, широко используемых в исследованиях Солнца и других звезд. Чаще всего, это агрегированные данные из разных источников (NIST ASD [66], Kurucz Atomic Spectral Line Database [74], Opacity Project [75], IRON Project [76,77], TOPbase [78]). Наиболее полные модели элементов собраны группой из ИНАСАН под руководством Машонкиной Л.И. [25,26,79–84]. При необходимости, данные дополняются из других источников, вычисляются напрямую или с помощью аппроксимационных формул. Также, возможно выбрать источник данных: например, NIST ASD [66], отдельных статей, например Nakayama [85], другой источник, или задать вручную. Подробный список используемых источников данных химических элементов продемонстрирован в таблицах 7 – 11.

Относительно спектров излучения звезд, ситуация сложнее, поскольку нет централизованной актуальной базы данных, пригодной для использования без обработки, специфичной для конкретного телескопа. Поэтому, большая часть данных взята из статей или других открытых проектов, и, в основном, совпадает с базой данных спектров ECHO3D. В таблице 12 перечислены встроенные в *Astrea* спектры.

2.4.2 База данных NIST Atomic Spectra Database

Одна из наиболее авторитетных и часто используемых баз — NIST ASD (National Institute of Standards and Technology Atomic Spectra Database) [66]. В ней представлены энергии дискретных уровней, вероятности спонтанных переходов A_{ij} , статистические веса уровней, ионизационные потенциалы, некоторые экспериментальные ширины линий.

Данные из NIST ASD используются для построения многоуровневых схем атомов и ионов. База содержит данные с разной степенью точности, и в таком случае важно предоставить пользователю самому решать, какие из них включать без изменений, а какие сопоставить с другими источниками. Для большинства легких элементов (H, He, C, N, O, Mg, Si) база NIST ASD обеспечивает полное покрытие уровней, релевантных при температурах до $\sim 20\,000$ К. Для тяжелых элементов, таких как Fe, информация о высоковозбужденных состояниях ограничена, и в таком случае особенно актуально использовать дополнительные источники.

2.4.3 Kurucz Atomic Spectral Line Database

База Kurucz Atomic Spectral Line Database (также, Kurucz Atomic Line Lists) [74], разработанная Робертом Курюцем, содержит огромное количество спектральных линий (десятки миллионов), особенно для железа и других переходных элементов. Она включает расчетные уровни и переходы для Fe I–III, Ti I–II и др., логарифмы сил осцилляторов, ширину линий, включая уширения давлением и за счет естественного распада.

Kurucz Atomic Spectral Line Database используется в случаях, когда требуется полное покрытие линий в УФ, оптическом и ИК-диапазоне, например, при синтезе спектра атмосферы KELT-9 b. Хотя точность данных ниже, чем в NIST, их масштаб и системность делают их незаменимыми для высокотемпературных моделей.

2.4.4 CHIANTI

CHIANTI [30] — база данных, ориентированная на спектры горячей плазмы (в том числе солнечной и звездной короны). В базу включены энергии уровней, радиационные переходы, ударные возбуждения электронами, рекомбинационные коэффициенты, спектральные линии в широком диапазоне температур.

CHIANTI используется для получения скоростей электронно-возбужденных переходов в условиях не-ЛТР. Особенно ценны таблицы ударных коэффициентов

$C_{ij}(T)$, которые недоступны в большинстве других баз. В частности, база полезна для ионов Fe, Si, O, C, N, а также для оценки спектров высокоионизованных элементов.

2.4.5 Opacity Project, IRON Project, TOPbase

Opacity Project [75] и ассоциированные проекты IRON Project [76,77], TOPbase [78] содержат расчетные фотоионизационные сечения для многих элементов, а также энергетические уровни и радиационные данные. Данные получены в рамках квантово-механических моделей с высокой степенью точности.

TOPbase применяется при расчетах фотоионизационных коэффициентов для тяжелых элементов. Особенно важна точность при моделировании ультрафиолетового поглощения, из-за которого фотоионизация может доминировать над ударной ионизацией.

2.4.6 VALD

База VALD (Vienna Atomic Line Database) [86] содержит тщательно отобранные спектральные данные с акцентом на астрофизические применения. Она компилирует данные из многих источников, включая NIST ASD, Kurucz Atomic Spectral Line Database и результаты экспериментов, а также, содержит удобный механизм поиска и фильтрации нужных данных.

VALD используется для верификации спектров, синтезированных по данным других источников, а также для построения «астрономического» каталога линий при сравнении с наблюдаемыми спектрами. Она также служит для расширения спектров на длинные волны (в ИК), где Kurucz Atomic Spectral Line Database и NIST ASD часто не дают полных данных.

2.4.7 Собственные расчеты и адаптация

В ряде случаев, особенно при отсутствии данных в существующих базах, выполняются собственные оценки скоростей или уровней. Например, используются аппроксимационные формулы (см. раздел 2.3). Также, возможна интерполяция по аналогам (например, от Si II к Mg II).

2.4.8 Унификация и валидация данных

Для обеспечения согласованности все данные проходят стадию унификации: приведение к единой системе единиц; сопоставление уровней по энергиям и

квантовым числом; проверка баланса: сумма вероятностей уходов с уровня не превышает физически допустимые значения; автоматическое устранение дублирующих переходов; построение проверочных диаграмм уровней.

Все источники подвергаются верификации: сравнение синтезированного спектра с наблюдениями или результатами моделирования с помощью других программ (например, Cloudy) позволяет выявить ошибки или несогласованные переходы. Это особенно важно для сложных многоуровневых элементов, таких как Fe II.

Применение специализированных атомных баз данных обеспечивает надежность и физическую реалистичность моделирования спектров атмосферы экзопланет. Использование нескольких источников данных, их перекрестная проверка и адаптация к численной модели позволяют уверенно интерпретировать спектральные признаки, включая ключевые диагностические линии кислорода, водорода и металлов. Разработанная методика унификации и фильтрации делает модель гибкой и пригодной для широкого круга задач.

2.5 Алгоритмы численного решения

Численное моделирование спектральных характеристик и термодинамических свойств атмосферы экзопланет в условиях неравновесной плазмы требует решения системы связанных уравнений: кинетических уравнений для квантовых населенностей, уравнений переноса излучения, уравнений баланса энергии, используя при этом результаты газодинамического или гидростатического моделирования пространственной структуры атмосферы. Все эти задачи обладают различной степенью жесткости, нелинейности и размерности, что накладывает требования на выбор численных схем, обеспечение устойчивости, сходимости и вычислительной эффективности. В данном разделе описаны основные алгоритмы, примененные в разработанной численной модели.

2.5.1 Общая структура решения

Вся задача разбивается на следующие блоки:

1. Построение или импорт гидростатической или гидродинамической модели атмосферы.
 1. Построение геометрической сетки (1D/2D/3D).
 2. Задание или импорт начальных условий: температура, плотности, скорости, поле излучения.

2. Построение моделей химических элементов с выбором учитываемых энергетических уровней и типов квантовых переходов.
3. Расчет квантовых населенностей (не-ЛТР или ЛТР) в каждой учитываемой точке пространства.
4. Синтез спектров поглощения на основе текущих населенностей.
5. Расчет охлаждения/нагрева атмосферы.

Каждый блок включает собственную численную реализацию. Рассмотрим ключевые из них.

2.5.2 Решение системы уравнений не-ЛТР

Система кинетических уравнений для квантовых уровней каждого элемента записывается в виде линейной системы уравнений (10). Отметим следующие аспекты: матрица $\hat{R}$ является разреженной (многие уровни не связаны прямыми переходами), система жесткая (перепады значений коэффициентов до 15–20 порядков), решение необходимо в каждой ячейке сетки и для каждого элемента. В связи с этими особенностями, для решения реализованы различные способы, в зависимости от параметров задачи (числа уровней, типа элемента), которые пользователь может самостоятельно выбрать. Например, для малых и средних матриц (до 100 уровней) можно применить прямой метод Гаусса с частичным выбором главного элемента, а для больших схем LU-разложение с нормировкой. В общем случае, применяется метод LU-разложения для разреженных матриц (алгоритмы типа UMFPACK), а в отдельных случаях итерационные методы (BiCGSTAB, GMRES). Существует возможность как выбора метода решения из пакетов Eigen, SciPy, так и реализованных независимо.

2.5.3 Расчет радиационных коэффициентов и источников

Во всех переходах, зависящих от фонового излучения (например, фотовозбуждение), необходимо учитывать среднюю спектральную интенсивность I_ν . Она может быть либо задана извне (при известном фоне, например, от звезды), либо получена из уравнения переноса (в 1D или 3D):

$$\frac{dI_\nu}{dl} = j_\nu - \alpha_\nu I_\nu,$$

где I_ν — интенсивность, l — расстояние, j_ν — коэффициент эмиссии, α_ν — коэффициент поглощения. Каждое такое уравнение описывает луч, проходящий

через элемент объема на диске звезды до наблюдателя. При этом считается, что лучи не испытывают рефракцию и распространяются по прямой.

Спектрально разрешенное поглощение $\alpha(v) = 1 - \kappa(v)$ вычисляется путем интегрирования лучей, исходящих от звезды до наблюдателя:

$$\alpha = \sum_i \frac{1 - \exp(-\tau_i)}{N},$$

$$\tau = \int_0^L n \sigma dl,$$

$$\sigma = A_{ji} \frac{g_j}{g_i} \frac{c^2}{8\pi^2 \nu_{ij}^2} \frac{\sqrt{\pi}}{\Delta \nu_D} H(u, a),$$

где v — доплеровские скорости, τ — оптическая глубина, N — количество лучей, L — длина луча от звезды до наблюдателя (по расчетной области), n — населенности нижнего уровня, σ — сечения перехода.

Возможно как прямое вычисление интеграла Фойгта $H(u, a)$, так и приближенное с помощью оптимизированного вычисления функции Фаддеевой [87], либо с использованием аппроксимации Tasitsiomi [88,89]. Параметры u и a определяются как

$$u = (v - v_z) \sqrt{\frac{m_i}{2k_B T}},$$

$$a = \frac{\Delta \nu_L}{2\Delta \nu_D},$$

$$\Delta \nu_L = \frac{A_{ji}}{2\pi},$$

$$\Delta \nu_D = \frac{\nu_{ij}}{c} \sqrt{\frac{2k_B T}{m_i}},$$

где v_z — скорость вдоль луча зрения, m_i — масса иона, $\Delta \nu_L$ — естественная (лоренцевская) ширина линии, $\Delta \nu_D$ — термальная (доплеровская) ширина линии. Отметим, что для атмосфер экзопланет другие механизмы уширения линий практически всегда несущественны.

2.5.4 Решение уравнений баланса энергии

Тепловой баланс в каждой ячейке определяется как разница между нагревом и охлаждением

$$\Lambda = H - L.$$

Охлаждение атмосферы L определяется ударным возбуждением (переходом частиц на более высокие уровни с поглощением тепловой энергии) и ударной ионизацией (потерей энергии при столкновениях, приводящих к ионизации), и имеет вид:

$$L = \sum_{ij} E_{ij} R_{ij}^{ce} n_i + \sum_i I_i R_{ik}^{ci} n_i, \quad (13)$$

где E_{ij} — разность энергий между уровнями i и j , I_i — потенциал ионизации уровня i , k — ионизационный континуум.

Нагрев атмосферы обусловлен фотоионизацией (поглощением высокоэнергетических фотонов, приводящим к ионизации атомов с появлением фотоэлектронов) и ударным девозбуждением (передачей энергии от возбужденных частиц свободным электронам при неупругих столкновениях), и функция нагрева H вычисляется как сумма вкладов от этих процессов:

$$H = \sum_{ij} E_{ij} R_{ji}^{cd} n_j + \sum_j \left(I_j - \frac{3}{2} k_B T \right) R_{jk}^{pi} n_j, \quad (14)$$

где $3/2 k_B$ — энергия рождаемого фотоэлектрона после его термализации со средой. Если фотоионизацией можно пренебречь, то баланс нагрева и охлаждения можно проанализировать на основе β -факторов отдельных уровней.

2.5.5 Оптимизация и параллельные расчеты

Решение уравнений в каждой ячейке атмосферы независимо, что дает возможность полной параллелизации по пространственным координатам: для 1D многопоточность (OpenMP), для 3D распараллеливание по узлам (MPI или CUDA/OpenCL).

Также применяется ряд оптимизаций, ускоряющих вычисления: предварительное вычисление матриц коэффициентов; устранение переходов с очень малой скоростью; ускоренное LU-разложение через библиотеку Eigen (BLAS); динамическая адаптация шага по высоте.

2.5.6 Контроль сходимости и устойчивости

Во всех итерационных схемах контролируется положительность величин ($n_i > 0$, $T > 0$ К). Сходимость обычно достигается за 5–15 итераций в 1D, или 10–30 в 3D, при разумных начальных условиях (позволяющих быстро выйти к стационарному состоянию — обычно ЛТР, или с населенностью только основного состояния).

Разработанные алгоритмы численного решения позволяют эффективно рассчитывать неравновесные населенности уровней и сопутствующие спектральные характеристики при различных геометриях и физических условиях. Устойчивость, точность и масштабируемость обеспечиваются за счет рационального выбора методов решения, предварительной фильтрации переходов, итерационных корректировок и параллельной архитектуры (все настройки доступны пользователю через программный интерфейс и написание скриптов — подробнее об архитектуре и конфигурации расчетов обсуждается в следующем разделе). Такая схема применима как для задач спектральной диагностики экзопланетных атмосфер, так и для теоретического моделирования их эволюции и химической структуры.

2.6 Архитектура программного обеспечения

Разработка универсального и масштабируемого программного обеспечения для моделирования спектральных и термодинамических характеристик атмосфер экзопланет требует четкой модульной архитектуры. Учитывая необходимость многократного использования отдельных блоков, возможность адаптации к различным геометриям (1D, 2D, 3D), а также необходимость эффективной работы с объемными массивами физических данных, была реализована архитектура, основанная на принципах модульности, расширяемости и параллельности. Ключевым аспектом, делающим разрабатываемую программу именно **научно-исследовательским** инструментом, является возможность гибкой настройки практически всех параметров (как моделей атмосфер, так и химических элементов и особенностей протекающих реакций), что позволяет полноценно исследовать влияние отдельных энергетических уровней (что недоступно даже в наиболее продвинутых пакетах типа Cloudy). В этом разделе описываются ключевые компоненты программного комплекса, их функциональность, взаимодействие, а также выбранные подходы к управлению данными и оптимизации вычислений.

Программный комплекс включает следующие основные модули:

- модуль геометрии и сетки [Python, CLI];

- модуль расчета гидростатической атмосферы [Python, CLI];
- модуль для работы с данными атмосфер [Python, CLI];
- модуль атомных и молекулярных данных [C++, Python, CLI];
- модуль расчета населенностей (ЛТП и не-ЛТП) [C++, Python, CLI];
- модуль оптики атмосферы и спектрального синтеза [C++, Python, CLI];
- модуль термодинамики и энергетического баланса [C++, Python, CLI];
- модуль вывода и визуализации [Python, CLI];
- модуль управления расчетами [Python, CLI].

Каждый модуль реализован как отдельный набор функций или классов, объединенных через общий API и формат данных. Обмен между модулями происходит через внутренние структуры (в оперативной памяти) и файлы в форматах HDF5/NetCDF/CSV/Pickle, что обеспечивает устойчивость, переносимость, и позволяет выполнять выборочный перерасчет только необходимых данных (например, при варьировании параметров одного химического элемента), что значительно ускоряет процесс исследования. Общая структура расчета задается с помощью скрипта на Python, либо shell-скрипта (Bash, CMD, PowerShell, Makefile, justfile и т.п.). Скрипт на Python позволяет более детально контролировать входные параметры и создавать собственные распределения величин (температуры, плотности, спектр, сечения переходов), в то время как shell-скрипт позволяет быстрее начать расчет со стандартными параметрами. Наиболее требовательные к вычислительным ресурсам модули написаны на языке программирования C++ с использованием библиотеки Eigen. Для параллельных вычислений (экспериментальный режим) используется язык функционального программирования Futhark, который может транслироваться в CUDA с интерфейсом C или Python.

2.6.1 Модуль геометрии и сетки

Основная задача этого модуля — создание пространственной сетки модели с поддержкой одномерной (1D), двумерной (2D) и трехмерной (3D) геометрии, гибким заданием сетки (равномерная, логарифмическая, адаптивная), возможностью импорта сеток из внешних гидродинамических моделей (например, из ECHO3D или собственных форматов), хранением сетки в виде массивов координат и индексов ячеек. Модуль работает с универсальными структурами, позволяющими использовать одни и те же методы независимо от размерности, что упрощает эксплуатацию, написание и отладку кода.

2.6.2 Модуль расчета гидростатической атмосферы

Для ряда задач достаточно предварительно оценить атмосферу с помощью гидростатического приближения, и в дальнейшем, при необходимости, использовать более сложные гидродинамические или магнитогидродинамические модели. Для такой подготовительной диагностики используется модуль расчета гидростатической атмосферы, который автоматически может создавать 1D, 2D или 3D модель атмосферы экзопланеты на основе параметров гравитационного поля (учет масс и геометрии планеты и звезды), оценки температуры и концентрации элементов. Более подробное описание см. в разделе [2.2](#).

2.6.3 Модуль для работы с данными атмосфер

Этот компонент отвечает за загрузку, интерполяцию и предварительную обработку температуры, плотностей электронов, протонов, ионов, нейтралов, скоростей и давления. Модуль поддерживает несколько форматов ввода: 1) Eho3D Result Data (.dat) для совместимости с Eho3D, 2) HDF5/NetCDF (для совместимости с научными библиотеками), 3) текстовые файлы (CSV, TSV, JSON), 4) бинарные массивы NumPy (для быстрого прототипирования), 5) Python Pickle (для сохранения сессий и кэширования). Также реализована система фильтрации и проверки входных данных на физическую корректность (например, отрицательные плотности, превышения температурных границ, несогласованность нормировок).

2.6.4 Модуль атомных и молекулярных данных

Все данные о химических элементах и переходах хранятся централизованно в базе атомных данных (см. раздел [2.4](#)). Это дает быстрый доступ к энергетическим уровням, коэффициентам радиационных, и ударных связанно-связанных и связанно-свободных переходов, ионизационным энергиям, статистическим весам. Модуль позволяет проводить фильтрации уровней и переходов по термам, энергиям, вероятностям, длинам волн и другим величинам, а также, добавлять собственные уровни и переходы.

2.6.5 Модуль расчета населенностей

Ключевой компонент программы, реализующий решение системы кинетических уравнений (см. раздел [2.3](#)). Основные функции модуля включают формирование матрицы переходов $\hat{R}$, применение прямого и итеративного решения

(LU, GMRES). При этом, поддерживаются режимы ЛТР и не-ЛТР, и есть возможность работы с суперуровнями для ускорения расчета. В зависимости от параметров среды возможно автоматически выбирать режим расчета (например, ЛТР при высокой плотности, не-ЛТР при низкой).

2.6.6 Модуль оптики атмосферы и спектрального синтеза

Этот блок отвечает за вычисление спектра из полученных населенностей, включая вычисление оптических глубин и коэффициентов поглощения, учет эффекта Доплера и давления, поддержку синтеза полного спектра или отдельных диапазонов (более подробно в разделе [2.5.3](#)). Также реализована функция «обратного моделирования» — сравнение синтетического спектра с наблюдаемыми данными, например, из HST/STIS (Hubble Space Telescope / Space Telescope Imaging Spectrograph) (автоматическое определение параметров программируется пользователем).

2.6.7 Модуль термодинамики и энергетического баланса

В этом компоненте реализован расчет охлаждения/нагрева атмосферы, учитывающий населенности и энергии уровней, а также, скорости переходов (см. раздел [2.5.4](#)). Важным аспектом данного модуля является интерфейс для использования внешних библиотек (например, Cloudy) в качестве моделей сравнения [[90](#)].

2.6.8 Модуль вывода и визуализации

Данный модуль реализует все основные процедуры визуализации: 1D и 2D профили атмосферы, структура элементов, населенности уровней, синтез спектра, энергетический баланс. Некоторые типы графиков поддерживают сравнение результатов с другими моделями или наблюдениями (например, моделями ECHO3D, Cloudy, или наблюдениями).

2.6.9 Модуль управления расчетами

Управление всей задачей осуществляется через основной управляющий модуль, который строит или импортирует модели атмосферы; строит модели химических элементов; настраивает учет физических процессов; запускает итерации расчета населенностей уровней до заданного критерия; контролирует адаптацию шага, критерии остановки; логирует состояние модели, промежуточные результаты и метрики качества; поддерживает запуск на кластере (например, через MPI).

Важной частью является система «горячей перезаписи» — возможность приостановить расчет, сохранить состояние и позже восстановить его без потери данных.

Разработанная архитектура программы обеспечивает высокую модульность, прозрачность и масштабируемость, необходимые для задач спектрального моделирования в атмосферах экзопланет. Гибкость архитектуры позволяет использовать комплекс как в исследовательских целях, так и в прикладной спектроскопии, а также адаптировать его к новым классам объектов. Использование современных технологий хранения и обработки данных (HDF5, MPI, GPU) обеспечивает высокую производительность на кластерах и локальных компьютерах.

2.7 Верификация: сравнение с другими моделями

Корректность результатов численного моделирования в задачах неравновесной спектроскопии критически зависит от надежной верификации всех компонентов модели: решения кинетических уравнений, расчета радиационных коэффициентов, расчета поглощения излучения и энергетического баланса. Основная цель верификации — убедиться, что модель правильно воспроизводит известные аналитические или численные решения в пределах заданной точности, а также дает физически обоснованные результаты при моделировании объектов, уже хорошо изученных в литературе.

В данном разделе приводится описание ключевых тестов и сравнений, проведенных для верификации модели, включая: простые аналитические и полуаналитические случаи; сравнение с результатами известных кодов (например, Cloudy); сравнение с опубликованными расчетами и наблюдаемыми спектрами; устойчивость и воспроизводимость при варьировании входных данных.

2.7.1 Верификация на простых тестах: ЛТР-равновесие

Первым уровнем проверки является способность модели правильно воспроизводить распределения населенностей в условиях локального термодинамического равновесия (ЛТР). В этом случае населенности должны удовлетворять уравнению Больцмана (4) и закону Саха (5).

Модель была протестирована для нескольких типичных условий: водород при $T = 3000\text{--}10\,000\text{ К}$ и железо при высокой плотности (подавление не-ЛТР эффектов).

Результаты совпадают с аналитическим решением с высокой точностью ($< 10^{-6}$ между численным и аналитическим решением). Данная проверка содержит

дополнительный полезный эффект — при соблюдении соответствующих диапазонов плотности и температуры, возможна настройка численного модуля на автоматическое переключение на ЛТР-режим, что может значительно ускорить расчеты.

2.7.2 Тесты на искусственной двухуровневой модели

Для оценки точности решения кинетических уравнений использовалась упрощенная двухуровневая система (уровни 0 и 1), результаты моделирования которой легко отслеживать. Эта задача в стационарном случае является частным случаем (8):

$$\frac{dn_0}{dt} = -R_{01}n_0 + R_{10}n_1,$$

и обладает аналитическим решением с учетом $n_0 = 1 - n_1$:

$$n_1 = \frac{R_{01}}{R_{01} + R_{10}}.$$

Например, тестировалась система с параметрами линии Лайман-альфа. При этом, фиксировалась плотность электронов или температура, а второй параметр варьировался. Результаты показывают отличия от аналитики не более 0,1 % при стандартных параметрах, и не более 1 % в случае жестких систем. Это подтверждает корректность решения линейных систем и точность численного метода.

2.7.3 Сравнение с кодом Cloudy

Программа Cloudy является одной из наиболее известных и верифицированных систем для моделирования фотоионизационных и плазменных процессов. В качестве сравнения часто используется функция охлаждения. Рассматривается очень разреженная среда (задача произошла из рассмотрения межзвездной среды), которая является оптически тонкой для любого излучения. Стороннее излучение пренебрежимо мало. Любое возбуждение за счет столкновений заканчивается излучением фотона. В таком случае любой элемент имеет скорость охлаждения за счет возбуждения его уровней. На рис. 2 продемонстрировано сравнение функций охлаждения, построенных с помощью Astrea и результатами моделирования Cloudy [90]. При этом, разница между Astrea и Cloudy составляет не более 5 %.

