

# **Universität Hamburg**

Fachbereich Physik

Moleküllinien in kühlen

M-Zwergen, modelliert

mit PHOENIX

**Diplomarbeit**

Alexander Christopher Wawrzyn

abgeschlossen am 31. Januar 2006 in Hamburg



## Zusammenfassung

Diese Diplomarbeit beschäftigt sich mit einigen der wichtigsten Moleküllinien in den Spektren kühler M-Zwerge. Dieser Sternentyp bildet das untere Ende der Hauptreihe und steht an der Grenze zu den substellaren Braunen Zwergen. Verglichen mit solaren Werten sind Leuchtkraft und Masse eines M-Zwerges deutlich kleiner und liegen etwa bei  $L \leq 0.03 L_{\odot}$  bzw.  $M \leq 0.5 M_{\odot}$ . Die Effektivtemperatur ist mit  $1500 \text{ K} \leq T_{\text{eff}} \leq 4000 \text{ K}$  sehr niedrig, so dass M-Zwerge auch über die Molekülbanden von TiO, VO und FeH charakterisiert und definiert werden. Wasserstoffhaltige Moleküle sind ebenfalls in den Spektren wichtig und so sind auch die Banden der Moleküle CaH, MgH und H<sub>2</sub>O deutlich sichtbar, wobei H<sub>2</sub>O hierbei besonders den infraroten Bereich dominiert.

Die synthetischen Spektren dieser Arbeit wurden mit dem allgemeinen Atmosphären-Simulationsprogramm PHOENIX modelliert. Zu Beginn der Diplomarbeit wurden neue Liniendaten für Titaniumoxid (TiO), Vanadiumoxid (VO) und Calciumhydrid (CaH) von Bertram Plez (2004) und eine breite Mischung weiterer Moleküle aus der Hitran Datenbank von 2004 (u.a. H<sub>2</sub>O, OH, HO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub>) in PHOENIX implementiert. Typische Parameter für die Simulationen waren Schwerebeschleunigungen von  $\log(g) = 0, 2$  und  $5$  (cgs-Einheiten), sowie Temperaturen von 2500, 3000, 3500 und 4000 Kelvin. Dabei wurde durchgängig eine solare Metallizität, also  $Z = [\text{H}/\text{M}] = 0$ , angenommen.

Ein Vergleich dieser und einer weiteren H<sub>2</sub>O Moleküllinienliste mit den jeweiligen älteren Listen ergab fast durchgängig eine Verbesserung der Qualität und Quantität der Linien. Diese Tests wurden bei  $T_{\text{eff}} = 2500$ ,  $\log(g) = 5$  und  $Z = 0$  durchgeführt. Des Weiteren wurden neue EOS Daten für TiO getestet, die die Häufigkeit dieses Moleküls wie erwartet erhöhen. Der Einfluss neuer veränderter Anzahlhäufigkeiten der Photosphäre wird gezeigt, kann aber nicht bewertet werden.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>4</b>
1.1	Sternatmosphären-Code PHOENIX . . . . .	5
1.2	Aufbau der Diplomarbeit . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Theorie</b>	<b>10</b>
2.1	Extinktion und Emission . . . . .	10
2.1.1	Strahlungstransportgleichung . . . . .	12
2.1.2	Konvektion . . . . .	12
2.2	Linienprofile . . . . .	13
2.3	Thermodynamische Näherungen und Zustandsgleichungen . . . . .	14
2.4	Molekülbildung . . . . .	14
2.5	Molekülphysik . . . . .	15
2.5.1	Elektronische Energie . . . . .	15
2.5.2	Vibrationsenergie . . . . .	16
2.5.3	Rotationsenergie . . . . .	19
2.5.4	Translationsenergie . . . . .	20
<b>3</b>	<b>Neue Linienlisten in PHOENIX</b>	<b>22</b>
3.1	Struktur der Linienlisten von Plez . . . . .	22
3.2	Struktur der HITRAN Datenbank . . . . .	24
3.2.1	Berechnung des $gf$ -Wertes . . . . .	28
<b>4</b>	<b>Vergleich der Linienlisten</b>	<b>30</b>
4.1	TiO Linienliste . . . . .	30
4.1.1	Verschiebung zwischen Schwenke und Plez Linien . . . . .	32
4.1.2	Neue EOS Daten für TiO . . . . .	34
4.2	VO Linienliste . . . . .	35
4.3	CaH Linienliste . . . . .	36
4.4	HITRAN Linienlisten . . . . .	37
4.5	H <sub>2</sub> O Linienliste . . . . .	39
<b>5</b>	<b>Neue solare Häufigkeiten der Photosphäre</b>	<b>42</b>
<b>6</b>	<b>Ausblick</b>	<b>45</b>

---

<b>A</b>	<b>Implementation der Linienlisten</b>	<b>46</b>
A.1	PHOENIX internes Linien-Speicherformat . . . . .	46
A.1.1	Technische Details . . . . .	47
A.1.2	Speicherformate . . . . .	48
<b>B</b>	<b>Tabellen</b>	<b>50</b>
B.1	Tabellen zur Kodierung der Moleküldaten . . . . .	50
<b>C</b>	<b>Glossar: englische Begriffe</b>	<b>55</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>56</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>60</b>
	<b>Selbständigkeitserklärung</b>	<b>61</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

In diesem Kapitel werden zunächst einige wesentliche Grundlagen und Begriffe<sup>1</sup> erklärt. Als Energielieferant der Strahlung eines Stern dient die Fusion leichter Elemente in seinem Inneren. Diese Strahlung gelangt von dort aus sehr langsam über viele Absorptions- und Emissionsprozesse nach außen. (Im Fall der Sonne berechnet man z.B. etwa 100 000 Jahre bis die Energie mittels Strahlungstransport (siehe Kapitel 2) an die Oberfläche gelangt.) Diese Verteilung im Innern ist so vollständig, dass sie in erster Näherung als Schwarzkörper modelliert werden kann.

Am Rand des Sternes, der Atmosphäre, gilt diese Näherung nicht mehr und individuelle Prozesse werden wichtig. Die Atmosphäre gliedert sich in vier Schichten (Photosphäre, Korona, Chromosphäre, Heliosphäre), wobei im folgenden immer die Photosphäre gemeint sein wird, auch wenn allgemein von einer Atmosphäre gesprochen wird.

Die Sternatmosphäre wird als diejenige Schicht definiert, von der aus die Strahlung den Stern verlässt und nicht wieder absorbiert wird. Sie ist nach außen 'sichtbar' und ihre Struktur damit folglich auf das Engste mit den emittierten Spektren verknüpft.

Ein Spektrum wird als Diagramm des Strahlungsflusses in Abhängigkeit der Wellenlänge oder der Energie dargestellt. Das Spektrum unterscheidet sich dadurch am Rand des Sternes von einem Schwarzkörper, dass dort kein thermisches Gleichgewicht mehr herrscht und die Strahlungsübergänge in den Atomen nur diskrete Energien zulassen. Die Abhängigkeit ist derart, dass signifikante Linien (aber auch ein Kontinuum) im Spektrum Rückschlüsse auf die Art und (mittels ihrer Stärke) auch auf die Häufigkeit der daran beteiligten Atome zulassen. Moleküle werden erst bei den kühleren ( $T_{\text{eff}} \leq 4000$  K) Sternatmosphären wichtig, da sie vorher dissoziieren. (Die Übergänge zwischen den verschiedenen elektronischen Zuständen fallen häufig in den optischen ( $4000 \text{ \AA} - 8000 \text{ \AA}$ ) oder ultravioletten Bereich ( $2000 \text{ \AA} - 4000 \text{ \AA}$ ). Die Übergänge zwischen (reinen) Vibrations- bzw. Rotationsniveaus liegen meistens im Infrarot ( $> 8000 \text{ \AA}$ ) oder Radiofrequenzbereich.) Wie bei den Atomen und Ionen bestimmen auch bei den Molekülen im Wesentlichen die Elektronen entsprechend ihrer Quantenzahlen die diskreten Energiezustände, wobei hier das elektrische Feld der Atomkerne kein Coulombfeld, sondern im einfachsten Fall eines zweiatomigen heteronuklearen Moleküls AB ein Dipolfeld ist. (Mehratomige heteronukleare Moleküle wirken in Abständen groß gegen den Atomabstand ebenfalls als Dipolfeld, während homonukleide Moleküle in der Dipolnäherung keine erlaubten Schwingungs-Rotations-Übergänge innerhalb desselben

---

<sup>1</sup>Eine Übersicht der in dieser Diplomarbeit verwendeten englischen Begriffe und deren Abkürzungen befindet sich im Anhang C.

elektronischen Zustandes besitzen).

Das besondere an Molekülen ist, dass sich jeder elektronische Zustand infolge der Schwingungen der Atomkerne im Molekül in mehrere Vibrationsniveaus (Quantenzahl  $\nu$ ) aufspaltet, welche wiederum wegen der Rotation des Moleküls in eine Serie von Rotationsniveaus (Quantenzahl  $J$ ) aufspalten (siehe Kapitel 2.5). Moleküle besitzen also sogenannte 'Bänder' und nicht nur die einzelnen Linien der elektronischen Zustände. Sie können so das Spektrum in einem weiten Bereich stark beeinflussen.

Üblicherweise werden zur Modellierung kompakte Atmosphären angenommen, also jene, deren Dicke klein gegenüber dem Sternradius ist, so dass die Schichtung als planparallel und die Schwerebeschleunigung als konstant angenähert werden kann. Dies trifft für alle hier betrachteten Sterne hinreichend zu. (Unsere Sonne z.B. besitzt eine Photosphäre von etwa 100 km Ausdehnung und einen Radius von rund 700.000 km.)

Eine solche Photosphäre lässt sich durch folgende Parameter charakterisieren:

- Effektivtemperatur

Der Strahlungsstrom, also der Energiefluss pro Zeit durch eine Einheitsfläche, beträgt nach dem Stefan-Boltzmannschen Strahlungsgesetz:

$$F = \int_0^\infty F_\lambda d\lambda = \int_0^\infty F_\nu d\nu = \sigma T_{\text{eff}}^4$$

Rechnerisch ergibt sich für die Sonne  $T_{\text{eff},\odot} = 5780 \text{ K}$  bzw.  $F_\odot = 6,33 \cdot 10^7 \frac{\text{W}}{\text{m}^2}$  ( $F_\odot = 6,33 \cdot 10^{10} \frac{\text{erg}}{\text{s} \cdot \text{cm}^2}$  in cgs-Einheiten).

- Schwerebeschleunigung  $g$  an der Sternoberfläche

$$g \equiv g(R) = \frac{GM}{R^2}$$

Auf der Sonne stellt sich  $g_\odot = 274 \frac{\text{m}}{\text{s}^2}$  bzw.  $\log(g) = 4,4$  (in cgs-Einheiten) ein.

- Chemische Zusammensetzung der Photosphäre

Die Häufigkeit der Elemente ist essentiell für die möglichen Reaktionen.

In dieser Diplomarbeit wurden die solaren Elementhäufigkeiten von Grevesse und Noels (1993) (unveröffentlicht, in Jaschek und Jaschek (1995)) und zum Vergleich die neuen (noch umstrittenen) von Asplund *et al.* (2005) verwendet.

Eben diese Parameter gehören auch zu den Eingabegrößen in PHOENIX.

## 1.1 Sternatmosphären-Code PHOENIX

PHOENIX entstand aus den zusammengeführten Scherben der älteren Codes SNIRIS 3.0  $\alpha$  von P. Hauschildt bzw. CDWARF von F. Allard. Der Name entspringt zu gleichen Teilen der damaligen Wirkungsstätte P. Hauschildts (Phoenix, Arizona) und der mythologischen Wiedergeburt des Phoenix aus der Asche (seiner Vorgänger).

Das Programm wurde als ein sehr allgemeines Sternatmosphären-Simulationsprogramm entwickelt. Die erste Anwendung bestand in der Berechnung der Spektren von sich schnell ausbreitenden (Super-)Novahüllen während der ersten Wochen und Monate nach deren Explosion. PHOENIX wird aber ebenfalls dazu benutzt, um sowohl LTE<sup>2</sup> als auch NLTE<sup>3</sup> Modellatmosphären für Zwerg- und Riesensterne innerhalb des Hertzsprung-Russel-Diagramms (HRD) zu konstruieren. Die Anwendung erstreckt sich weiterhin auf Braune Zwerge, extrasolare Planeten (inklusive deren Bestrahlung durch einen benachbarten Stern), heiße Winde

<sup>2</sup>engl. 'local thermodynamic equilibrium' = lokales thermodynamisches Gleichgewicht

<sup>3</sup>engl. 'non-local thermodynamic equilibrium' = nicht-lokales thermodynamisches Gleichgewicht

von den Ausbrüchen 'Kataklysmischer Variablen' (CV)<sup>4</sup> und 'Aktive Galaktische Kerne' (AGN)<sup>5</sup>, wobei ständig neue Anwendungen / Verbesserungen wie z.B. neue Staubmodelle oder Moleküle hinzugefügt werden.

Das Programm nimmt eine sphärische Geometrie und einen statischen Zustand ( $\delta/\delta t \equiv 0$ ) des Sternes an. Für Supernovae wird eine homologe Ausbreitung ( $v(r) = v_0(r/R_0)$ ) und für Novae eine konstante Massenverlustrate vorausgesetzt. Dabei wird die vorgegebene Ausbreitungsgeschwindigkeit  $v_0$  als Inputparameter übergeben (typischerweise ist dies  $v_0 \approx 10^4 \text{ km s}^{-1}$  für Supernovae und  $v_0 \approx 10^3 \text{ km s}^{-1}$  für Novae). Der Dichteverlauf wird im Fall von klassischen Novae oder Supernovae nach einem Potenzgesetz ( $\rho(r) = \rho_0(r/R_0)^{-n_\rho}$ ) oder als exponentielles Dichteprofil ( $\rho(r) = \rho_0 \exp(v_e r / (v_0 R_0))$ ) und für Sterne als hydrostatisches Gleichgewicht angesetzt. Das Programm berücksichtigt die Umverteilung der Energie (insbesondere das Strahlungsgleichgewicht im Lagrange Bezugssystem). Abweichungen vom LTE, d.h. von der Saha-Boltzmann Gleichung für die Besetzung der Atomniveaus, sind für die wichtigen Elemente H, He, Li, C, N, O, S, Si, Mg, Ca, Ti, Co, Fe für mehr als 3700 NLTE Niveaus und mehr als 37 000 primäre NLTE Linien erlaubt. Ein lokales thermisches Gleichgewicht für weitere 40 Elemente und deren Ionen wird berücksichtigt, des Weiteren ein lokales chemisches Gleichgewicht für bis zu  $\approx 230$  Moleküle und einige ihrer Ionen.

