# Spektrallinien von Wassermolekülen in kühlen

# M-Sternen

Spectral lines of water in cool M-stars



Bachelorarbeit im Studiengang Physik Universität Hamburg Hamburger Sternwarte von: Anna Heise geboren am 21.04.1989

2011

Gutachter: Prof. Dr. Peter Hauschildt
 Gutachter: Prof. Dr. Jürgen Schmitt

#### Zusammenfassung

Diese Arbeit beschäfftigt sich mit theoretischen Spektren von M-Sternen, die mit dem Sternatmosphärencode PHOENIX von Peter Hauschildt und Mitarbeitern simuliert wurden. Die Form der Spektrallinien von molekularem Wasser wird in der Photosphäre in Abhängigkeit von der Oberflächengravitation und der Effektivtemperatur untersucht. Bei konstanter Oberflächengravitation nimmt der Fluss der Linienmitte mit zunehmender Temperatur ab, bis ab einer Temperatur von 3900 K keine Spektrallinien mehr erkennbar sind. Die Halbwertsbreite der Linien nimmt linear mit der Temperatur ab. Bei konstanter Temperatur ist kein mathematischer Zusammenhang zwischen Fluss der Linienmitte und Oberflächengravitation zu erkennen, jedoch sind Spektrallinien mit hoher Oberflächengravitation am stärksten.

#### Abstrct

In this bachelor thesis, theoretical spectra of M-stars are studied, which were simulated with the stellar atmosphere code PHOENIX by Peter Hauschidt and Collaborators. The dependency of the shape of spectral lines of water in the photosphere with respect to the surface gravity and effective temperature are studied in detail. With increasing temperature (and constant surface gravitation), the flux of the line center decreases, until from 3900 K on no more spectral lines could be observed. The full-width half maximum decreases linearly with increasing temperature. It was not possible to determine an exact functional relation between the spectral flux in the line center and the surface gravity. However, it can be seen that spectral lines become more pronounced with increasing surface gravity.

# Inhaltsverzeichnis

1.	Einleitung							
2.	The	oretiscl	ne Grundlagen	8				
	2.1. Strahlungstransport							
	2.2.	Absorp	otion und Emission	9				
	2.3.	Anregu	ing und Ionisation	10				
	2.4.	Linien	profile	11				
	2.5.	Molekülphysik						
		2.5.1.	Elektronische Bindung und Geometrie des Wassermoleküls	12				
		2.5.2.	Rotationszustände	13				
		2.5.3.	Vibrationszustände	14				
	2.6.	Spektr	${ m en}$	15				
3.	Auswertung							
	3.1.	PHOE	NIX	16				
	3.2.	hl der Spektrallinien	16					
3.3. Häufigkeit von Wasser								
	gigkeit der Linienform von der Temperatur	17						
		3.4.1.	Fluss der Linienmitte in Abhängigkeit von der Temperatur	19				
		3.4.2.	Halbwertsbreite in Abhängigkeit von der Temperatur	21				
		3.4.3.	Normierung der Spektrallinien	22				
	3.5. Abhängigkeit der Linienform von der Oberflächengravitation							
		3.5.1.	Fluss der Linienmitte in Abhängigkeit von der Oberflächengravitation	24				
		3.5.2.	Halbwertsbreite in Abhängigkeit von der Oberflächengravitation	24				
		3.5.3.	Normierung der Spektrallinien	28				
4.	Zusa	ammen	fassung	30				
Α.	Nori	mierter	Fluss & Temperatur	31				
В.	Nori	mierter	Fluss & Temperatur & Fit	32				
C.	C. Halbwertsbreite & Temperatur 3							
D.	). Halbwertsbreite & Temperatur & Fit 3							

E. Untersuchte Spektrallinien (log(g)=konstant)	35
F. Halbwertsbreite & Oberflächengravitation	36
Literatur	37
Eidesstattliche Versicherung	38

## 1. Einleitung

In dieser Arbeit werden theoretische Spektren von M-Sternen untersucht, wobei das M die Spektraklasse angibt. M-Sterne sind kühle Sterne, die aufgrund ihrer Oberflächengravitation weiter unterschieden werden können, von kühlen Zwergen (rechts unten im Hertzsprung-Russel-Diagramm) bis hin zu kühlen Riesen (rechts oben im Hertzsprung-Russel-Diagramm). Sie werden durch die Parameter Effektivtemperatur  $T_{\text{eff}}$  und Oberflächaracteristic characteristic chara in der Atmosphäre verschiedene Molekülgruppen vorhanden, über deren spektrale Banden ein Stern ebenfalls charakterisiert werden kann. In dieser Arbeit wird die Abhängigkeit der Spektrallinien von molekularem Wasser von den Parametern Effektivtemperatur und Oberflächengravitation untersucht. Dazu wurde der Temperaturbereich von 3000 K bis 4900 K über einem Wellenlängenbereich von 13000 Å bis 17000 Å betrachtet, da in diesem Bereich Spektrallinien von molekularem Wasser häufig vorkommen. Diese Arbeit teilt sich in zwei Abschnitte auf; zunächst werden die theoretischen Grundlagen besprochen, dabei wird hauptsächlich auf den Strahlungstransport und die Molekülphysik eingegangen. Im zweiten Teil werden die Ergebnisse präsentiert, bei der Untersuchung der Spektrallinien wurde immer ein Parameter festgehalten, und die Abhängigkeit der Linienform auf den anderen hin betrachtet.

## 2. Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen eingeführt, die zur Beschreibung und Analyse von Spektren nötig sind. Im ersten Teil geht es um den Transport der Energie in Sternen, mehr zu diesem Thema findet man u. a. bei Rutten (2003). Der zweite Teil beschäftigt sich mit den energetischen Zuständen von Wassermolekülen.

### 2.1. Strahlungstransport

Eine genaue Betrachtung zu diesem Thema findet sich bei [Rutten 2003]. Im Inneren eines Sterns wird durch Fusion Energie frei, die durch verschiedene Schichten an die Oberfläche transportiert und dort abgestrahlt wird. Den Bereich, in dem das Spektrum entsteht, bezeichnet man als Sternatmosphäre. In dieser Schicht wird Strahlung gestreut, absorbiert und emittiert und dringt nach außen. Daher kann man aus dem beobachteten Spektrum auf die chemische Zusammensetzung der Atmosphäre und ihre physikalischen Bedingungen schließen.