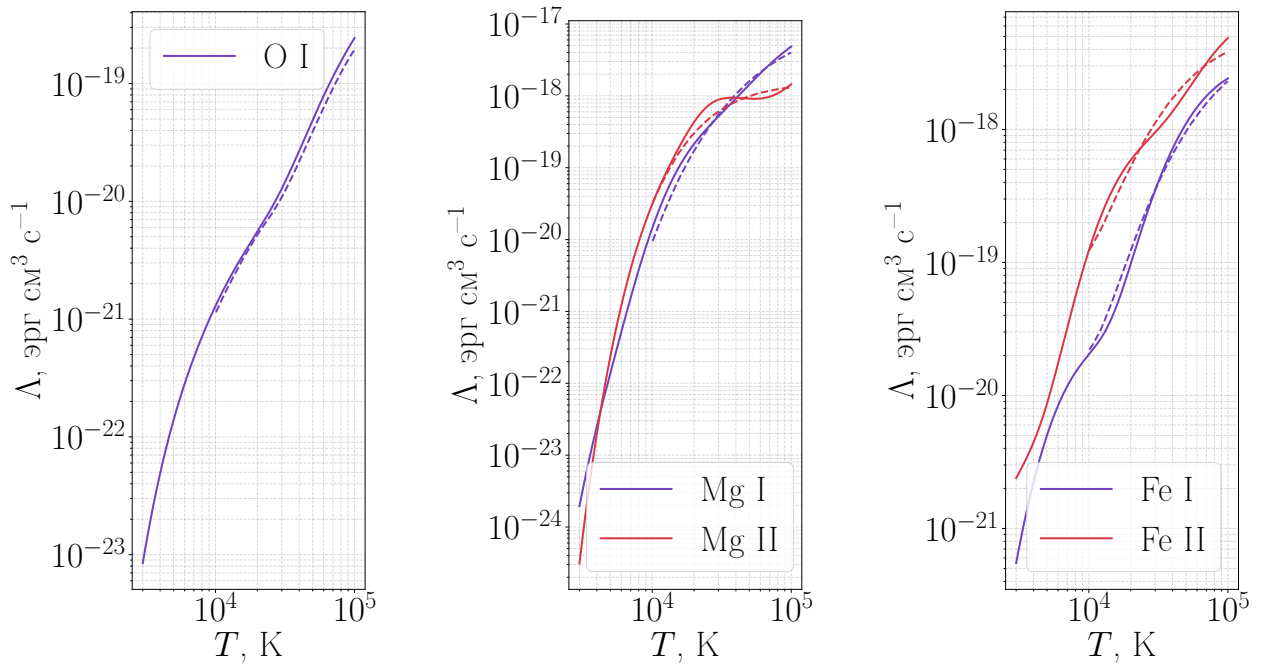


Рисунок 2: Функции охлаждения элементов вычисленные с помощью *Astrea* (сплошная линия) и *Cloudy* [90] (штриховая линия). Сравнение предполагает отсутствие радиационного поля и нормализацию на плотность электронов и плотность ионов.

2.7.4 Сравнение с опубликованными моделями атмосфер экзопланет

Для демонстрации применимости к реальным объектам были использованы опубликованные модели экзопланетных атмосфер. Результаты сравнения спектрального синтеза и энергетического баланса подробно рассмотрены в главах 3 и 4.

2.7.5 Чувствительность к изменениям входных параметров

Дополнительно проведен анализ устойчивости результатов при варьировании температуры на $\pm 10\%$, плотности электронов на $\pm 50\%$ и фонового излучения на порядок.

Результаты показали, что не-ЛТР населенности чувствительны в пределах 5–10 %, особенно на верхних уровнях. При этом, синтетические спектры изменяются менее чем на 3 % при малых вариациях, а энергетический баланс сохраняется в пределах 2–4 % при разумных флуктуациях параметров.

Эти результаты демонстрируют численную устойчивость алгоритмов и физическую согласованность модели.

Проведенная серия тестов и сравнений показала, что разработанная модель корректно воспроизводит как простые аналитические решения, так и результаты более сложных, опубликованных численных моделей. Сопоставление с известными кодами (Cloudy) и спектрами реальных экзопланет подтвердило достоверность вычисленных населенностей и спектров, что дает основания использовать данный программный комплекс для дальнейших прикладных исследований экзопланетных атмосфер.

В отличие от ЛТР-методов, предложенная модель учитывает полную кинетику уровней в условиях неравновесной плазмы экзопланет и позволяет воспроизводить физически реалистичную картину спектрального излучения. Созданная программная платформа является универсальным инструментом для моделирования атмосферы экзопланет в широком диапазоне температур и плотностей.

2.8 Выводы к главе 2

В данной главе представлены методы расчета спектральных характеристик излучения в неравновесной плазме атмосфер экзопланет, разработанные в рамках глобального моделирования. Основное внимание уделено постановке задачи, включающей интеграцию гидростатических и гидродинамических моделей

атмосфер, расчет населенностей квантовых уровней с учетом отклонений от локального термодинамического равновесия (ЛТР), а также синтез спектральных профилей. Ключевым преимуществом предложенного подхода является возможность анализа энергетического баланса и построения реалистичных профилей температуры, согласованных с наблюдаемыми данными.

Разработанная программа Astrea решает систему кинетических уравнений, описывающих переходы между уровнями, включая радиационные, фотоионизационные и ударные процессы. Матричный подход к решению этих уравнений обеспечивает высокую эффективность вычислений и гибкость модели, позволяя легко добавлять новые уровни и процессы. Важной особенностью программы является поддержка работы с внешними базами атомных данных, такими как NIST ASD, Kurucz Atomic Spectral Line Database и CHIANTI, что обеспечивает высокую точность расчетов.

Архитектура программного обеспечения построена по модульному принципу, что обеспечивает гибкость и масштабируемость. Каждый модуль отвечает за определенный этап моделирования, от задания входных параметров до синтеза спектральных профилей линий и анализа нагрева и охлаждения атмосфер. Это позволяет адаптировать модель к различным физическим условиям и классам экзопланет, от горячих юпитеров до землеподобных планет.

Проведенная верификация модели подтвердила ее корректность и точность. Сравнение с аналитическими решениями, результатами программы Cloudy и опубликованными моделями атмосфер экзопланет показало хорошее согласие, что позволяет использовать Astrea для дальнейших исследований. Отдельное внимание уделено устойчивости алгоритмов и их чувствительности к изменениям входных параметров, что обеспечивает надежность результатов даже при экстремальных физических условиях исследуемых объектов.

Таким образом, разработанные методы и программное обеспечение представляют собой мощный инструмент для спектральной диагностики атмосфер экзопланет, позволяющий учитывать неравновесные эффекты и получать физически обоснованные результаты. Это открывает новые возможности для изучения физико-химических условий в атмосферах экзопланет и их интерпретации на основе наблюдательных данных.

Глава 3 АНАЛИЗ ЛИНИЙ АТОМА КИСЛОРОДА 130,4 нм и 777,4 нм ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ АТМОСФЕР ЭКЗОПЛАНЕТ

3.1 Физика формирования поглощения в линиях O I 130,4 нм и 777,4 нм

Линии кислорода на длинах волн 130,4 нм (триплет в УФ спектре, переходы $[\text{He}] 2s^2 2p^3(^4S^o)3s\ ^3S_1^o \Leftrightarrow [\text{He}] 2s^2 2p^4\ ^3P_{0,1,2}$) и 777,4 нм (триплет в ИК спектре, переходы $[\text{He}] 2s^2 2p^3(^4S^o)3p\ ^5P_{1,2,3} \Leftrightarrow [\text{He}] 2s^2 2p^3(^4S^o)3s\ ^5S_2^o$) (рис. 3) являются чувствительными к термодинамическим условиям среды. Эти переходы — разрешенные дипольные и достаточно интенсивные, чтобы наблюдаться в атмосферах как звезд, так и планет. Для информативной диагностики атмосферных условий в экзопланетах необходимо понимание механизмов формирования поглощения в этих линиях. В частности, соотношение интенсивностей линий может дать более точную информацию о температуре среды.

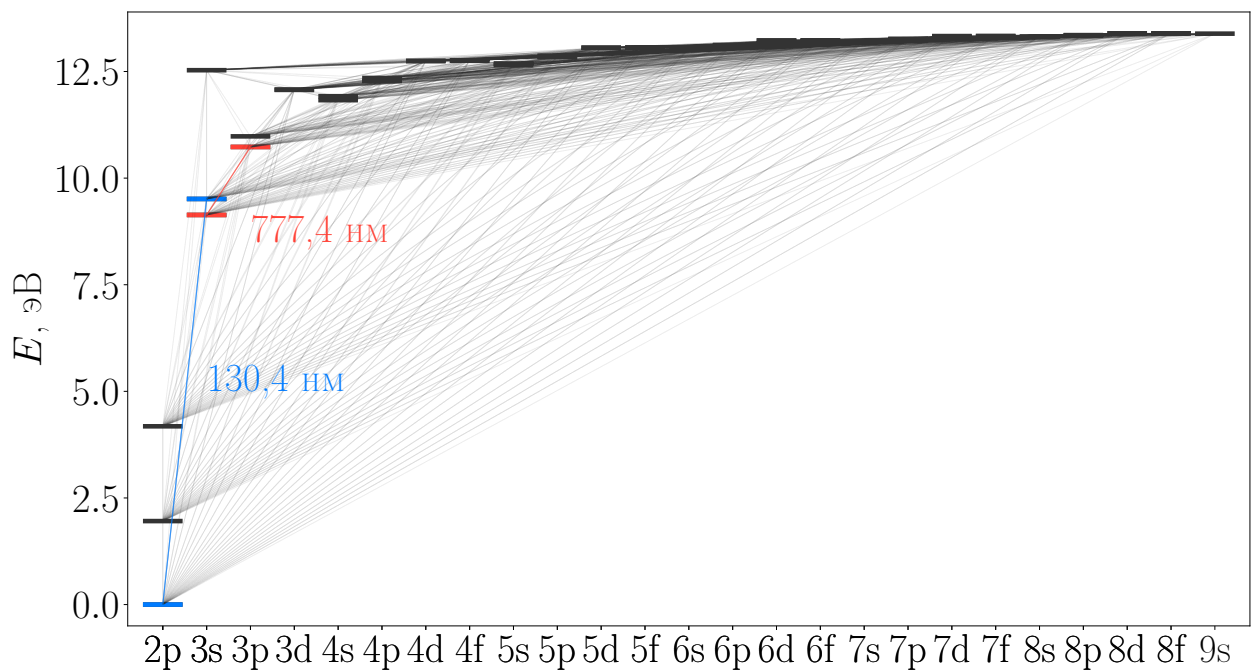


Рисунок 3: Структура уровней O I и диагностические линии 130,4 нм и 777,4 нм.

Оба набора линий принадлежат к электронным переходам в атоме нейтрального кислорода (O I). Линия 130,4 нм — это триплет, состоящий из трех близко расположенных компонентов: 130,217 нм, 130,486 нм и 130,603 нм. Нижние уровни располагаются очень близко по энергии к основному и являются метастабильными, что следует из-за запрещенности переходов между 3P_0 , 3P_1 и истинным основным состоянием 3P_2 . Их населенность высока и близка населенности основного состояния

с учетом статического веса. Таким образом, линия 130,4 нм является резонансной. В спектре излучения звезд данный триплет хорошо выражен, что должно учитываться при расчете транзитного поглощения в атмосфере планеты. В контексте наблюдений, линия 130,4 нм непрозрачна для атмосферы Земли, поэтому может наблюдаться только с помощью космических телескопов. В атмосфере HD 189733 b данная линия обнаружена при глубине поглощения 6,4 % [55].

Линия 777,4 нм представляет собой триплет с компонентами 777,194 нм, 777,417 нм и 777,539 нм. Нижний уровень располагается высоко над основным (9,15 эВ) и в большей степени формируются за счет столкновительных процессов, что делает их особенно чувствительными к температуре и плотности электронов. Примечательно, что линия 777,4 нм может наблюдаться с помощью наземных телескопов. KELT-9 b — единственная экзопланта на данный момент, где была обнаружена данная линия (глубина поглощения 0,26 %) [15].

Одним из ключевых аспектов моделирования указанных линий является учет неравновесных условий (не-ЛТР). В атмосферах экзопланет, особенно горячих газовых гигантов (например, KELT-9 b), столкновения не всегда доминируют над излучательными процессами и фотовозбуждением, и, как следствие, населенности уровней не описываются уравнением Больцмана при локальной температуре. В таких условиях необходимо решать уравнения кинетики квантовых уровней с учетом всех возможных процессов: возбуждения, ионизации, рекомбинации, фотопереходов, рассеяния и др.

Для линии 130,4 нм важнейшую роль играют процессы возбуждения ультрафиолетовым излучением и последующего спонтанного испускания, а также резонансное рассеяние. При этом в верхней атмосфере экзопланеты данный уровень может накапливать населенность за счет радиационной рекомбинации и каскадных переходов из более высоких уровней.

Линия 777,4 нм, в свою очередь, в большей степени определяется столкновительными процессами и фотоионизацией. При температурах порядка 4000–10 000 К, характерных для верхних слоев экзопланетных атмосфер, эффективность возбуждения этой линии значительно возрастает. Однако при снижении плотности электронов ее интенсивность резко падает, что делает ее хорошим индикатором не только температуры, но и плотности.

Процесс формирования профиля линии сильно зависит от геометрии модели атмосферы — 1D, 2D или 3D. В симметричных (1D) моделях интенсивность линии определяется балансом между генерацией и поглощением вдоль одной оси,

тогда как в 3D моделях добавляется влияние горизонтального переноса энергии и возможной асимметрии в плотностях или температуре. Особенно важно учитывать эффекты самопоглощения для резонансных линий, когда фотон, испущенный на одной высоте, может быть повторно поглощен на другой. Это приводит к формированию резонансных «плеч» в профиле линии и может существенно изменять вид наблюдаемого спектра.

Резонансное рассеяние играет важную роль для линии 130,4 нм, поскольку эта линия обладает большой вероятностью спонтанного испускания и высокой оптической толщиной. Фотон может рассеяться многократно, прежде чем покинет атмосферу, что делает профиль этой линии особенно чувствительным к вертикальному градиенту плотности. Ультрафиолетовое излучение звезды важно для линии 777,4 нм: с одной стороны, оно способствует фотоионизации, уменьшая населенность нижнего уровня, с другой стороны возбуждает его фотонами соответствующей энергии.

В контексте наблюдений важно учитывать, что излучение звезды должно быть достаточно интенсивным в окрестности данных линий, чтобы превышать порог чувствительности прибора (например, HST/STIS, JWST/NIRSpec, наземные спектрографы высокого разрешения).

Формирование как линии 130,4 нм, так и 777,4 нм сильно зависит от степени ионизации кислорода в атмосфере. При высокой температуре и сильном ультрафиолетовом излучении со стороны звезды-хозяина основная часть кислорода может быть ионизована, что приводит к снижению интенсивности обеих линий. Особенно это актуально для линии 777,4 нм.

Сравнение интенсивностей линий 130,4 нм и 777,4 нм позволяет получить оценку температуры в определенной степени независимо от содержания кислорода в верхних слоях атмосферы экзопланеты. При этом важно, что температурная зависимость этих линий различна: линия 130,4 нм чувствительна к излучению и слабо реагирует на температуру, в то время как линия 777,4 нм — наоборот, экспоненциально растет с температурой.

Измерения в различных фазах транзита отношения интенсивностей этих двух линий позволяет создать двумерную карту условий в атмосфере, своеобразный «спектральный термометр». Этот метод был использован в данной работе для определения температурных ограничений, при которых линии могут быть обнаружены и использованы для детектирования кислорода.

Условная схема вычислений продемонстрирована на рис. 4. Нюансы создания

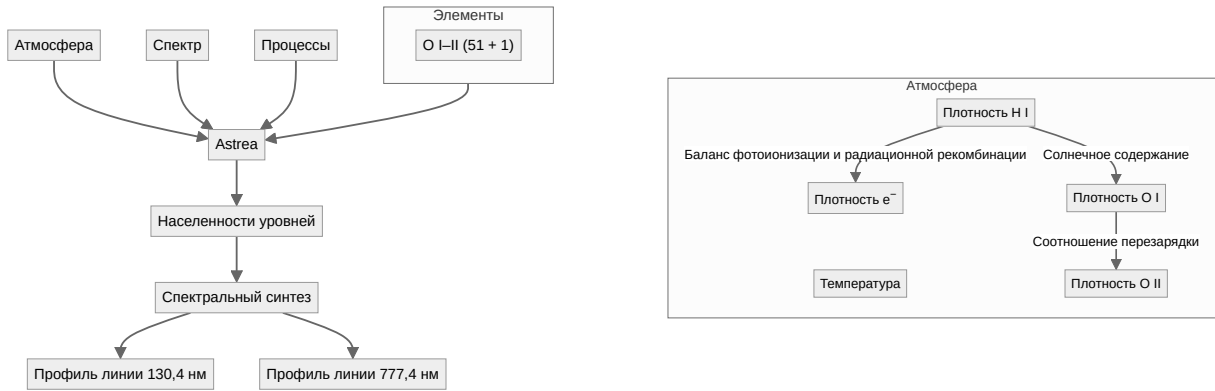


Рисунок 4: Конфигурация вычислений для исследования поглощения в линиях O I 130,4 нм и 777,4 нм.

моделей атмосфер и расчетов населенностей уровней более подробно рассмотрены в последующих разделах.

3.2 Параметрическое создание гидростатических моделей 3D атмосфер

Одним из важнейших этапов в спектральной диагностике экзопланетных атмосфер является построение моделей распределения основных физических параметров: температуры, плотности, состава и давления в трехмерной геометрии. Такие модели служат основой для последующего расчета кинетики квантовых переходов, синтеза спектра и анализа термодинамики. В условиях отсутствия прямых наблюдений внутренней структуры атмосферы экзопланеты, единственным способом получения этих распределений остается моделирование, основанное на физических законах, аппроксимациях и известных свойствах звезды-хозяина и планеты. Для отдельных планетных систем наиболее точным и эффективным методом моделирования атмосфер является трехмерная магнитная гидродинамика (модели типа ECHO3D). В случае предварительной оценки сразу множества объектов (> 100), более оптимальным выбором будет параметрическое создание гидростатических моделей.

Подробное описание создания гидростатических атмосфер с помощью Astrea описано в разделе 2.2. В данном разделе будут рассмотрены частные случаи для атмосфер с кислородом, на примере экзопланет HD 189733 b, HD 209458 b, KELT-9 b.

Для первого этапа (распределение водорода $N_{H I}$) требуется задание сетки (например, 181 радиальная компонента), радиуса планеты ($R_p = 1,36 R_J$, где R_J — радиус Юпитера), поверхностного давления ($P = 0,1$ бар) и температуры ($T = 2500\text{--}25\,000$ K). Плотность атомарного кислорода вычисляется с помощью

относительного солнечного соотношения $N_{O I} = 5,4 \times 10^{-4} N_{H I}$. Далее, плотности протонов и электронов находятся по формуле барометрического равновесия (2). С помощью соотношения перезарядки (3) определяется концентрация иона кислорода. Таким образом, при заданной температурной структуре можно параметрически восстановить распределение давления и плотности, а затем ввести вариации по горизонтальным координатам (широта, долгота), что и приводит к трехмерной модели.

Состав атмосферы (профили плотностей H, He, O, Fe, ионов и электронов) может быть задан либо с учетом барометрического равновесия и формулы Саха, либо с использованием эмпирических или численных данных из публикаций и численного моделирования. Программа поддерживает задание профилей в виде параметрических функций или через внешние 1D/3D массивы. В случае независимого расчета состава атмосферы, переход от одномерной модели к трехмерной может осуществляться, например, через приближение сферически симметричной атмосферы. Программа допускает использование сферической геометрии с координатами (r, θ, ϕ) или декартовой (x, y, z) при необходимости встроить атмосферу в более общий трехмерный код (например, при сопоставлении с данными из МГД-кодов).

При этом предполагается, что атмосфера находится в квазистационарном состоянии и не испытывает резких динамических изменений, таких как ударные волны, вспышки излучения или плазменного ветра звезды, нарушающие гидростатическое равновесие. Данное допущение оправдано для широкого класса экзопланет.

Результатом работы является многомерный массив физических величин на сетке, совместимый с последующими блоками расчета населенностей уровней, синтеза спектра и определения энергетического баланса. Модели также снабжены метаинформацией, описывающей шаг сетки, параметры генерации и версию программного ядра — это критически важно для воспроизводимости результата и дальнейшего анализа.

Для верификации построенных 3D гидростатических моделей применялось сравнение высотных профилей плотности и температуры с литературными источниками, а также результатами моделирования с помощью Eho3D. При вариации параметров сетки выполнялась проверка устойчивости. Наиболее важной верификацией было сравнение результатов расчетного поглощения с наблюдательными спектрами (в частности, с работами [15,16]).

Таблица 2: Используемые параметры планетных систем для создания моделей атмосфер, где M_J — масса Юпитера, R_J — радиус Юпитера, R_p — радиус планеты, R_S — радиус Солнца, M_S — масса Солнца. Данные адаптированы из базы Encyclopaedia of exoplanetary systems [91].

Планета	Масса планеты, M_J	Радиус планеты, R_J	Орбита планеты, R_p	Радиус звезды, R_S	Масса звезды, M_S
GJ 436 b	0,05836	0,32519	0,02887	0,464	0,452
HD 189733 b	1,138	1,138	0,031	0,805	0,8
HD 209458 b	0,7	1,36	0,045	1,2	1,148
KELT-9 b	2,88	1,936	0,03368	3,0	3,0
KELT-16 b	2,75	1,415	0,02044	1,36	1,211
MASCARA-1 b	3,7	1,5	0,043	2,1	1,72
MASCARA-5 b	3,14	1,508	0,04	1,92	1,9
TOI-1518 b	2,3	1,875	0,039	1,95	1,79
WASP-189 b	1,99	1,619	0,04	2,33	1,887

В рамках настоящей работы была протестирована серия гидростатических моделей атмосфер для горячих экзопланет с температурами от 2500 К до 25 000 К и различной степенью ионизации (основные параметры приведены в таблице 2, всего сформировано 90 моделей атмосфер, часть из которых соответствует реально наблюдаемым). Результаты показали, что параметрическая 3D-модель с хорошо подобранными функциями модификации температуры и плотности позволяет достоверно воспроизводить как форму линий поглощения.

3.3 Расчет не-ЛТР населенностей атомарного кислорода

Уровни, формирующие диагностические линии 130,4 нм и 777,4 нм, являются метастабильными, и в условиях планетарных атмосфер могут существенно отклоняться от ЛТР. Не-ЛТР моделирование этих линий у Солнца и других звезд широко применяется, однако в области исследования экзопланет, это не так распространено, в первую очередь, из-за отсутствия специализированных надежных кодов. В этом разделе рассмотрим основные методы расчета не-ЛТР населенностей атома кислорода в атмосферах экзопланет, а также важнейшие физические процессы, влияющие на эти населенности.

Для атома кислорода основными процессами, которые определяют населенности его квантовых уровней, являются как радиационные, так и ударные процессы. В первую очередь, это спонтанное излучение. Фотовозбуждение происходит, когда атом кислорода поглощает фотон с энергией, соответствующей разности энергий между двумя уровнями. Этот процесс может играть важную роль для линии 777,4 нм. Столкновительные процессы с электронами вызывают возбуждение или девозбуждение атома кислорода. Они особенно важны в горячих экзопланетных атмосферах, где плотность частиц может быть значительной. Учет ионизации кислорода (как O I, так и O II) играет важную роль в моделировании не-ЛТР, поскольку при достаточном уровне коротковолнового излучения атомы кислорода быстро ионизируются. Рекомбинация ионов кислорода с электронами восстанавливает атомы кислорода в их нейтральном состоянии с возбуждением и дальнейшим радиационным переходом в основное состояние.

Каждый из этих процессов требует точных данных о скорости протекания реакций, а также точной оценки спектра излучения звезды. В описываемых расчетах используются заданные спектры излучения, результаты реальных наблюдений с высоким разрешением в УФ и ИК диапазонах (см. раздел 2.4). Модели атома кислорода включают от 2 до 51 энергетических уровней, в зависимости от требуемой точности и целей (либо быстрая оценка, либо точный синтез спектра).

Для расчета не-ЛТР населенностей на практике используется численный подход, подробно рассмотренный в разделе 2.3. Программа рассчитывает установившееся состояние населенности квантовых уровней, решая систему уравнений кинетики с заданными начальными условиями.