Zur numerischen Lösung der Gleichungen in PHOENIX werden verschiedene Algorithmen verwendet, wie z.B.

- 1-D Newton oder Brent Methode bezüglich des Elektronendrucks zur Lösung der gekoppelten (generalisierten) Saha-Boltzmann-Gleichung für alle Atome (keine Moleküle)
- Multi-D Newton Methode zur Lösung der gekoppelten (generalisierten) Saha-Boltzmann-Gleichung und Moleküldissoziationsgleichung für die 'große' Zustandsgleichung (EOS)
- Operator Splitting Methode / Approximate  $\Lambda$ -Operator Iteration (OS/ALI) für die Lösung der speziell relativistischen Strahlungstransportgleichung für alle Wellenlängenpunkte
- Ratenoperator Formalismus für direktes Multi-Level NLTE
- modifizierte Unsöld-Lucy Methode für die Lösung der Energieerhaltungsgleichung im Lagrange Bezugssystem
- Bulirsch-Stoer Methode zur Lösung von zusätzlichen gewöhnlichen Differentialgleichungen, z.B. bei der Energiegleichung und der Berechnung des radialen Gitters
- Shooting Methode für die Berechnung des äußeren Radius  $R_{\text{out}}$

Diese waren aber nicht unmittelbar Gegenstand der Diplomarbeit, deswegen soll hier für weitere Informationen bezüglich der numerischen Methoden in PHOENIX auf den Artikel von Hauschildt und Baron (1999) und die darin zitierten Artikel als weitere Referenzen<sup>6</sup> verwiesen werden.

<sup>4</sup>engl. 'Cataclysmic Variables'

<sup>5</sup>engl. 'Active Galactic Nuclei'

<sup>6</sup>Eine etwas veraltete Anleitung mit kurzer Beschreibung des Programms kann auch hier gefunden werden: <http://www.hs.uni-hamburg.de/EN/For/ThA/phoenix/documents/Manual/Manual.pdf>

PHOENIX Versionen sind derzeit für die Betriebssysteme AIX, HPUNIX, Altix, Unicos, OSF/1, Solaris, LINUX, Mac OS X und FreeBSD verfügbar.

## 1.2 Aufbau der Diplomarbeit

Wie bereits in der Einleitung erläutert wurde, sind bei kühlen Sternen neben Atomlinienlisten besonders Moleküllinienlisten essentiell, um Spektren korrekt zu modellieren. Bei Sternen jenseits von M5 gilt dies vor allem für TiO, VO und H<sub>2</sub>O im optischen und nahem infraroten Bereich (Merrill *et al.* (1962)). Bei niedrigeren als solaren Metallizitäten sind weiterhin Hydride wie CaH, MgH und FeH dominierend (Schweitzer (1999)).

Die Qualität (Genauigkeit) und Quantität (Wellenlängen- bzw. Energiebereich) solcher Linienlisten wurde in den letzten Jahren immer weiter verbessert, dennoch besteht weiterer Forschungsbedarf auf diesem Gebiet. So gibt es z.B. für das ebenfalls wichtige Molekül FeH bisher nur unvollständige theoretische Werte.

Um diesem Einfluss der Linienlisten auf ein synthetisches Spektrum Rechnung zu tragen, enthält PHOENIX bereits diverse Atomlinienlisten (Kurucz (1993a))<sup>7</sup> und Moleküllinienlisten; u.a.

- kollisionsinduzierte Absorptionsopazitäten für H<sub>2</sub>, He, H, N<sub>2</sub>, Ar, CH<sub>4</sub> und CO<sub>2</sub> (Borysov *et al.* (1997), Borysov und Frommhold (1986a,b,c, 1987a,b), Borysov und Tang (1993), Samuelson *et al.* (1997) und Gruszka und Borysov (1997) und darin zitierte Artikel),
- 'ab initio' Berechnungen für H<sub>2</sub>O und TiO (Miller *et al.* (1994) und Schryber *et al.* (1995) bzw. Partridge und Schwenke (1997); Jorgensen (1994) bzw. Schwenke (1998)),
- CO (Goorvitch und Chackerian (1994a,b) und Goorvitch (1994)),
- MgH und OH (Kurucz (1993b)),
- VO und CrH (private Mitteilung von R.D. Freedman 1999),
- FeH (Phillips und Davis (1993)),
- CaH in Liniennäherung (beschrieben in Tsuji (1995) und Tsuji *et al.* (1996a,b) und darin zitierte Artikel) bzw. als Linienliste (Weck *et al.* (2003)),
- und weitere Moleküle aus der HITRAN92 und GEISA Datenbank (Rothman *et al.* (1992); Husson *et al.* (1992)).

Diesen wurden im Rahmen dieser Diplomarbeit umfangreichere Linienlisten für H<sub>2</sub>O (Barber *et al.* (2006), für TiO, VO und CaH (B. Plez (2004), nach dem Schema alter Arbeiten in Plez (1998)) und für 38 weitere Moleküle aus der HITRAN2004 (Rothman *et al.* (2005)) hinzugefügt.

Zum Testen dieser neuen Linienlisten wurden am Anfang GAIA-Modelle mit einer Effektivtemperatur von 2500, 3000, 3500 und 4000 Kelvin, einer Schwerebeschleunigung  $\log(g)$  von 0, 2 und 5 (cgs-Einheiten) und einer Metallizität  $Z$  von 0 verwendet. Wie sich zeigte,

<sup>7</sup>Enthält insgesamt über  $4.3 \cdot 10^7$  atomare Übergänge.

waren die Moleküllinien bei  $T_{\text{eff}} = 2500$  K und  $\log(g) = 5$  am stärksten, weswegen diese Einstellungen vorzugsweise für die hier verwendeten Spektren benutzt wurden.

Im Weiteren gliedert sich die Diplomarbeit in

- einen theoretischen Teil, welcher grundlegende Mechanismen zum Strahlungstransport, zu Linienprofilen und zu Rotations-Schwingungsspektren beinhaltet,
- in einen Untersuchungsteil, welcher die verwendeten Quellen auf Qualität und Quantität überprüft,
- in einen Vergleichsteil, welcher die Verbesserungen und Verschlechterungen zu älteren Moleküllinienlisten untersucht
- und schließlich in einen Abschlussteil, welcher eine kurze Zusammenfassung und einen Ausblick auf zukünftige Arbeiten enthält.

Im Anhang befinden sich weiterhin technische Details zur Implementation der Linienlisten in PHOENIX, Tabellen mit zusätzlichen Informationen über die Linienlisten und ein Glossar der in dieser Diplomarbeit verwendeten englischen Begriffe.



## Kapitel 2

# Theorie

Wie bereits in der Einleitung erwähnt ist nur aus der Atmosphäre abgestrahlte Energie nach außen sichtbar. Für den Transport der Energie aus dem Sterninneren in die Atmosphäre sorgt neben der elektromagnetischen Strahlung auch die Konvektion, während die Wärmeleitung in den hier betrachteten Fällen nur eine untergeordnete Rolle spielt. Turbulenzen und Rotation führen wie jede andere Bewegung des Gases zu einer Dopplerverschiebung und werden in den Linienprofilen nicht gesondert behandelt.

Im Weiteren wird lediglich kurz auf einige der wichtigsten Punkte, wie die Linienprofile, eingegangen, da jedes Thema für sich allein bereits recht komplex ist. Dabei werden auch die hydrodynamischen bzw. hydrostatischen Eigenschaften, die hauptsächlich einen Einfluss auf die Druckverteilung der Atmosphäre haben, ausgelassen.

### 2.1 Extinktion und Emission

Beim Durchqueren des Sternes wird die Strahlung von den Atomen bzw. Molekülen des Gases unzählige Male gestreut, absorbiert und wieder emittiert. Dies geschieht so vollständig, dass das Spektrum der Strahlung im Inneren des Sternes als schwarzer Körper mit einer effektiven Temperatur  $T_{\text{eff}}$  genähert werden kann.

Häufig werden Streuung ( $dI_\nu = \sigma_\nu I_\nu ds$ ) und Absorption ( $dI_\nu = \kappa_\nu I_\nu ds$ ), Prozesse, die Energie aus einem betrachteten Strahl abführen, als Extinktion ( $\chi_\nu = \kappa_\nu + \sigma_\nu \rightarrow dI_\nu = \chi_\nu I_\nu ds$ ) zusammengefasst. Die Streuung entfernt natürlich keine Energie aus dem Strahlungsfeld selbst, sondern nur aus dem jeweils betrachteten Strahl, welche in einen anderen Strahl hineingestrahlt werden kann. Dabei ist  $I_\nu$  die Intensität bei Frequenz  $\nu$ ,  $\sigma_\nu$  der Wirkungsquerschnitt der Streuung, die Photonen aus dem Strahl entlang des Weges  $ds$  herausbricht,  $\kappa_\nu$  der Wirkungsquerschnitt der Absorption dieser Photonen und  $\chi_\nu$  wird als Opazität bezeichnet. Als Energie zuführender Prozess ist die Emission ( $dI_\nu = \eta_\nu ds$ ) unabhängig von der spezifischen Intensität<sup>1</sup>  $I_\nu$ . Dabei ist  $\eta_\nu$  der Wirkungsquerschnitt der Emission.

Eine frequenzunabhängige Opazität beschreibt die 'Graue Atmosphäre'. Diese ist nur eine grobe Näherung einer wirklichen Atmosphäre, aber trotzdem ein guter Start der Modellierung, zumal sie viel weniger Rechenzeit benötigt.

Mit der Opazität lässt sich die optische Tiefe  $\tau_\nu$  einführen, die die Zahl mittlerer freier Weglängen eines Photons mit der Frequenz  $\nu$  zur Oberfläche beschreibt. Bei der Angabe von optischen Tiefen einer Atmosphäre wird normalerweise eine optische Tiefe  $\tau_{\text{std}}$  (oder

<sup>1</sup>Die induzierte Emission hängt durchaus von  $I_\nu$  ab und wird daher häufig als negative Extinktion behandelt.

$\tau_{\text{Rosseland}}^2$ ) gewählt, deren Frequenz nicht allzuweit von der des Maximums des Spektrums entfernt ist.

Wechselwirkungen, bei denen Photonen emittiert bzw. absorbiert werden, lassen sich in drei Klassen einteilen:

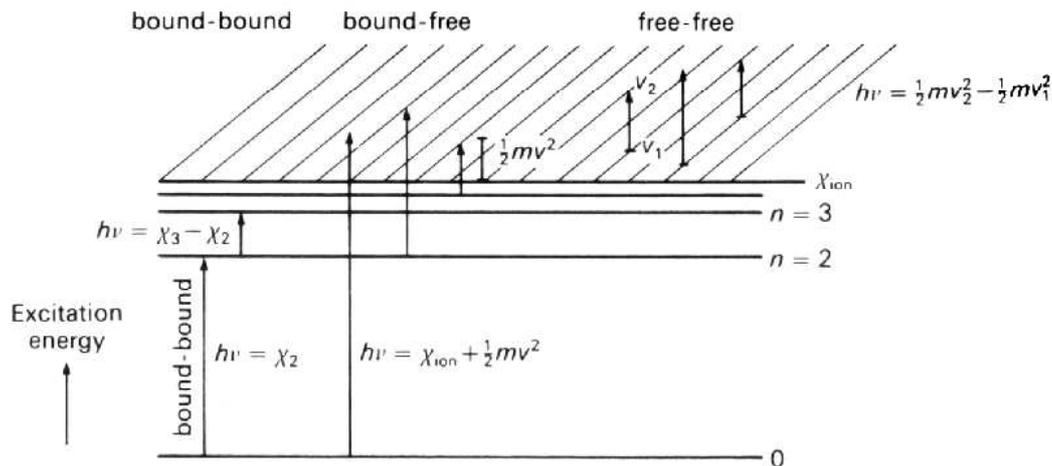


Abbildung 2.1: Mögliche elektronische Übergänge in einem Atom und dem Kontinuum (entnommen dem Buch von Böhm-Vitense (1989)).

- *gebunden-gebunden Übergänge* (bound-bound)  
Ein Linienprozess zwischen zwei gebundenen Niveaus  $j$  und  $i$  im Atom, der die Energie  $E_{j,i} = h\nu$  freisetzt oder aufnimmt und nur eine leichte Verschmierung dieser scharfen Linie im Rahmen der Unschärferelation erfährt.
- *gebunden-frei Übergänge* (bound-free)  
Ein Kontinuumsprozess bei der Ionisation eines Atoms / der Rekombination eines Elektrons mit dem Atom, bei dem abhängig von der Geschwindigkeit des Elektrons  $v$  die Energie  $h\nu = E_{j,\text{kont.}} + \frac{1}{2} m_e v^2$  aufgenommen / frei wird.
- *frei-frei Übergänge* (free-free)  
Ein Kontinuumsprozess, bei dem ein freies Elektronen der kinetischen Energie  $\frac{1}{2} m_e v_1^2$  durch Streuung die kinetische Energie  $\frac{1}{2} m_e v_2^2$  erhält und dabei die Energiedifferenz  $h\nu = \frac{1}{2} m_e (v_2^2 - v_1^2)$  je nach Vorzeichen aufnimmt bzw. nach außen abgibt.

Die Streuung setzt sich aus der Linienstreuung (kurzzeitige Absorption und Reemission durch ein Elektron im Atom / Molekül) und der kontinuierlichen Thomson- (Streuung an freien Elektronen) und Rayleigh-Streuung (Streuung an gebundenen Elektronen, ohne diese auszulösen) zusammen.