Energie wird durch elektromagnetische Strahlung transportiert, die Ausbreitung von Licht durch ein Medium wird durch den Strahlungstransport beschrieben.

Außerdem kann Energie auch durch Konvektion an die Oberfläche transportiert werden, diese Möglichkeit soll hier nicht näher betrachtet werden.

**Intensität**. Pro Zeit t, Fläche A, Raumwinkel  $\Omega$  und Frequenz  $\nu$  wird die Energie E abgestrahlt:

$$dE = I_{\nu} \cdot \cos(\Theta) \cdot dA \cdot dt \cdot d\nu \cdot d\Omega \tag{1}$$

Der Faktor  $I_{\nu}$  ist als spezifische Intensität definiert und stellt ein Maß für die Flächenhelligkeit dar.  $\Theta$  ist der Winkel zwischen der Richtung der austretenden Strahlung und dem Normalenvektor des Flächenelementes. Die Intensität ist vom betrachteten Ort, der Frequenz und der Richtung der Strahlung abhängig, nicht aber von der Entfernung des Beobachters zur Strahlungsquelle.

**Fluss**. Integriert man die Intensität entlang des Normalenvektors  $\vec{n}$  über alle Raumwinkel auf, so erhält man die gerichtete Größe Fluss.

$$\vec{F} = \int I \vec{n} d\Omega \tag{2}$$

Da heiße, innere Schichten mehr Energie abstrahlen als kühle, äußere Schichten, ist der Fluss nach außen gerichtet. Im Gegensatz zur Intensität ist der Fluss abhängig von der Entfernung des Beobachters.

Es soll nun die Ausbreitung der Strahlung entlang einer (radial gerichteten) Geraden s betrachtet werden. Die spezifische Intensität bleibt konstant, solange keine Wechselwirkungsprozesse wie Absorption und Emission auftreten. Solche Prozesse führen zu einer Änderung der Intensität.

### 2.2. Absorption und Emission

Absorption. Die Abnahme der Intensität durch Absorption in einer infinitesimalen dünnen Schicht wird durch folgende Differentialgleichung beschrieben:

$$dI_{\nu} = -I_{\nu}\kappa_{\nu}ds \tag{3}$$

 $\kappa_{\nu}$  ist der Absorptionskoeffizient und abhängig von der Frequenz, der Temperatur, des Drucks und der Zusammensetzung des Mediums. Daher variiert der Aborptionskoeffizient für verschiedene Schichten und wird zur optischen Tiefe  $\tau_{\nu}$  aufintegriert:

$$-\int \frac{dI_{\nu}}{I_{\nu}} = \int \kappa_{\nu} ds = \tau_{\nu} \tag{4}$$

Emission. Die Änderung der Intensität ist analog zur Absorption definiert:

$$dI_{\nu} = \epsilon_{\nu} ds \tag{5}$$

 $\epsilon_{\nu}$  ist der Emissionskoeffizient und genau wie der Absorptionskoeffizient eine Funktion von Temperatur, Druck und Zusammensetzung des Mediums.

Strahlungstransportgleichung. Beim Transport durch die verschiedenen Schichten des Sterns kommt es sowohl zur Absorption als auch zur Emission der Energie und zu einer entsprechenden Intensitätsänderung. Diese wird duch die Strahlungstransportgleichung beschrieben.

$$dI_{\nu} = -I_{\nu}\kappa_{\nu}ds + \epsilon_{\nu}ds$$

$$\frac{dI_{\nu}}{ds} = -I_{\nu}\kappa_{\nu} + \epsilon_{\nu}$$

$$\frac{dI_{\nu}}{d\tau_{\nu}} = I_{\nu} - \frac{\epsilon_{\nu}}{\kappa_{\nu}} = I_{\nu} - S_{\nu}$$
(6)

 $S_{\nu}$  wird als Ergiebigkeit oder Quellfunktion (Englisch: Source function) bezeichnet und ist als Quotient aus Emissions- und Absorptionskoeffizient definiert.

Nimmt man thermodynamisches Gleichgewicht an, so wird ein Absorptionsprozess zwischen zwei Niveaus ausgeglichen durch einen Emissionsprozess zwischen den gleichen Niveaus, sodass das Spektrum im Inneren eines Sternes dem eines schwarzen Körpers entspricht und der Verlauf der Intensität durch die Planck-Funktion beschrieben werden kann.

Schwarzer Körper. Ein schwarzer Körper ist ein idealer Körper, der sich im thermodynamischen Gleichgewicht befindet. Er zeichnet sich durch vollständige Absorption von elektromagnetischer Strahlung aus und emittiert seine Energie in Form von thermischer Strahlung. Für jede Temperatur ergibt sich ein charakteristischer Verlauf der Intensität in Abhängigkeit von der Frequenz (oder Wellenlänge) der thermischen Strahlung. Dieser Verlauf wird durch die sogenannte Planck-Funktion beschrieben. Sie verknüpft die Frequenz mit der Temperatur:

$$B_{\nu}(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp(\frac{h\nu}{k_{\rm P}T}) - 1}$$
(7)

Im thermodynamischen Gleichgewicht entspräche die Quellfunktion der Planck-Funktion.  $S_{\nu} = B_{\nu}.$ 

## 2.3. Anregung und lonisation

Die transportierte Strahlung kann über drei verschiedene Prozesse mit dem umgebenden Medium wechselwirken. Dabei kommt es zu Übergängen, die auf unterschiedliche Weise zum Spektrum beitragen, man unterschiedet drei Arten von Übergängen: gebunden-gebunden Übergänge. Das Elektron geht unter Absorption oder Emission eines Photons der Energie  $E = \hbar \omega$  in ein anderes Niveau über. Dieser Übergang ist im Spektrum als Absorptionslinie sichtbar.

gebunden-frei Übergänge. Das Elektron wird ionisiert und erhält zusätzlich zu einer diskreten Ionisationsenergie kinetische Energie  $\hbar\omega = E_{\text{diskret}} + \frac{1}{2}mv^2$ . Rekombiniert das Elektron, wird ein Photon dieser Energie frei. Dabei handelt es sich um einen Kontinuumsprozess.

frei-frei Übergänge. Das freie Elektron wird gestreut und ändert seine Energie um die Differenz  $\hbar\omega = \frac{1}{2}m(v_2^2 - v_1^2)$ . Es handelt sich ebenfalls um einen Kontinuumsprozess. Die Elektronen streuen dabei an freien Elektronen (Thompson-Streuung), aber auch an gebundenen Elektronen, ohne diese zu ionisieren (Rayleigh-Streuung).