Рассмотрим частный пример расчета не-ЛТР населенностей O I для параметрически сгенерированной атмосферы из предыдущего раздела:

1. Задаются начальные условия для всех уровней кислорода (обычно, населенности ЛТР, позволяющие быстро выйти к стационарному состоянию).
2. Данные об атмосфере (температура, плотность электронов, плотность кислорода), а также, информация о поле излучения передаются модулю расчета не-ЛТР населенностей.
3. Решается система уравнений для различных высот (или радиусов) в атмосфере.
4. Итерации продолжаются до достижения сходимости решения (различие между населенностями последовательных итерациях меньше заданного порога). На практике, часто используется квазистационарный режим, позволяющий достичь сходимости в ограниченное количество шагов с большим шагом по времени.

Для проверки корректности расчетов использовалось сравнение с ЛТР-населенностями: при высоких плотностях и высоких температурах система должна стремиться к равновесию. Синтез спектров поглощения экзопланетных атмосфер — ключевой этап, соединяющий численное моделирование и наблюдательную астрономию. Он реализуется через уже найденные населенности уровней кислорода. В рамках данной работы, первоочередной интерес вызывают линии O I 130,4 нм и 777,4 нм. Подробное описание процедуры расчета спектра поглощения линий приведено в разделе 2.5.3. Результирующие спектры пригодны для прямого сравнения с данными JWST, HST, а также с наземными наблюдениями с телескопов VLT, ELT, Keck.

В следующем разделе рассмотрено, как линии O I 130,4 нм и 777,4 нм могут служить индикаторами условий в атмосфере. Сравнивая наблюдаемые интенсивности этих линий с теоретическими моделями, можно получить информацию о физических параметрах планетных атмосфер, в частности, о температуре. Например, для планеты KELT-9 b, которая обладает экстремально высокой температурой, точные расчеты не-ЛТР населенностей помогают объяснить нестандартное поведение линии 777,4 нм, а также ее обнаружение пока только в одном случае. В данной работе, расчет населенностей кислорода с не-ЛТР подходом позволил оценить вклад каждого уровня в генерацию излучения в данной линии. В итоге, определен диапазон температур, при которых линии 130,4 нм и 777,4 нм становятся наблюдаемыми (или исчезают) — это важно для поиска экзопланет, содержащих в атмосфере кислород.

3.4 Зависимость взаимной интенсивности линий 130,4 нм и 777,4 нм от температуры

Спектральные линии кислорода в ближнем ультрафиолете (130,4 нм) и ближнем инфракрасном диапазоне (777,4 нм) представляют собой важные диагностические инструменты для изучения физических условий в верхних слоях атмосфер экзопланет. Интенсивности этих линий, а также их относительное соотношение, чувствительны к температуре, плотности, ионизационному состоянию и излучению звезды, что будет впервые продемонстрировано в данном разделе. Однако именно температура, как фундаментальный макропараметр, оказывает первичное и наибольшее влияние на механизм формирования обеих линий.

Текущий раздел посвящен анализу температурной зависимости относительной интенсивности линий O I 130,4 нм и 777,4 нм на основе расчетов не-ЛТР

населенностей и последующего синтеза спектров поглощения в рамках параметрических 3D гидростатических моделей атмосфер.

Прежде чем анализировать температурную зависимость, важно рассмотреть физику формирования обеих линий. Ранее, в разделе 3.1 рассматривались соответствующие процессы. Далее более подробно обсудим эффекты, связанные именно с температурой. Линия излучения 130,4 нм представляет собой триплет, возникающий, преимущественно, из перехода с верхнего уровня $3s\ ^3S^0$ на основной уровень $2p^4\ ^3P$, что обусловлено преобладанием спонтанного излучения. Этот переход — разрешенный дипольный, при этом, основным источником заселения верхнего состояния является УФ-излучение звезды, а для горячих и плотных атмосфер начинают влиять ударные процессы. Линия 777,4 нм также представляет собой триплет, возникающий из переходов с уровня $3p\ ^5P$ на уровень $3s\ ^5S^0$. Этот переход чувствителен к столкновительному возбуждению (температуре), менее чувствителен к полю излучения (ИК), и, в отличие от УФ-линии, гораздо слабее подвержен рассеянию, так как лежит в области, где атмосфера часто оптически тонка. Поглощение в линии 130,4 нм является сильным, поскольку нижний уровень является основным, а в линии 777,4 нм зависит от населенности возбужденного уровня, которое в случае столкновительного заселения зависит от температуры экспоненциальным образом.

Таким образом, поведение этих линий при изменении температуры будет различным, что делает их взаимную интенсивность чувствительным термометром. Температура влияет на поглощение линий O I несколькими путями. Во-первых, через населенности уровней — при повышении температуры увеличиваются столкновения, и возрастают вероятности возбуждения уровня $3s\ ^5S^0$, формирующего поглощение в линии 777,4 нм. Во-вторых, через изменение ионизации — при температуре выше $\sim 7000\text{--}8000\text{ K}$ начинается быстрая ионизация кислорода, приводящая к уменьшению общего числа нейтральных атомов, доступных для возбуждения. Это в первую очередь снижает интенсивность обеих линий, но с разной скоростью. В-третьих, через изменение оптической толщины — для резонансной линии 130,4 нм оптическая толщина меняется сложным образом, не только за счет ионизации, но и за счет раздувания атмосферы в целом, а также эффекта самопоглощения.

В целом, при повышении температуры поглощение в линии 777,4 нм усиливается быстрее, чем 130,4 нм, но затем обе ослабевают из-за ионизации. Это создает характерный максимум в соотношении интенсивностей на определенной температуре.

В рамках данной работы были проведены расчеты не-ЛТР населенностей кислорода для серии 3D атмосфер с температурным диапазоном от 2500 К до 25 000 К, от землеподобных планет до звезд спектрального класса В, с особенной детализацией в области горячих юпитеров. Расчеты велись с использованием кода, описанного ранее в главе 2, с учетом 51 уровня кислорода (и основного состояния иона кислорода), всех значимых радиационных и столкновительных процессов, а также звездного излучения. Для каждой атмосферы вычислялись профили поглощения линий 130,4 нм и 777,4 нм (рис. 5), и находились максимумы пошложения ($\max(\alpha_{130,4})$ и $\max(\alpha_{777,4})$), а также, отношение максимумов $\max(\alpha_{777,4}) / \max(\alpha_{130,4})$.

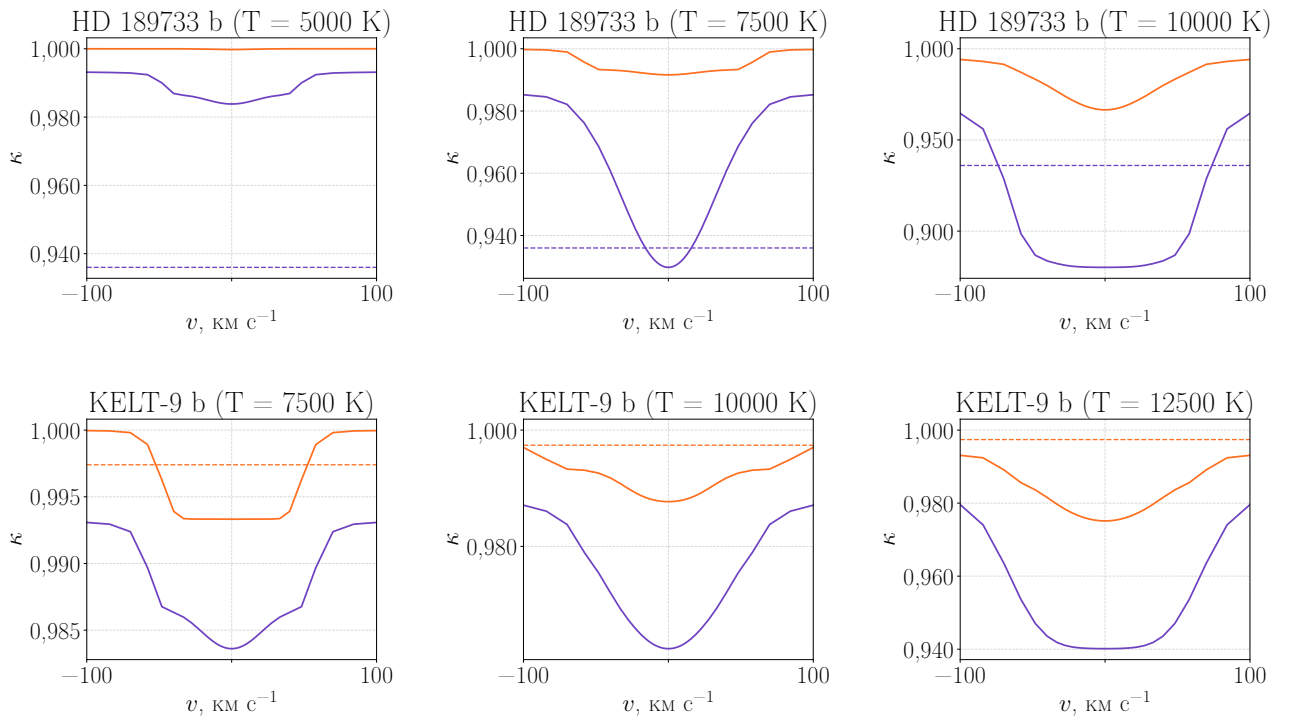


Рисунок 5: Профили поглощения линий О I 130,4 нм (■) и 777,4 нм (■) в атмосферах экзопланет HD 189733 b и KELT-9 b в зависимости от доплеровской скорости. Пунктиром обозначены результаты наблюдения глубины поглощения соответствующей линии в атмосфере соответствующей экзопланеты.

Полученные зависимости позволили построить карту отношения линий как функции температуры (рис. 6). Отношение интегралов по линии и амплитуды максимумов дает качественно аналогичную картину и могут использоваться как в спектрально разрешенных наблюдениях, так и в наблюдениях с низким разрешением. Таким образом, результаты имеют диагностическую применимость для оценки температуры по отношению поглощений в этих линиях кислорода. Справедливо и обратное — по известной температуре можно предположить

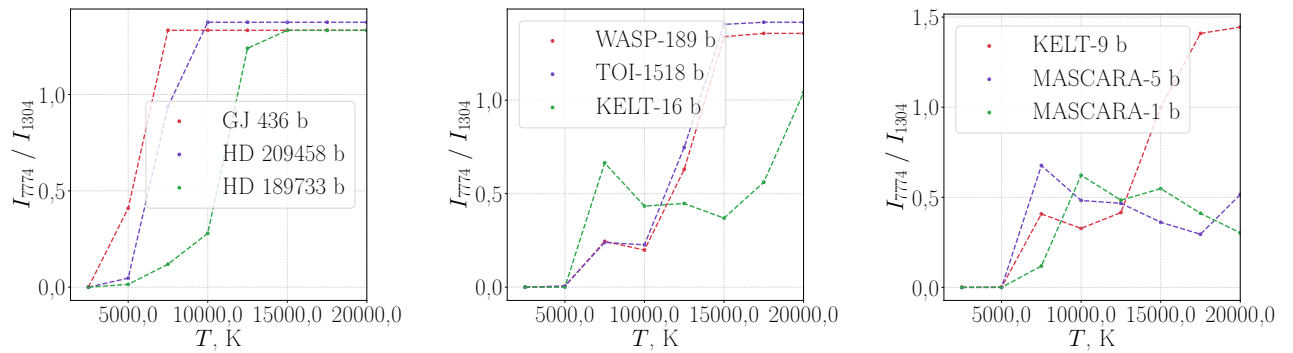


Рисунок 6: Отношение амплитуд поглощения пар линий О I для трех групп планет. Разница температур верхних уровней переходов (1,22 эВ для линий 777,4 нм и 130,4 нм) позволяет использовать данные соотношения в качестве чувствительного термометра в диапазоне температур 2500–15 000 К. При температурах ниже 2500 К и выше 15 000 К возникает плато из-за низких населенностей, либо термализации, соответственно.

вероятность обнаружения кислорода в той или иной линии.

3.5 Определение температурных границ

Одним из результатов данной работы стало определение температурных диапазонов, в которых линии атомарного кислорода О I 130,4 нм и 777,4 нм являются информативными и диагностически полезными для анализа экзопланетных атмосфер. В разделе 3.1 описаны процессы, влияющие на формирование исследуемых линий кислорода с точки зрения физики и наблюдений. Выделим из них ключевые в контексте моделирования и соотнесем с результатами расчетов (рис. 6) для определения диагностически важных температурных диапазонов. Для того чтобы линия могла быть использована в спектральной диагностике, должен выполняться ряд условий. Исследуемые линии формируются из нейтрального кислорода, поэтому необходимо, чтобы при данной температуре кислород сохранялся преимущественно в нейтральной форме (т.е. ионизационный уровень не должен превышать ~ 50 %). Должна реализовываться оптическая прозрачность в линии 777,4 нм и умеренная насыщенность линии 130,4 нм (при слишком высокой плотности или температуре может возникнуть насыщение, приводящее к самопоглощению и искажению профиля). Чтобы использовать пару линий как температурный диагностический индикатор, необходимо, чтобы отношение их интенсивностей изменялось в зависимости от температуры (температурная

чувствительность). Судя по результатам моделирования (рис. 6), на исследуемом температурном диапазоне это условие выполняется.

При температурах ниже ~ 3000 К эффективность возбуждения 777,4 нм резко снижается. В частности, это заметно по результатам моделирования горячих экзопланет KELT-9 b, MASCARA-1 b и MASCARA-5 b. С точки зрения неравновесной кинетики, основной причиной является снижение вероятности столкновительного возбуждения: переходы с уровней, ответственных за 777,4 нм, требуют значительной энергии возбуждения ($\sim 9,1$ эВ). При низких температурах населенность уровней возбуждается исключительно через фотоны или резонансное рассеяние, которое в данном диапазоне малоэффективно. В реальных условиях также стоит учитывать, что в холодных слоях атмосферы нарушается не только возбуждение, но и сама химия кислорода — кислород начинает вступать в химические реакции с водородом, углеродом и др., формируя H_2O , CO , O_2 , O_3 и т.п., что уменьшает количество свободных атомов (учет химических эффектов — одно из направлений дальнейшего развития программного комплекса).

Из этого следует, что нижняя температурная граница, при которой линии могут быть надежно идентифицированы и использованы для диагностики, составляет $\sim 3500\text{--}5000$ К, в зависимости от плотности и фонового излучения.

Повышение температуры выше определенного предела приводит к переходу кислорода из нейтральной в ионизованную форму. Потери нейтрального кислорода происходят преимущественно при температурах выше 8000 К. При этом даже при высоком общем содержании кислорода доля O I падает экспоненциально (по уравнению Саха в условиях ЛТР или с учетом не-ЛТР эффектов ионизации). При $T > 10\,000$ К линии начинают формироваться в верхних, разреженных слоях, где из-за низкой плотности столкновительные процессы становятся неэффективными, а населенности резко отклоняются от термодинамического равновесия.

На основе численных расчетов с полным не-ЛТР описанием можно заключить, что верхняя граница температуры, при которой линии кислорода сохраняют свою диагностическую ценность, составляет $\sim 8500\text{--}9000$ К, при этом оптимальным диапазоном является интервал 5000–8000 К. Для различных типов экзопланет и условий звездного облучения температурные границы могут варьироваться.

Температурное окно 8000–15 000 К является универсальным диапазоном, в котором поглощение в обеих линиях может наблюдаться, и в котором чувствительность по относительной интенсивности максимальна. При этом, отношение $\max(\alpha_{777,4}) / \max(\alpha_{130,4})$ имеет ярко выраженный температурный

максимум в диапазоне $\sim 10\,000\text{ K}$ с резким ростом в диапазоне $6000\text{--}8000\text{ K}$.

В данном разделе были рассмотрены полезные для диагностики температурные диапазоны, основанные на отношении интенсивности поглощения линий кислорода. Не менее интересна обратная задача — поиск кислорода по температуре, которая подробнее рассмотрена в следующем разделе.

3.6 Синтетические спектры и рекомендации для наземных и космических наблюдений

Развитие высокоточной спектроскопии и запуск орбитальных обсерваторий нового поколения (JWST, HST, в будущем LUVOIR, ARIEL, Спектр-УФ) открывают возможности для наблюдения тонких спектральных структур в атмосферах экзопланет.

Анализ соотношения линий O I $130,4\text{ нм}$ и $777,4\text{ нм}$, а также отдельное исследование амплитуд этих линий (рис. 7), позволяет оценивать вероятность обнаружения кислорода в соответствующем спектральном диапазоне. Например, приведенная оценка поглощения на группах экзопланет показала, что линия $777,4\text{ нм}$ может быть потенциально обнаружена в транзитах экзопланет KELT-16 b и MASCARA-5 b. Важно отметить, что KELT-9 b, согласно моделированию, находится в пространстве параметров, наиболее предпочтительном для наблюдения линии $777,4\text{ нм}$, что подтверждается единственным результатом наблюдений [16].

Этот подход особенно перспективен для выявления кислорода как одного из необходимых компонент в комплексе биомаркеров, поскольку дает возможность отделить фотохимические и термодинамические источники наблюдаемых линий. Совместное наблюдение линий O I и других молекул (например, озона, воды, CH_4) может повысить вероятность биологического присутствия.

Рассмотрим основные способы наблюдения линий атомарного кислорода, и то, как полученные результаты могут улучшить планирование исследований для их детектирования. Наблюдение линии $130,4\text{ нм}$ возможно только с космических телескопов, поскольку земная атмосфера полностью поглощает ультрафиолет:

- HST/STIS остается основным рабочим инструментом в УФ, но имеет ограничения по чувствительности и стабильности. Для линий $130,4\text{ нм}$ необходимы многократные транзитные наблюдения с накоплением сигнала.
- LUVOIR (в будущем) обладает большим зеркалом и высокой УФ-чувствительностью. Оптимальный телескоп для регистрации линий кислорода в биосигнатурных задачах.

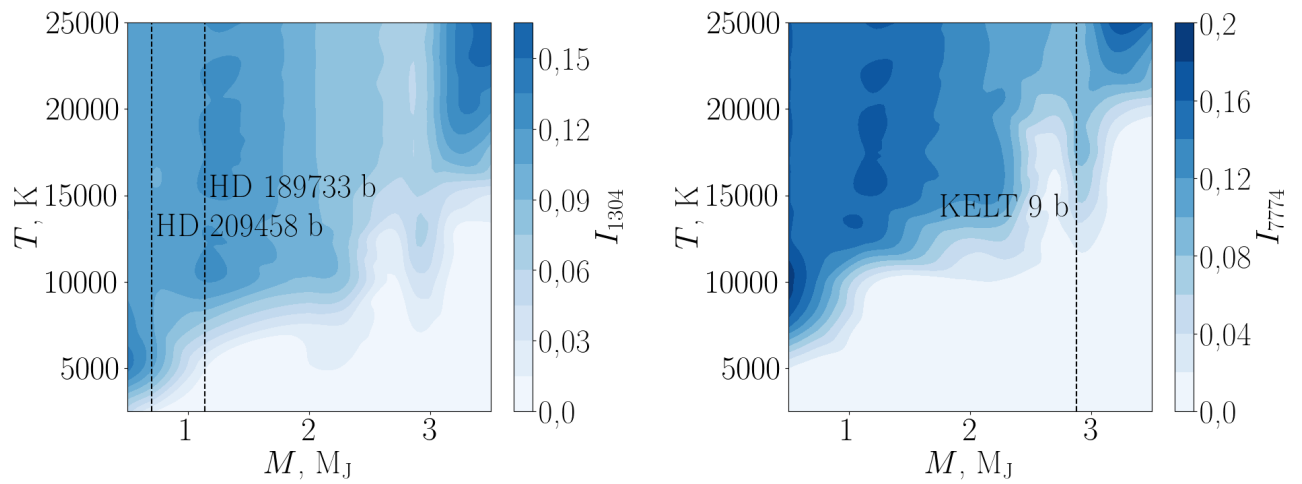


Рисунок 7: Карта обнаруженная линий О I 130,4 нм и 777,4 нм в параметрическом пространстве масса—температура. Интенсивность цвета отражает глубину поглощения соответствующей линии. Важно учитывать, что эффективная температура атмосфер ультрагорячих юпитеров может достигать 10 000 К и более. Так, KELT-9 b с температурой, превышающей 10 000 К, находится в оптимальной зоне для наблюдений линии 777,4 , что вполне согласуется с наблюдениями. В то же время, линия 130,4 нм обнаружима в атмосферах HD 189733 b и HD 209458 b с максимальными температурами верхних слоев до 8000 К.

- Спектр-УФ/UVSPEX (в будущем) сможет наблюдать 130,4 нм с хорошим разрешением и, потенциально, наилучшей эффективностью.

Для линии 777,4 нм можно использовать существующие и будущие спектрографы:

- ESPRESSO (VLT) — разрешение до $R \sim 140\,000$, высокая стабильность. Возможна работа с яркими звездами.
- HIRES (ELT) — в перспективе позволит наблюдать более слабые сигналы, включая планеты в зоне обитаемости.
- HARPS-N, CARMENES — менее подходящие, но потенциально полезны при использовании продвинутых методов удаления теллурических эффектов (линии поглощения, образуемые при прохождении через атмосферу Земли).
- ARIEL в будущем может регистрировать 777,4 нм при хорошем сигнале от ярких звезд и горячих планет.

В ходе данной работы было показано, какие данные (температура атмосферы, звездное УФ-излучение) необходимы для планирования и надежной интерпретации наблюдений. Обе линии чувствительны к температуре и физическому состоянию атмосферы, но требуют высокой точности и спектрального разрешения. Наиболее перспективный способ их регистрации — транзитная спектроскопия, в первую очередь из космоса (130,4 нм) и с наземных телескопов (777,4 нм), при этом, желательно накопление сигнала за несколько транзитов (3–10). Линия O I 130,4 нм потенциально обнаружима в атмосферах экзопланет с температурой $\sim 3500\text{--}5000$ К, массой, близкой к Юпитеру, при условии сильного УФ поля звезды (вероятнее всего, спектрального класса G или K). Линия O I 777,4 нм действительно требует более редких условий ($T \sim 8500\text{--}9000$ К, 3–4 массы Юпитера), что подтверждается ее единственным на данный момент детектированием. Если наблюдаются только одна из линий или их отношение выходит за предсказанные пределы, это может свидетельствовать о том, что атмосфера находится за пределами температурного окна или в ней происходят дополнительные процессы.

3.7 Выводы к главе 3

В рамках главы 3 проведено детальное исследование применения спектральных линий атомарного кислорода O I 130,4 нм и 777,4 нм для диагностики атмосфер экзопланет. Установлено, что эти линии обладают высокой чувствительностью к термодинамическим условиям среды, таким как температура, плотность и степень ионизации, что делает их ценными инструментами для анализа верхних слоев

атмосфер.

Разработанная в рамках диссертации программа *Astrea* позволила провести расчеты населенностей уровней атомарного кислорода в условиях неравновесной термодинамики (не-ЛТР), что важно для моделирования атмосфер экзопланет, где традиционные подходы, основанные на локальном термодинамическом равновесии (ЛТР), оказываются недостаточными. Показано, что отклонения от ЛТР существенно влияют на интенсивности исследуемых линий, особенно в условиях высоких температур и низких плотностей, характерных для верхних слоев атмосфер горячих юпитеров.

Анализ температурной зависимости взаимной интенсивности линий 130,4 нм и 777,4 нм выявил их диагностический потенциал. Установлено, что отношение интенсивностей этих линий достигает максимума в диапазоне температур 8000–15 000 К, что позволяет использовать его в качестве «спектрального термометра». Определены температурные границы, в которых линии остаются наблюдаемыми и информативными: нижняя граница составляет ~ 3500–5000 К, а верхняя — ~ 8500–9000 К. При температурах выше 10 000 К интенсивность линий снижается из-за ионизации кислорода, что ограничивает их применение для диагностики экстремально горячих атмосфер.

Проведенное моделирование продемонстрировало, что линии кислорода могут служить не только для определения физических параметров атмосфер, но и для поиска кислорода как потенциального биомаркера. Перечислены рекомендации для наблюдательных кампаний, включая выбор инструментов (таких как HST, JWST, LUVOIR, ELT) и стратегий наблюдений. Показано, что совместное использование линий 130,4 нм и 777,4 нм позволяет повысить надежность интерпретации наблюдательных данных.

Таким образом, результаты главы 3 подтверждают, что линии кислорода O I 130,4 нм и 777,4 нм являются мощными диагностическими инструментами для изучения атмосфер экзопланет, а разработанные методы их анализа на основе не-ЛТР подхода открывают новые возможности для спектральных исследований в астрофизике.