<sup>2</sup>gemittelte Absorption nach Rosseland:  $\frac{1}{\chi_R} = \int \frac{1}{\chi_\nu} \frac{dK_\nu}{ds} d\nu / \int \frac{dK_\nu}{ds} d\nu$

### 2.1.1 Strahlungstransportgleichung

Die Theorie, die die Ausbreitung des Lichtes durch ein Medium beschreibt, ist der Strahlungstransport. Wie gezeigt wurde, sind Extinktion  $\chi$  (Streuung und Absorption) und Emission  $\eta$  verantwortlich für eine Änderung der Intensität  $I$  in einem Lichtstrahl der Frequenz  $\nu$  über einen Weg  $s$ . Dies lässt sich in der Strahlungstransportgleichung<sup>3</sup> so formulieren

$$\frac{dI_\nu}{ds} = \eta_\nu(s) - \chi_\nu(s) \cdot I_\nu(s) \quad (2.1)$$

Vereinfachend lässt sich mittels einer 'source function'<sup>4</sup>  $S_\nu = \eta_\nu/\chi_\nu$  eine Größe einführen, die angibt, wieviel Intensität einem Strahl durch Emission und hineingestrahlte Streuung hinzugefügt wird.

Eine ausführliche Abhandlung zum Thema Strahlungstransport ist das Buch 'Stellar Atmospheres' von Mihalas (1970) bzw. Mihalas (1978). Ersteres soll sich mehr Zeit für die Grundlagen lassen, während die neuere Auflage zusätzliche Erkenntnisse aufführt. Ebenfalls für einen schnellen Überblick über das Thema geeignet ist das Skript von R.J. Rutten (Sterrekundig Instituut Utrecht) mit dem Titel 'Radiative Transfer in Stellar Atmospheres' (2003)<sup>5</sup>.

### 2.1.2 Konvektion

Eine weitere Form des Energietransportes in Sternatmosphären ist die Konvektion, bei der der Energietransfer durch Massentransport stattfindet. Unter der Annahme eines idealen Gases in der Atmosphäre lässt sich mit dem Schwarzschild-Stabilitäts-Kriterium prüfen, ob Konvektion auftritt.

$$\left( \frac{d \ln T}{d \ln p} \right)_R > \left( \frac{d \ln T}{d \ln p} \right)_A \quad (2.2)$$

Dabei ist  $d \ln T$  die logarithmische Temperatur- und  $d \ln p$  die logarithmische Druckveränderung für Strahlungs- (R) bzw. adiabatische Zustandsänderungen (A).

Konvektion stellt sich also dort ein, wo der Gradient des Strahlungstransportes den adiabatischen übersteigt. Dies könnte z.B. durch eine hohe Opazität oder einen hohen Strahlungsfluss hervorgerufen werden.

Zur Behandlung dieses Transportproblems durch Konvektion wird die sogenannte mixing length theory<sup>6</sup> (siehe Biermann (1932)) benutzt, welche die Konvektion näherungsweise behandelt. Demnach findet in konvektiven Schichten der Energietransport durch auf- und absteigende turbulente, adiabatische Elemente statt. Aufsteigende Elemente geben ihre thermische Energie erst nach dem Durchlaufen einer charakteristischen Weglänge ('mixing-length') an die Umgebung ab. Analog nehmen absteigende Elemente erst verspätet Energie aus dem umgebenden Medium auf. (Es ist zu beachten, dass die Wahl des Mischungsweges willkürlich ist.)

<sup>3</sup>PHOENIX benutzt eine kompliziertere, sphärisch symmetrische, speziell relativistische Strahlungstransportgleichung im mitbewegten (Langrange-) System, welche hier nicht benötigt wird.

<sup>4</sup>deu. Quellfunktion (früher einmal als 'Ergiebigkeitsfunktion' bezeichnet)

<sup>5</sup>Derzeit im Web zu finden unter: <http://www.fys.ruu.nl/~rutten/education/rjr-material/rtsa/afy.pdf>

<sup>6</sup>deu. Mischungsweg-Theorie (MLT)

## 2.2 Linienprofile

Obwohl die Änderung der Energie bei Linienprozessen (im Gegensatz zu Kontinuumsprozessen), klassisch betrachtet, sehr scharf sein sollte, führt die quantenmechanische Unschärfe trotzdem dazu, dass der Übergang in einem Energiebereich stattfindet. Diese 'Aufweichung' der natürlichen Linienbreite in Abhängigkeit der Frequenz wird mit dem natürlichen Linienprofil oder auch Lorentzprofil beschrieben:

$$L(\nu - \nu_0) = \frac{\gamma}{4\pi^2(\nu - \nu_0)^2 + \gamma^2/4} \quad (2.3)$$

Dabei ist  $\gamma$  eine übergangsabhängige Dämpfungskonstante und  $\nu_0$  die Zentralfrequenz. Aber nicht nur die natürliche Linienbreite hat einen Einfluss auf die Frequenz, sondern auch die thermische Bewegung des Atoms, die zu einer Dopplerverschiebung gegenüber dem Strahlungsfeld führt. Dieser Einfluss wird in dem Doppler- oder Gaußprofil berücksichtigt, wobei die Bewegung der Atome mit einer Maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung genähert wird:

$$D(\nu - \nu_0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\nu_D - \nu_0} \exp - \left( \frac{\nu - \nu_0}{\nu_D - \nu_0} \right)^2 \quad (2.4)$$

Hierbei wird der Dopplerparameter als  $\frac{\nu_D - \nu_0}{\nu_0} = \frac{v}{c}$  definiert. Die Faltung von Lorentz- und Dopplerprofil ergibt nun das sogenannte Voigtprofil, welches beide Effekte zusammenfasst:

$$H(\nu - \nu_0) = L(\nu - \nu_0) * D(\nu - \nu_0) \quad (2.5)$$

Anhand der Temperatur wird zur Laufzeit von PHOENIX intern entschieden, ob mit dem deutlich rechenzeitaufwendigeren Voigt- oder dem einfacheren Dopplerprofil gerechnet wird. Sollten Linien dicht beieinander liegen oder schwach sein, so dass ihre Flügel keinen nennenswerten Einfluss haben, lässt sich mit diesem Auswahlmechanismus viel Rechenzeit einsparen.

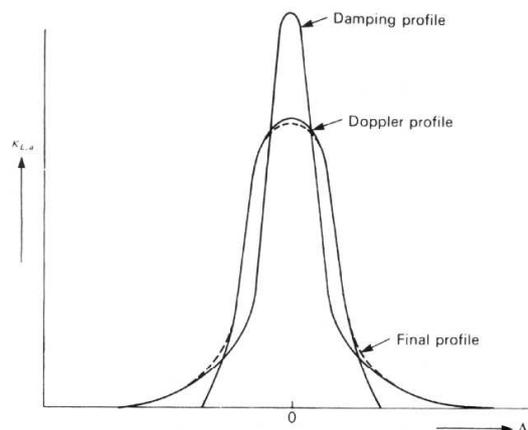


Abbildung 2.2: Die Skizze zeigt die Faltung des Lorentzprofiles (Dampening profile) und Dopplerprofiles (Doppler profile) zum Voigtprofil (Final profile) (entnommen dem Buch von Böhm-Vitense (1989)).

## 2.3 Thermodynamische Näherungen und Zustandsgleichungen

Man unterscheidet in einem Stern grob zwei verschiedene Zustände, nämlich lokales thermisches Gleichgewicht (LTE) bzw. nicht lokales thermisches Gleichgewicht (NLTE).

Vom LTE kann gesprochen werden, wenn zumindest lokal (nicht global) die Besetzungs- oder Ionisationszahlen vollständig durch die Stefan-Boltzmann-Gleichung anhand der thermodynamischen Größen Temperatur und Dichte oder Temperatur und Druck beschrieben werden können. Die restlichen Größen können dann durch die ideale Gasgleichung bestimmt werden.

Sollte dies nicht erfüllt sein, spricht man vom NLTE. Es bedeutet, dass weder global **noch** lokal eine Bestimmung wie im LTE erlaubt ist.

Genaugenommen kann niemals LTE existieren, da der Stern nicht abgeschlossen ist, aber es ist eine gute Näherung, wenn die Rate der Teilchenkollisionen viel größer ist als die Rate der Photonenwechselwirkungen. Diese Situation ergibt sich bei hohem Druck, da eine hohe Zahl an unelastischen Stößen im Medium dazu führt, dass sich Unterschiede genügend schnell ausgleichen und ein Gleichgewicht eintritt. Das Verhältnis der Besetzungszahlen  $n$  der Anregungszustände ist im LTE wie erwähnt durch die Boltzmannformel gegeben:

$$\frac{n_i}{n_j} = \frac{g_i}{g_j} \exp\left(-\frac{E_{ij}}{kT}\right) \quad (2.6)$$

Dabei sind  $g_i$  und  $g_j$  die statistischen Gewichte des jeweiligen Zustandes,  $E_{ij}$  die Energiedifferenz zwischen den beiden Zuständen,  $k$  die Boltzmannkonstante und  $T$  die Temperatur. Die Boltzmann-Gleichung gilt nur für gebundene Zustände, lässt sich aber für Ionisation zur Saha-Boltzmannformel erweitern, die für ein Ionisationspotential  $E_k$  das Verhältnis der Besetzungszahlen zwischen zwei beliebigen Ionisationsstufen beschreibt:

$$\frac{n_{k+1}n_e}{n_k} = 2\frac{g_{k+1}}{g_k} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_k}{kT}\right) \quad (2.7)$$

Hier ist  $n_e$  die Elektronendichte,  $h$  die Planck-Konstante und  $m_e$  die Elektronenmasse.

Solange die Näherung des LTE gültig ist, sind die Besetzungszahlen ohne Kenntnis des Strahlungsfeldes bestimmt und die Kenntnis der temperaturabhängigen Verteilungsfunktion genügt. In Atmosphären, in denen Streuung wichtig ist, herrscht NLTE, so dass Besetzungszahlen und Strahlungstransport, die über An- und Abregeprozesse zusammenhängen, gleichzeitig selbstkonsistent gelöst werden müssen. Ionisationsgrade und Besetzungszahlen lassen sich iterativ über Ratengleichungen bestimmen, auf die hier aber nicht genauer eingegangen soll.

PHOENIX rechnet nicht alle chemischen Elemente im NLTE, da viele nur einen vernachlässigen kleinen Einfluss auf das Spektrum haben und somit der Unterschied zwischen LTE und NLTE nicht ins Gewicht fällt. Dies erspart außerdem die rechenzeitaufwendige Lösung der NLTE-Ratengleichungen. Diese Elemente werden aber im LTE, also mit Besetzungszahlen, die der Boltzmann- und Saha-Gleichung genügen, berechnet.

## 2.4 Molekülbildung

Bei Temperaturen unter 4000 K beginnt die Bildung von Molekülen in der Atmosphäre. Die Bildung eines Moleküls ist im einfachsten Fall durch die Gleichgewichtsreaktion

$A + B \rightleftharpoons AB$  für ein zweiatomiges Molekül  $AB$  der Elemente  $A$  und  $B$  gegeben. Das Umwandlungsverhältnis wird durch das Massenwirkungsgesetz von C.M. Guldberg und P. Waage bestimmt:

$$\frac{P(A)P(B)}{P(AB)} = K_{AB}(T) \quad (2.8)$$

Dabei ist  $K_{AB}(T)$  eine Gleichgewichtskonstante, die sich ähnlich wie die Saha-Gleichung herleiten lässt:

$$K_{AB}(T) = \left( \frac{2\pi\mu kT}{h^2} \right)^{3/2} kT \frac{Q_A Q_B}{Q_{AB}} \exp\left(-\frac{E_D}{kT}\right) \quad (2.9)$$

Wobei  $\mu = m_A \cdot m_B / (m_A + m_B)$  die reduzierte Masse und  $E_D$  die Dissoziationsenergie ist.

## 2.5 Molekülphysik

Moleküle können im Gegensatz zu Atomen nicht nur elektronisch an- und abgeregt und bewegt werden, sondern auch vibrieren und rotieren. Hier wird eine Betrachtung dieser Energien vorgenommen. Wieviele Moleküle jeder Art sich bei der entsprechenden Temperatur bilden oder dissoziieren und sonstwie zu einer Änderung der Molekülstruktur führen, wird hier nicht erläutert.

Diese vier Energien im Molekül sind vom größten Energieschritt bis zum kleinsten:

- Elektronische Energie
- Vibrationsenergie
- Rotationsenergie
- Translationsenergie (kinetische)

Dabei verteilt sich die Energie gleichmäßig auf alle vier Energiearten, soweit dies die Energieschritte erlauben.

### 2.5.1 Elektronische Energie

Für die elektronischen Zustände werden oft folgende Bezeichnungen verwendet:  $X$  steht für den Grundzustand,  $A, B, C, \dots$  stehen für die immer höher angeregten Zustände (kleine Buchstaben  $a, b, c, \dots$  kennzeichnen in der Regel Tripletzustände). Bahnwellenfunktionen von Elektronenzuständen mit  $\lambda = 0, 1, 2, \dots$  nennt man  $\sigma, \pi, \delta, \dots$  in Analogie zur Bezeichnung  $s, p, d, \dots$  für Elektronen in Atomen mit  $l = 0, 1, 2, \dots$ . Die Gesamtzustände einer gegebenen Elektronenkonfiguration bezeichnet man in Abhängigkeit des Bandrehimpulses der  $z$ -Komponente  $\Lambda = 0, 1, 2, \dots$  mit den Symbolen  $\Sigma, \Pi, \Delta, \dots$ , wiederum in Anlehnung an die Bezeichnungen  $\sigma, \pi, \delta, \dots$  bei den Einzelelektronenzuständen. Für diese doch auf den ersten Blick recht komplizierte Benennung siehe auch das Buch von Haken und Wolf (1998). Die Anzahl der Elektronen im Molekül bestimmt den 'Füllstand' der Orbitale und damit welche elektronischen Zustände bzw. Übergänge zwischen verschiedenen Konstellationen möglich sind. Dieses wird in Grafik 2.3 anhand des Kohlenwasserstoff-Radikals  $CH$  exemplarisch gezeigt. Ein  $X-A$  Übergang besteht in der Anregung eines Elektrons in das nächst höhere Orbital (siehe 1. zu 3. Spalte in Abbildung 2.3). Der  $X-B$  Übergang unterscheidet

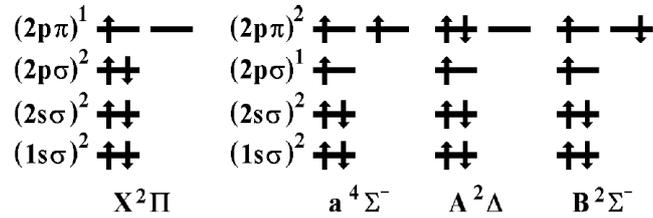


Abbildung 2.3: Elektronenkonfiguration in den Orbitalen in Abhängigkeit elektronischer Zustände am Beispiel eines CH Radikals (entnommen dem Buch von Herzberg (1989)).

sich in diesem Fall dadurch, dass das angeregte Elektron in ein neues, noch nicht einfach besetztes Orbital steigt, was energetisch ungünstiger ist als das angefangene Orbital abzuschließen und daher eine höhere Energie braucht (siehe 1. zu 4. Spalte in Abbildung 2.3). In den Linienlisten wird nicht der Fall der Absorption, sondern der Emission betrachtet, so dass die Abregung dieser Zustände folglich als  $A-X$ ,  $B-X$  etc. Übergang bezeichnet wird.