Für die Sternatmosphäre kann man lokales thermischen Gleichgewicht annehmen und jeder Schicht eine eindeutige Temperatur zuweisen. Unter dieser Annahme wird der Anregungsgrad, das heißt das Verhältnis der Besetzungszahlen  $N_i$  und  $N_j$  durch die Boltzmann-Formel gegeben:

$$\frac{N_i}{N_j} = \frac{g_i}{g_j} \cdot \exp(-\frac{E_{ij}}{k_B T}) \tag{8}$$

 $E_{ij}$  ist die Energiedifferenz zwischen den Niveaus *i* und *j*,  $g_i$  und  $g_j$  sind die statistischen Gewichte der jeweiligen Niveaus. Handelt es sich nicht um einen Übergang zwischen gebundenen Zuständen muss man von der Boltzmann-Formel zur Saha-Formel übergehen, die den Inosationsgrad beschreibt (mit der Zustandssumme Z):

$$\frac{N_{r+1}}{N_r} = \frac{2}{N_e} \cdot \frac{Z_{r+1}}{Z_r} \frac{(2\pi m_e k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \cdot \exp(-\frac{E_r}{k_B T})$$
(9)

### 2.4. Linienprofile

Gaußprofil. Die thermische Bewegung des Atoms oder Moleküls führt zu einer Dopplerverschiebung gegenüber des Strahlungsfeldes und wird, wie auch Turbulenzen in der Atmosphäre durch das Gaußprofil beschrieben. Lorentzprofil. Aufgrund von spontanen Zerfällen ist die Lebensdauer eines angeregten Zustandes endlich. Die Energie eines angeregten Zustandes kann daher niemals scharf sein, da aus der Heisenbergschen Unschärferelation eine frequenzabhängige Verbreiterung resultiert. Diese wird durch ein Lorentzprofil beschrieben.

In kühlen Atmosphären tritt auch eine Druck-Verbreiterung durch Van-der-Vaals Wechselwirkungen auf, die ebenfalls durch ein Lorentzprofil beschrieben wird.

Korrekter Weise müsste eine Spektrallinie, da es sich hier um schwache, individuelle Linien handelt, durch eine Kombination der beiden Profile (Voigt-Profil) beschrieben werden. Dies ist allerdings aufwendig, und führt für die betrachteten Linien zu keiner signifikanten Verbesserung. Der Kern einer Spektrallinie eines Moleküls wird gut durch ein Gaußprofil wiedergegeben.

### 2.5. Molekülphysik

Neben den allgemeinen Grundlagen der Beschreibung von mehratomigen Molekülen wird in diesem Kapitel speziell auf die Physik des Wassermoleküls eingegangen. Im Gegensatz zur Atomphysik müssen in der Molekülphysik die Freiheitsgrade der Rotation und Vibration berücksichtigt werden, die durch neue Quantenzahlen beschrieben werden. Daher gibt es im Wassermolekül neben den elektronischen Übergängen eine Vielzahl an weiteren möglichen Übergängen zwischen Rotations- und Vibrationszuständen, die zu einer komplexen Struktur des Spektrums führen. Näheres zu diesem Thema kann man bei Haken und Wolf (2006) und Demtröder (2010) nachlesen.

### 2.5.1. Elektronische Bindung und Geometrie des Wassermoleküls

Das Wassermolekül wird aus zwei Wasserstoffatomen mit je einem Valenzelektron (1s) und einem Sauerstoffatom mit sechs Valenzelektronen (2s, 2p) gebildet. Die Bindung kommt zu stande, wenn die Orbitale der beiden ungepaarten Elektronen im 2p-Niveau mit den 1s-Orbitalen der Wasserstoffatome überlappen und sich in dem bindenden Orbital eine hohe Elektronendichte ergibt, durch die die Gesamtenergie abgesenkt wird, so dass eine Bindung entsteht.

Da die beiden 2p-Orbitale senkrecht aufeinander stehen, würde man auch für das Wassermolekül einen Bindungswinkel von 90° erwarten, findet experimentell aber einen Winkel von 105°. Der Grund dafür liegt in der vereinfachten Betrachtung der Bindung. Die vernachlässigte Elektron-Elektron-Wechselwirkung führt zu einer Deformierung der Orbitale und so zu einer Verschiebung der Ladungsverteilung, was wiederum zu einer Verschiebung des Überlapps der Orbitale führt. Dadurch wird die Gesamtenergie minimiert und die Bindungsenergie maximiert, es bilden sich sogenannte Hybridorbitale, die eine Linearkombination aus den Wellenfunktionen der Orbitale darstellen.

#### 2.5.2. Rotationszustände

Im Wassermolekül gibt es nicht eine Hauptträgheitsachse, um die das Molekül rotieren könnte, sondern mehrere ausgezeichnete Achsen, um die eine Rotation erfolgen kann. Daher wählt man zur Beschreibung der Rotationsenergie drei körperfeste Hauptträgheitsachsen, entlang derer man die Komponenten der Winkelgeschwindigkeit  $\vec{\omega}$  und die entsprechenden Trägheitsmomente  $I_i$  bestimmen kann. Auf diese Weise kann man den Gesamtdrehimpuls  $\vec{J}$  bestimmen:

$$E_{rot} = \frac{1}{2} (\omega_a^2 I_a + \omega_b^2 I_b + \omega_c^2 I_c) = \frac{1}{2} (\frac{J_a^2}{I_a} + \frac{J_b^2}{I_b} + \frac{J_c^2}{I_c})$$
(10)

Asymmetrischer Rotator. Beim Wassermolekül handelt es sich um einen asymmetrischen Rotator, das bedeutet es gibt keine Symmetrieachse und somit drei verschiedene Trägheitsmomente. Aus diesem Grund kann man die Eigenwerte und damit die Energie nicht eindeutig bestimmen. Um dennoch eine Aussage über die Rotationsniveaus eines asymmetrischen Rotators machen zu können, kann man zwischen den Grenzfällen des symmetrischen Rotators interpolieren.