Глава 4 РОЛЬ ИОНА Fe II В АЭРОНОМИИ АТМОСФЕР УЛЬТРАГОРЯЧИХ ЮПИТЕРОВ

4.1 Описание типичного ультрагорячего юпитера KELT-9 b и его особенностей

Планета KELT-9 b была открыта в 2017 году в рамках проекта Kilodegree Extremely Little Telescope (KELT) и относится к классу ультрагорячих юпитеров. Она обращается вокруг звезды HD 195689, также известной как KELT-9, находящейся на расстоянии примерно 620 световых лет в созвездии Лебедя, с периодом всего 1,5 суток. Планета имеет массу 2,88 масс Юпитера и радиус 1,94 радиуса Юпитера, что указывает на ее значительную гравитацию [92]. Верхние слои атмосферы KELT-9 b состоят преимущественно из водорода и гелия [93–96], но также содержат тяжелые элементы, такие как Fe I, Fe II, Mg I, Na I, Cr II, Sc II, и O I [94,97]. В 2021 году впервые было зафиксировано поглощение в инфракрасной линии атомарного кислорода 777,4 нм, что подчеркивает уникальность параметров атмосферы [15]. Благодаря близкому расположению к звезде (0,0337 а.е.) равновесная температура KELT-9 b достигает 4600 К, что делает ее уникальным объектом для изучения физики высокотемпературных атмосфер [28,29]. Высокая температура и интенсивное ультрафиолетовое излучение звезды приводят к сильной ионизации атмосферы и формированию протяженной плазмосферы. Потеря массы атмосферы оценивается до 10^{13} г с⁻¹, что является одной из самых высоких величин среди известных экзопланет [15,67,98]. Подробный анализ интерпретации наблюдений KELT-9 b также описан в предыдущих работах нашей исследовательской группы [24,67].

Звезда KELT-9 относится к редкому спектральному классу V9.5–A0V, излучение которого значительно отличается от звезд классов G, K и M, что делает ее уникальной среди звезд, обладающих планетами. Высокие показатели излучения родительской звезды в VUV (вакуумный ультрафиолет, ВУФ, 10–200 нм) спектре значительно меняют механизм нагрева верхней атмосферы близких планет. Это приводит к тому, что нагрев происходит за счет фотоионизации с возбужденных уровней, которые находятся в не-ЛТР, в то время как большинство известных горячих юпитеров нагреваются за счет фотоионизации XUV (EUV, экстремальный ультрафиолет, ЭУФ, 10–121 нм) излучением из основного состояния элементов [24,63]. Таким образом, атмосфера KELT-9 b представляет собой «естественную лабораторию» для изучения процессов, не встречающихся в Солнечной системе, крайне редкая даже по меркам экзопланетных систем.

Одним из важных наблюдательных результатов последних лет стало

обнаружение многочисленных линий Fe II в спектре планеты. Однако интерпретация этих данных в ряде работ [15,16], выполненных с использованием кода Cloudy for Exoplanets, привела к дискуссионным выводам, требующим проверки. В частности, был предсказан аномально высокий вклад Fe II в нагрев верхних слоев атмосферы, что противоречит ожидаемой роли тяжелых элементов, которые в подобных условиях обычно выступают скорее как эффективные охладители. Cloudy, как и другие известные не-ЛТР коды, не предоставляет возможности по выборочному учету процессов и отдельных уровней, а, в рассматриваемом контексте, является «черным ящиком», что ограничило авторов в возможности выявления причин такого противоречивого эффекта. Код Astrea, разработанный в рамках настоящей диссертационной работы, проектировался специально для подобных случаев, где требуется подробный анализ вклада микроскопических параметров атомных и ионных систем.

Fe I и Fe II могут играть важную роль в аэрономии за счет своего вклада в радиационное охлаждение через возбужденные уровни из-за их уникальной конфигурации. В частности, среди обнаруженных элементов, железо обладает наиболее сложной многоэлектронной структурой с большим количеством близко расположенных метастабильных уровней (рис. 8). При интенсивном УФ-излучении звезды возможна накачка определенных уровней, что может приводить к дополнительному нагреву. Это создает сложную картину взаимодействия между процессами, которая требует использования не-ЛТР моделей для ее адекватного описания. Сопоставимая сложность структуры достигается у элементов Ni I, Ni II, Nd II, Ce II, однако они имеют гораздо меньшее влияние, и некоторые из них пока не были достоверно подтверждены [97].

KELT-9 b служит эталонным объектом для понимания физики ультрагорячих юпитеров. Ее уникальные характеристики, такие как высокая температура, наличие тяжелых элементов и интенсивное излучение звезды, делают эту планету подходящим объектом для тестирования современных моделей атмосфер экзопланет. В последующих разделах главы будет подробно рассмотрена роль иона Fe II и его возбужденных уровней в аэрономии KELT-9 b, а также проведено сравнение с результатами других исследований.

Общая схема исследования представлена на рис. 9. Далее подробнее описаны конкретные этапы, начиная с создания модели атмосферы.

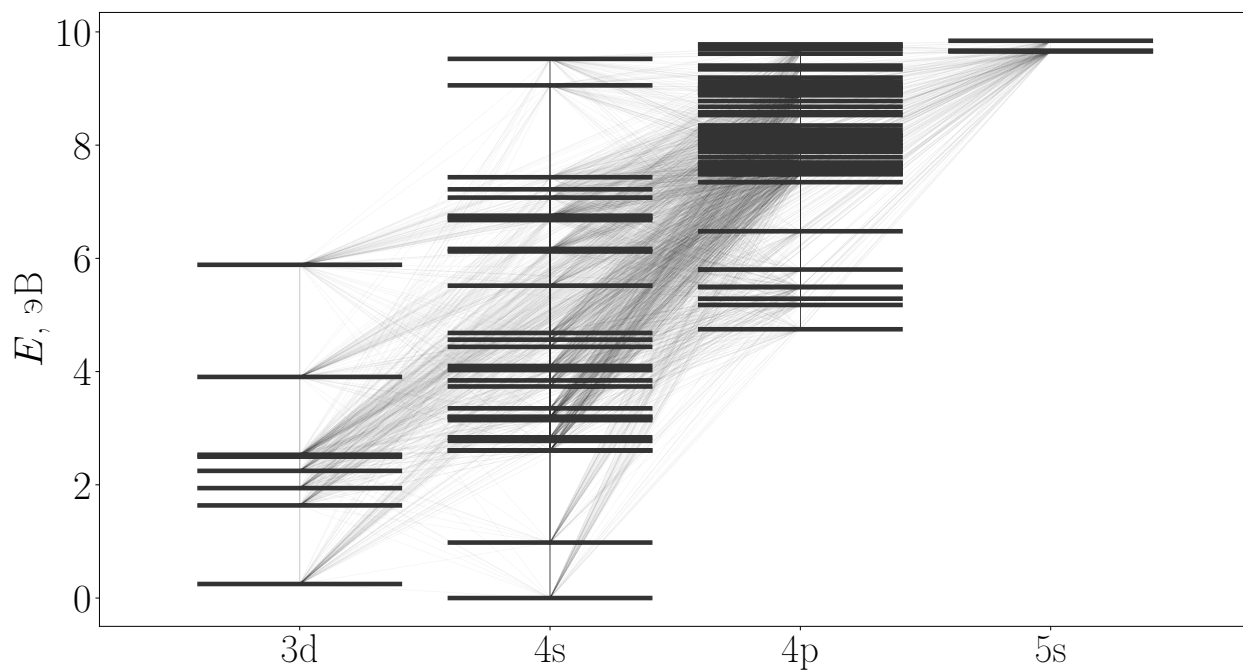


Рисунок 8: Структура Fe II с множеством близкорасположенных уровней.

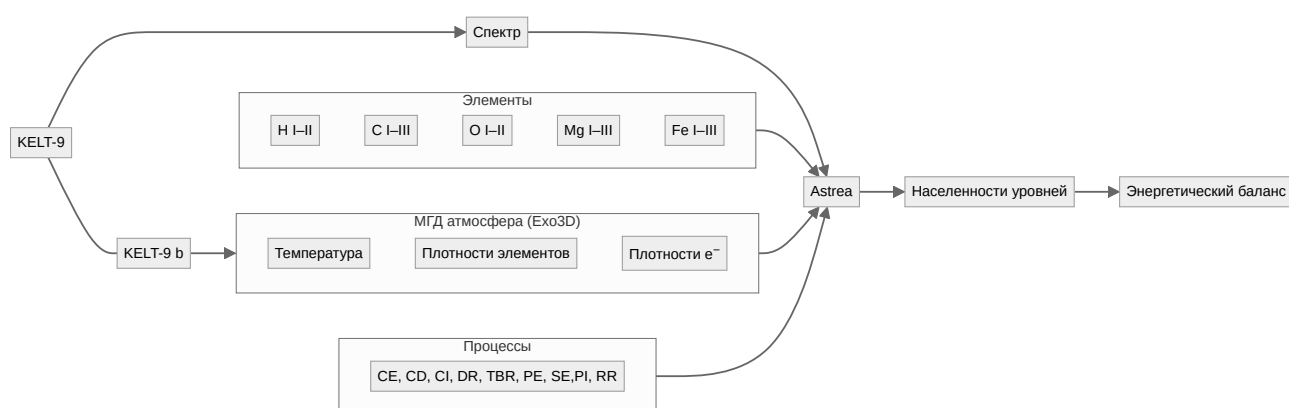


Рисунок 9: Конфигурация вычислений для исследования энергетического баланса экзопланеты KELT-9 b.

4.2 Построение газодинамической ЛТР модели атмосферы

Для исследования структуры и динамики атмосферы KELT-9 b использовалась ранее разработанная трехмерная газодинамическая модель Exo3D. Этот код основан на многожидкостной магнитогидродинамике (МГД) и позволяет рассчитывать распределение температуры, плотности, скоростей газа и химического состава в атмосфере экзопланеты с учетом воздействия излучения родительской звезды.

Модель Exo3D решает систему уравнений МГД, включая уравнения сохранения массы, импульса и энергии для многокомпонентной плазмы, уравнения состояния для идеального газа с учетом ионизации, уравнения переноса излучения в приближении заданного внешнего поля излучения звезды.

В рамках МГД расчетов также учитываются следующие ключевые процессы для атмосфер экзопланет:

1. Нагрев за счет поглощения звездного излучения в УФ и рентгеновском диапазонах.
2. Ионизацию атомов и молекул под действием излучения.
3. Адиабатическое охлаждение расширяющейся атмосферы.
4. Гравитационное влияние планеты и приливные силы от звезды.

Для KELT-9 b были заданы следующие основные параметры: температура на границе вычислительной области (поверхность планеты, $r = R_p$): 4500 K; интегральный поток излучения звезды в диапазоне 10–912 Å на расстоянии 1 а.е.: $5 \text{ эрг см}^{-2} \text{ с}^{-1}$; относительное содержание гелия $[\text{He}]/[\text{H}]$: 0,03; химический состав: p^+ , H I, He I–II, O I–III, Mg I–III, Fe I–III, C I–III.

При моделировании были учтены специфические особенности системы, включая близкое расположение планеты к звезде (0,0337 а.е.) и связанный с этим интенсивный нагрев, большую массу планеты ($2,88 M_J$), которая ограничивает потерю атмосферы, спектр звезды класса B9.5–A0V с преобладанием VUV-излучения.

Моделирование Exo3D позволило получить трехмерные распределения температуры, плотности и скорости газа, профили давления и температуры вокруг планеты (рис. 10), оценку потери массы атмосферы ($\sim 3 \times 10^{12} \text{ г с}^{-1}$), распределение различных химических элементов и их ионизационных состояний [67]. В предыдущей работе были вычислены населенности первых трех уровней H I, C I, C II, O I, Mg I, Mg II [24]. Результаты показали, что основным каналом нагрева является H I, что вполне соответствует ожиданиям и исследованию [63]. Однако

возбужденные уровни Fe I и Fe II при этом не учитывались из-за их сложной структуры. В данной работе был добавлен учет Fe I–III для аналогичной модели атмосферы.

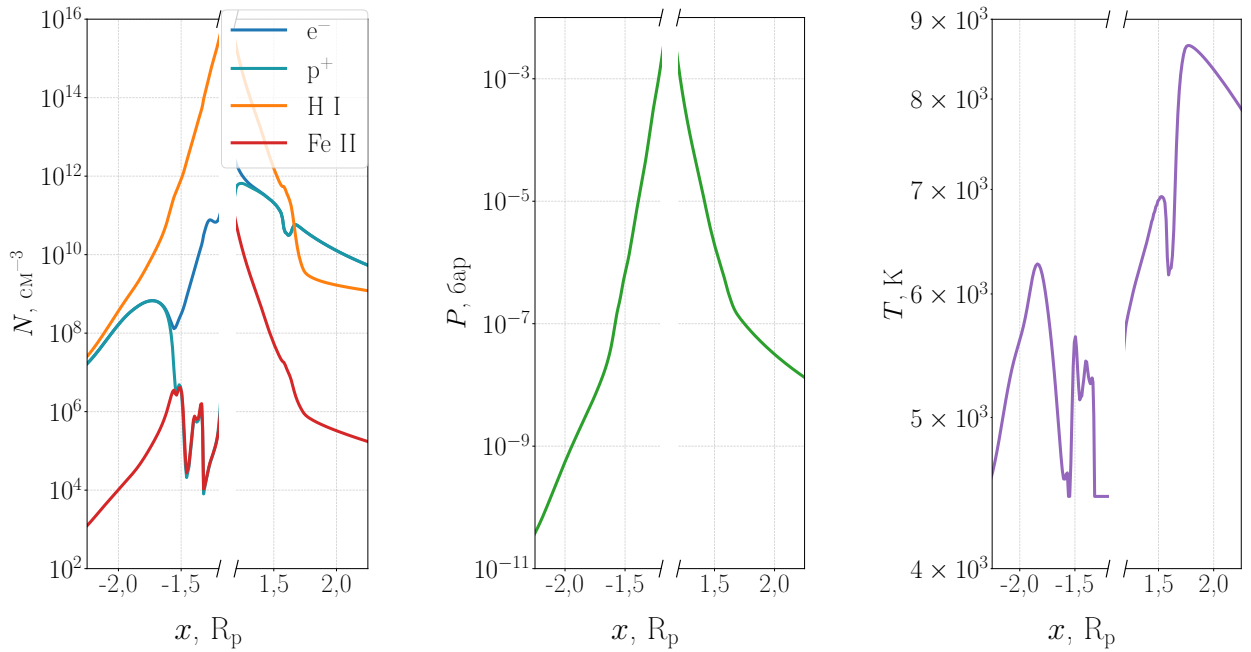


Рисунок 10: Распределения (а) частиц и элементов, (б) давления и (с) температуры в атмосфере KELT-9 b вдоль линии планета–звезда.

Хотя модель Exo3D в ЛТР-приближении дает важную информацию о структуре атмосферы, она не учитывает неравновесные процессы возбуждения уровней детально, соответственно, требуется последующее уточнение населенностей уровней в не-ЛТР-приближении.

Эти ограничения были преодолены путем использования разработанной библиотеки Astrea для последующего не-ЛТР-анализа, что позволило получить более точное описание кинетики уровней и их вклада в тепловой баланс атмосферы. Так, важность учета не-ЛТР эффектов в атмосфере KELT-9 b подтверждается даже для простейшего элемента — атома водорода. На рисунке 11 демонстрируется сравнение населенностей уровней 2–3 H I в ЛТР и не-ЛТР, которые значительно отличаются на высоких слоях атмосферы.

Прямой расчет населенностей уровней H I позволяет точно рассчитать охлаждение за счет ударного возбуждения уровня H I $n = 2$ с быстрым излучением Лайман-альфа фотона — важнейшего процесса в энергетическом балансе атмосфер горячих экзопланет [64]. Основной вопрос в упрощенных газодинамических моделях состоит в том, до каких давлений это охлаждение работает, а при каких давлениях его следует выключать [60,99]. Расчет для KELT-9 b показывает, что Лайман-альфа

охлаждение для этой планет работает с высот $0,3 R_p$ и выше.

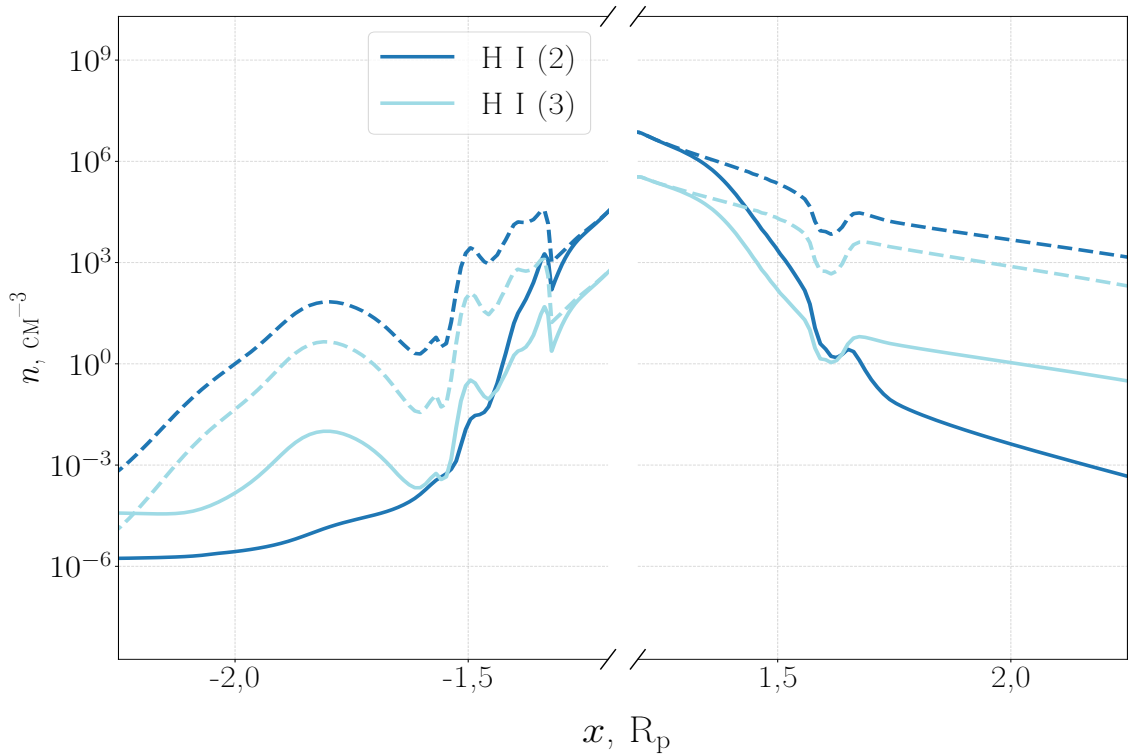


Рисунок 11: Не-ЛТР (сплошные линии) и ЛТР (штриховые линии) населенности энергетических уровней 2 и 3 водорода в атмосфере KELT-9 b. Ночная и дневная сторона определяется знаком x (отрицательные и положительные значения, соответственно). Вблизи планеты населенности уровней близки к ЛТР, в то время как на высоких разреженных слоях различие становится значительным.

Газодинамическая модель ECHO3D дает основу для исследования атмосферы KELT-9 b, рассчитывая самосогласованные распределения основных параметров плазмы. Однако для детального анализа роли отдельных элементов (в частности Fe II) и их вклада в нагрев/охлаждение потребовалось использование дополнительного не-ЛТР подхода, что будет рассмотрено в следующих пунктах главы.

4.3 Расчет населенностей уровней Fe II

Железо играет важную роль в формировании спектров и термодинамической структуры атмосферы ультрагорячих экзопланет. При этом атом железа, имея низкий потенциал ионизации, быстро фотоионизируется в относительно плотных слоях атмосферы, в то время как первый ион железа присутствует практически во всех слоях атмосферы. Fe II обладает богатой системой возбужденных состояний, позволяющих взаимодействовать с излучением в широком диапазоне длин волн, включая ультрафиолет, видимую область. Расчет населенностей квантовых уровней

Fe II является необходимым шагом при синтезе спектра, а также, при расчете энергетического баланса атмосфер.

Поскольку в верхних слоях атмосферы экзопланет условия далеки от локального термодинамического равновесия (см. предыдущий раздел), необходим переход к решению системы уравнений кинетики возбуждения в не-ЛТР приближении. Рассмотрим методы и физику, лежащие в основе вычисления населенностей уровней Fe II, включая структуру иона, механизмы возбуждения и релаксации, используемые численные алгоритмы и пример применения к атмосфере KELT-9 b.

Методика расчета учитывает полную структуру иона Fe II, включая 89 квантовых уровней с их характерными энергиями, статистическими весами и вероятностями переходов. Особое внимание уделяется обработке резонансных переходов, где критически важен корректный учет эффектов оптической толщины (self-shielding). Это достигается путем расчета локальных оптических глубин и моделирования потока резонансного излучения звезды к каждому локальному элементу атмосферы с учетом геометрии. Для обеспечения точности вычислений использована итерационная схема (10) с контролем сохранения числа частиц и проверкой выполнения принципа детального равновесия.

На рис. 12 представлены профили населенностей первых 80 уровней Fe II, на которых продемонстрировано сильное отклонение от ЛТР (β -факторы от 0,01 до 100), а также наблюдается различное поведение групп уровней: уровни 1–30 близки к ЛТР при $p > 10^{-7}$ бар, уровни 31–80 существенно ниже ЛТР во всем диапазоне давлений. Общие условия расчета представлены ранее на рис. 10.

Основная новизна данной работы в исследовании роли отдельных процессов, что позволяет понять физическую картину. Для этого были построены модели с всевозможными их комбинациями: без учета фотовозбуждения, без учета радиационной рекомбинации, без учета сразу нескольких классов процессов и т.д. Один из ключевых результатов был получен в модели без фотовозбуждения (рис. 13). При сравнении с рис. 12 видно, что населенности первых 30 уровней в верхних слоях ($p < 10^{-7}$ бар) значительно зависят от фотовозбуждения излучением звезды, и в его отсутствии находятся близко к ЛТР. Таким образом, именно фотовозбуждение отклоняет населенности нижних уровней Fe II от ЛТР в случае KELT-9 b. При этом, рекомбинационный вклад незначителен из-за малой концентрации Fe III.

Полученные результаты демонстрируют сложную картину распределения населенностей, существенно отличающуюся от предсказаний в приближении

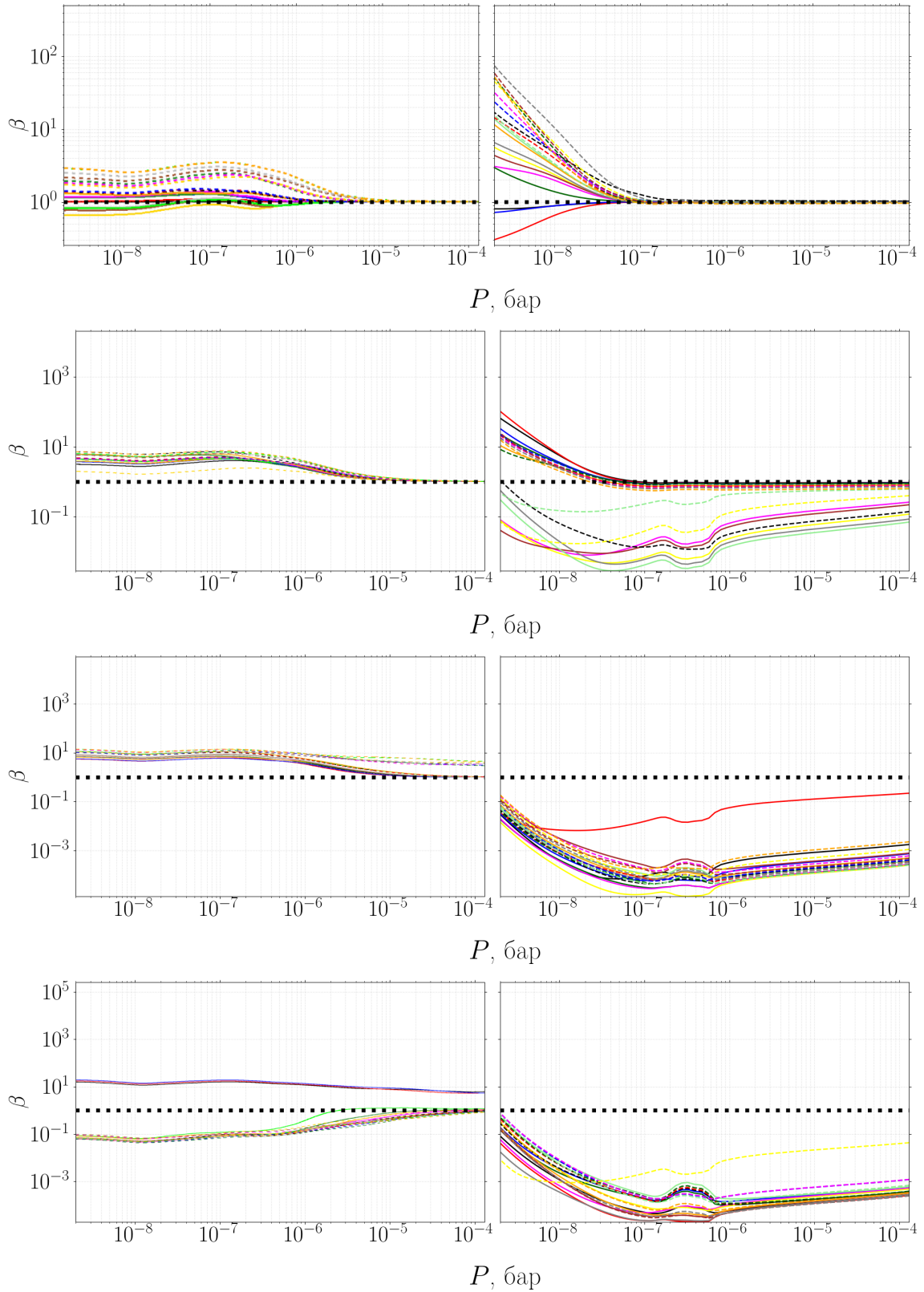


Рисунок 12: β -факторы для Fe II в модели атмосферы KELT-9 b. Слева результат моделирования с помощью Cloudy for Exoplanets (из [16]). Справа результат моделирования Astrea. Уровни упорядочены следующим образом: сначала идут 10 сплошных линий (черная, красная, синяя, темно-зеленая, пурпурная, желтая, коричневая, синяя, светло-зеленая, оранжевая), затем 10 штриховых линий с аналогичным порядком цветов. Черным пунктиром обозначен уровень ЛТР $\beta = 1$.