Die elektronischen Zustände für TiO, VO und CaH sind entsprechend zu verstehen. Die unterschiedliche Anzahl von Elektronen macht sich selbst bei den im Periodensystem nebeneinanderliegenden Atomen Ti und V deutlich bemerkbar. Eine Übersicht der wahrscheinlichsten Übergänge dieser drei Moleküle wird im Anhang B aufgeführt.

Abbildung 2.4 zeigt den elektronischen A-X Übergang und dazwischen mögliche Zweige. Diese entsprechen in etwa der Nomenklatur, die B. Plez für seine Linienliste wählt, wobei z.B.  ${}^R R_{11}$  verkürzt als R1 oder  ${}^O P_{12}$  groß als OP12 dort bezeichnet wird (siehe auch Tabelle 2.1). Die Benennung der Zweige resultiert aus den Änderungen der Quantenzahlen, wobei, wie in der Abbildung gezeigt,  $R$  die Gerüstrotation,  $N$  der Gesamtdrehimpuls ohne Spin und  $J$  der Gesamtdrehimpulsvektor ist. Aus  ${}^{\Delta N} \Delta J$  ergeben sich die Buchstaben der Zweigbenennung. Die beiden Zahlen geben jeweils die beiden Spinkomponenten des oberen und des unteren Zustandes an.

$\Delta J = -4 \rightarrow$ M-Linie	$\Delta J = -1 \rightarrow$ P-Linie	$\Delta J = +2 \rightarrow$ S-Linie
$\Delta J = -3 \rightarrow$ N-Linie	$\Delta J = 0 \rightarrow$ Q-Linie	$\Delta J = +3 \rightarrow$ T-Linie
$\Delta J = -2 \rightarrow$ O-Linie	$\Delta J = +1 \rightarrow$ R-Linie	$\Delta J = +4 \rightarrow$ U-Linie

Tabelle 2.1: Die Benennung der Zweige nach dem Wert von  $\Delta J$ .

Die Liste der Zweige lässt sich in beide Richtungen noch weiter fortsetzen; allerdings nimmt die Wahrscheinlichkeit der Existenz solcher Zweige sehr schnell ab.

Eine ausführliche Erklärung der hierfür wichtigen Übergangsmatrixelemente findet sich in dem Buch von Demtröder (1996).

## 2.5.2 Vibrationsenergie

Der einfachste Fall einer Molekül-Schwingung ist die in einem zweiatomigen Molekül. Handelt es sich um ein nicht-rotierendes Molekül, so ist die Rotationsquantenzahl  $J = 0$  und ein möglicher Zentrifugalterm verschwindet. Für die Lösung ist nun lediglich noch die Form der potentiellen Energie  $E_{\text{pot}}(R)$  entscheidend. Ein mit einem Wasserstoffatom vergliches

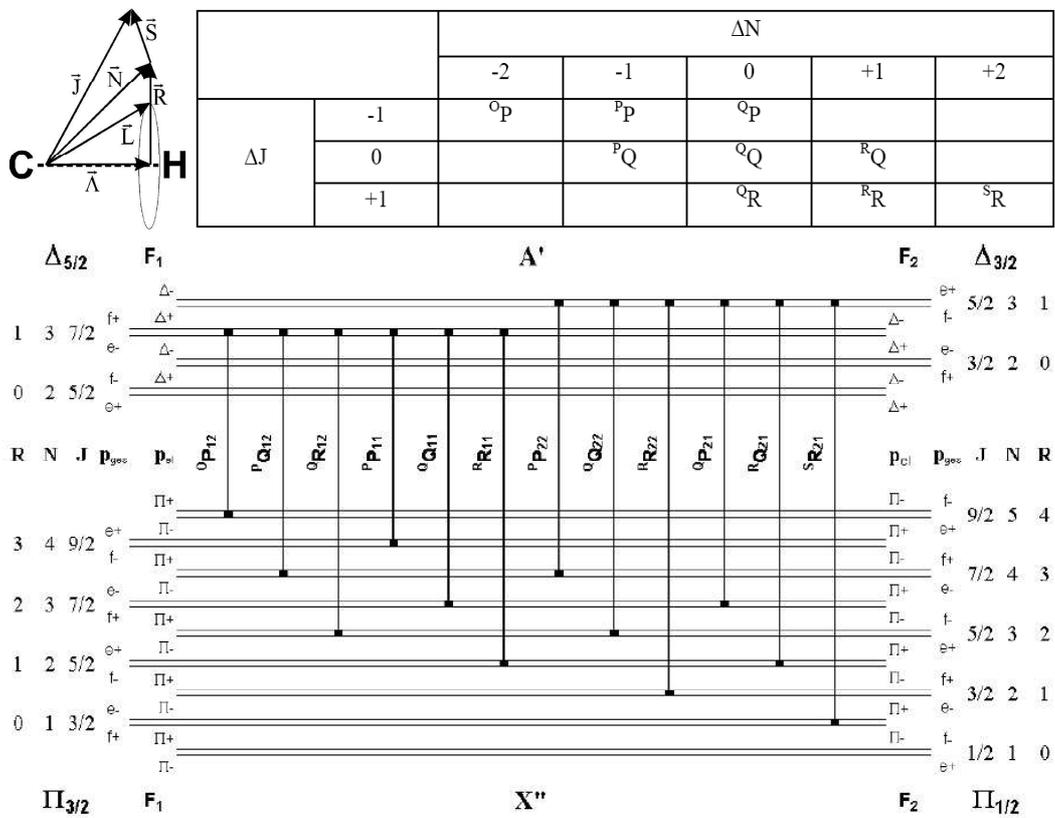


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der Zweige eines A-X Überganges am Beispiel des Radikals CH. Die Abstände der Energieniveaus sind nicht maßstabsgerecht (entnommen dem Buch von Herzberg (1989)).

schweres Atom kann als ruhend betrachtet werden. Unter der Annahme eines Parabelpotentials ergibt sich dann

$$E_{\text{pot}}(\vec{R}) = \frac{1}{2} k \vec{R}^2 \tag{2.10}$$

und

$$\vec{F}_{\text{Rückstell}} = -\vec{\nabla} E_{\text{pot}} = -k \vec{R} \tag{2.11}$$

Klassisch entspricht dieses einem Massenpunkt  $m$  an einer Feder mit der Federkonstanten  $k$  und der Rückstellkraft  $-kR$ , welche um die Ruhelage harmonische Schwingungen ausführt mit der Frequenz

$$\omega = \sqrt{k/m} \rightarrow k = \omega^2 \cdot m \tag{2.12}$$

Für eine quantenmechanische Behandlung dieses Problems ergibt sich aufgrund der Nullpunktsenergie eine leicht modifizierte Lösung für den harmonischen Oszillator. Des Weiteren muss für die Bewegung der beiden Atome gegeneinander, bei ähnlich schweren Atomen, auch die reduzierte Masse  $\mu = m_A \cdot m_B / (m_A + m_B)$  verwendet werden, so dass sich für die Energiewerte

$$E(n) = \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \tag{2.13}$$

ergibt, wobei die Frequenz nun  $\omega = \sqrt{k/\mu}$  ist. Auffallend sind hierbei die äquidistanten Energieschritte  $\Delta E = \hbar\omega$  zwischen benachbarten Energieniveaus.

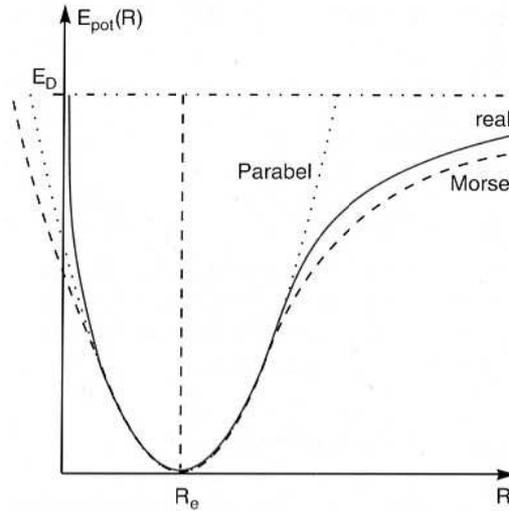


Abbildung 2.5: Parabel-, Morse- und reales Potential (entnommen dem Buch von Demtröder (1996)).

Das Parabelpotential ist bereits eine gute Näherung für ein reales Molekülpotential, wenn  $E_{\text{pot}}(R)$  in der Nähe des Minimums  $R = R_e$  liegt, doch für höhere Energien kann es erheblich abweichen (siehe Abbildung 2.5). Das sieht man z.B. daran, dass das reale Potential für  $R \rightarrow \infty$  gegen die Dissoziationsenergie  $E_D$  konvergieren muss, während das Parabelpotential für  $R \rightarrow \infty$  gegen  $E = \infty$  strebt.

Ein Potential, welches besser zur Berechnung der Schwingungsenergien im Potentialverlauf des anziehenden Teils bei  $R > R_e$  geeignet ist, ist das Morsepotential

$$E_{\text{pot}}(R) = E_D \cdot \left[1 - e^{-a(R-R_e)}\right]^2 \quad (2.14)$$

welches für  $R \rightarrow \infty$  gegen die Dissoziationsenergie  $E_D$  konvergiert und sein Minimum  $E_{\text{pot}}(R_e) = 0$  für  $R = R_e$  annimmt. Der abstoßende Teil des Potentials für  $R \ll R_e$  wird ungenügend beschrieben, da  $E_{\text{pot}}(R \rightarrow 0)$  gegen  $E(0) < E_D$  konvergiert, während das reale Potential wegen der Kernabstoßung für  $R \rightarrow 0$  gegen  $\infty$  gehen sollte. Das Morsepotential hat den großen Vorzug, dass es eine exakte Lösung der Schrödingergleichung erlaubt. Für die Energie  $E(\nu)$  der Schwingungsniveaus erhält man

$$E_{\text{vib}}(\nu) = \hbar\omega \left(\nu + \frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2\omega^2}{4E_D} \left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 \quad (2.15)$$

Die Abstände

$$\Delta E(\nu) = E(\nu + 1) - E(\nu) = \hbar\omega \left[1 - \frac{\hbar\omega}{2E_D}(\nu + 1)\right] \quad (2.16)$$

benachbarter Schwingungsniveaus sind nicht mehr konstant wie beim harmonischen Oszillator, sondern nehmen, wie auch experimentell bestätigt, mit wachsender Schwingungszahl  $\nu$

ab. Die Frequenz  $\omega = a\sqrt{2E_D/\mu}$  hängt von der Dissoziationsenergie  $E_D$  ab und entspricht der Frequenz eines klassischen Oszillators mit der Rückstellkonstanten  $k_r = 2a^2 E_D$ . Dabei ist  $a$  eine Konstante, die aus der Messung von  $\omega$  und  $E_D$  im Morsepotential ermittelt werden kann.

Obwohl der Abstand zwischen benachbarten Schwingungsniveaus mit zunehmender Energie immer kleiner wird, bleibt die Dissoziationsenergie endlich. Dies bedeutet, dass es für alle zweiatomigen Moleküle nur eine endliche Anzahl von Schwingungsniveaus gibt, im Gegensatz zur unendlichen Zahl elektronischer Zustände des H-Atoms. Diese Abstände werden durch die Formel

$$E_n = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{Z^2 m e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -R_\infty h c \frac{Z^2}{n^2} \approx -13.58 \text{ eV} \frac{Z^2}{n^2} \quad (2.17)$$

beschrieben und gehen (mit  $Z=1$ ) für  $n \rightarrow \infty$ , d.h.  $E_n \rightarrow E_{\text{ion}}$ , gegen Null.

### 2.5.3 Rotationsenergie

Der einfachste Fall eines starren Rotators ist eine Hantel, bei der die beiden Kerne mit den Massen  $m_A$  und  $m_B$  im festen Abstand  $a$  um eine senkrecht zur Verbindungslinie durch ihren gemeinsamen Schwerpunkt verlaufende Achse rotieren. Hier ergibt sich für das Trägheitsmoment

$$I = \mu a^2 = \frac{m_A \cdot m_B}{m_A + m_B} a^2 \quad (2.18)$$

und die Rotationsenergie

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 I} J(J+1) \quad (2.19)$$

wobei  $J = 0, 1, 2, \dots$  die Rotationsquantenzahl ist.

Das Auftreten von  $\mu = m_A m_B / (m_A + m_B)$ , der *reduzierten* Masse, in  $I$  bzw.  $E_{\text{Rot}}$  zeigt, dass die verschiedenen Isotope der Elemente in den Molekülspektren durchaus erkennbar unterschiedliche Energieniveaus haben. So ergibt sich z. B. zwischen den Linien von  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  und  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$  (in Gleichungen 2.18 und 2.19 eingesetzt) eine reduzierte Masse von 6.86 bzw. 7.17 und damit eine Energie- bzw. Frequenzverschiebung von einem Faktor 1.046!