Ein Rotationsniveau wird charakterisiert durch den Drehimpuls sowie seine Projektion auf die Symmetrieachse. Da im Falle des asymmetrischen Rotators keine Symmetrieachse vorliegt, kann auch die Projektion entlang dieser Achse nicht bestimmt werden.

Im Falle eines symmetrischen Rotators sind zwei Trägheitsmomente identisch und es wird möglich, die Eigenwerte der Drehimpulse zu bestimmen. Dabei erhält man drei Rotationskonstanten, die vom jeweiligen Trägheitsmoment abhängen, diese kann man auch für das Wassermolekül bestimmen, da durch die bekannte Geometrie von Wasser auch die Trägheitsmomente berechnet werden können. Um das Rotationsniveau des asymmetrischen Rotators zu beschreiben, verwendet man dann zusätzlich zum Drehimpuls die beiden Projektionen auf die jeweilige Symmetrieachse des symmetrischen Rotators.

### 2.5.3. Vibrationszustände

Betrachten wir zunächst, wieviele Freiheitsgrade des Wassermoleküls auf die Schwingung entfallen: Jedes der drei Atome besitzt drei Freiheitsgrade der Translation. Von diesen neun Freiheitsgraden werden drei benötigt, um die Bewegung des Schwerpunktes, sowie drei um die Rotation um die Trägheitsachsen zu beschreiben, es bleiben also drei Freiheitsgrade für die Schwingung übrig.

Um die Schwingung von der Translation und der Rotation abzugrenzen, fordert man, dass der Schwerpunkt des Moleküls in Ruhe bleibt, sodass alle Kerne des Moleküls gleichzeitig durch die Ruhelage laufen und der Gesamtimpuls und -drehimpuls null sind.

Solche Schwingungen werden als Normalschwingungen bezeichnet. Jede andere harmonische Schwingung des Moleküls kann durch eine Linearkombination dieser Normalschwingungen dargestellt werden. Für das Wassermolekül ergeben sich eine symmetrische Streckschwingung, eine Knickschwingung und eine asymmetrische Streckschwingung.

Eine Schwingung kommt zustande, wenn die Kerne um eine kleine Auslenkung aus ihrer Ruhelage gebracht werden und Rückstellkräfte auftreten. Entwickelt man das Potential, in dem sich die Kerne bewegen, nach diesen Auslenkungen und kombiniert man das Ergebnis mit der Rückstellkraft und der Bewegungsgleichung der Teilchen, erhält man unter der Verwendung von massegewichteten Koordinaten drei gekoppelte Differentialgleichungen. Diese lassen sich entkoppeln, wenn man eine Hauptachsentransformation durchführt und von den massengewichteten Koordinaten zu so genannten Normalkoordinaten  $Q_i$  übergeht.

$$\frac{d^2}{dt^2}\vec{Q_i} + \omega_i\vec{Q_i} = 0 \tag{11}$$

Diese Gleichung beschreibt eine harmonische Schwingung mit der Frequenz  $\omega_i$ . Die Schwingungsenergie ergibt sich in Analogie zum harmonischen Oszillator:

$$E_{Vibration} = \sum i\hbar\omega_i(\nu_i + \frac{d_i}{2}) \tag{12}$$

Der Schwingungszustand wird dabei durch die drei Quantenzahlen  $\nu_i$  beschrieben, die angeben, mit wievielen Quanten eine der drei Normalschwingungen angeregt ist,  $d_i$  gibt den Entartungsgrad der Schwingung an.

### 2.6. Spektren

Alle Energiebeiträge, die oben vorgestellt wurden, müssen bei der Analyse eines spektralen Übergangs berücksichtigt werden.

$$E = E_{elektrisch} + E_{Rotation} + E_{Vibration} \tag{13}$$

Innerhalb eines elektronischen Anregungszustandes gibt es vibronische Niveaus, die wiederum zahlreiche Rotationsniveaus beinhalten. Je nachdem, um welchen Übergang zwischen diesen Niveaus es sich handelt unterscheidet man folgende Spektren:

- Rotationsspektren: Dabei ändert sich nur die Quantenzahl der Rotation, der Übergang findet zwischen zwei Rotationsniveaus des gleichen Schwingungszustandes statt, der elektrische Zustand bleibt gleich.
- Rotationsschwingungsspektren: Der Übergang findet zwischen zwei Rotationsniveaus verschiedener Schwingungszuständen statt, der elektrische Zustand bleibt gleich.
- Elektronenspektren: Hierbei handelt es sich um Übergänge, zwischen verschiedenen elektrischen Niveaus, bei denen sich sowohl die Vibrations- als auch die Rotations- quantenzahl ändert.

## 3. Auswertung

## 3.1. PHOENIX

Die verwendeten Daten der Sternatmosphären wurden mit dem Computerprogramm PHOENIX von Peter Hauschildt und Eddie Baron erstellt. Dabei handelt es sich um einen Sternatmosphärencode, mit dem sowohl Modellatmosphären von allen Stertypen des Hertzsprung-Russel-Diagramms, als auch synthetische Spektren der Sterne erzeugt werden können. Eine ausführliche Beschreibung von PHOENIX kann man bei Hauschildt und Baron (2007), Hauschildt und Baron(1999) und Hauschildt u.a. (1997) finden. Für diese Arbeit wurden fertige Modellatmosphären von M-Sternen verwendet, um 228 hochaufgelöste Spektren zu generieren, wobei einmal die Effektivtemperatur  $T_{\rm eff}$  bei fester Oberflächengravitation  $\log(g)$  in Schritten von 100 K von 3000 K bis 4900 K variiert wurde, sowie die Oberflächengravitation, bei festgehaltener Effektivtemperatur in Schritten von 0,5 zwischen 0 und 6 variiert wurde. Die Daten wurden für einen Wellenlängenbereich zwischen 13000 Å und 17000 Å erzeugt, da im Rahmen dieser Arbeit Spektrallinien von molekularem Wasser untersucht werden sollen, die in diesem Bereich zahlreich auftreten.