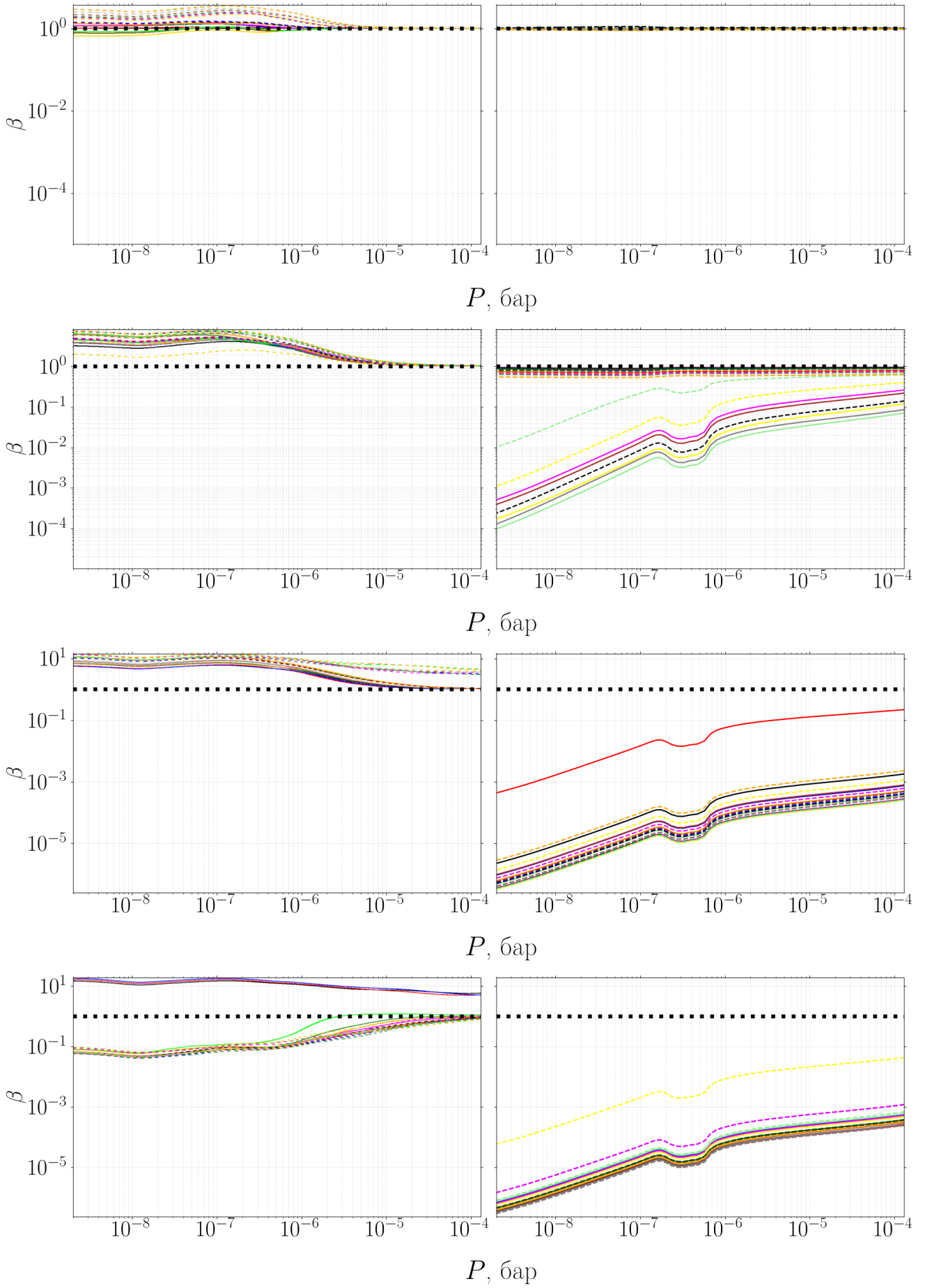


Рисунок 13: β -факторы для Fe II в модели атмосферы KELT-9 b без фотовозбуждения. Обозначения аналогичны рис. 12.

ЛТР. В верхних слоях атмосферы (при давлениях ниже 10^{-7} бар) наблюдается повышенная относительно ЛТР населенность первых 30 уровней, что связано, как показано, с эффектом фотовозбуждения. Однако для более высоколежащих уровней (31–80) характерно устойчивое отклонение населенностей в сторону значений ниже равновесных во всем исследуемом диапазоне давлений. Этот эффект особенно выражен в плотных слоях атмосферы, где доминирующую роль играют ударные процессы и радиационная релаксация, а вклад фотовозбуждения подавляется из-за эффекта self-shielding.

Сравнение с результатами, полученными с помощью широко используемого кода Cloudy (модификацией Cloudy for Exoplanets), выявило принципиальные различия в поведении населенностей. В то время как Cloudy предсказывает превышение населенностей над ЛТР-значениями для всех уровней в верхних слоях атмосферы, предлагаемый подход демонстрирует более сложную картину, где высоколежащие уровни остаются существенно ненаселенными. Эти расхождения объясняются более точным учетом эффектов self-shielding и детальным моделированием ударных процессов в разработанной методике.

Физическая интерпретация полученных результатов основывается на особенностях электронной структуры иона Fe II, характеризующейся большим количеством близко расположенных уровней с различными вероятностями радиационных переходов. В условиях атмосферы KELT-9 b с ее высокой электронной температурой и интенсивным ионизирующим излучением, поведение населенностей определяется сложным балансом между процессами фотовозбуждения, ударного возбуждения, радиационной релаксации и рекомбинации. При этом рекомбинационный вклад в целом оказывается незначительным из-за малой концентрации Fe III в исследуемой области атмосферы.

Таким образом, разработанная методика позволила получить детальную картину распределения населенностей уровней Fe II, которая служит надежной основой для последующего анализа вклада этого иона в тепловой баланс атмосферы KELT-9 b, более подробно рассмотрено в следующем разделе главы. Эти результаты имеют принципиальное значение для понимания аэрономии ультрагорячих юпитеров и разрешения существующих противоречий в интерпретации наблюдательных данных.

4.4 Расчет процессов охлаждения и нагрева

На основании рассчитанных населенностей уровней Fe II был проведен анализ его вклада в тепловой баланс атмосферы KELT-9 b. Сделаны количественные оценки конкурирующих процессов нагрева и охлаждения, которые прямо влияют на термическую структуру верхних слоев атмосферы экзопланеты.

Процессы охлаждения, связанные с потерями энергии атмосферой, включают ударное возбуждение и ударную ионизацию (13). Для каждого уровня рассчитывался вклад в общее охлаждение согласно формуле, учитывающей населенность уровня, скорость соответствующего процесса и выделяющуюся энергию. Наибольший вклад в охлаждение вносили переходы между близко расположенными по энергии уровнями с высокой вероятностью излучательной релаксации.

Механизмы нагрева атмосферы включают два основных процесса: фотоионизация с появлением фотоэлектрона и девозбуждение электронными соударениями. Особенностью расчетов нагрева фотоэлектронами стал учет тепловой энергии фоновых электронов (14), что особенно важно для экстремально горячих атмосфер, где фотоэлектроны нагревают атмосферу энергию только при превышении средней энергии фоновых электронов. При этом было показано, что вклад фотоионизации существенно зависит от населенности верхних уровней, которая, в свою очередь, в проведенных расчетах оказалась значительно меньше по сравнению с ЛТР.

Результаты расчетов с детальным учетом вклада различных процессов (рис. 14) выявили четкую зависимость теплового баланса от высоты атмосферы. В области высоких давлений ($p > 10^{-7}$ бар) доминирующим оказывается охлаждающее действие Fe II, связанное с преобладанием ударных процессов над радиационными. Этот эффект усиливается тем, что населенности большинства уровней в этой области оказываются ниже равновесных значений. В верхних слоях атмосферы ($p < 10^{-7}$ бар) ситуация меняется — фотовозбуждение первых 30 уровней приводит к локальному нагреву, однако его величина недостаточна для компенсации общего охлаждающего эффекта.

Сравнение вклада Fe II с другими элементами (рис. 15) показало его исключительную роль в тепловом балансе. Несмотря на относительно низкую концентрацию, комплекс уровней Fe II обеспечивает охлаждение, сопоставимое с вкладом основного компонента атмосферы — атомарного водорода. Это объясняется уникальной электронной структурой иона железа, предоставляющей множество

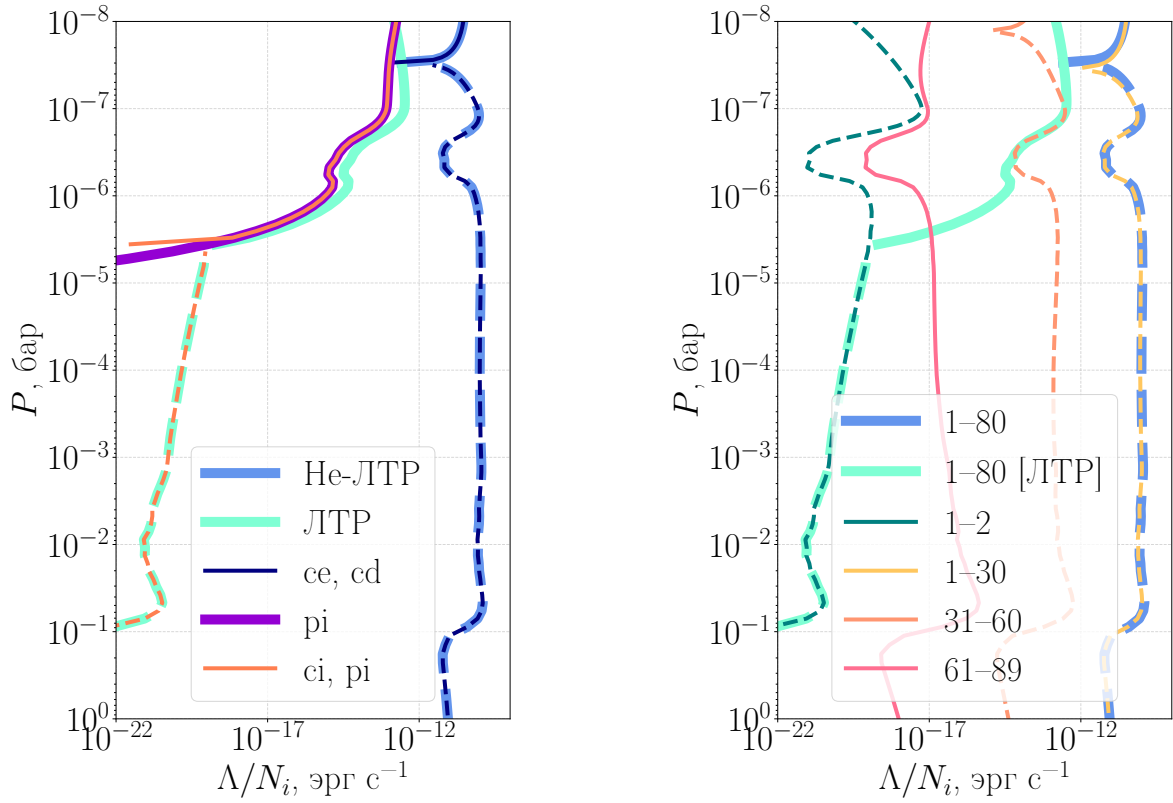


Рисунок 14: Энергетический баланс для иона Fe II в атмосфере KELT-9 b в зависимости от давления с учетом различных процессов. Нагрев и охлаждение показаны, соответственно, сплошной и штриховой линией. Если диапазон уровней для расчета нагрева/охлаждения не указан явно, то учитываются все 89 уровней. По умолчанию учитываются все процессы в приближении не-ЛТР. Учет отдельных процессов указан с помощью сокращенной записи: ударное возбуждение (ce), ударное девозбуждение (cd), ударная ионизация (ci), фотоионизация (pi).

каналов для эффективного перераспределения энергии.

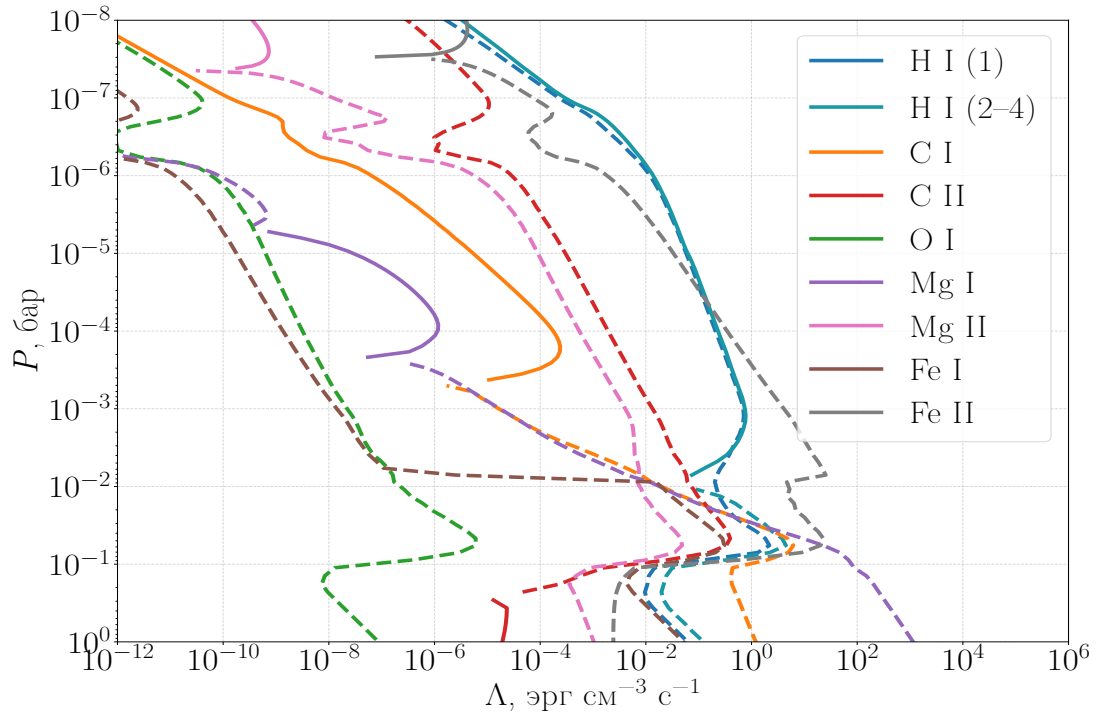


Рисунок 15: Вклад различных элементов в охлаждение и в нагрев (штриховая и сплошная линия, соответственно) атмосферы KELT-9 b. Отдельно учтенные диапазоны уровней указаны в круглых скобках. Для H I используются профили из работы [67].

Анализ вклада отдельных групп уровней Fe II выявил различия в их влиянии на тепловой баланс атмосферы KELT-9 b. Для уровней 1–2 расчеты показали близость к ЛТР при давлениях выше 10^{-5} бар, что следует из их наибольшей населенности. Совокупный вклад уровней 1–30 в охлаждение оказался сопоставимым с полным учетом всех 89 уровней, что указывает на доминирующую роль этой группы в энергетическом балансе. Уровни 31–60 продемонстрировали охлаждение на 2–3 порядка ниже уровней 1–30 во всем исследуемом диапазоне. Для высоколежащих уровней (61–89) наблюдается минимальный вклад в нагрев, тем не менее, превышающий охлаждение при ЛТР для давлений выше 10^{-5} бар. Как показали расчеты, основное охлаждение связано не с отдельными резонансными переходами, а с совокупным действием множества слабых переходов между близко расположенными уровнями. Этот результат принципиально отличается от простых оценок, основанных на рассмотрении лишь нескольких сильных линий.

Полученные результаты позволяют по-новому взглянуть на проблему перегрева железом в атмосферах ультрагорячих юпитеров. В отличие от ранних работ,

предсказывавших доминирующий нагрев за счет Fe II, демонстрируемые расчеты показывают, что в реальных условиях этот ион выступает, напротив, как эффективный охладитель атмосферы, особенно в плотных слоях. Это объясняет наблюдаемые температурные профили и разрешает существовавшие ранее противоречия между модельными предсказаниями и наблюдательными данными.

4.5 Анализ вклада отдельных уровней и отдельных процессов

Исследование теплового баланса атмосферы KELT-9 b потребовало детального анализа вклада отдельных уровней и элементарных процессов, формирующих общую картину энергообмена. Такой подход позволил выявить ключевые механизмы, определяющие термическую структуру атмосферы, и установить их взаимосвязь с наблюдаемыми характеристиками экзопланеты.

Анализ начался с систематизации уровней иона Fe II по их вкладу в процессы нагрева и охлаждения (рис. 12 и 13). Уровни были разделены на три характерные группы по энергии возбуждения: основные (1–30), промежуточные (31–60) и высоколежащие (61–89). Для каждой группы проводился пошаговый анализ с последовательным включением различных физических процессов. Такой методический прием позволил установить, что поведение уровней существенно различается в зависимости от их положения в энергетическом спектре и условий в атмосфере.

Наиболее показательные результаты были получены для группы основных уровней (1–30). В верхних слоях атмосферы ($p < 10^{-7}$ бар) эти уровни демонстрируют повышенные относительно ЛТР населенности (β -факторы от 1 до 100), что связано с эффективным фотовозбуждением резонансными переходами. Однако при переходе в более плотные слои ($p > 10^{-5}$ бар) их вклад резко меняется — фотовозбуждение подавляется эффектом self-shielding, и уровни начинают работать как эффективные каналы охлаждения за счет радиационного излучения. Показателен вклад основного уровня, который во всем диапазоне давлений обеспечивает устойчивое охлаждение за счет ударной ионизации.

Промежуточные уровни (31–60) демонстрируют иное поведение. Их населенности во всех случаях остаются ниже ЛТР ($\beta \approx 0,01–0,5$), что превращает их в стабильные каналы охлаждения. Интересно отметить, что максимальный вклад в охлаждение вносят не отдельные «сильные» уровни, а совокупность многочисленных слабых переходов между близко расположенными состояниями. Этот эффект особенно выражен в области давлений $10^{-7}–10^{-5}$ бар, где формируется

«плато» в профиле охлаждения.

Высоколежащие уровни (61–89) оказались наименее населенными ($\beta < 0,1$), но их совокупный вклад в охлаждение оказался существенным благодаря большому количеству возможных переходов. Особенностью этих уровней стало их «универсальное» поведение — независимо от условий в атмосфере они работают как стабильные каналы охлаждения.

Отдельно был проведен анализ вклада различных физических процессов (рис. 14). Расчеты с последовательным отключением отдельных механизмов показали, что ударные процессы доминируют при $p > 10^{-7}$ бар. При этом, фотовозбуждение существенно только для ограниченной группы уровней в верхних слоях атмосферы, а вклад рекомбинации пренебрежимо мал из-за низкой концентрации Fe III.

Особенно показательным оказалось сравнение с упрощенными моделями, учитывающими только несколько «сильных» переходов. Такие модели систематически завышали вклад нагрева, недооценивая совокупное действие множества слабых переходов. Это объясняет расхождения с предыдущими работами [16] и подчеркивает важность полного учета сложной структуры иона Fe II.

Полученные результаты имеют принципиальное значение для понимания аэрономии ультрагорячих юпитеров. Они показывают, что традиционный подход, основанный на рассмотрении отдельных «важных» линий, может приводить к существенным ошибкам в оценках теплового баланса. Только полный учет сложной системы уровней и переходов позволяет адекватно описать наблюдаемые свойства атмосфер таких экстремальных объектов, как KELT-9 b.

4.6 Сравнение с предыдущими работами

Проведенное исследование позволило разрешить принципиальные противоречия, существовавшие между результатами предыдущих работ по моделированию атмосферы KELT-9 b. Особое значение имело сопоставление с исследованиями, выполненными с использованием кода Cloudy (Cloudy for Exoplanets), где был предсказан доминирующий вклад Fe II в нагрев атмосферы [16]. Расчеты с помощью Astrea, основанные на более детальном подходе, демонстрируют принципиально иную картину.

Ключевое различие между полученными результатами и выводами предыдущих работ заключается в переоценке роли фотовозбуждения. В моделях, основанных на Cloudy, не учитывался в полной мере эффект self-shielding для

резонансных переходов Fe II, что приводило к завышенным оценкам населенностей верхних уровней и, как следствие, к преувеличению вклада фотоионизации в нагрев атмосферы. Проведенные расчеты показывают, что в реальных условиях плотные слои атмосферы эффективно экранируют резонансное излучение, существенно ограничивая процесс фотовозбуждения. Это объясняет, почему в предыдущих работах прогнозировался значительно более сильный нагрев, чем наблюдается в действительности.

Важным аспектом сравнения стало рассмотрение температурных профилей (рис. 16). В работе [16], где Fe II рассматривался как основной источник нагрева, предсказывался более крутой рост температуры с высотой. Модель, полученная с помощью Astrea, в которой Fe II выступает преимущественно как охладитель, дает температурный профиль, лучше соответствующий экспериментальным измерениям. Особенно показательно согласие в области давлений $< 10^{-6}$ бар, где формируются наблюдаемые спектральные особенности.

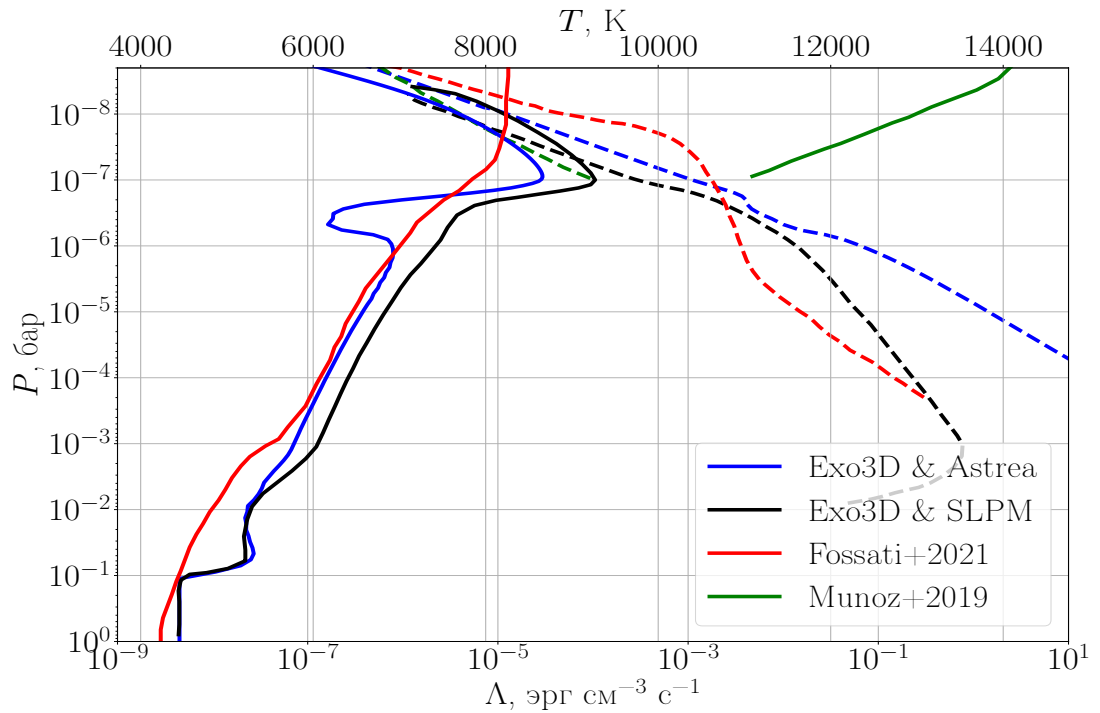


Рисунок 16: Профили температуры KELT-9 b (сплошные линии) и профили полного нагрева от всех смоделированных элементов (штриховые линии). Приводится сравнение с предыдущими работами: черная кривая [67], красная кривая [16], зеленая кривая [63].