Im Vergleich dazu sind die Isotopeneffekte bei atomaren Linien wesentlich kleiner, da hier die reduzierte Masse zur Hauptsache durch die gegenüber den Kernmassen wesentlich geringere Elektronenmasse  $m_e$  bestimmt wird. Hier lassen sich die Isotopenlinien nur bei den leichtesten Atomen (wie z.B.  $^1\text{H}/^2\text{D}$  oder  $^6\text{Li}/^7\text{Li}$ ) voneinander trennen.

Die Abbildung 2.6 zeigt das Verhältnis der Rotationsenergien zueinander, wobei es sich bei den Energieschritten um ein Vielfaches der Rotationskonstanten  $B = \hbar/(8\pi^2 c I)$  handelt. Es ergibt sich aus der Betrachtung des harmonischen Oszillators die Auswahlregel  $\Delta\nu = \pm 1$ , wobei im anharmonischen Potential (z.B. Morse-Potential) mit wesentlich geringerer Wahrscheinlichkeit auch die Übergänge  $\Delta\nu = \pm 2, 3, 4, \dots$  möglich sind, deren Intensität mit wachsenden Werten von  $\Delta\nu$  stark abnehmen. Ferner ergibt sich aus dem Drehimpuls des absorbierten bzw. emittierten Photons  $\Delta J = \pm 1$ . Alle Rotationslinien eines Schwingungsüberganges bilden eine sogenannte Schwingungsbande.

Die Bezeichnung der Zweige entspricht der Änderung  $\Delta J$  in der Rotationsquantenzahl (siehe Abbildung 2.4 oder Tabelle 2.1 im vorangegangenen Unterkapitel 2.5.1).

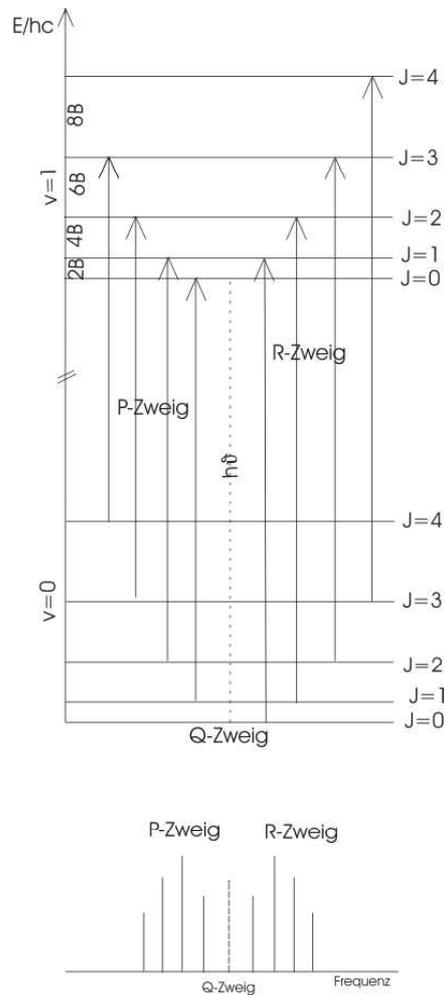


Abbildung 2.6: Die Zweige zwischen Übergängen verschiedener Energieniveaus eines starren Rotators (entnommen einer Praktikumsbeschreibung der Universität Heidelberg).

### 2.5.4 Translationsenergie

Ein Molekül wird durch Strahlung oder Stöße in Bewegung versetzt, wobei es aufgrund seiner drei translatorischen Freiheitsgrade im Mittel die kinetische Energie  $E_{\text{kin}} = \frac{3}{2}kT$  aufnimmt. Diese resultiert in einer Geschwindigkeit  $v$  des Moleküls mit der Masse  $M$  (Schwerpunkt) und lässt sich bekanntermaßen als  $E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}Mv^2$  schreiben.

Da es sich bei einer Sternatmosphäre um ein heißes Gas aus vielen Teilchen handelt, gilt die Maxwell'sche Geschwindigkeitsverteilung, wenn wir uns für den absoluten Wert der Geschwindigkeit des Moleküls interessieren.

$$f_0(|\vec{v}|) = 4\pi v^2 f_0(\vec{v}) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) dv \quad (2.20)$$

Wie die Abbildung 2.7 zeigt, ist diese Verteilung asymmetrisch, so dass der Maximalwert bei

$$\tilde{v} = \sqrt{\frac{2kT}{m}} \quad (2.21)$$

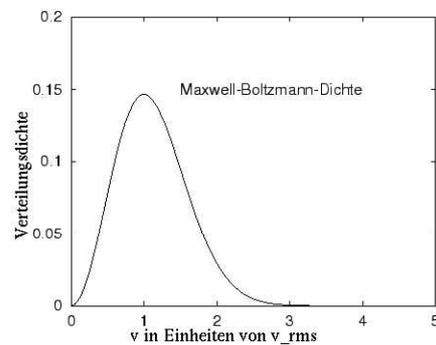


Abbildung 2.7: Maxwell-Boltzmann-Verteilung

liegt und diese wahrscheinlichste Geschwindigkeit **nicht** identisch mit der mittleren Geschwindigkeit

$$\langle v \rangle \equiv \int_0^{\infty} dv v f_0(|\vec{v}|) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \sqrt{\frac{kT}{m}} \quad (2.22)$$

oder der Wurzel aus dem mittleren Geschwindigkeitsquadrat<sup>7</sup> ist

$$\bar{v}_{rms} \equiv \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} \quad (2.23)$$

Durch diese Bewegung verschmieren die Linien energetisch (siehe auch 'Dopplerprofil' im Unterkapitel 2.2).

<sup>7</sup>engl. root mean squared velocity (r.m.s. velocity)

## Kapitel 3

# Neue Linienlisten in PHOENIX

Seit 2004 gibt es aktualisierte Moleküllinienlisten von B. Plez (nach dem Schema alter Arbeiten, siehe auch Plez (1998)<sup>1</sup>) für TiO, VO und CaH, die im Rahmen dieser Diplomarbeit in PHOENIX implementiert und untersucht wurden. Es gibt lediglich kleine Unterschiede in der Sortierung bzw. dem Format dieser Moleküllinienlisten untereinander.

### 3.1 Struktur der Linienlisten von Plez

<i>Isotopolog</i>	<i># Linien</i>	<i>Isotopolog</i>	<i># Linien</i>	<i>Isotopolog</i>	<i># Linien</i>
<sup>46</sup> Ti <sup>16</sup> O	2 154 865	<sup>49</sup> Ti <sup>16</sup> O	2 032 568	<sup>40</sup> CaH (A-X)	21 263
<sup>47</sup> Ti <sup>16</sup> O	2 127 639	<sup>50</sup> Ti <sup>16</sup> O	2 032 798	<sup>40</sup> CaH (B-X)	10 528
<sup>48</sup> Ti <sup>16</sup> O	3 021 990	<sup>51</sup> V <sup>16</sup> O	3 171 552		

Tabelle 3.1: Anzahl der Linien in den Dateien der *Isotopologe*

Die Tabelle 3.1 zeigt die von Plez gelieferten Linienlisten und deren Linienanzahl. Das Titanium spaltet sich in fünf Isotope auf, während die anderen beiden nur mit ihrem jeweils häufigsten Isotop angegeben sind, nämlich mit <sup>51</sup>V (99.750 %) bzw. <sup>40</sup>Ca (96.941 %) (Plez, private Mitteilung). Die CaH Linienliste unterteilt sich aber in zwei Dateien ('linelist\_CaH\_A-X.dat' bzw. 'linelist\_CaH\_B-X.dat'), die jeweils alle elektronischen A-X bzw. B-X Übergänge<sup>2</sup> enthalten.

Alle Dateien sind in einem sehr ähnlichen ASCII Format gespeichert<sup>3</sup>, wobei typische Linien der Moleküle (inklusive der Leerzeichen) folgendermaßen aussehen:

```
TiO 15 03 026 + R1 0.1145E-04 27986.898 0.416 A
VO 12 01 016 + R1 .2900E-05 25938.635 .140 C
CaH 05 00 008 + R2 .1557E-06 21623.625 .047 B
```

<sup>1</sup>Plez baut auf den 'ab initio' Berechnungen elektronischer Übergänge von Langhoff (1997) auf, siehe auch Dobrodey (2001) für weitere Details und Korrekturen gegenüber Langhoff.

<sup>2</sup>engl. transition id

<sup>3</sup>Fortran Notation: (a3,x,i2,x,i2,x,i3,x,a1,x,a4,x,x,e10.2,x,x,f9.3,x,x,f5.3,x,a) für TiO und CaH bzw. (a2,x,x,i2,...) für VO

Die Reihenfolge dieser Einträge repräsentiert: Molekülname,  $\nu_{\text{up}}$ ,  $\nu_{\text{low}}$ ,  $J_{\text{low}}$ , +, Zweig<sup>4</sup>, gf-Wert, Wellenzahl, Anregung und elektronischer Übergang. Dabei sind:

- $\nu_{\text{up}}$  und  $\nu_{\text{low}}$  die Vibrationsquantenzahlen des oberen bzw. unteren Zustandes,
- $J_{\text{low}}$  ist die Rotationsquantenzahl des unteren Zustandes,
- das '+' ist eine Positionsmarkierung und hat keine physikalische Bedeutung,
- die *Zweige* beschreiben die Änderungen der Rotationsquantenzahl (für eine Aufzählung aller Zweige und deren Anzahl siehe die Tabellen B.2, B.4 und B.6 im Anhang B),
- der gf-Wert ist ein Maß für die Stärke der Linie,
- die Wellenzahl der Linie ist in  $\text{cm}^{-1}$  angegeben,
- die Molekülanregung in eV
- und der elektronische Übergang beschreibt die Art des Elektronenübergangs (für die vorkommenden Übergänge und deren Anzahl von TiO und VO siehe Tabelle B.3 bzw. B.5 im Anhang B, für CaH ist *A-X* als 1 und *B-X* als 2 codiert).

<i>Molekül</i>	<i>Wellenzahl</i>		<i>gf-Wert</i>		<i>Anre</i>	$\nu_{\text{u}}$	$\nu_{\text{l}}$	$J_{\text{l}}$
	<i>min</i>	<i>max</i>	<i>min</i>	<i>max</i>	<i>max</i>	<i>max</i>	<i>max</i>	<i>max</i>
<sup>46</sup> Ti <sup>16</sup> O	4091.	27987.	$3.550 \cdot 10^{-06}$	6.559	4.461	15	15	200
<sup>47</sup> Ti <sup>16</sup> O	4106.	27954.	$3.463 \cdot 10^{-06}$	5.985	4.445	15	15	200
<sup>48</sup> Ti <sup>16</sup> O	2844.	28940.	$3.454 \cdot 10^{-06}$	60.510	4.496	15	15	200
<sup>49</sup> Ti <sup>16</sup> O	4427.	27828.	$3.456 \cdot 10^{-06}$	4.509	4.329	15	15	200
<sup>50</sup> Ti <sup>16</sup> O	4439.	27803.	$3.565 \cdot 10^{-06}$	4.427	4.316	15	15	200
<sup>51</sup> V <sup>16</sup> O	3767.	25939.	$1.032 \cdot 10^{-11}$	5.422	4.061	15	15	198
<sup>40</sup> CaH( <i>A-X</i> )	8389.	20651.	$2.486 \cdot 10^{-12}$	16.540	1.673	5	5	50
<sup>40</sup> CaH( <i>B-X</i> )	9809.	21624.	$1.288 \cdot 10^{-12}$	5.463	1.673	5	5	50

Tabelle 3.2: Minimale und maximale Einträge in den Linienlisten von Plez.

Die Tabelle 3.2 zeigt die niedrigsten und höchsten verwendeten Werte einer jeden Linienliste von Plez für die Moleküle in den jeweiligen Spalten. Die Spalte *Molekül* gibt neben dem Isotopolog im Falle von CaH auch den elektronischen Übergang an. Für die *Wellenzahl* und den *gf-Wert* steht jeweils der minimale (*min*) bzw. maximale (*max*) Wert in  $\text{cm}^{-1}$  in der Tabelle. Ferner ist die maximale Anregung (*Anre*) des unteren Niveaus, die höchste Vibrationsquantenzahl des oberen (u für upper) Niveaus  $\nu_{\text{u}}$  bzw. unteren (l für lower) Niveaus  $\nu_{\text{l}}$  und die höchste Rotationsquantenzahl  $J_{\text{l}}$  des unteren Niveaus angegeben. Zu berücksichtigen ist hierbei, dass die gf-Werte des TiO von Plez bereits mit der solaren Häufigkeit multipliziert<sup>5</sup> wurden (Plez, private Mitteilung, er verwendet Anders und Grevesse (1989); siehe Tabelle 3.3). Daher scheint besonders der maximale gf-Wert  $g_{\text{f}_x}$  von <sup>48</sup>TiO im Vergleich zu den anderen TiO Isotopologen sehr stark. Bei einer Häufigkeit von 1 liegen aber alle Isotopologe

<sup>4</sup>engl. branch ratio

<sup>5</sup>Dieser Rechenschritt wurde bei der Implementierung dieser Linienliste rückgängig gemacht, da PHOENIX seine eigenen Häufigkeiten benutzt.

bei knapp  $82 \text{ cm}^{-1}$ . Die Tabelle führt für  $An_{\text{re,min}}$ ,  $v_{\text{u,min}}$ ,  $v_{\text{l,min}}$  und  $J_{\text{l,min}}$  keine eigenen Werte auf, da diese bei allen Einträgen exakt Null sind.

TiO Isotop	$^{46}\text{Ti}$	$^{47}\text{Ti}$	$^{48}\text{Ti}$	$^{49}\text{Ti}$	$^{50}\text{Ti}$
Solare Häufigkeit der Photosphäre	0.08	0.073	0.738	0.055	0.054

Tabelle 3.3: Die Häufigkeit der TiO Isotope nach Anders und Grevesse (1989).

Es wurden bei der Überprüfung der Linienlisten von Plez keine physikalisch unerklärlichen Werte, wie unvollständige Zeilen (z.B. leere Einträge), Werte außerhalb sinnvoller Größen (z.B. negative Wellenzahlen), einzigartige Einträge (z.B. einmalige Übergänge oder Zweige) oder doppelte Linien (komplett identische Reihen) gefunden. Das lässt vermuten, dass die Listen bereits gefiltert wurden.