## 3.2. Auswahl der Spektrallinien

Ein Großteil der Spektrallinien im untersuchten Wellenlängenbereich werden durch Wasser hervor gerufen. Mit dem Programm PHOENIX war es möglich, die einzelnen Spektrallinien zweifelsfrei zu identifizieren. Für die weitere Untersuchung wurden acht Linien ausgewählt, die besonders stark sind und deren Fluss für die verschiedenen Temperaturen gut durch ein Gaußprofil wiedergegeben wird.

## 3.3. Häufigkeit von Wasser

Die molekulare Bindung von Wasser wird bei hohen Temperaturen aufgebrochen, diese Grenztemperatur, bei der keine Moleküle mehr vorkommen, soll näherungweise bestimmt werden. Bevor die theoretischen Spektren zur Analyse herangezogen werden, wird die absolute Häufigkeit von Wassermolekülen in der Sternatmosphäre betrachtet.



Das Programm PHOENIX stellt Daten über die Prozentuale Verteilung der Molekülarten in den einzelnen Schichten der Atmosphäre zur Verfügung, daraus berechnet sich leicht die Säulendichte der Wassermoleküle über die gesamte Sternatmosphäre. Das Ergebnis ist in Abbildung 1 gezeigt. Es wird deutlich, dass die Anzahl der Wassermoleküle mit steigender Temperatur abnimmt bis bei ungefähr 3900 K der Nullpunkt der Säulendichte erreicht ist und somit kein molekulares Wasser mehr vorliegt.

Abbildung 1: Säulendichte der Wassermoleküle logarithmisch aufgetragen gegen die Effektivtemperatur

## 3.4. Abhängigkeit der Linienform von der Temperatur

Die temperaturabhängige Planck-Funktion hat einen starken Einfluss auf das Spektrum, weshalb der Fluss für verschiedene Temperaturen an einem Wellenlängenpunkt nicht übereinstimmt. Abbildung 2 zeigt den Verlauf des spektralen Flusses eines Sternes sowie die Planck-Funktion für die gleiche Effektivtemperatur.



Abbildung 2: Das Spektrum eines Sternes mit  $T_{eff}$  = 3500 und log(g) = 5 in Blau, sowie die Planckfunktion für diese Temperatur in Rot.

Es wird deutlich, dass der Verlauf des Kontinuum-Anteils des spektralen Flusses noch mit der Planck-Funktion korreliert. Um die temperaturabhängige Linienveränderung zu untersuchen, wird daher zunächst das Spektrum durch die Planck-Funktion dividiert. In Abbildung 3 ist ein Ausschnitt aus dem gesamten Spektrum gezeigt, wobei in der rechten Graphik die Planck-Funktion herausdividiert wurde. Man erkennt eine bessere Übereinstimmung der Flüsse für die verschiedenen Temperaturen, gleichzeitig bleibt eine geringe Abhängigkeit von der Effektivtemperatur erhalten. Um die Übereinstimmung der Flüsse zusätzlich zu optimieren, wird für jede ausgewer-

tete Spektrallinie eine Normierung vorgenommen: Dazu wird der Fluss für jede Temperatur durch den Fluss an einem für jede Spektrallinie ausgezeichneten Wellenlängenpunkt dividiert. Die Genauigkeit dieses Verfahrens wird in den späteren Abschnitten diskutiert.

Das bearbeitete Spektrum kann nun ausgewertet werden, indem für jede Spektrallinie und jede Temperatur das Minimum des Flusses und die Halbwertsbreite bestimmt wird. Dabei wird die Oberflächengravitation konstant gehalten, für alle hier beschriebenen Linien ist log(g) = 5.





(a) spektraler Fluss für alle Temperaturen über dem Wellenlänenbereich von 13050 Å bis 13100 Å

(b) spektraler Fluss für alle Temperaturen über dem Wellenlänenbereich von 13050 Å bis 13100 Å, dividiert durch die Planck-Funktion

Abbildung 3: in Blau dargestellt ist der Fluss bei hohen Temperaturen, beginnend bei 4900 K, in Rot dargestellt ist der Fluss bei niedrigen Temeraturen, endend bei 3000 K.

### 3.4.1. Fluss der Linienmitte in Abhängigkeit von der Temperatur

Zunächst soll das Verhalten des Flusses in Abhängigkeit von der Temperatur anhand von zwei beispielhaften Linien untersucht werden.

Aus den Abbildungen 4 wird deutlich, dass der normierte Fluss der Linienmitte bei zunehmender Temperatur steigt und sich bei hohen Temperaturen dem Grenzwert 1 annähert. Dieser ist bei ungefähr 3900 K erreicht, was den Erwartungen entspricht, da ab dieser Temperatur keine Wassermoleküle mehr in der Atmosphäre vorhanden sind (siehe Abb. 1). Um den Verlauf der Kurve unterhalb dieser Grenztemperatur näher zu analysieren, werden zwei Beispiele in dem Temperaturbereich von 3000 K bis 3900 K gesondert betrachtet:



Abbildung 4: normierter Fluss der Linienmitte in Abhängigkeit von der Temperatur für die genannten Spekrallinien



Abbildung 5: normierter Fluss der Linienmitte in Abhängigkeit von der Temperatur, mit einem polynomiellen Fit.

Die Abbildungen für die übrigen Spektrallinien sind in Anhang B zu finden. An die Datenpunkte ist ein polynomieller Fit der Form  $F = A + B \cdot T + C \cdot T^2$  angelegt, als einfachstmöglichstes Polynom, welches den Verlauf den Datenpunkte angemessen wiedergibt.F gibt den normierten Fluss der Linienmitte an und T die Temperatur in Kelvin. A,B und C sind Konstanten, die mit dem Programm Origin ermittelt wurden. Betrachtet man die Werte, stellt man fest, dass der Verlauf der Datenpunkte durch den Fit angemessen wieder gegeben wird. Dabei fällt auf, dass für Spektrallinien bei niedrigeren Wellenlängen ein kleinerer statistischer Fehler vorliegt, der Fit also präziser ist.