Сравнение с моделями, учитывающими только несколько первых уровней Fe II, также оказалось показательным. Такие упрощенные подходы систематически

завышали вклад нагрева, так как не учитывали охлаждающее действие многочисленных слабых переходов между высоколежащими уровнями. Это еще раз подчеркивает важность полного учета сложной структуры иона Fe II для корректного моделирования теплового баланса.

Разрешение этих противоречий имеет принципиальное значение не только для понимания физики KELT-9 b, но и для исследований других ультрагорячих юпитеров. Полученные результаты показывают, что ранее наблюдавшиеся расхождения между моделями и наблюдениями могли быть вызваны именно недостаточно точным учетом роли тяжелых элементов, в частности железа в тепловом балансе атмосфер. Это открывает новые возможности для интерпретации наблюдательных данных и совершенствования моделей атмосфер экзопланет.

4.7 Выводы к главе 4

Разработанная методика, сочетающая трехмерное газодинамическое моделирование с детальным расчетом населенностей уровней в условиях сильного отклонения от ЛТР, продемонстрировала свою эффективность в решении задач экзопланетной аэрономии. Проведенное комплексное исследование роли иона Fe II в аэрономии атмосферы KELT-9 b позволило сделать ряд принципиально важных выводов о роли этого элемента в атмосферах ультрагорячих юпитеров.

Главным результатом работы стало установление доминирующей роли Fe II в процессах охлаждения атмосферы KELT-9 b при давлениях выше 10^{-7} бар. Это заключение, основанное на детальном анализе вклада 89 квантовых уровней иона железа, меняет сложившиеся представления о тепловом балансе ультрагорячих юпитеров. В отличие от предыдущих работ, где Fe II создавал нагрев атмосферы, приведенные расчеты убедительно показывают, что совокупное действие многочисленных слабых переходов между уровнями Fe II приводит к эффективному охлаждению, особенно в плотных слоях.

Полученные результаты имеют фундаментальное значение для развития теорий атмосферной аэрономии и могут быть применены не только к KELT-9 b, но и к другим ультрагорячим юпитерам. Они подчеркивают необходимость пересмотра существующих подходов к моделированию теплового баланса экзопланетных атмосфер, в частности, важность полного учета сложной структуры многоэлектронных ионов. Эти выводы создают основу для более полной интерпретации наблюдательных данных современных и будущих телескопов, что особенно актуально в свете планируемых миссий по исследованию экзопланет,

таких как обсерватория Спектр-УФ.

Глава 5 УСИЛЕНИЕ ПОГЛОЩЕНИЯ ЛИНИЙ ВОДОРОДА В АТМОСФЕРАХ ЭКЗОПЛАНЕТ ПРИ ВСПЫШЕЧНОЙ АКТИВНОСТИ ЗВЕЗД

5.1 Влияние звездных вспышек на спектры поглощения Лайман-альфа и Н-альфа в атмосферах экзопланет

Линия Н-альфа (656,3 нм, переход $n = 2 \leftrightarrow n = 3$ в атоме водорода) формируется преимущественно в нижних слоях атмосфер экзопланет ($1\text{--}1.2 R_p$, где R_p — радиус планеты). Ее интенсивность определяется населенностью уровня $n = 3$, которая формируется преимущественно за счет ударного возбуждения. Основным интерес эта линия представляет в контексте возможности ее обнаружения с поверхности Земли. Однако, она имеет относительно низкую интенсивность (в 10–100 раз меньше Лайман-альфа), что накладывает серьезные ограничения на ее обнаружение — современные наземные телескопы зарегистрировали поглощение для порядка 10 экзопланет (например, HD 189733 b, KELT-9 b, HAT-P-32 b) [56,94].

Линия Лайман-альфа (1216 Å), соответствующая переходу между первым и вторым уровнями атома водорода ($n = 1 \leftrightarrow n = 2$), играет важную роль в исследовании верхних слоев атмосфер экзопланет. Она формируется в разреженных и сильно ионизованных областях, где процессы локального термодинамического равновесия (ЛТР) часто нарушаются из-за низкой плотности и интенсивного ультрафиолетового излучения звезды [67]. При этом, ее сигнал достаточно сильный для обнаружения современными космическими обсерваториями у звезд в радиусе нескольких сотен парсек. Это делает Лайман-альфа уникальным инструментом для диагностики температуры, состава и динамики атмосфер, особенно у горячих юпитеров и планет, подверженных мощному звездному воздействию.

Вспышечная активность звезд может служить мощным инструментом для усиления сигнала Лайман-альфа, так как во время вспышки резко возрастает поток УФ-излучения, что приводит к дополнительному возбуждению и ионизации атомов водорода. Так, например, в атмосферах звезд класса G, вариации населенности $n = 2$ водорода в хромосфере могут превышать 6 % [100]. Предполагается, что в атмосферах экзопланет этот эффект тоже должен быть замечен. Например, известны случаи влияния вспышек на поглощение Лайман-альфа в системе HD 189733 b, где вспышка вызвала изменение поглощения линии на 3 % [101], что подтверждает возможность использования таких событий для улучшения детектируемости линии.

Таким образом, можно предположить, что сигнал от Н-альфа также может быть «усилен» вспышкой. Однако, эта линия не чувствительна к рентгеновскому и

УФ излучению, которое преобладает при вспышках. Для решения данной проблемы предлагается использовать следующий подход: 1) использовать Лайман-альфа для калибровки параметров вспышки и определения временного окна эффективного наблюдения Н-альфа, 2) учитывать каскадные переходы, вызываемые вспышкой, которые косвенно влияют на $n = 3$ и усиливают Н-альфа, 3) по возможности включать вторичные эффекты вспышки (ударные волны, нагрев), которые увеличивают скорости ударных переходов на $n = 3$ [102],

Наблюдения транзитов экзопланет в линии Лайман-альфа выявили значительные поглощения, например, 8–15 % для HD 189733 b [103] и 12 % для HD 209458 b [17]. Поглощение в линии Н-альфа было обнаружено у экзопланет KELT-9 b и HD 189733 b на уровне 0,8–1,1 % [56,94]. Интерпретация этих данных осложняется несколькими факторами. Во-первых, сигнал Лайман-альфа в центре линии поглощается в межзвездной среде. Во-вторых, предположение ЛТР не учитывают фотовозбуждение и фотоионизацию, которые важны для правильного описания населенности уровня $n = 2$ [15].

Также, исследования HD 209458 b продемонстрировали, что вспышки приводят к формированию ударных волн и усилению массопотери атмосферы экзопланеты [102]. Совместный анализ разномасштабных эффектов в перспективе позволит установить временные корреляции между пиком вспышки, появлением ударных волн и изменением населенностей, что даст новую информацию о корональных выбросах плазмы, порождаемых вспышкой.

Известные не-ЛТР коды (Cloudy, PHOENIX) используют квазистационарное приближение для вычисления населенностей, что для динамических процессов (например, вспышек) может быть неприменимым, поскольку становятся важны масштабы быстрее типичных гидродинамических времен (менее часа). Более того, требуется учет вспышек (модификация спектров), которые в большинстве кодов также недоступны. Для демонстрации эффекта «усиления» сигналов в рамках данной работы код Astrea был дополнен динамическим временным шагом и вариабильностью спектров.

Таким образом, анализ Лайман-альфа и Н-альфа в контексте вспышечной активности открывает новые возможности для изучения экзопланетных атмосфер. Комбинирование высокочувствительных наблюдений с точным моделированием не-ЛТР процессов позволяет не только детектировать слабые сигналы, но и получать информацию о физических условиях в верхних слоях атмосфер, их отклике на внешние воздействия.

5.2 Методика моделирования вспышек

Моделирование влияния звездных вспышек на атмосферы экзопланет требует комплексного подхода, учитывающего как параметры самой вспышки, так и особенности взаимодействия ее излучения с атмосферными компонентами.

Рассмотрим способ моделирования вспышек через модуляцию спектра звезды. Спектральное распределение излучения вспышки аппроксимируется степенной зависимостью $F_{\lambda}^f = A(t)\lambda^{-\alpha}$, где α — показатель степени, зависящий от спектрального класса звезды, а $A(t)$ описывает временную эволюцию вспышечного потока. При этом, результирующий спектр складывается из компоненты звезды и вспышки. Временной профиль вспышки задается функцией $A(t) = A_0[\exp(-t/\tau_d) - \exp(-t/\tau_r)]$, где τ_r и τ_d — характерные времена нарастания и спада вспышки соответственно. Энергия вспышки определяется интегралом спектрального профиля вспышки по длине волны и времени. Для различных экзопланетных систем эти параметры существенно различаются, как показано в таблице 3:

Таблица 3: Параметры вспышек для различных систем. Энергии вспышек (10^{30} – 10^{34} эрг) выбраны в соответствии с известными значениями для звезд класса G и A [100,104].

Система	Энергия вспышки, эрг	α	τ_r , с	τ_d , с	Спектральный эталон
HD 209458 b	10^{32}	1,5	60	600	Солнце [104]
HD 189733 b	10^{34}	2	100	1000	HD 85512 [105]
KELT-9 b	10^{30}	1,5	300	3000	Солнце [104]
TRAPPIST-1 c	10^{34}	3	300	3000	GJ 3470 [12]
WASP-12 b	10^{32}	2	100	1000	Солнце [104]
55 Cancri e	10^{32}	2	100	1000	HD 85512 [105]

Входными данными для модели (рис. 17) служат атмосферные профили температуры, плотности и концентрации компонентов, которые могут быть получены как из гидродинамических симуляций (например, с использованием кода ECHO3D), так и в предположении гидростатического равновесия. В данном исследовании главная цель — предложить и проверить методику, поэтому выбран гидростатический подход, аналогичный тому, что был использован в главе 3. Однако следует учитывать,

что это может приводить к снижению точности (например, завышению времени релаксации для планет с сильными атмосферными течениями) по сравнению с гидродинамическими моделями.

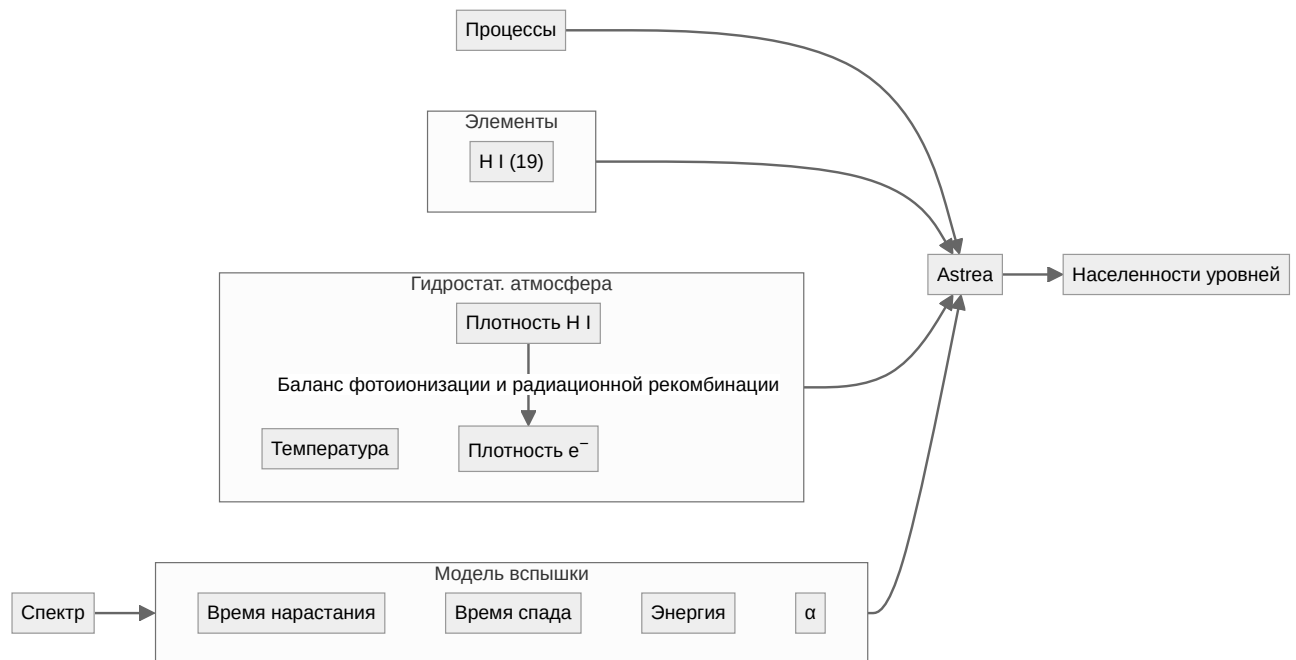


Рисунок 17: Конфигурация вычислений для исследования влияния вспышечной активности звезд на динамику населенностей уровней H I $n = 2$ и $n = 3$, а также на поглощение в линиях Лайман-альфа и H-альфа.

Верификация модели проводилась путем сравнения с наблюдательными данными. Модель воспроизводит известные поглощения в линиях Лайман-альфа и H-альфа для HD 189733 b, HD 209458 b и KELT-9 b. Также согласуются временные масштабы релаксации уровня $n = 2$ в атмосфере HD 209458 b (1–2 часа), что соответствует результатам исследования влияния вспышек на динамические процессы [102]. Это подтверждает адекватность выбранной методики для анализа вспышечно-индуцированных эффектов в экзопланетных атмосферах.

5.3 Результаты и интерпретация

Анализ пространственного распределения показывает, что максимальная концентрация атомов на уровне $n = 2$ достигается на высотах $1,5\text{--}2 R_p$, что обусловлено балансом между фотоионизацией звездным излучением и столкновительными процессами (рис. 18). Для планет с разными параметрами это распределение существенно отличается: в протяженной атмосфере KELT-9 b [16] возбуждение уровня $n = 2$ происходит на больших высотах по сравнению с

атмосферой HD 209458 b.

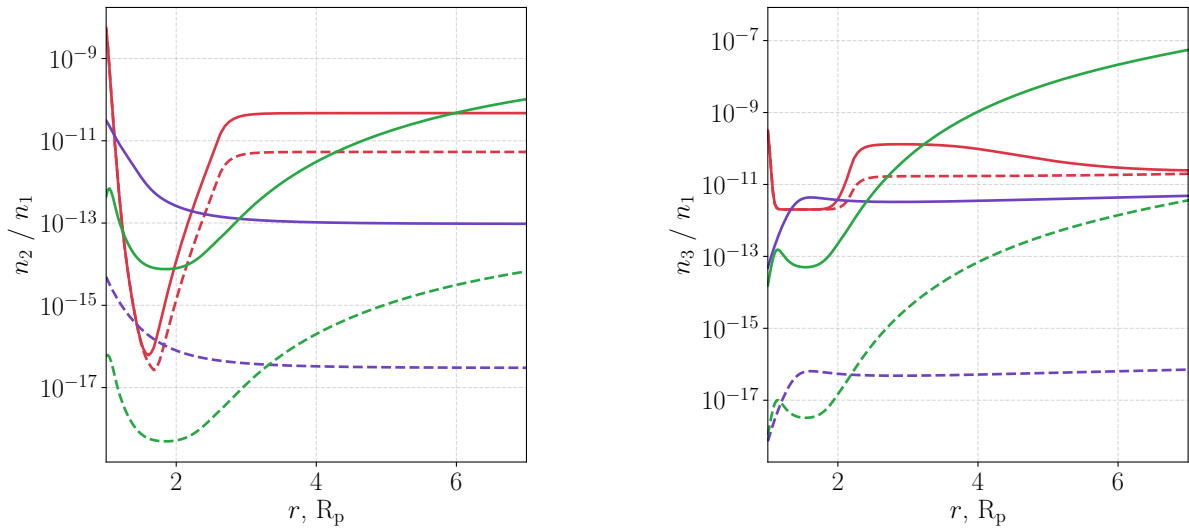


Рисунок 18: Пространственное распределение населенности уровней $n = 2$ и $n = 3$ водорода по высоте в атмосферах экзопланет KELT-9 b ($T = 6000$ K, ■), TRAPPIST-1 c ($T = 500$ K, ■) и HD 209458 b ($T = 3000$ K, ■). Пунктирные линии соответствуют равновесным значениям до вспышки, сплошные — максимальным значениям после вспышки. Максимум достигается на $1,5\text{--}2 R_p$, что обусловлено балансом фотоионизации и столкновений.

Временная динамика изменения населенности уровня $n = 2$ после вспышки позволяет проводить сравнение с другими моделями (например, гидродинамическими), а также, демонстрирует особенности отклика атмосфер на вспышки. Как видно из рис. 19, характерное время релаксации существенно зависит от температуры атмосферы и ее протяженности. В горячих юпитерах типа KELT-9 b ($T = 6000$ K) на высоте $2 R_p$ населенность уровня $n = 2$ возвращается к исходному значению за 13 часов, тогда как в более холодных атмосферах ($T = 500$ K), характерных для планет системы TRAPPIST-1, этот процесс занимает всего 5 часов. Важно отметить, что в компактных атмосферах ($1,3 R_p$) релаксация происходит значительно быстрее — около 1 часа для HD 209458 b, что связано с более высокой частотой столкновительных процессов, и полностью соответствует выводам предыдущих работ о динамических процессах в атмосфере этой планеты при вспышках [102].

Поглощение линий после вспышек (рис. 20) позволяет оценить на сколько вспышка влияет на возможность обнаружения этой линии. Так, для землеподобных планет и суперземель 55 Cancri e и TRAPPIST-1 c наблюдается увеличение

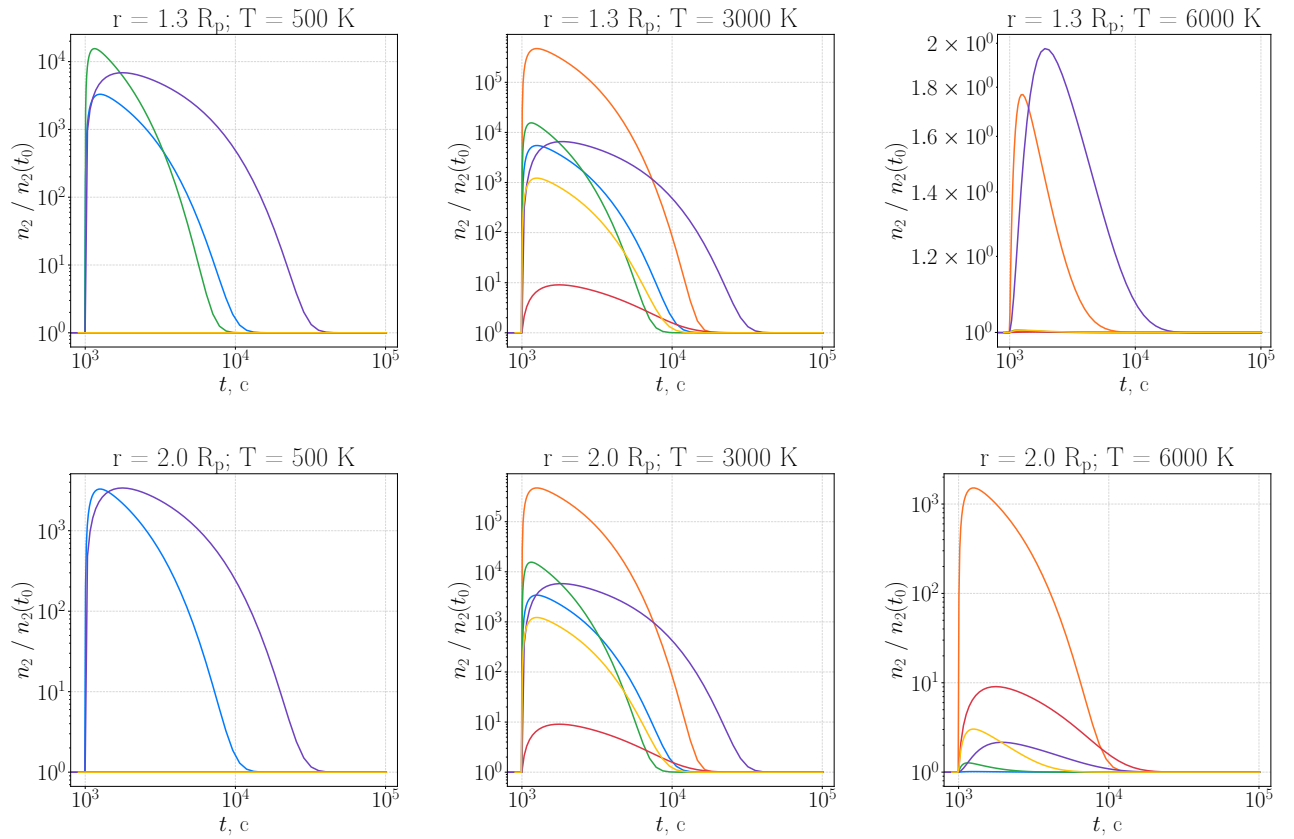


Рисунок 19: Временная эволюция отношения населенности уровня $n = 2$ к исходному значению до вспышки для шести экзопланетных систем при разных температурах ($T = 500 \text{ K}$, 3000 K и 6000 K) на высотах $1,3 R_p$ (характерный верхний слой) и $2 R_p$ (характерный разреженный слой): TRAPPIST-1 c (■), WASP-12 b (■), HD 209458 b (■), 55 Cancri e (■), KELT-9 b (■), HD 189733 b (■).

поглощения на 10–25 %. Для горячего юпитера HD 189733 b поглощение увеличивается на 0,25 %. Это соответствует возможностям детектирования этой линии с помощью современных и будущих наземных телескопов.

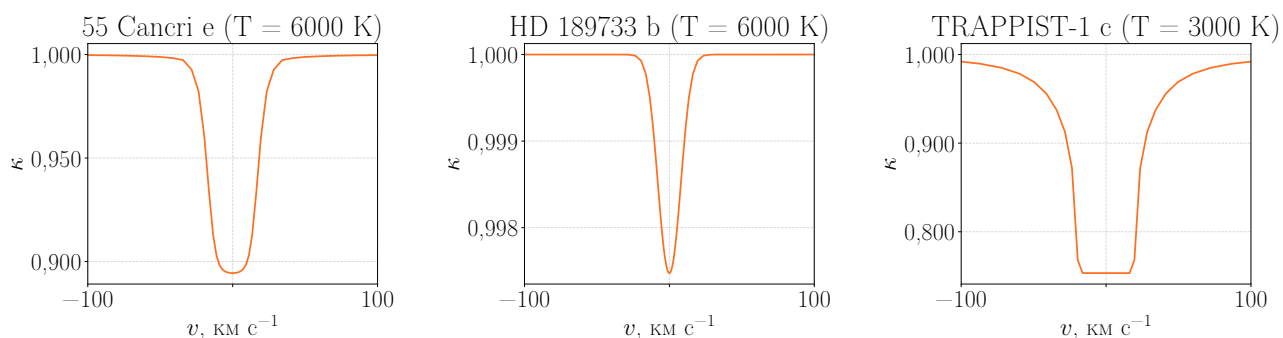


Рисунок 20: Профили поглощения линии Н-альфа в атмосферах экзопланет 55 Cancri e, HD 189733 b и TRAPPIST-1 c после звездной вспышки в зависимости от доплеровской скорости. Профили также демонстрируют увеличение поглощения после вспышки, поскольку до звездной активности поглощение отсутствует. Увеличение температуры атмосферы после вспышки соответствует модельным данным [102].

Полученные результаты имеют важное значение для планирования наблюдательных кампаний. Моделирование показывает, что максимальное усиление сигнала ($> 25\%$) Н-альфа наблюдается в течение 1–3 часов после пика вспышки. Это временное окно является оптимальным для детектирования вспышечно-индуцированных изменений в атмосферах экзопланет.