## 3.2 Struktur der HITRAN Datenbank

Die HITRAN (**H**igh Resolution **T**ransmission) Molekülspektroskopie-Datenbank 2004 stellt derzeit Linienlisten für 39 Moleküle bereit (eigentlich nur 38, denn O ist ein einzelnes Atom). Das JavaHAWKS Manual<sup>6</sup> bietet eine ausführlichere Anleitung zur Nutzung der HITRAN Datenbank und deren Besonderheiten. Außerdem enthält der Artikel von Rothman *et al.* (2005)<sup>7</sup> Informationen über den Ursprung der einzelnen Linienlisten.

Die Datenbank enthält sowohl Isotopologe, also gleiche Moleküle mit unterschiedlicher Isotopen-Zusammensetzung wie z.B.  $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  und  $^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ , als auch Isotopomere, gleiche Moleküle mit gleichen Isotopen, aber mit einer anderen Anordnung wie z.B.  $^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$  und  $^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$ .

Alle 38 Linienlisten der Moleküle sind in PHOENIX implementiert worden, wobei die Sortierung der verfügbaren Isotopologen und Isotopomeren übernommen wurde, um sie einzeln auswählen zu können. Eine Aufstellung der Moleküle findet sich in Tabelle 3.5. Dort gibt es keine HITRAN Nummer 34, da es sich hierbei um das O-Atom handelt, welches mit den Atomlinienlisten von Kurucz abgedeckt wird und daher nicht verwendet wurde.

Das neue HITRAN 2004 Format benutzt 160 Byte pro Linie. Eine typische Linie (inklusive der Leerzeichen zwischen den Hochkommata) sieht folgendermaßen aus:

```
'351 763.641040 6.167E-23 1.293E+00.1400.8000 528.15070.500.000000 V4+V9
V9 74 11 63 75 11 64 000000 1 1 1 0 0 0 1788.0 1812.0'
```

Das Format ist sehr eng geschrieben, sodass einige Zahlen wie eine einzige aussehen (z.B. 528.15070.500.000000) und Punkte sind nicht immer ausreichend, um die Trennung zu erkennen. (Siehe Tabelle 3.4 für eine Auflistung der Bedeutung der Zahlen und ihres Formates.) Die obige Zahl zerlegt sich z.B. mit der Formatierung f10.4, f4.2, f8.6 in die Zahlen 528.1507, 0.50 und 0.000000, wobei vor der ersten Zahl noch zwei Leerzeichen stehen.

Die HITRAN Datenbank enthält deutlich mehr Informationen als in PHOENIX derzeit verwendet werden. Leider lässt sich z.B. die Druckverbreiterung der Linien im jetzigen Linienlisten-Format von PHOENIX (siehe Anhang A) nicht speichern. Dies wäre sinnvoll, um die gemessenen Druckverbreiterungen später mit denen vom Programm berechneten Werten zu vergleichen.

<i>Symbol</i>	<i>Typ</i>	<i>physikalische Bedeutung</i>
$M$	i2	Molekülnummer
$I$	i1	Isotopologenummer (1=am häufigsten, 2= am zweit ... etc.)
$\nu$	f12.6	Wellenzahl [ $\text{cm}^{-1}$ ]
$S$	e10.3	Intensität [ $\text{cm}^{-1}/(\text{Moleküle} * \text{cm}^{-2})$ ] bei 296 K
$A$	f5.4	Einstein-A Koeffizient
$\gamma_{\text{air}}$	f5.4	Luft-verbreiterte Halbbreite (HWHM) [ $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ ] bei 296 K
$\gamma_{\text{self}}$	f5.4	Selbst-verbreiterte Halbbreite (HWHM) [ $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ ] bei 296 K
$E''$	f10.4	Anregungsenergie des unteren Niveaus [ $\text{cm}^{-1}$ ]
$n$	f4.2	Koeffizient der Temperaturabhängigkeit der luftverbreiterten Halbbreite (HWHM)
$\delta_{\text{air}}$	f8.6	Luft-verbreiterte Druckverschiebung des Linienübergangs [ $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ ] bei 296 K
$v', v''$	2a15	Globale Quanten des oberen/unteren Niveaus
$q', q''$	2a15	Lokale Quanten des oberen/unteren Niveaus
$i_{\text{err}}$	6i1	Indices für Unsicherheit in der Wellenzahl, der Intensität, der luft- und selbstverbreiterten Halbbreiten (HWHM), der Temperaturabhängigkeit und der Druckverschiebung
$i_{\text{ref}}$	6i2	Indices für die Tabelle der Referenzen entsprechend der Wellenzahl, der Intensität, der luft- und selbstverbreiterten Halbbreiten (HWHM), der Temperaturabhängigkeit und Druckverschiebung
*	a1	Flagge (*) für Linien, berechnet mit line-coupling Algorithmus
$g', g''$	2f7.1	Statistisches Gewicht des oberen/unteren Niveaus

Tabelle 3.4: 160 Byte Formartierung der Linien in der HITRAN Datenbank (Auszug aus dem JavaHAWKS Manual der HITRAN2004 Datenbank).

Vor der Implementierung in PHOENIX wurden die Linieninformationen in der HITRAN Datenbank auf Unvollständigkeit bzw. physikalisch unmögliche Einträge geprüft. In Tabelle 3.5 wird das Verhältnis der Gesamtzahl der *Linien* zu den unvollständigen<sup>8</sup> (*unv*) gezeigt. Viele dieser unvollständigen Linien besitzen eine '-1' Flagge für die Energie des unteren Niveaus  $E''$ . Sie konnten bei 296 K zwar gemessen werden, aber da ihre Übergänge und damit die Energie des unteren Niveaus unbekannt sind, kann die Intensität zu anderen Temperaturen nicht extrapoliert werden kann (L. Rothman, private Mitteilung). Ferner ist in der Tabelle die Zahl der identischen (*id*) (doppelten Linien) und ähnlichen (*ähn*) (identisch in bezug auf die von PHOENIX verwendeten Einträge, die nur einen Teil der 160 Byte Linieninformationen ausmachen) Linien angegeben. Ähnliche Linien werden übernommen und addieren ihre Linienstärken zur Laufzeit des Programmes auf. Dieser Schritt wurde nicht vorher gemacht, da unter Umständen ohnehin einige dicht beieinander liegenden Linien aufeinander abgebildet werden (siehe zur Struktur der Linien in PHOENIX den Anhang A). Die Betrachtung der extremalen Werte in den Dateien beginnt mit der minimalen und maximalen Wellenzahl. Zum besseren Verständnis ist diese außerdem in die kleinste Wellenlänge [ $\text{\AA}$ ] umgerechnet, um den Anfang der Moleküllinien anzugeben. Es ist aber keine maximale Wellenlänge angege-

<sup>6</sup> Java Hitran Atmospheric WorkStation Manual: <http://www.cfa.harvard.edu/HITRAN/docs.html>

<sup>7</sup> Rothman *et al.* (2005): <http://www.cfa.harvard.edu/atmosphere/publications/HITRAN2004.pdf>

<sup>8</sup> Damit ist gemeint, dass mindestens eine für PHOENIX benötigte Linieninformation nicht vorhanden ist.

<i>Molekül</i>	<i>HITRAN</i>	<i>Linien</i>	<i>unv</i>	<i>id</i>	<i>ähn</i>	$\nu_-$	$\nu_+$	$> \lambda_{\min}$
	Nummer	#	#	#	#	[cm <sup>-1</sup> ]	[cm <sup>-1</sup> ]	[Å]
H <sub>2</sub> O	01	63196	3763	1	130	0.00700	25224.	3964.3
CO <sub>2</sub>	02	62913	0	0	180	0.73637	12784.	7822.2
O <sub>3</sub>	03	311481	0	0	17601	0.02630	4060.8	24625.
N <sub>2</sub> O	04	47835	0	0	10	0.83802	7796.6	12826.
CO	05	4477	0	0	0	3.4625	8464.9	11813.
CH <sub>4</sub>	06	251440	43529	1	2	0.01006	6106.3	16376.
O <sub>2</sub>	07	6428	0	0	0	1.·10 <sup>-6</sup>	15927.	6278.6
NO	08	102280	0	0	0	3.·10 <sup>-5</sup>	9273.2	10783.
SO <sub>2</sub>	09	38853	0	0	0	0.01739	4092.9	24432.
NO <sub>2</sub>	10	104223	4	0	0	0.49800	3074.2	32529.
NH <sub>3</sub>	11	29084	1723	2	2	0.05821	5294.5	18887.
HNO <sub>3</sub>	12	271166	0	0	34514	0.01192	1770.0	56487.
OH	13	42373	0	0	0	0.00297	19268.	5190.0
HF	14	107	0	0	0	41.111	11536.	8668.8
HCl	15	613	0	0	0	20.240	13458.	7430.6
HBr	16	1293	0	0	0	16.232	9758.3	10247.
HI	17	806	0	0	0	12.509	8487.3	11782.
ClO	18	7230	0	0	0	0.01461	1207.6	82806.
OCS	19	19920	0	0	12	0.38059	4118.0	24283.
H <sub>2</sub> CO	20	2702	0	1	203	3.·10 <sup>-6</sup>	2998.5	33349.
HOCl	21	16276	0	0	2534	1.0808	3799.7	26318.
N <sub>2</sub>	22	120	0	0	0	1992.6	2625.5	38088.
HCN	23	4253	0	0	0	0.01498	3423.9	29206.
CH <sub>3</sub> Cl	24	31119	0	0	10	0.87275	3172.9	31516.
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	25	100781	0	0	0	0.04311	1499.5	66689.
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	26	3517	0	0	0	604.77	6685.3	14958.
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	27	4749	4328	0	0	2975.3	2977.9	33580.
PH <sub>3</sub>	28	11790	2011	0	351	770.88	2471.7	40458.
COF <sub>2</sub>	29	70601	0	0	0	725.01	2001.3	49966.
SF <sub>6</sub>	30	22901	0	0	1344	929.98	963.97	103737.
H <sub>2</sub> S	31	20788	0	0	0	2.9853	4256.5	23493.
HCOOH	32	24808	0	0	5854	10.018	1234.7	80992.
HO <sub>2</sub>	33	38804	2	0	5931	0.1728	3675.8	27204.
ClONO <sub>2</sub>	35	32199	0	0	11617	763.64	797.74	125354.
NO <sup>+</sup>	36	1206	0	0	0	1634.8	2530.5	39518.
HOBr	37	4358	0	0	745	0.1548	315.91	316548.
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	38	12978	1393	0	244	701.20	3242.2	30843.
CH <sub>3</sub> OH	39	19899	122	4	455	0.01927	1407.2	71062.

Tabelle 3.5: Anzahl der Linien in den Listen und Extrema-Betrachtung. Weiter in Tabelle 3.6.

ben, da, bis auf N<sub>2</sub>O ( $\lambda_{\max} < 50.185 \text{ \AA}$ ) und C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> ( $\lambda_{\max} < 33.610 \text{ \AA}$ ), alle Moleküle Linien bis jenseits der betrachteten 60.000 Å Grenze besitzen. Die Extrema-Betrachtung

wird in Tabelle 3.6 fortgesetzt.

<i>Molekül</i>	$g'_-$	$g'_+$	$g''_-$	$g''_+$	$is$	$E''_-$	$E''_+$	$A_-$	$A_+$
						[ $\text{cm}^{-1}$ ]	[ $\text{cm}^{-1}$ ]	[ $\text{s}^{-1}$ ]	[ $\text{s}^{-1}$ ]
H <sub>2</sub> O	1	756	1	684	6	0.	5713.	$2.071 \cdot 10^{-14}$	1035000.
CO <sub>2</sub>	1	1908	1	1884	8	0.	4791.	$6.871 \cdot 10^{-15}$	809.5
O <sub>3</sub>	1	726	1	714	5	0.	3214.	$1.342 \cdot 10^{-13}$	26.77
N <sub>2</sub> O	6	7614	6	7506	5	0.	4049.	$1.700 \cdot 10^{-09}$	411.2
CO	1	1452	1	1428	6	0.	9034.	$3.155 \cdot 10^{-08}$	66.49
CH <sub>4</sub>	2	610	2	590	3	0.	4487.	$8.343 \cdot 10^{-20}$	129.4
O <sub>2</sub>	1	438	3	1314	3	0.	5368.	$3.256 \cdot 10^{-35}$	0.098
NO	8	3000	8	3024	3	0.	36399.	$1.942 \cdot 10^{-23}$	23.74
SO <sub>2</sub>	1	163	1	165	2	0.	2984.	$3.974 \cdot 10^{-13}$	46.82
NO <sub>2</sub>	2	182	2	180	1	0.	3308.	$1.108 \cdot 10^{-10}$	304.1
NH <sub>3</sub>	4	540	4	540	2	0.379	5791.	$4.991 \cdot 10^{-20}$	1072.
HNO <sub>3</sub>	6	1146	6	1146	1	0.	2400.	$1.734 \cdot 10^{-12}$	127.3
OH	4	736	4	720	3	0.	31067.	$2.175 \cdot 10^{-18}$	147.2
HF	4	132	4	124	1	0.	4814.	$2.401 \cdot 10^{-02}$	339.
HCl	4	360	4	344	2	0.	4712.	$1.542 \cdot 10^{-05}$	70.59
HBr	4	408	4	392	2	0.	4888.	$8.160 \cdot 10^{-06}$	12.93
HI	4	636	4	612	1	0.	4124.	$9.499 \cdot 10^{-09}$	1.009
ClO	4	1408	4	1408	2	0.	4466.	$1.055 \cdot 10^{-13}$	$6.0 \cdot 10^{-2}$
OCS	1	756	1	748	5	0.	2792.	$3.604 \cdot 10^{-09}$	371.1
H <sub>2</sub> CO	3	366	1	366	3	0.	2363.	$7.882 \cdot 10^{-24}$	5077.
HOCl	8	984	8	968	2	0.	1993.	$2.130 \cdot 10^{-07}$	35.74
N <sub>2</sub>	6	510	6	486	1	0.	3247.	$4.780 \cdot 10^{-09}$	$2.7 \cdot 10^{-8}$
HCN	2	1260	4	1236	3	0.	5358.	$4.585 \cdot 10^{-12}$	82.41
CH <sub>3</sub> Cl	4	1840	4	1840	2	0.	2861.	$2.825 \cdot 10^{-09}$	83.42
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	1	297	1	297	1	0.	3171.	$2.791 \cdot 10^{-12}$	75.24
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	1	824	1	808	2	0.	3730.	$3.662 \cdot 10^{-04}$	78.12
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	60	2424	100	2424	1	12.010	1991.	$0.805 \cdot 10^{+00}$	38.63
PH <sub>3</sub>	4	360	4	360	1	0.	2221.	$9.642 \cdot 10^{-08}$	75.26
COF <sub>2</sub>	1	543	1	549	1	0.	1943.	$3.310 \cdot 10^{-03}$	145.2
SF <sub>6</sub>	6	2010	2	2030	1	0.	937.6	$1.070 \cdot 10^{-02}$	44.56
H <sub>2</sub> S	1	588	1	564	3	0.	3499.	$1.583 \cdot 10^{-09}$	17.66
HCOOH	4	564	4	564	1	0.	2444.	$1.031 \cdot 10^{-07}$	15.56
HO <sub>2</sub>	1	104	1	104	1	0.	2473.	$4.002 \cdot 10^{-10}$	12.90
ClONO <sub>2</sub>	36	1788	60	1812	2	0.490	1218.	$8.111 \cdot 10^{-03}$	4.312
NO <sup>+</sup>	3	609	3	603	1	0.	29932.	$2.401 \cdot 10^{+00}$	46.55
HOBr	24	1128	8	1128	2	0.	1725.	$6.021 \cdot 10^{-10}$	7.507
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	7	567	3	567	2	0.	1603.	$6.465 \cdot 10^{-03}$	330.1
CH <sub>3</sub> OH	2	142	2	142	1	0.	2332.	$1.120 \cdot 10^{-16}$	3829.