Wellenlänge		А			В			С	
der Linienmitte									
13405,4	-2,5	±	$^{0,1}$	0,00017	±	$6 \cdot 10^{-5}$	$-1,92 \cdot 10^{-7}$	$\pm$	$9 \cdot 10^{-9}$
13489,7	-2,40	±	$0,\!05$	$0,\!00159$	±	$3 \cdot 10^{-5}$	$-1,85 \cdot 10^{-7}$	$\pm$	$5 \cdot 10^{-9}$
14142,5	-2,3	±	$^{0,1}$	$0,\!00157$	±	$6 \cdot 10^{-5}$	$-2 \cdot 10^{-7}$	$\pm$	$9 \cdot 10^{-7}$
14231,6	-1,8	±	$^{0,1}$	0,00124	±	$7 \cdot 10^{-5}$	$-1.3 \cdot 10^{-7}$	$\pm$	$1 \cdot 10^{-8}$
14415,8	-1,09	±	$0,\!07$	$9,3 \cdot 10^{-4}$	±	$5 \cdot 10^{-5}$	$-1,04 \cdot 10^{-7}$	$\pm$	$6 \cdot 10^{-9}$
15009,7	-0,3	±	$^{0,3}$	$5 \cdot 10^{-4}$	±	$2 \cdot 10^{-4}$	$-4 \cdot 10^{-8}$	±	$3 \cdot 10^{-8}$
15075,2	-0,2	$\pm$	$0,\!1$	$4,4 \cdot 10^{-4}$	±	$8 \cdot 10^{-5}$	$-3 \cdot 10^{-8}$	$\pm$	$1 \cdot 10^{-8}$
16977,6	0,73	±	0,06	$9 \cdot 10^{-5}$	±	$3 \cdot 10^{-5}$	$-4 \cdot 10^{-9}$	±	$5 \cdot 10^{-9}$

Tabelle 1: Die Funktionsparamter A,B und C für jede Spektrallinie mit statistischem Fehler

### 3.4.2. Halbwertsbreite in Abhängigkeit von der Temperatur



(a) Spektrallinie bei 13405,4 Å



Abbildung 6: Halbwertsbreite der jeweiligen Spektrallinie in Abhängigkeit von der Temperatur.

Nun soll das Verhalten der Halbwertbreite der verschiedenen Spektrallinien in Abhängigkeit von der Temperatur untersucht werden. Dazu soll die Halbwertsbreit von zwei Spektrallinien beispielhaft betrachtet werden, die Halbwertsbreiten der übrigen Linien finden sich in Anhang C. Für Temperaturen unterhalb von 3900 K lässt sich deutlich ein linearer Verlauf erkennen, bei höheren Temperaturen ist kein mathematischer Zusammenhang der Datenpunkte zu erkennen. Dies unterstützt das Ergebnis, dass ab einer Temperatur von 3900 K keine Wassermoleküle mehr in der Atmosphäre vorhanden sind.



Abbildung 7: Halbwertsbreite der jeweiligen Spektrallinie in Abhängigkeit von der Temperatur mit einem linearen Fit.

Für eine genauere Analyse des linearen Verlaufs wird der Temperaturbereich von 3000 K bis 3900 K wieder gesondert betrachtet, die übrigen Abbildungen sind in Anhang D zu finden. An die Datenpunkte ist ein linearer Fit der Form  $H = A + B \cdot T$  angelegt, wobei H die Halbwertsbreite in Angström ist. Dies ist das einfachst-mögliche Polynom, welches den Datenverlauf sinnvoll wieder gibt.

Wellenlänge der Linienmitte		А			В	
$13405,\!4$	$0,\!95$	±	$0,\!03$	$-1,5 \cdot 10^{-5}$	$\pm$	$0,5 \cdot 10^{-5}$
13489,7	0,80	±	0,05	$-5 \cdot 10^{-5}$	$\pm$	$1 \cdot 10^{-5}$
14142,5	0,7	±	$^{0,1}$	$0 \cdot 10^{-5}$	±	$3 \cdot 10^{-5}$
14231,6	0,99	±	$0,\!04$	$-8.10^{-5}$	±	$1 \cdot 10^{-5}$
14415,8	0,67	±	0,02	$-3,3 \cdot 10^{-5}$	±	$0,7 \cdot 10^{-5}$
15009,7	1,04	±	$0,\!03$	$-13 \cdot 10^{-5}$	±	$1 \cdot 10^{-5}$
15075,2	1,0	±	$^{0,1}$	$-6 \cdot 10^{-5}$	±	$3 \cdot 10^{-5}$
16977,6	1,2	±	$^{0,1}$	$-20 \cdot 10^{-5}$	±	$3 \cdot 10^{-5}$

Tabelle 2: Die Funktionsparamter A und B für jede Spektrallinie mit statistischem Fehler

Betrachtet man die Ergebnisse für die Parameter A und B, stellt man fest, dass der Verlauf der Halbwertsbreite in Abhängigkeit von der Temperatur sehr gut durch eine Gerade mit negativer Steigung und positivem Achsenabschnitt wiedergegeben wird. Das bedeutet, je höher die Temperatur ist, desto schmaler ist die Spektrallinie.

#### 3.4.3. Normierung der Spektrallinien

In diesem Abschnitt soll auf die Abweichungen der oben bestimmten Paramter eingegangen werden. Zu großen Teilen resultieren diese aus dem beschriebenen Normierungsverfahren. Da die Fehler für die Spektrallinien bei konstant gehaltener Oberflächengravitation gering sind, werden hier zwei Linien beispielhaft besprochen, die Übrigen sind in Anhang E zu finden.



Abbildung 8: normierter Fluss der Linienmitte in Abhängigkeit von der Wellenlänge Lambda in Angström.In Blau dagestellt sind Linien für hohe Temperaturen, beginnend mit 4900 K, in Rot abgebildet sind Linien mit niedrigen Temperaturen, endend mit 3000 K.

Aus Abbildung 8 wird deutlich, dass der Fluss der Linienmitte mit zunehmender Temperatur abnimmt, bis keine Spektrallinie mehr auszumachen ist.