5.4 Выводы к главе 5

Проведенное исследование демонстрирует значительный потенциал использования звездных вспышек как естественного инструмента усиления сигналов от экзопланетных атмосфер, в частности линии Н-альфа. Разработанная методика моделирования на основе кода Astrea позволила количественно описать пространственно-временную динамику населенности уровней $n = 2$ и $n = 3$ водорода под воздействием вспышечной активности. Полученные результаты согласуются с имеющимися наблюдательными данными для систем KELT-9 b, HD 189733 b и HD 209458 b, подтверждая адекватность применяемого подхода.

Основным научным достижением главы является разработка и апробация методики моделирования вспышечно-индуцированных изменений в атмосферах экзопланет на основе не-ЛТР кинетики. Установлено оптимальное временное

окно наблюдений (1–3 часов после вспышки), определяемое балансом между кинетическими процессами. Поглощение линии Н-альфа при вспышках может меняться до 25 % и выше, что соответствует техническим возможностям современных и будущих наземных и космических обсерваторий. Например, поглощение Н-альфа, вероятно, будет обнаружено с помощью наземных телескопов в атмосферах 55 Cancri e и TRAPPIST-1 c.

Перспективы дальнейших исследований связаны с несколькими направлениями. Во-первых, известно, что вспышки значительно влияют на химический состав, поэтому необходимо расширить модель, включив в рассмотрение молекулярные компоненты атмосфер (H_2O , CO , CH_4), что особенно актуально для планет с умеренными температурами. Во-вторых, представляет интерес разработка самосогласованного подхода, объединяющего не-ЛТР кинетику с трехмерными гидродинамическими моделями, которые позволят более точно определять динамику конкретных систем. Также, важной задачей является создание унифицированной базы параметров вспышек для различных спектральных классов звезд, что позволит применять разработанную методику к более широкому кругу экзопланетных систем.

Заключение

Основные итоги

В настоящей диссертационной работе были разработаны и применены методы кинетики уровней элементов для спектрального исследования физических процессов в атмосферах экзопланет. Основное внимание было уделено моделированию кинетики квантовых переходов в условиях космической плазмы, а также изучению влияния радиационных и ударных процессов на тепловой баланс экзопланетных атмосфер. Результаты работы направлены на решение ключевых задач современной экзопланетной науки — в частности, на разработку более совершенных моделей атмосфер, учитывающих принципиально новые каналы энергетического обмена, и более точно интерпретирующих данные транзитных наблюдений. Это позволяет расширить диагностику элементов, важных для поиска биомаркеров (таких как молекулярный кислород), новыми спектральными линиями поглощения.

Одним из основных результатов диссертации является создание новой вычислительной программы *Astrea* для моделирования населенностей квантовых уровней в условиях неравновесной плазмы. Программа принимает на вход пространственные распределения плотностей химических элементов, электронов и протонов, а также температуру среды, которые могут быть получены методами гидродинамического или гидростатического моделирования. На выходе рассчитываются неравновесные населенности квантовых уровней, которые далее могут быть использованы для синтеза спектра поглощения излучения атмосферы, а также для определения процессов нагрева и охлаждения, что значительно расширяет возможности интерпретации наблюдаемых спектров экзопланет.

В рамках работы были также разработаны вспомогательные вычислительные модули для построения трехмерных гидростатических моделей атмосфер экзопланет, синтеза спектральных профилей, расчета термодинамических характеристик атмосферы, и моделирования звездных вспышек. Совокупность этих инструментов позволила провести комплексные исследования, сочетающие расчет физических параметров атмосферы с их спектроскопическим проявлением, что является важным шагом для интерпретации наблюдательных данных.

Первый научный результат работы связан с определением температурных ограничений, при которых возможно детектирование кислорода в атмосферах экзопланет по линиям 130,4 нм и 777,4 нм. В результате расчетов установлено, что

соотношение интенсивностей этих линий является чувствительным индикатором температуры атмосферных слоев. Было показано, что при определенных температурных условиях кислородные линии могут служить надежными диагностическими признаками наличия кислорода. Эти результаты дают количественные рекомендации для целенаправленного поиска экзопланет с содержанием кислорода в атмосфере на основе ультрафиолетовых и инфракрасных спектральных наблюдений.

Второй научный результат работы заключается в исследовании влияния переходов Fe II на тепловой баланс атмосферы ультрагорячих юпитеров на примере KELT-9 b. Расчеты показали, что учет возбужденных уровней Fe II и соответствующих радиационных процессов заставляет существенно пересмотреть, по сравнению с предыдущими подобными исследованиями, оценку нагрева и охлаждения атмосферы. Анализ отдельных физических процессов продемонстрировал, что некоторые ранее недостаточно учтенные механизмы охлаждения, связанные с линиями Fe II, могут эффективно компенсировать избыточный нагрев, предсказанный прежними моделями. Таким образом, удалось показать, что нет аномальной исключительности элемента Fe II. Не смотря на количественные отличия, его роль такова же, как и других металлов, например Mg — охлаждение за счет ударного возбуждения уровней и переизлучения. Отличие состоит в эффективности охлаждающего эффекта ионом Fe II, за счет его уникальной структуры уровней.

Третий научный результат связан с разработкой методики по прогнозированию усиления наблюдаемых сигналов от экзопланетных атмосфер вследствие звездных вспышек на примере линий Лайман-альфа и H-альфа. Предложенный подход также позволяет получать дополнительную информацию о физических процессах в верхних слоях атмосфер и планировать наблюдения экзопланет у звезд с высокой активностью.

Разработанные в ходе работы методы и программные инструменты обладают широкой применимостью. Они могут быть использованы не только для исследования рассмотренных линий и теплового баланса конкретных экзопланет, но и для более общего анализа физических процессов в атмосферах самых различных типов планет за пределами Солнечной системы, а также, для космической плазмы в целом. Это делает предложенный подход перспективным инструментом для будущих миссий, направленных на изучение экзопланет транзитными методами и методами прямой спектроскопии.

Важно отметить, что примененный в работе подход сочетает реалистичное

описание физических условий в атмосфере с точным учетом микроскопических процессов квантовых систем. В отличие от широко распространенных моделей локального термодинамического равновесия (ЛТР), в разработанных моделях учитывается нарушение равновесия вследствие радиационных и столкновительных процессов. Это обеспечивает более достоверное моделирование спектров излучения и позволяет выявлять важные физические эффекты, которые остаются незамеченными в рамках упрощенных моделей.

Кроме того, расчеты показали, что влияние определенных переходов металлов, в частности Fe II, может быть критическим для энергетического баланса горячих экзопланетных атмосфер. Этот вывод подчеркивает необходимость точного моделирования атомных процессов и их применения в спектральных расчетах.

На основании полученных результатов можно сделать вывод, что учет тонких спектроскопических эффектов и точных атомных процессов является неотъемлемым элементом при построении реалистичных моделей экзопланетных атмосфер. Без их учета могут возникать существенные ошибки как в определении физических параметров атмосферы, так и в интерпретации наблюдательных данных.

Полученные в работе результаты создают основу для проведения более точных и физически адекватных исследований в области спектроскопии экзопланетных атмосфер. Разработанные методы могут быть использованы для анализа новых наблюдательных данных, полученных с использованием современных и перспективных космических телескопов, таких как James Webb Space Telescope (JWST), а также для подготовки к миссиям следующего поколения, таким как Спектр-УФ.

Список использованных источников

1. Mayor M., Queloz D. [A jupiter-mass companion to a solar-type star](#) // Nature. Springer Science; Business Media LLC, 1995. Vol. 378, № 6555. P. 355–359.
2. Akeson R.L., Chen X., Ciardi D., Crane M., Good J., Harbut M., Jackson E., Kane S.R., Laity A.C., Leifer S., Lynn M., McElroy D.L., Papin M., Plavchan P., Ramírez S.V., Rey R., Braun K. von, Wittman M., Abajian M., Ali B., Beichman C., Beekley A., Berriman G.B., Berukoff S., Bryden G., Chan B., Groom S., Lau C., Payne A.N., Regelson M., Saucedo M., Schmitz M., Stauffer J., Wyatt P., Zhang A. [The NASA exoplanet archive: Data and tools for exoplanet research](#) // Publications of the Astronomical Society of the Pacific. IOP Publishing, 2013. Vol. 125, № 930. P. 989–999.
3. Cassan A., Kubas D., Beaulieu J.-P., Dominik M., Horne K., Greenhill J., Wambsganss J., Menzies J., Williams A., Jørgensen U.G., Udalski A., Bennett D.P., Albrow M.D., Batista V., Brilant S., Caldwell J.A.R., Cole A., Coutures Ch., Cook K.H., Dieters S., Prester D.D., Donatowicz J., Fouqué P., Hill K., Kains N., Kane S., Marquette J.-B., Martin R., Pollard K.R., Sahu K.C., Vinter C., Warren D., Watson B., Zub M., Sumi T., Szymański M.K., Kubiak M., Poleski R., Soszynski I., Ulaczyk K., Pietrzyński G., Wyrzykowski Ł. [One or more bound planets per milky way star from microlensing observations](#) // Nature. Springer Science; Business Media LLC, 2012. Vol. 481, № 7380. P. 167–169.
4. Kurucz R.L. Model atmospheres for g, f, a, b, and o stars // Astrophysical Journal Supplement Series, vol. 40, May 1979, p. 1-340. 1979. Vol. 40. P. 1–340.
5. Mihalas D. Stellar atmospheres // San Francisco: WH Freeman. 1978. P. 632.
6. Charbonneau D., Brown T.M., Noyes R.W., Gilliland R.L. [Detection of an extrasolar planet atmosphere](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2002. Vol. 568, № 1. P. 377–384.
7. Fortney J.J., Lodders K., Marley M.S., Freedman R.S. [A unified theory for the atmospheres of the hot and very hot jupiters: Two classes of irradiated atmospheres](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2008. Vol. 678, № 2. P. 1419–1435.

8. Showman A.P., Fortney J.J., Lian Y., Marley M.S., Freedman R.S., Knutson H.A., Charbonneau D. [ATMOSPHERIC CIRCULATION OF HOT JUPITERS: COUPLED RADIATIVE-DYNAMICAL GENERAL CIRCULATION MODEL SIMULATIONS OF HD 189733b and HD 209458b](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2009. Vol. 699, № 1. P. 564–584.
9. Shaikhislamov I.F., Khodachenko M.L., Lammer H., Berezutsky A.G., Miroshnichenko I.B., Rumenskikh M.S. [3D modeling of absorption by various species for hot jupiter HD209458b](#) // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. Oxford University Press (OUP), 2019.
10. Carlsson M., Stein R.F. [Chromospheric dynamics — what can be learnt from numerical simulations](#) // Solar and heliospheric plasma physics. Springer Berlin Heidelberg, 1997. P. 159–178.
11. Kulow J.R., France K., Linsky J., Parke Loyd R.O. [LY \$\alpha\$ TRANSIT SPECTROSCOPY AND THE NEUTRAL HYDROGEN TAIL OF THE HOT NEPTUNE GJ 436b](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2014. Vol. 786, № 2. P. 132.
12. Bourrier V., Lecavelier des Etangs A., Ehrenreich D., Sanz-Forcada J., Allart R., Ballester G.E., Buchhave L.A., Cohen O., Deming D., Evans T.M., García Muñoz A., Henry G.W., Kataria T., Lavvas P., Lewis N., López-Morales M., Marley M., Sing D.K., Wakeford H.R. [Hubble PanCET: An extended upper atmosphere of neutral hydrogen around the warm neptune GJ 3470b](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2018. Vol. 620. P. A147.
13. Oklopčić A., Hirata C.M. [A new window into escaping exoplanet atmospheres: 10830 Å line of helium](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2018. Vol. 855, № 1. P. L11.
14. Lampón M., López-Puertas M., Lara L.M., Sánchez-López A., Salz M., Czesla S., Sanz-Forcada J., Molaverdikhani K., Alonso-Floriano F.J., Nortmann L., Caballero J.A., Bauer F.F., Pallé E., Montes D., Quirrenbach A., Nagel E., Ribas I., Reiniers A., Amado P.J. [Modelling the he i triplet absorption at 10 830 Å in the atmosphere of HD 209458 b](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2020. Vol. 636. P. A13.
15. Borsa F., Fossati L., Koskinen T., Young M.E., Shulyak D. [High-resolution detection of neutral oxygen and non-LTE effects in the atmosphere of KELT-9b](#) // Nature Astronomy. Springer Science; Business Media LLC, 2021. Vol. 6, № 2. P. 226–231.

16. Fossati L., Young M.E., Shulyak D., Koskinen T., Huang C., Cubillos P.E., France K., Sreejith A.G. [Non-local thermodynamic equilibrium effects determine the upper atmospheric temperature structure of the ultra-hot jupiter KELT-9b](#) // *Astronomy & Astrophysics*. EDP Sciences, 2021. Vol. 653. P. A52.
17. Vidal-Madjar A., Dsert J.-M., Etangs A.L. des, Hbrard G., Ballester G.E., Ehrenreich D., Ferlet R., McConnell J.C., Mayor M., Parkinson C.D. [Detection of oxygen and carbon in the hydrodynamically escaping atmosphere of the extrasolar planet HD 209458b](#) // *The Astrophysical Journal*. American Astronomical Society, 2004. Vol. 604, № 1. P. L69–L72.
18. Linsky J.L., Yang H., France K., Froning C.S., Green J.C., Stocke J.T., Osterman S.N. [OBSERVATIONS OF MASS LOSS FROM THE TRANSITING EXOPLANET HD 209458b](#) // *The Astrophysical Journal*. American Astronomical Society, 2010. Vol. 717, № 2. P. 1291–1299.
19. Hauschildt P.H., Baron E. [Numerical solution of the expanding stellar atmosphere problem](#) // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. Elsevier BV, 1999. Vol. 109, № 1–2. P. 41–63.
20. Malik M., Grosheintz L., Mendonça J.M., Grimm S.L., Lavie B., Kitzmann D., Tsai S.-M., Burrows A., Kreidberg L., Bedell M., Bean J.L., Stevenson K.B., Heng K. [HELIOS: AN OPEN-SOURCE, GPU-ACCELERATED RADIATIVE TRANSFER CODE FOR SELF-CONSISTENT EXOPLANETARY ATMOSPHERES](#) // *The Astronomical Journal*. American Astronomical Society, 2017. Vol. 153, № 2. P. 56.
21. Wakeford H.R., Sing D.K., Deming D., Lewis N.K., Goyal J., Wilson T.J., Barstow J., Kataria T., Drummond B., Evans T.M., Carter A.L., Nikolov N., Knutson H.A., Ballester G.E., Mandell A.M. [The complete transmission spectrum of WASP-39b with a precise water constraint](#) // *The Astronomical Journal*. American Astronomical Society, 2017. Vol. 155, № 1. P. 29.
22. McCullough P.R., Crouzet N., Deming D., Madhusudhan N. [WATER VAPOR IN THE SPECTRUM OF THE EXTRASOLAR PLANET HD 189733b. I. THE TRANSIT](#) // *The Astrophysical Journal*. American Astronomical Society, 2014. Vol. 791, № 1. P. 55.
23. Kok R.J. de, Brogi M., Snellen I.A.G., Birkby J., Albrecht S., Mooij E.J.W. de. [Detection of carbon monoxide in the high-resolution day-side spectrum of the exoplanet HD 189733b](#) // *Astronomy & Astrophysics*. EDP Sciences, 2013. Vol. 554. P. A82.

24. Shaikhislamov I.F., Golubovsky M.P., Shepelin A.V., Miroshnichenko I.B., Sharipov S.S., Rumenskikh M.S., Berezutsky A.G., Chibrarov A.A., Khodachenko M.L. [Kinetic simulation of ultra-hot jupiter KELT-9b](#) // Solar System Research. Pleiades Publishing Ltd, 2025. Vol. 59, № 3. P. 23.
25. Sitnova T.M., Mashonkina L.I., Ryabchikova T.A. [Influence of departures from LTE on oxygen abundance determination in the atmospheres of a-k stars](#) // Astronomy Letters. Pleiades Publishing Ltd, 2013. Vol. 39, № 2. P. 126–140.
26. Mashonkina L.I., Sitnova T.N., Pakhomov Yu.V. [Influence of departures from LTE on calcium, titanium, and iron abundance determinations in cool giants of different metallicities](#) // Astronomy Letters. Pleiades Publishing Ltd, 2016. Vol. 42, № 9. P. 606–615.
27. Amarsi A.M., Asplund M., Collet R., Leenaarts J. [Non-LTE oxygen line formation in 3D hydrodynamic model stellar atmospheres](#) // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. Oxford University Press (OUP), 2015. Vol. 455, № 4. P. 3735–3751.
28. Mansfield M., Bean J.L., Stevenson K.B., Komacek T.D., Bell T.J., Tan X., Malik M., Beatty T.G., Wong I., Cowan N.B., Dang L., Désert J.-M., Fortney J.J., Gaudi B.S., Keating D., Kempton E.M.-R., Kreidberg L., Line M.R., Parmentier V., Stassun K.G., Swain M.R., Zellem R.T. [Evidence for H₂ dissociation and recombination heat transport in the atmosphere of KELT-9b](#) // The Astrophysical Journal Letters. American Astronomical Society, 2020. Vol. 888, № 2. P. L15.
29. Wong I., Shporer A., Kitzmann D., Morris B.M., Heng K., Hoeijmakers H.J., Demory B.-O., Ahlers J.P., Mansfield M., Bean J.L., Daylan T., Fetherolf T., Rodriguez J.E., Benneke B., Ricker G.R., Latham D.W., Vanderspek R., Seager S., Winn J.N., Jenkins J.M., Burke C.J., Christiansen J.L., Essack Z., Rose M.E., Smith J.C., Tenenbaum P., Yahalomi D. [Exploring the atmospheric dynamics of the extreme ultrahot jupiter KELT-9b using TESS photometry](#) // The Astronomical Journal. American Astronomical Society, 2020. Vol. 160, № 2. P. 88.
30. Landi E., Dere K.P., Young P.R., Zanna G.D., Mason H.E. [CHIANTI: An atomic database for astrophysical plasmas](#) // Fusion Science and Technology. Informa UK Limited, 2013. Vol. 63, № 3. P. 324–332.
31. Ferland G. HAZY, a brief introduction to CLOUDY 84 // The Ohio State University Internal Report. 1990.

32. Kurucz R.L. ATLAS: A computer program for calculating model stellar atmospheres // SAO Special Report# 309 (1970). 1970. Vol. 309.
33. Hubeny I., Lanz T. [A brief introductory guide to TLUSTY and SYNSPEC](#). 2017.
34. Carlsson M. A computer program for solving multi-level non-LTE radiative transfer problems in moving or static atmospheres. Springer, 1986.
35. Uitenbroek H. [Multilevel radiative transfer with partial frequency redistribution](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2001. Vol. 557, № 1. P. 389–398.
36. Pereira T.M.D., Uitenbroek H. [RH 1.5D: A massively parallel code for multi-level radiative transfer with partial frequency redistribution and zeeman polarisation](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2015. Vol. 574. P. A3.
37. Tagirov R.V., Shapiro A.I., Schmutz W. [NESSY: NLTE spectral synthesis code for solar and stellar atmospheres](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2017. Vol. 603. P. A27.
38. Husser T.-O., Wende-von Berg S., Dreizler S., Homeier D., Reiners A., Barman T., Hauschildt P.H. [A new extensive library of PHOENIX stellar atmospheres and synthetic spectra](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2013. Vol. 553. P. A6.
39. Kerzendorf W.E., Sim S.A. [A spectral synthesis code for rapid modelling of supernovae](#) // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. Oxford University Press (OUP), 2014. Vol. 440, № 1. P. 387–404.
40. Hillier D.J., Lanz T. CMFGEN: A non-LTE line-blanketed radiative transfer code for modeling hot stars with stellar winds // Spectroscopic challenges of photoionized plasmas. 2001. Vol. 247. P. 343.
41. JUSTUS C. [A mars global reference atmospheric model \(MARS-GRAM\) for mission planning and analysis](#) // 28th aerospace sciences meeting. American Institute of Aeronautics; Astronautics, 1990.
42. Goyal J.M., Mayne N., Sing D.K., Drummond B., Tremblin P., Amundsen D.S., Evans T., Carter A.L., Spake J., Baraffe I., Nikolov N., Manners J., Chabrier G., Hebrard E. [A library of ATMO forward model transmission spectra for hot jupiter exoplanets](#) // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. Oxford University Press (OUP), 2017. Vol. 474, № 4. P. 5158–5185.

43. Kempton E.M.-R., Lupu R., Owusu-Asare A., Slough P., Cale B. [Exo-transmit: An open-source code for calculating transmission spectra for exoplanet atmospheres of varied composition](#) // Publications of the Astronomical Society of the Pacific. IOP Publishing, 2017. Vol. 129, № 974. P. 044402.
44. Baudino J.-L., Bézard B., Charnay B., Doriann B. Exo-REM: 1D self-consistent radiative-equilibrium model for exoplanetary atmospheres // Astrophysics Source Code Library. 2024. P. ascl–2410.
45. Zhang M., Chachan Y., Kempton E.M.-R., Knutson H.A. [Forward modeling and retrievals with PLATON, a fast open-source tool](#) // Publications of the Astronomical Society of the Pacific. IOP Publishing, 2019. Vol. 131, № 997. P. 034501.
46. Asensio Ramos A., Elitzur M. [MOLPOP-CEP: An exact, fast code for multi-level systems](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2018. Vol. 616. P. A131.
47. Tak F.F.S. van der, Black J.H., Schöier F.L., Jansen D.J., Dishoeck E.F. van. [A computer program for fast non-LTE analysis of interstellar line spectra: With diagnostic plots to interpret observed line intensity ratios](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2007. Vol. 468, № 2. P. 627–635.
48. Madhusudhan N., Lee K.K.M., Mousis O. [A POSSIBLE CARBON-RICH INTERIOR IN SUPER-EARTH 55 cancri e](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2012. Vol. 759, № 2. P. L40.
49. Brogi M. [Oxygen as atmospheric thermometer](#) // Nature Astronomy. Springer Science; Business Media LLC, 2022. Vol. 6, № 2. P. 182–183.
50. Petigura E.A., Marcy G.W. [CARBON AND OXYGEN IN NEARBY STARS: KEYS TO PROTOPLANETARY DISK CHEMISTRY](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2011. Vol. 735, № 1. P. 41.
51. Nissen P.E., Chen Y.Q., Carigi L., Schuster W.J., Zhao G. [Carbon and oxygen abundances in stellar populations](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2014. Vol. 568. P. A25.
52. Tinsley B.M. [Stellar lifetimes and abundance ratios in chemical evolution](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 1979. Vol. 229. P. 1046.
53. McWilliam A. [ABUNDANCE RATIOS AND GALACTIC CHEMICAL EVOLUTION](#) // Annual Review of Astronomy and Astrophysics. Annual Reviews, 1997. Vol. 35, № 1. P. 503–556.

54. Ben-Jaffel L., Hosseini S.S. [ON THE EXISTENCE OF ENERGETIC ATOMS IN THE UPPER ATMOSPHERE OF EXOPLANET HD209458b](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2010. Vol. 709, № 2. P. 1284–1296.
55. Ben-Jaffel L., Ballester G.E. [HubbleSpace telescope detection of oxygen in the atmosphere of exoplanet HD 189733b](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2013. Vol. 553. P. A52.
56. Huang C. , Arras P., Christie D., Li Z.-Y. [A model of the h \$\alpha\$ and na transmission spectrum of HD 189733b](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2017. Vol. 851, № 2. P. 150.
57. Shaikhislamov I.F., Khodachenko M.L., Sasunov Yu.L., Lammer H., Kislyakova K.G., Erkaev N.V. [ATMOSPHERE EXPANSION AND MASS LOSS OF CLOSE-ORBIT GIANT EXOPLANETS HEATED BY STELLAR XUV. I. MODELING OF HYDRODYNAMIC ESCAPE OF UPPER ATMOSPHERIC MATERIAL](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2014. Vol. 795, № 2. P. 132.
58. Khodachenko M.L., Shaikhislamov I.F., Lammer H., Prokopov P.A. [ATMOSPHERE EXPANSION AND MASS LOSS OF CLOSE-ORBIT GIANT EXOPLANETS HEATED BY STELLAR XUV. II. EFFECTS OF PLANETARY MAGNETIC FIELD; STRUCTURING OF INNER MAGNETOSPHERE](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2015. Vol. 813, № 1. P. 50.
59. Shaikhislamov I.F., Khodachenko M.L., Lammer H., Kislyakova K.G., Fossati L., Johnstone C.P., Prokopov P.A., Berezutsky A.G., Zakharov Yu.P., Posukh V.G. [TWO REGIMES OF INTERACTION OF a HOT JUPITER's ESCAPING ATMOSPHERE WITH THE STELLAR WIND AND GENERATION OF ENERGIZED ATOMIC HYDROGEN CORONA](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2016. Vol. 832, № 2. P. 173.
60. Shaikhislamov I.F., Khodachenko M.L., Lammer H., Fossati L., Dwivedi N., Güdel M., Kislyakova K.G., Johnstone C.P., Berezutsky A.G., Miroshnichenko I.B., Posukh V.G., Erkaev N.V., Ivanov V.A. [Modeling of absorption by heavy minor species for the hot jupiter HD 209458b](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2018. Vol. 866, № 1. P. 47.
61. Shaikhislamov I.F., Khodachenko M.L., Lammer H., Berezutsky A.G., Miroshnichenko I.B., Rumenskikh M.S. [Global 3D hydrodynamic modeling of absorption in ly \$\alpha\$ and he 10830 a lines at transits of GJ3470b](#) // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. Oxford University Press (OUP), 2020.