Tabelle 3.6: Weiterführung der Extrema-Betrachtung aus Tabelle 3.5.

Die Tabelle 3.6 enthält wiederum das Molekül in der 1. Spalte, um die entsprechenden Reihen in den anderen Tabellen zu referenzieren. Die Extrema sind in der Reihenfolge von links

nach rechts das kleinste bzw. größte statistischen Gewicht des oberen ( $g'_-$  bzw.  $g'_+$ ) und unteren Niveaus ( $g''_-$  bzw.  $g''_+$ ), die Anzahl der Isotopologen des Moleküls ( $is$ ), die niedrigste und höchste Anregungsenergie [ $\text{cm}^{-1}$ ] des unteren Niveaus ( $E''_-$  bzw.  $E''_+$ ) und die niedrigsten bzw. höchsten Einstein-A Koeffizient ( $A_-$  bzw.  $A_+$ ) [ $\text{s}^{-1}$ ].

Da sich in den Tabellen 3.5 und 3.6 nicht erkennen lässt, wie die Extrema mit den unvollständigen Linien aussehen würden (also welche weiteren Linien noch gemessen, aber nicht bestimmt werden konnten), sind hier kurz die auffälligsten Unterschiede der Minima und Maxima Untersuchung der Dateien mit unvollständigen Linien (HITRAN Nummer 01 ( $\text{H}_2\text{O}$ ) mit  $\approx 6\%$  unvollständigen Linien der Gesamtzahl, 06 ( $\text{CH}_4$ )  $\approx 17\%$ , 10 ( $\text{NO}_2$ )  $\approx 0.004\%$ , 11 ( $\text{NH}_3$ )  $\approx 6\%$ , 27 ( $\text{C}_2\text{H}_6$ )  $\approx 91\%$ , 28 ( $\text{PH}_3$ )  $\approx 17\%$ , 33 ( $\text{HO}_2$ )  $\approx 0.0005\%$ , 38 ( $\text{C}_2\text{H}_4$ )  $\approx 11\%$  und 39 ( $\text{CH}_3\text{OH}$ )  $\approx 0.6\%$ ) aufgeführt:

- 9 von 38 Files enthalten unvollständige Linien, die zum Teil für Extrema verantwortlich sind.
- Die größte Wellenzahl in Datei 06 ist  $\nu_+ = 9199.3 \text{ cm}^{-1}$  (anstatt  $\nu_+ = 6106.3 \text{ cm}^{-1}$ ).
- Die kleinste Wellenzahl in Datei 27 ist  $\nu_- = 720.50 \text{ cm}^{-1}$  (anstatt  $\nu_- = 2975.3 \text{ cm}^{-1}$ ).
- Die höchste Anregungsenergie des unteren Niveaus in Datei 27 ist  $E''_+ = 4831 \text{ cm}^{-1}$  (anstatt  $E''_+ = 1991 \text{ cm}^{-1}$ ).

Alle anderen Dateien mit unvollständigen Linien erfahren keine oder nur minimale Änderungen in ihren Extrema, weswegen sie hier nicht aufgeführt werden.

### 3.2.1 Berechnung des gf-Wertes

In der HITRAN Datenbank gibt es keine gf-Werte wie bei Plez, sondern nur den damit verwandten Einstein-A-Wert, die statistischen Gewichte und die Wellenzahl.

Nach Baschek und Scholz (1982) steht der Wirkungsquerschnitt  $\hat{\sigma}_{ij}$  zu den Einstein Koeffizienten  $B_{ij}$ ,  $B_{ji}$  und  $A_{ji}$  und der (Absorptions-) Oszillator Stärke  $f_{ij}$  in folgender Relation:

$$\hat{\sigma} \simeq \frac{h\nu_0}{4\pi} B_{ij} = \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{ij} \quad (3.1)$$

und

$$A_{ji} = \frac{2h\nu_0^3}{c^2} B_{ji} = \frac{2h\nu_0^3}{c^2} \frac{g_i}{g_j} B_{ij} \quad (3.2)$$

wobei  $h\nu_0 = h\nu_{ij} = |E_j - E_i|$ . Der Index  $j$  steht für das höhere Niveau und  $i$  für das untere Niveau. In der HITRAN Notation entspricht also  $g_j$  dem statistischen Gewicht des höheren Niveaus  $g'$  und  $g_i$  dem des unteren  $g''$ . Weiterhin ist  $\nu_0$  die beobachtete Frequenz,  $h$  die Planckkonstante,  $e$  die Elementarladung des Elektrons,  $m_e$  dessen Masse und  $c$  die Lichtgeschwindigkeit.

Es ist zu beachten, dass andere Definitionen für  $B_{ij}$  und  $B_{ji}$  in der Literatur weit verbreitet sind.

Das Lösen der Gleichungen 3.1 und 3.2 nach  $g_i f_{ij} (A_{ji}, \nu_0)$  führt zu der Abhängigkeit:

$$g_i f_{ij} = g_j \frac{c^3 m_e}{8\pi e^2} A_{ji} \frac{1}{\nu_0^2} \quad (3.3)$$

Dies lässt sich mittels  $f\lambda = \nu_0\lambda = c \Leftrightarrow \nu_0 = c/\lambda$  bzw.  $\lambda = 1/\nu$  und dem Einsetzen aller bekannten Konstanten zur gewünschten Gleichung umformen (Unsöld und Baschek (1999)):

$$g''f = g'A \cdot 1,499 \cdot 10^{-28} \frac{1}{[\text{cm}^2]} \cdot \frac{1}{\nu^2} \quad (3.4)$$

dabei ist  $g'$  das statistische Gewicht des oberen Zustandes [einheitenlos],  $A$  der Einstein-A-Wert [ $\text{s}^{-1}$ ] und  $\nu$  [ $\text{cm}^{-1}$ ] die Wellenzahl, die in der HITRAN Datenbank verfügbar ist.

## Kapitel 4

# Vergleich der Linienlisten

Im Folgenden sind die einzelnen Spektren nur mit den Linienlisten des jeweils genannten Moleküls berechnet. Alle anderen Molekül- sowie die Atomlinienlisten werden für die Berechnung vernachlässigt. Dies führt zwar zu unphysikalischen Spektren, gibt aber eine gute Übersicht über den Beitrag des einzelnen Moleküls zum Spektrum.

In diesem Kapitel soll der Einfluss der neuen Linienlisten auf die mit PHOENIX berechneten Spektren und die Unterschiede zu älteren Listen ermittelt werden. Das Hauptaugenmerk liegt dabei zunächst auf den drei Linienlisten von B. Plez, die mit

- der TiO Linienliste von Schwenke (1998)<sup>1</sup> (Ames)<sup>2</sup> in Unterkapitel 4.1,
- der VO Linienliste von R. Freedman (unveröffentlicht, Ames)<sup>3</sup> in Unterkapitel 4.2
- bzw. der CaH Linienliste von Weck *et al.* (2003)<sup>4</sup> in Unterkapitel 4.3

verglichen werden.

Eine Auswahl der Moleküle aus der HITRAN Datenbank wird in Unterkapitel 4.4 kurz behandelt und die Gesamtheit aller HITRAN Moleküle der Version von 1992<sup>5</sup> mit der von 2004 verglichen.

Die neue H<sub>2</sub>O Linienliste von Barber *et al.* (2006), welche PHOENIX freundlicherweise bereits vor der Veröffentlichung zur Verfügung gestellt wurde, wird in Unterkapitel 4.5 mit der von Partridge und Schwenke (1997) verglichen.

In Kapitel 5 wird der Einfluss der vorgegebenen photosphärischen Häufigkeiten auf das Spektrum anhand der neuen von Asplund *et al.* (2005) untersucht und mit den bisher benutzten alten Häufigkeiten von Grevesse und Noels (1995) (unveröffentlicht, in Jaschek und Jaschek (1995)) verglichen.

### 4.1 TiO Linienliste

Während der Implementation der neuen TiO Linienliste von Plez in PHOENIX fand sich ein Fehler in der Molmasse von <sup>48</sup>Ti<sup>16</sup>O. Die Molmasse war auf 63.0429 u gesetzt, aber nach

<sup>1</sup>In PHOENIX implementiert von P.H. Hauschildt im September 1998.

<sup>2</sup>NASA Ames Research Center

<sup>3</sup>Ebenfalls von P.H. Hauschildt im November 1999 implementiert.

<sup>4</sup>Von A. Schweizer im Mai 2002 in PHOENIX implementiert.

<sup>5</sup>Ebenfalls von A. Schweizer im Oktober 1994 implementiert.

den Isotopengewichten des 'National Institute of Standards and Technology' (NIST)<sup>6</sup>, das als Referenz Emsley (1995) nennt, ergibt sich eine Masse von  $^{48}\text{Ti} + ^{16}\text{O} = 47.947947 \text{ u} + 15.994915 \text{ u} = 63.942862 \text{ u} \approx 63.9429 \text{ u}$ . Der Fehler lag eindeutig in PHOENIX, denn der Abstand von  $^{48}\text{Ti}^{16}\text{O}$  zu  $^{47}\text{Ti}^{16}\text{O}$  und  $^{49}\text{Ti}^{16}\text{O}$  betrug  $\approx 0.1 \text{ u}$  bzw.  $\approx 1.9 \text{ u}$  und nicht jeweils  $\approx 1 \text{ u}$ .

Wenn man sich den Unterschied zwischen den Zahlen ansieht, fällt auf, dass in der dritten Ziffer eine 0 anstatt einer 9 steht. Da diese Zahlen auf der Tastatur unmittelbar nebeneinander liegen, handelt es sich vermutlich um einen Tippfehler. Im ersten Moment scheint der Fehler nicht ganz unwichtig zu sein, denn schließlich ist  $^{48}\text{Ti}$  das häufigste Titanium Isotop mit beinahe 74 % (siehe Tabelle 3.3) und der Unterschied der Masse beträgt immerhin knapp 1.5 %. Trotzdem konnte bei Testrechnungen mit der alten Linienliste von Schwenke und korrigierter Molmasse kein signifikanter Einfluss auf die Spektren im Vergleich zu Rechnungen mit fehlerhafter Molmasse festgestellt werden.

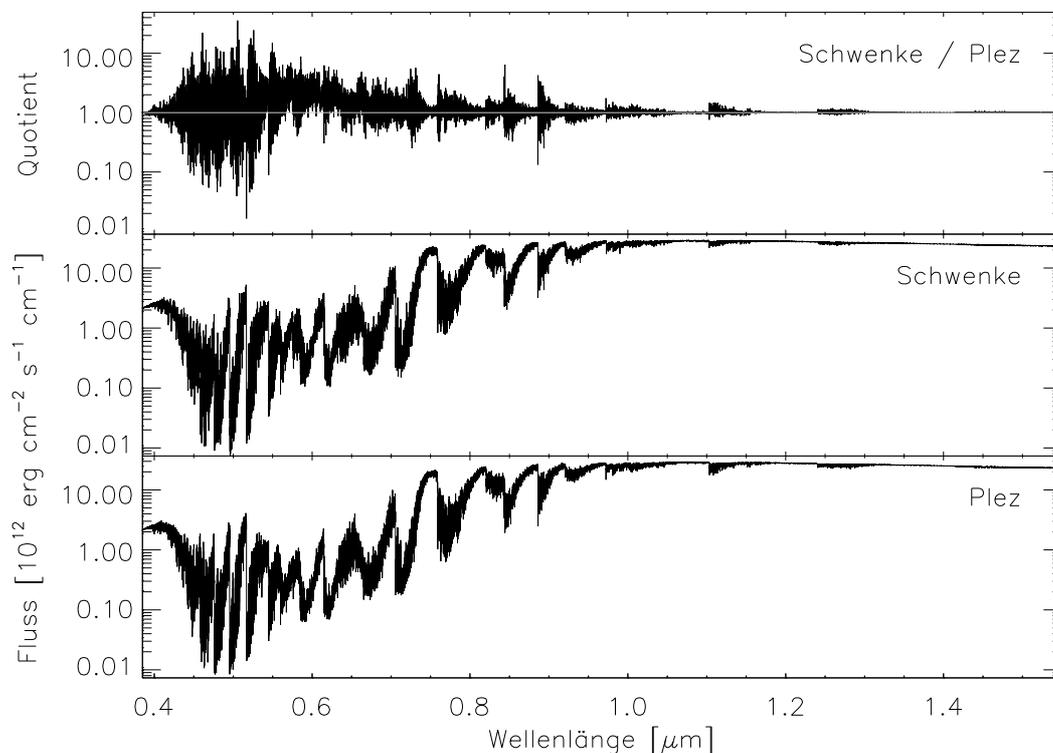


Abbildung 4.1: Das reine TiO Spektrum von Schwenke (Mitte) im Vergleich zu dem von Plez (unten) bei  $T_{\text{eff}} = 2500 \text{ K}$  und  $\log(g) = 5.0$  und der Quotient (oben) aus beiden.