Als Beispiel wurden die Linien ausgewählt, die durch ihre Form am auffälligsten sind. Die Spektrallinie bei 16977,6 Å ist deutlich flacher als die Übrigen, daher fallen auch alle Ungenauigkeiten, die durch das Normierungsverfahren entstehen stärker ins Gewicht. So lassen sich die Abweichungen der Halbwertsbreite und des Flusses der Linienmitte erklären. Die Spektrallinie bei 15075,2 Å ist nicht ganz symmetrisch, wie man es bei einem Gaußprofil erwartet. Eine mögliche Ursache ist die Überlagerung mit einer anderen Spektrallinie.

## 3.5. Abhängigkeit der Linienform von der Oberflächengravitation

Um den Einfluss der Oberflächengravitation auf die Linienform der Spektrallinien zu untersuchen, wird die Effektivtemperatur konstant gehalten. Für alle vorgestellten Linien gilt  $T_{\rm eff}$  = 3500K. Um den Fluss der verschiedenen Kurven vergleichbar zu machen, wurden auch hier für eine Spektrallinie alle Flüsse an einem Wellenlängenpunkt auf eins normiert.



### 3.5.1. Fluss der Linienmitte in Abhängigkeit von der Oberflächengravitation

(d) Spektrallinie bei 14231,6 Å

Abbildung 9: normierter Fluss der Linienmitte der jeweiligen Spektrallinie in Abhängigkeit von der Oberflächengravitatin (logarithmisch).



(c) Spektrallinie bei 15075,2 Å



Bei einer niedrigen Oberflächengravitation  $(\log(g) = 0$  bis  $\log(g) = 2)$ ist der Fluss der Linienmitte gering und die Spektrallinie sehr flach. Die Abweichenungen des normierten Flusses der Linienmitte für die verschiedenen Spektrallinien ist durch das Normierungsverfahren zu erklären, darauf wird im nächsten Abschnitt genauer eingegangen. Im mittleren Bereich  $(\log(g) = 2$  bis  $\log(g) = 5)$  nimmt der Fluss der Linienmitte zu und nimmt bei hohen Werten  $(\log(g) = 5$  bis  $\log(g) = 6)$  wieder leicht ab. Bei konstanter Wellenlänge ist eine Spektrallinie bei einer Oberflächengravitation von ungefähr  $\log(g) = 5$  am tiefsten. Im Vergleich mit den Daten der temperaturabhängigen Messung fällt auf, dass der mathematische Zusammenhang ein anderer ist, sowie dass die Datenpunkte unpräziser sind. Besonders die Werte der Spektrallinie bei 13489,7 Å, in Abb. 10(b) dargestellt, weichen deutlich von den Werten der übrigen Linien ab. Ein möglicher Grund ist die Überlagerung aus mehreren Spektrallinien, die im Spektrum nicht einzeln erkennbar waren. Eine solche Überlappung von Linien verfälscht den Fluss und kann so zu dem abweichenden Verlauf der Datenpunkte führen.

#### 3.5.2. Halbwertsbreite in Abhängigkeit von der Oberflächengravitation

Ein klarer Zusammenhang von Halbwertsbreite und Oberflächengravitation ist wie bei der Betrachtung der Temperatur nicht möglich. Dies ist in den nachfolgenden Abbildungen zu erkennen, die übrigen Linien finden sich in Anhang F. Besonders die Werte für niedriges log(g) variieren stark und waren teilweise nicht messbar. Im mittleren Bereich kann man einen konstanten Zusammenhang vermuten, für hohe Oberflächengravitation nimmt die Halbwertsbreite leicht zu.



Abbildung 11: Halbwertsbreite der jeweiligen Spektrallinie in Abhängigkeit von der Oberflächengravitation (logarithmisch).

#### 3.5.3. Normierung der Spektrallinien

In diesem Abschnitt kam es zu stärkeren Unsicherheiten, als im Abschnitt über die Abhängigkeit der Linienform von der Temperatur. Der Hauptgrund ist auch hier bei dem gewählten Normierungsverfahren zu vermuten. Daher werden hier die einzelnen Spektrallinien betrachtet, um Abweichungen deutlich zu machen:



(a) Spektrallinie bei 13405,4 Å

(b) Spektrallinie bei 13489,7 Å

Abbildung 12: normierter Fluss der Linienmitte in Abhängigkeit von der Wellenlänge Lambda in Angström.

Es fällt auf, dass nur die in Abb. 12 (b) und Abb. 12 (e) dargestellten Spektrallinien die gewünschte Gestalt aufweisen. Bei den übrigen Linien weicht der Fluss bei einer niedrigen Oberflächengravitation dagegen so stark von der Form einer Spektrallinie ab, dass eine Auswertung kaum oder gar nicht möglich ist. Dies war für die in Abbildung 13(b) dargestellte Linie der Fall.

Außerdem fällt auf, wenn man die Spektrallinien bei konstanter Temperatur mit denen bei konstanter Oberflächengravitation vergleicht, dass die ersteren Linien deutlich flacher sind, der Fluss der Linienmitte also geringer ist, als bei konstanter Oberflächengravitation. Dadurch fallen Ungenauigkeiten, die aus der Normierung resultieren stärker ins Gewicht.



Abbildung 13: normierter Fluss der Linienmitte in Abhängigkeit von der Wellenlänge Lambda in Angström.

## 4. Zusammenfassung

Aus den theoretischen Spektren wurden Spektrallinien für 8 verschiedene Wellenlängen vermessen. Tatsächlich bestand beinahe das gesamte Spektrum in dem bearbeiteten Wellenlängenbereich hauptsächlich aus Spektrallinien von molekularem Wasser, wobei größere Bereiche von atomaren Linien dominiert wurden, so dass Wasserlinien nicht eindeutig identifiziert werden konnten.

Die Betrachtung der Spektrallinien in Abhängigkeit von der Temperatur hat zu dem Ergebniss geführt, dass ab ungefähr 3900 K keine Wassermoleküle mehr in der Atmosphäre enthalten sich und daher ab dieser Temperatur auch kein Fluss der Linienmitte gemessen wurde. Die Halbwertsbreite der Linien nimmt mit steigender Temperatur ab.