62. Шепелин А.В. [Программный комплекс для спектральной диагностики атмосфер экзопланет «астрея: экзопланеты»](#). прогр. для ЭВМ, RU2025684208, зарег. 11.09.2025; правообладатель Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт лазерной физики Сибирского отделения Российской академии наук.
63. García Muñoz A., Schneider P.C. [Rapid escape of ultra-hot exoplanet atmospheres driven by hydrogen balmer absorption](#) // The Astrophysical Journal Letters. American Astronomical Society, 2019. Vol. 884, № 2. P. L43.
64. Trammell G.B., Arras P., Li Z.-Y. [HOT JUPITER MAGNETOSPHERES](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2011. Vol. 728, № 2. P. 152.
65. Field G.B., Steigman G. Charge transfer and ionization equilibrium in the interstellar medium // Astrophysical Journal. 1971. Vol. 166. P. 59.
66. Kramida A., Ralchenko Y., Reader J. Team NIST atomic spectra database (version 5.3) // National Institute of Standards and Technology: Gaithersburg, MD. 2018.
67. Shaikhislamov I.F., Miroshnichenko I.B., Sharipov S.S., Rumenskikh M.S., Golubovsky M.P., Berezutsky A.G., Shepelin A.V., Chibrarov A.A., Khodachenko M.L. [Aeronomy of the upper atmosphere of KELT-9 b](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2025. Vol. 696. P. A211.
68. Regemorter H. van. [Rate of collisional excitation in stellar atmospheres](#). // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 1962. Vol. 136. P. 906.
69. VORONOV G.S. [A PRACTICAL FIT FORMULA FOR IONIZATION RATE COEFFICIENTS OF ATOMS AND IONS BY ELECTRON IMPACT: \$z=1-28\$](#) // Atomic Data and Nuclear Data Tables. Elsevier BV, 1997. Vol. 65, № 1. P. 1–35.
70. Verner D.A., Ferland G.J., Korista K.T., Yakovlev D.G. [Atomic data for astrophysics. II. New analytic FITS for photoionization cross sections of atoms and ions](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 1996. Vol. 465. P. 487.
71. Burgess A. [Dielectronic recombination in the corona](#) // Symposium - International Astronomical Union. Cambridge University Press (CUP), 1965. Vol. 23. P. 95–99.
72. Badnell N.R. [Radiative recombination data for modeling dynamic finite-density plasmas](#) // The Astrophysical Journal Supplement Series. American Astronomical Society, 2006. Vol. 167, № 2. P. 334–342.
73. Hummer D.G., Storey P.J. [Recombination-line intensities for hydrogenic ions - i. Case b calculations for h i and he II](#) // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. Oxford University Press (OUP), 1987. Vol. 224, № 3. P. 801–820.

74. Kurucz R.L. [Atomic data for interpreting stellar spectra: Isotopic and hyperfine data](#) // *Physica Scripta*. IOP Publishing, 1993. Vol. T47. P. 110–117.
75. Seaton M.J. [The opacity project](#) // AIP conference proceedings. AIP, 1995. Vol. 322. P. 117–128.
76. Hummer D., Berrington K., Eissner W., Pradhan A.K., Saraph H., Tully J. Atomic data from the IRON project. 1: Goals and methods // *Astronomy and Astrophysics* (ISSN 0004-6361), vol. 279, no. 1, p. 298-309. 1993. Vol. 279. P. 298–309.
77. Zhang H., Pradhan A. Atomic data from the iron project. VI. Collision strengths and rate coefficients for Fe II. // *Astronomy and Astrophysics*, Vol. 293, p. 953-966 (1995). 1995. Vol. 293. P. 953–966.
78. Cunto W., Mendoza C. The opacity project-the topbase atomic database // *Revista Mexicana de Astronomia y Astrofisica*, 23,. 1992. Vol. 23.
79. Mashonkina L., Zhao G., Gehren T., Aoki W., Bergemann M., Noguchi K., Shi J.R., Takada-Hidai M., Zhang H.W. [Non-LTE line formation for heavy elements in four very metal-poor stars](#) // *Astronomy & Astrophysics*. EDP Sciences, 2007. Vol. 478, № 2. P. 529–541.
80. Mashonkina L., Gehren T., Shi J.-R., Korn A.J., Grupp F. [A non-LTE study of neutral and singly-ionized iron line spectra in 1D models of the sun and selected late-type stars](#) // *Astronomy & Astrophysics*. EDP Sciences, 2011. Vol. 528. P. A87.
81. Mashonkina L.I., Ryabchikova T.A. [Non-LTE nitrogen abundances in the sun and selected a–f-type stars](#) // *Astronomy Letters*. Pleiades Publishing Ltd, 2024. Vol. 50, № 6. P. 390–407.
82. Alexeeva S.A., Mashonkina L.I. [Carbon abundances of reference late-type stars from 1D analysis of atomic C I and molecular CH lines](#) // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. Oxford University Press (OUP), 2015. Vol. 453, № 2. P. 1619–1631.
83. Alexeeva S., Ryabchikova T., Mashonkina L., Hu S. [NLTE line formation for Mg I and Mg II in the atmospheres of B–A–F–G–K stars](#) // *The Astrophysical Journal*. American Astronomical Society, 2018. Vol. 866, № 2. P. 153.
84. Sitnova T.M., Mashonkina L.I. [Influence of inelastic collisions with hydrogen atoms on non-LTE oxygen abundance determinations](#) // *Astronomy Letters*. Pleiades Publishing Ltd, 2018. Vol. 44, № 6. P. 411–419.

85. Nakayama A., Ikoma M., Terada N. [Survival of terrestrial N₂–O₂ atmospheres in violent XUV environments through efficient atomic line radiative cooling](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2022. Vol. 937, № 2. P. 72.
86. Piskunov N., Kupka F., Ryabchikova T., Weiss W., Jeffery C. VALD: The vienna atomic line data base. // Astronomy and Astrophysics Supplement, v. 112, p. 525. 1995. Vol. 112. P. 525.
87. Zaghloul M.R., Ali A.N. [Algorithm 916: Computing the faddeyeva and voigt functions](#) // ACM Transactions on Mathematical Software. Association for Computing Machinery (ACM), 2011. Vol. 38, № 2. P. 1–22.
88. Tasitsiomi A. [Ly \$\alpha\$ radiative transfer in cosmological simulations and application to az 8 ly \$\alpha\$ emitter](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2006. Vol. 645, № 2. P. 792–813.
89. Khodachenko M.L., Shaikhislamov I.F., Lammer H., Kislyakova K.G., Fossati L., Johnstone C.P., Arkhypov O.V., Berezutsky A.G., Miroshnichenko I.B., Posukh V.G. [Ly \$\alpha\$ absorption at transits of HD 209458b: A comparative study of various mechanisms under different conditions](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2017. Vol. 847, № 2. P. 126.
90. Gnat O., Ferland G.J. [ION-BY-ION COOLING EFFICIENCIES](#) // The Astrophysical Journal Supplement Series. American Astronomical Society, 2012. Vol. 199, № 1. P. 20.
91. Schneider J., Dedieu C., Le Sidaner P., Savalle R., Zolotukhin I. [Defining and cataloging exoplanets: The exoplanet.eu database](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2011. Vol. 532. P. A79.

92. Gaudi B.S., Stassun K.G., Collins K.A., Beatty T.G., Zhou G., Latham D.W., Bieryla A., Eastman J.D., Siverd R.J., Crepp J.R., Gonzales E.J., Stevens D.J., Buchhave L.A., Pepper J., Johnson M.C., Colon K.D., Jensen E.L.N., Rodriguez J.E., Bozza V., Novati S.C., D'Ago G., Dumont M.T., Ellis T., Gaillard C., Jang-Condell H., Kasper D.H., Fukui A., Gregorio J., Ito A., Kielkopf J.F., Manner M., Matt K., Narita N., Oberst T.E., Reed P.A., Scarpetta G., Stephens D.C., Yeigh R.R., Zambelli R., Fulton B.J., Howard A.W., James D.J., Penny M., Bayliss D., Curtis I.A., DePoy D.L., Esquerdo G.A., Gould A., Joner M.D., Kuhn R.B., Labadie-Bartz J., Lund M.B., Marshall J.L., McLeod K.K., Pogge R.W., Relles H., Stockdale C., Tan T.G., Trueblood M., Trueblood P. [A giant planet undergoing extreme-ultraviolet irradiation by its hot massive-star host](#) // Nature. Springer Science; Business Media LLC, 2017. Vol. 546, № 7659. P. 514–518.
93. Yan F., Henning T. [An extended hydrogen envelope of the extremely hot giant exoplanet KELT-9b](#) // Nature Astronomy. Springer Science; Business Media LLC, 2018. Vol. 2, № 9. P. 714–718.
94. Cauley P.W., Shkolnik E.L., Ilyin I., Strassmeier K.G., Redfield S., Jensen A. [Atmospheric dynamics and the variable transit of KELT-9 b*](#) // The Astronomical Journal. American Astronomical Society, 2019. Vol. 157, № 2. P. 69.
95. Sánchez-López A., Lin L., Snellen I.A.G., Casasayas-Barris N., García Muñoz A., Lampón M., López-Puertas M. [Detection of paschenβ absorption in the atmosphere of KELT-9 b: A new window into the atmospheres of ultra-hot jupiters](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2022. Vol. 666. P. L1.
96. D'Arpa M.C., Saba A., Borsa F., Fossati L., Micela G., Di Maio C., Stangret M., Tripodo G., Affer L., Bonomo A.S., Benatti S., Brogi M., Fardella V., Lanza A.F., Guilluy G., Maldonado J., Mantovan G., Nascimbeni V., Pino L., Scandariato G., Sicilia D., Sozzetti A., Spinelli R., Andreuzzi G., Bignamini A., Claudi R., Desidera S., Ghedina A., Knapic C., Lorenzi V. [The GAPS programme at TNG: LX. Atmospheric characterisation of KELT-9 b via single-line analysis: Detection of six h i balmer lines, na i, ca i, ca II, fe i, fe II, mg i, ti II, sc II, and cr II](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2024. Vol. 690. P. A237.

97. Hoeijmakers H.J., Ehrenreich D., Kitzmann D., Allart R., Grimm S.L., Seidel J.V., Wyttenbach A., Pino L., Nielsen L.D., Fisher C., Rimmer P.B., Bourrier V., Cegla H.M., Lavie B., Lovis C., Patzer A.B.C., Stock J.W., Pepe F.A., Heng K. [A spectral survey of an ultra-hot jupiter: Detection of metals in the transmission spectrum of KELT-9 b](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2019. Vol. 627. P. A165.
98. Wyttenbach A., Mollière P., Ehrenreich D., Cegla H.M., Bourrier V., Lovis C., Pino L., Allart R., Seidel J.V., Hoeijmakers H.J., Nielsen L.D., Lavie B., Pepe F., Bonfils X., Snellen I.A.G. [Mass-loss rate and local thermodynamic state of the KELT-9 b thermosphere from the hydrogen balmer series](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2020. Vol. 638. P. A87.
99. Rumenskikh M.S., Khodachenko M.L., Shaikhislamov I.F., Miroshnichenko I.B., Berezutsky A.G., Shepelin A.V., Dwivedi N.K. [Mysterious non-detection of HeI \(23S\) transit absorption of GJ436b](#) // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. Oxford University Press (OUP), 2023. P. 4120–4129.
100. Greteorex H.J., Milligan R.O., Chamberlin P.C. [Observational analysis of ly \$\alpha\$ emission in equivalent-magnitude solar flares](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2023. Vol. 954, № 2. P. 120.
101. Lecavelier des Etangs A., Ehrenreich D., Vidal-Madjar A., Ballester G.E., Désert J.-M., Ferlet R., Hébrard G., Sing D.K., Tchakoumegni K.-O., Udry S. [Evaporation of the planet HD 189733b observed in h i lyman- \$\alpha\$](#) // Astronomy and Astrophysics. EDP Sciences, 2010. Vol. 514. P. A72.
102. Bisikalo D.V., Cherenkov A.A., Shematovich V.I., Fossati L., Möstl C. [The influence of a stellar flare on the dynamical state of the atmosphere of the exoplanet HD 209458b](#) // Astronomy Reports. Pleiades Publishing Ltd, 2018. Vol. 62, № 10. P. 648–653.
103. Lecavelier des Etangs A., Bourrier V., Wheatley P.J., Dupuy H., Ehrenreich D., Vidal-Madjar A., Hébrard G., Ballester G.E., Désert J.-M., Ferlet R., Sing D.K. [Temporal variations in the evaporating atmosphere of the exoplanet HD 189733b](#) // Astronomy & Astrophysics. EDP Sciences, 2012. Vol. 543. P. L4.
104. Tobiska W.K. [Recent solar extreme ultraviolet irradiance observations and modeling: A review](#) // Journal of Geophysical Research: Space Physics. American Geophysical Union (AGU), 1993. Vol. 98, № A11. P. 18879–18893.

105. France K., Loyd R.O.P., Youngblood A., Brown A., Schneider P.C., Hawley S.L., Froning C.S., Linsky J.L., Roberge A., Buccino A.P., Davenport J.R.A., Fontenla J.M., Kaltenegger L., Kowalski A.F., Mauas P.J.D., Miguel Y., Redfield S., Rugheimer S., Tian F., Vieytes M.C., Walkowicz L.M., Weisenburger K.L. [THE MUSCLES TREASURY SURVEY. I. MOTIVATION AND OVERVIEW*](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2016. Vol. 820, № 2. P. 89.
106. Bates D.R. Atomic and molecular processes. Academic Press, 1962.
107. Younger S.M. [Electron impact ionization cross sections and rates for highly ionized atoms](#) // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. Elsevier BV, 1981. Vol. 26, № 4. P. 329–337.
108. Arnaud M., Rothenflug R. An updated evaluation of recombination and ionization rates // Astronomy and Astrophysics Supplement Series (ISSN 0365-0138), vol. 60, June 1985, p. 425-457. 1985. Vol. 60. P. 425–457.
109. Hahn Y. [Plasma density effects on the three-body recombination rate coefficients](#) // Physics Letters A. Elsevier BV, 1997. Vol. 231, № 1–2. P. 82–88.
110. Draine B.T. Physics of the interstellar and intergalactic medium. Princeton University Press, 2011. Vol. 19.
111. Verner D.A., Ferland G.J. [Atomic data for astrophysics. I. Radiative recombination rates for h-like, he-like, li-like, and na-like ions over a broad range of temperature](#) // The Astrophysical Journal Supplement Series. American Astronomical Society, 1996. Vol. 103. P. 467.
112. Seaton M.J. [Radiative recombination of hydrogenic ions](#) // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. Oxford University Press (OUP), 1959. Vol. 119, № 2. P. 81–89.
113. Przybilla N., Butler K. [Non-LTE line formation for hydrogen revisited](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2004. Vol. 609, № 2. P. 1181–1191.
114. Wang Y., Ferland G.J., Lykins M.L., Porter R.L., Hoof P.A.M. van, Williams R.J.R. [Radiative cooling II: Effects of density and metallicity](#) // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. Oxford University Press (OUP), 2014. Vol. 440, № 4. P. 3100–3112.
115. Wang Y., Zatsarinny O., Bartschat K. [B-spline r-matrix-with-pseudostates calculations for electron-impact excitation and ionization of carbon](#) // Physical Review A. American Physical Society (APS), 2013. Vol. 87, № 1.

116. Reid C.D., Strain B.R. [Effects of CO₂ enrichment on whole-plant carbon budget of seedlings of *fagus grandifolia* and *acer saccharum* in low irradiance](#) // *Oecologia*. Springer Science; Business Media LLC, 1994. Vol. 98, № 1. P. 31–39.
117. Wilson N.J., Bell K.L., Hudson C.E. [Effective collision strengths for electron impact excitation of c II](#) // *Astronomy & Astrophysics*. EDP Sciences, 2005. Vol. 432, № 2. P. 731–736.
118. Przybilla N., Butler K., Becker S., Kudritzki R., Venn K. Non-LTE line formation for neutral oxygen. Model atom and first results on a-type stars // *Astronomy and Astrophysics*, v. 359, p. 1085-1106 (2000). 2000. Vol. 359. P. 1085–1106.
119. Barklem P.S. [Electron-impact excitation of neutral oxygen](#) // *Astronomy & Astrophysics*. EDP Sciences, 2006. Vol. 462, № 2. P. 781–788.
120. Lemke M., Holweger H. A non-LTE study of the solar emission lines near 12 microns // *Astronomy and Astrophysics* (ISSN 0004-6361), vol. 173, no. 2, Feb. 1987, p. 375-382. 1987. Vol. 173. P. 375–382.
121. Osorio Y., Barklem P.S., Lind K., Belyaev A.K., Spielfiedel A., Guitou M., Feautrier N. [Mg line formation in late-type stellar atmospheres: I. The model atom](#) // *Astronomy & Astrophysics*. EDP Sciences, 2015. Vol. 579. P. A53.
122. Merle T., Thévenin F., Belyaev A.K., Guitou M., Feautrier N., Spielfiedel A., Zatsarinny O. [Impact of new atomic data for the formation of the mg i b triplet lines in benchmark stars](#) // *EAS Publications Series* / ed. Alecian G., Lebreton Y., Richard O., Vauclair G. EDP Sciences, 2013. Vol. 63. P. 331–336.
123. Sigut T.A.A., Pradhan A.K. [Electron-impact excitation of mg II: Collision strengths and rate coefficients](#) // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. IOP Publishing, 1995. Vol. 28, № 22. P. 4879–4893.
124. Bautista M.A., Romano P., Pradhan A.K. [Resonance-averaged photoionization cross sections for astrophysical models](#) // *The Astrophysical Journal Supplement Series*. American Astronomical Society, 1998. Vol. 118, № 1. P. 259–265.
125. Salz M., Czesla S., Schneider P.C., Schmitt J.H.M.M. [Simulating the escaping atmospheres of hot gas planets in the solar neighborhood](#) // *Astronomy & Astrophysics*. EDP Sciences, 2016. Vol. 586. P. A75.

126. Ben-Jaffel L., Ballester G.E., Muñoz A.G., Lavvas P., Sing D.K., Sanz-Forcada J., Cohen O., Kataria T., Henry G.W., Buchhave L., Mikal-Evans T., Wakeford H.R., López-Morales M. [Signatures of strong magnetization and a metal-poor atmosphere for a neptune-sized exoplanet](#) // Nature Astronomy. Springer Science; Business Media LLC, 2021. Vol. 6, № 1. P. 141–153.
127. Zhang M., Knutson H.A., Wang L., Dai F., Barragán O. [Escaping helium from TOI 560.01, a young mini-neptune](#) // The Astronomical Journal. American Astronomical Society, 2022. Vol. 163, № 2. P. 67.
128. Youngblood A., France K., Loyd R.O.P., Linsky J.L., Redfield S., Schneider P.C., Wood B.E., Brown A., Froning C., Miguel Y., Rugheimer S., Walkowicz L. [THE MUSCLES TREASURY SURVEY. II. INTRINSIC \$\text{Ly}\alpha\$ AND EXTREME ULTRAVIOLET SPECTRA OF k AND m DWARFS WITH EXOPLANETS*](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2016. Vol. 824, № 2. P. 101.
129. Linsky J.L., Fontenla J., France K. [THE INTRINSIC EXTREME ULTRAVIOLET FLUXES OF F5 v TO M5 v STARS](#) // The Astrophysical Journal. American Astronomical Society, 2013. Vol. 780, № 1. P. 61.

[illegible]

Таблица 7: Источники данных о структуре химических элементов — водород и азот.

Данные \ Элемент	H I	N I	N II
Электронная конфигурация	[63,66,79,85]	[66,81,85]	[66,85]
Энергии (E_i)	[63,66,79,85]	[66,74,81,85]	[66,85]
Статистические веса (g_i)	[63,66,79,85]	[66,81,85]	[66,85]
Спонтанная эмиссия (f_{ij} или A_{ji})	[66,79,85]	[66,78,81,85]	[66,85]
Ударное возбуждение (C_{ij} или γ_{ij})	[85]	[85]	[85]
Ударное возбуждение ($C_{ij}(T)$ или $\gamma_{ij}(T)$)	[79,113]	[81,114]	
Ударная ионизация (k_{ik})	[63]		
Фотоионизация ($\sigma(\nu)$)		[81]	

Таблица 8: Источники данных о структуре химических элементов — углерод.

Данные \ Элемент	C I	C II	C III
Электронная конфигурация	[66,85]	[66,85]	[66]
Энергии (E_i)	[66,82,85]	[66,82,85]	[66]
Статистические веса (g_i)	[66,82,85]	[66,82,85]	[66]
Спонтанная эмиссия (f_{ij} или A_{ji})	[66,82,85]	[66,82,85]	[66]
Ударное возбуждение (C_{ij} или γ_{ij})	[85]	[85]	
Ударное возбуждение ($C_{ij}(T)$ или $\gamma_{ij}(T)$)	[82,115,116]	[82,117]	
Фотоионизация ($\sigma(\nu)$)	[78,82]	[78,82]	

Таблица 9: Источники данных о структуре химических элементов — кислород.

Данные \ Элемент	O I	O II
Электронная конфигурация	[25,66,84,85,118]	[66,85]
Энергии (E_i)	[25,66,84,85,118]	[66,85]
Статистические веса (g_i)	[25,66,84,85,118]	[66,85]
Спонтанная эмиссия (f_{ij} или A_{ji})	[25,66,84,85]	[66,85]
Ударное возбуждение (C_{ij} или γ_{ij})	[85,119]	[85]
Ударное возбуждение ($C_{ij}(T)$ или $\gamma_{ij}(T)$)	[25,119]	
Фотоионизация ($\sigma(\nu)$)	[25,78,84]	

Таблица 10: Источники данных о структуре химических элементов — магний.

Данные \ Элемент	Mg I	Mg II	Mg III
Электронная конфигурация	[66]	[66]	[66]
Энергии (E_i)	[66,83]	[66,83]	[66]
Статистические веса (g_i)	[66,83]	[66,83]	[66]
Спонтанная эмиссия (f_{ij} или A_{ji})	[66,78,83,120,121]	[66,78,83]	[66]
Ударное возбуждение ($C_{ij}(T)$ или $\gamma_{ij}(T)$)	[83,122]	[83,123]	
Фотоионизация ($\sigma(\nu)$)	[78,83]	[78,83]	

Таблица 11: Источники данных о структуре химических элементов — железо.

Данные \ Элемент	Fe I	Fe II	Fe III
Электронная конфигурация	[66,80]	[26,66,80]	[66]
Энергии (E_i)	[66,80]	[26,66,80]	[66]
Статистические веса (g_i)	[66,80]	[26,66,80]	[66]
Спонтанная эмиссия (f_{ij} или A_{ji})	[66,80]	[26,66,80]	[66]
Ударное возбуждение ($C_{ij}(T)$ или $\gamma_{ij}(T)$)	[80]	[77,80,124]	
Фотоионизация ($\sigma(\nu)$)	[76,80,124]		

Таблица 12: Источники данных о звездных спектрах.

Звезда	Источник	Диапазон спектра
GJ 3470	[12]	XUV, < 1200 Å
GJ 3470	[125]	XUV, > 1200 Å
GJ 436	[16]	XUV
HAT-P-11	[126]	
HD 189733	[16]	XUV
HD 209458	[16]	XUV
HD 209458	[125]	
HD 73583	[127]	
HD 85512	[128]	
KELT-9	[16]	XUV

Звезда	Источник	Диапазон спектра
Солнце	[129]	EUV
Солнце	[104]	XUV
WASP-80	[125]	XUV
WASP-80	[16]	XUV