Bei der Betrachtung der Spektrallinien in Abhängigkeit von der Oberflächengravitation ist keine quantitative Aussage möglich, da der Verlauf der Datenpunkte nicht eindeutig durch eine Funktion genähert werden konnte. Qualitativ kann man aussagen, dass die Tiefe der Spektrallinien im Bereich von log(g) = 2 bis log(g) = 5 zunimmt, und für noch höhere Oberflächengravitation wieder leicht sinkt.

# A. Normierter Fluss & Temperatur

In den folgenden Abbildungen ist der normierter Fluss der Linienmitte der jeweiligen Spektrallinie in Abhängigkeit von der Temperatur dar gestellt.



Abbildung 14: links: Spektrallinie bei 13405,4 Å, rechts: Spektrallinie bei 13489,7 Å



Abbildung 15: links: Spektrallinie bei 14142,5 Å, rechts: Spektrallinie bei 14231,6 Å



Abbildung 16: links: Spektrallinie bei 14415,8 Å, rechts: Spektrallinie bei 15009,7 Å



Abbildung 17: links:Spektrallinie bei 15075,2 Å, rechts: Spektrallinie bei 16977,6 Å

# B. Normierter Fluss & Temperatur & Fit

In den folgenden Abbildungen ist der normierter Fluss der Linienmitte in Abhängigkeit von der Temperatur dargestellt, mit einem polynomiellen Fit.



Abbildung 18: links: Spektrallinie bei 14142,5 Å, rechts: Spektrallinie bei 14231,6 Å



Abbildung 19: links: Spektrallinie bei 14415,8 Å, rechts: Spektrallinie bei 15009,7 Å



Abbildung 20: links: Spektrallinie bei 15075,3 Å, rechts: Spektrallinie bei 16977,6 Å

# C. Halbwertsbreite & Temperatur

In den folgenden Abbildungen ist die Halbwertsbreite der jeweiligen Spektrallinie in Abhängigkeit von der Temperatur dar gestellt.



Abbildung 21: links: Spektrallinie bei 13405,4 Å, rechts: Spektrallinie bei 13489,7 Å



Abbildung 22: links: Spektrallinie bei 14142,5 Å, rechts: Spektrallinie bei 14231,6 Å



Abbildung 23: links: Spektrallinie bei 14415,8 Å, rechts: Spektrallinie bei 15009,7 Å



Abbildung 24: links: Spektrallinie bei 15075,2 Å, rechts: Spektrallinie bei 16977,6 Å

# D. Halbwertsbreite & Temperatur & Fit

In den folgenden Abbildungen ist die Halbwertsbreite der jeweiligen Spektrallinie in Abhängigkeit von der Temperatur dragestellt, mit einem linearen Fit.



Abbildung 25: links: Spektrallinie bei 14142,5 Å, rechts: Spektrallinie bei 14231,6 Å



Abbildung 26: links: Spektrallinie bei 14415,8 Å, rechts: Spektrallinie bei 15009,7 Å



Abbildung 27: links: Spektrallinie bei 15075,2 Å, rechts: Spektrallinie bei 16977,6 Å

# E. Untersuchte Spektrallinien (log(g)=konstant)

In den folgenden Abbildungen ist der normierter Fluss der Linienmitte in Abhängigkeit von der Wellenlänge Lambda in Angström dargestellt. In dunklem Blau sind Linien mit niedrigem  $\log(g)$  dargestellt, beginnend bei  $\log(g)=0$ , in hellem Blau Linien mit hohem  $\log(g)$ , endend bei  $\log(g)=6$ .



Abbildung 28: links: Spektrallinie bei 13405,4 Å, rechts: Spektrallinie bei 13489,7 Å



Abbildung 29: links: Spektrallinie bei 14142,5 Å, rechts: Spektrallinie bei 14231,6 Å



Abbildung 30: links: Spektrallinie bei 14415,2 Å, rechts: Spektrallinie bei 15009,7 Å

# F. Halbwertsbreite & Oberflächengravitation



Abbildung 31: Halbwertsbreite der jeweiligen Spektrallinie in Abhängigkeit von der Oberflächengravitation (logarithmisch).

# Literatur

- [Demtröder 2010] DEMTRÖDER, W.: Experimentalphysik 3, Atome, Moleküle, Festkörper, vierte Auflage, 2010
- [Haken und Wolf 2006] HAKEN, H.; WOLF, H. C.: Molekülphysik und Quantenchemie, fünfte Auflage, 2006
- [Hauschildt 2010] HAUSCHILDT, P. H.: Einführung in die Astronomie und Astrophysik. Universität Hamburg, Vorlesung, 2010
- [Hauschildt und Baron 1999] HAUSCHILDT, P. H.; BARON, E.: Numerical solution of the expanding stellar atmosphere problem. In: Journal of Computational and Applied Mathematics 109 (1999), September, S. 41 63
- [Hauschildt und Baron 2007] HAUSCHILDT, P. H.; BARON, E.: PHOENIX version 15 (manual). http://www.hs.unihamburg.de/EN/For/ThA/phoenix/manual.html:, 2007
- [Hauschildt u.a. 1997] HAUSCHILDT, P. H.; BARON, E., ALLARD, F.: Parallel Implementation of the PHOENIX Generalized Stellar Atmosphere Program. In: ApJ 483 (1997), Juli, S.390+
- [Hertel 2010] HERTEL, I.V.; SCHULZ, C.-P.: Atome, Moleküle und optische Physik 2, 2010
- [Rutten 2003] RUTTEN, R. J.: Radiativ Transver in Stellar Atmospheres. eighth. Utrecht University lecture notes, Mai 2003

# **Eidesstattliche Versicherung**

Hiermit bestätige ich, dass die vorliegende Arbeit von mir selbständig verfasst wurde und ich keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel – insbesondere keine im Quellenverzeichnis nicht benannten Internet-Quellen – benutzt habe und die Arbeit von mir vorher nicht einem anderen Prüfungsverfahren eingereicht wurde. Die eingereichte schriftliche Fassung entspricht der auf dem elektronischen Speichermedium. Ich bin damit einverstanden, dass die Bachelorarbeit veröffentlicht wird.

Hamburg, den 26. Juli 2011

(Anna Heise)