Abbildung 4.1 zeigt die reinen TiO Spektren von Schwenke (Mitte) und Plez (unten) bei  $T_{\text{eff}} = 2500 \text{ K}$ ,  $\log(g) = 5.0$  und  $Z = 0$ . Darüber ist zum besseren Vergleich der Quotient (oben) der beiden Spektren gezeigt. Der Wellenlängenbereich von  $4000 \text{ \AA}$  bis  $14500 \text{ \AA}$  entspricht den verfügbaren Linien der beiden Quellen.

Eine klare Struktur ist im Quotienten nicht zu erkennen. Das Spektrum mit der Liste von Schwenke zeigt genauso häufig größere Absorption (unter 1, graue Linie im Quotienten)

<sup>6</sup>NIST lässt sich im Web finden unter: <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Handbook/>

wie das mit der Linienliste von Plez berechnete Spektrum (größer 1). Dieses ist auf kleine Verschiebungen zwischen den Linien der beiden Linienlisten zurückzuführen, was sich mit einer gröberen Einteilung<sup>7</sup> zeigen lässt. Lediglich um 6000 Å herum liegen die Linien im Plez Spektrum etwas niedriger und der Quotient wird in diesem Wellenlängenbereich fast überall größer 1. Auch bei gröberer Einteilung bleibt diese Eigenschaft erhalten.

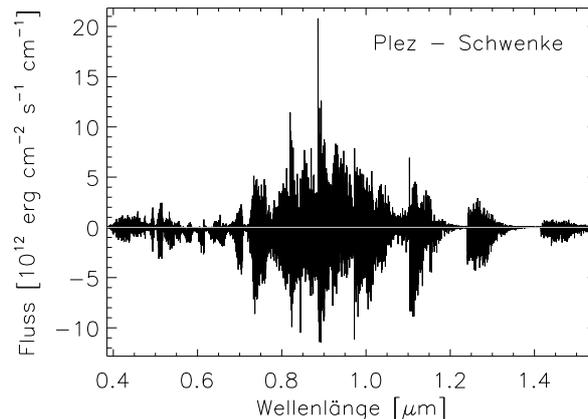


Abbildung 4.2: Differenz der Flüsse aus Abbildung 4.1.

Auffällig bei der Betrachtung der Differenz der absoluten Flüsse in Abbildung 4.2 ist außerdem ein verhältnismäßig hoher Ausreißer bei knapp unter 8900 Å (im  $\delta$ -System des TiO), auf welchen im Folgenden weiter eingegangen wird.

#### 4.1.1 Verschiebung zwischen Schwenke und Plez Linien

An einigen Positionen (Abbildung 4.3, links) scheinen die Linien um +2.1 Å verschoben, wie man an den entsprechenden Moleküllinien bzw. deren Bandköpfen erkennen kann. Dies entspricht in einem Wellenlängenbereich um 8000 Å nach Bönsch und Potulski (1998), die sich auf die Formel von Edlén (1966) berufen, in etwa dem Unterschied im Brechungsindex zwischen Messungen an Luft und im Vakuum.

Aber sowohl die Messung und 'ab initio' Berechnungen von Schwenke als auch Plez sind im Vakuum gemacht (Plez, private Mitteilung) und eine umfassendere Analyse zeigt, dass die Verschiebung nicht systematisch ist. In Abbildung 4.3 (rechts) beträgt sie z.B. -1.8 Å und ist damit blau- und nicht mehr rotverschoben wie in Abbildung 4.3 (links). Es scheint sich also um einen physikalischen Unterschied in den Linienlisten zu handeln.

Ein Vergleich mit vier von UVES beobachteten Spektren von LHS2065 zeigt, dass für die Verschiebung bei 8864 Å das blauere Ergebnis mit der Linienliste von Schwenke am besten passt. Für die 8446 Å Bande scheint es außer dem Problem mit der Wellenlänge auch einen Fehler in den Oszillatorenstärken bei Plez zu geben (A. Reiners, private Mitteilung). Auch hier weichen die Linien der Liste von Plez am weitesten ab. Dies ist umso erstaunlicher, als dass Plez bereits Korrekturen an den theoretischen  $gf$ -Werten des  $\delta$  und  $\phi$  Systems vorgenommen hat; diese wurden mit 0.5 bzw. 1.9 multipliziert, um den beobachteten Stärken besser zu entsprechen<sup>8</sup>. Die Position der Zentren der Molekülbandensysteme sind in Abhängigkeit

<sup>7</sup>engl. binning; es wurde die ursprüngliche Auflösung von 0.5 Å über 1, 2.5, 5 bis auf 10 Å 'gebinnt'.

<sup>8</sup>Das  $\delta$  System ist bereits bei Langhoff *et al.* (1996) um einen Faktor 2 gegenüber Beobachtungen zu groß.

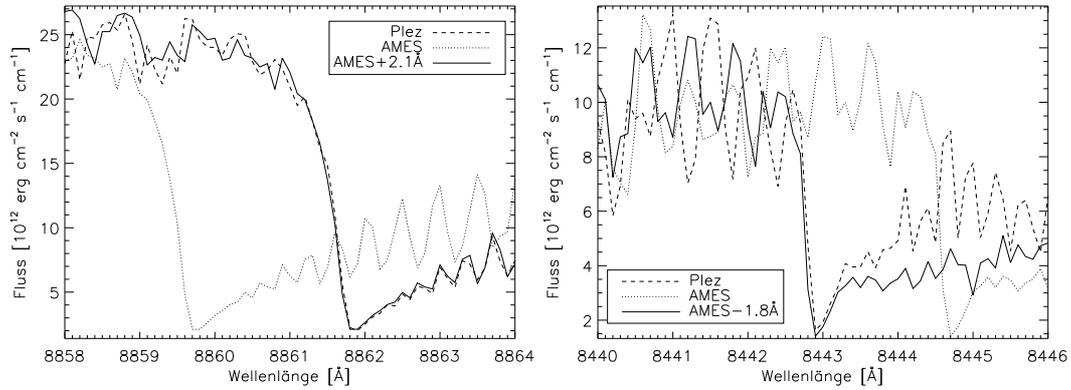


Abbildung 4.3: Vergrößerung der TiO Spektren aus Abbildung 4.1 in zwei Bereichen, die Bandköpfe jeweils einmal aufeinander verschoben, um die Abweichung zu bestimmen.

der Wellenlänge in Tabelle 4.1 verzeichnet.

Übergang	$\nu_{00}$ [Å]	Übergang	$\nu_{00}$ [Å]	Übergang	$\nu_{00}$ [Å]
$\alpha$ ( $C^3\Delta - X^3\Delta$ )	5171	$\beta$ ( $c^1\Phi - a^1\Delta$ )	5605	$\gamma'$ ( $B^3\Pi - X^3\Delta$ )	6193
$\gamma$ ( $A^3\Phi - X^3\Delta$ )	7096	$\epsilon$ ( $E^3\Phi - X^3\Delta$ )	8408	$\delta$ ( $b^1\Pi - a^1\Delta$ )	8871
$\phi$ ( $b^1\Pi - d^1\Sigma^+$ )	11045				

Tabelle 4.1: Die Benennung und Position der Bandsysteme des TiO. In Klammern ist jeweils der elektronische Übergang angegeben, der für das Band verantwortlich ist.

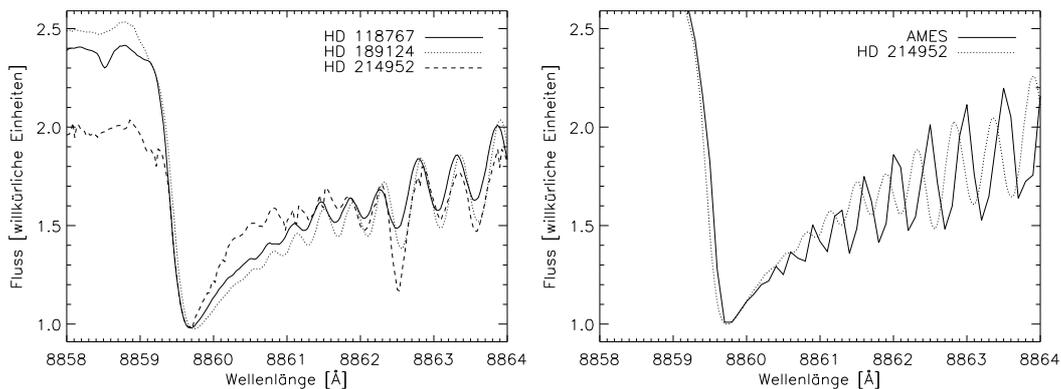


Abbildung 4.4: Referenz dreier beobachteter UVES Spektren für den oben gezeigten TiO Bandkopf (links). Direkter Vergleich eines der Spektren mit dem AMES Spektrum (rechts).

Ein weiterer Vergleich mit anderen Spektren des 'UVES Paranal Observatory Project' von

den drei Riesen HD 118767<sup>9</sup>, HD 189124<sup>10</sup> und HD 214952<sup>11</sup> zeigt, dass der Bandkopf von TiO bei etwa 8859.7 Å liegen müsste (siehe Abbildung 4.4, links). Die Rot- bzw. Blauverschiebung in der Wellenlänge wurde mittels  $\Delta\lambda/\lambda = v/c$  korrigiert, während der Nullpunkt im Fluss willkürlich ist und die Spektren daher in der y-Achse zur besseren Übersicht übereinander verschoben wurden. Das Spektrum mit der Liste von Schwenke wurde in Abbildung 4.4 (rechts) mit einem der drei Riesen verglichen, wobei wiederum nur die Wellenlänge in der x-Achse präzise und der Fluss in der y-Achse völlig willkürlich gewählt ist. Die Spektren passen von der Wellenlänge sehr gut aufeinander, während sie zu dem der Plez Liste doch recht deutlich abweichen (siehe zum Vergleich Abbildung 4.3 (links)). Scheinbar ist das  $\delta$ -Band in der Linienliste von Plez ein wenig verschoben (Plez, private Mitteilung).

#### 4.1.2 Neue EOS Daten für TiO

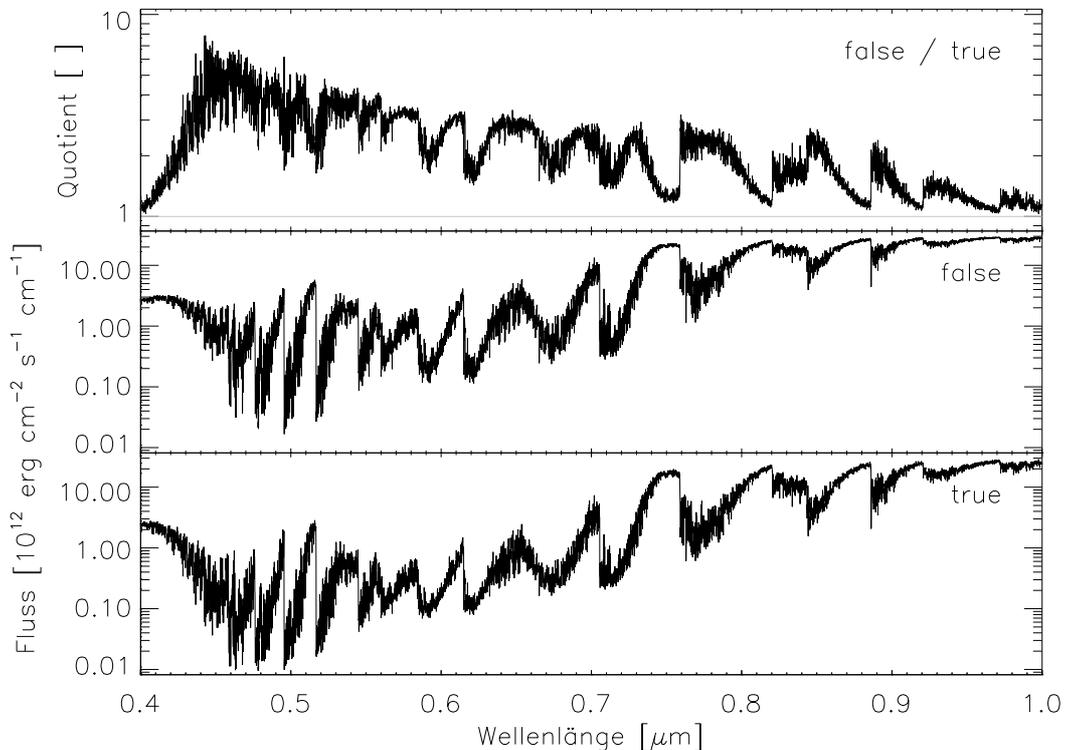


Abbildung 4.5: Das reine TiO Spektrum als Quotient aus den Spektren mit TiO\_shomate aus- (Mitte) bzw. eingeschaltet (unten) und der Quotient der Spektren (oben).

Bisher sind die TiO Linienstärken in PHOENIX im Vergleich zu Beobachtungen etwas zu schwach und es ist fraglich, ob die Menge der im Programm produzierten TiO Moleküle möglicherweise zu niedrig ist.

Die neuen EOS<sup>12</sup> Daten in PHOENIX von F. Allard können intern mit dem Schalter

<sup>9</sup>Spektral Typ M5III / V Magnitude 5.86 / Radialgeschwindigkeit  $v = -10.7 \frac{\text{km}}{\text{s}}$

<sup>10</sup>Spektral Typ M6III / V Magnitude 5.06 / Radialgeschwindigkeit  $v = -10.3 \frac{\text{km}}{\text{s}}$

<sup>11</sup>Spektral Typ M5III / V Magnitude 2.13 / Radialgeschwindigkeit  $v = +1.6 \frac{\text{km}}{\text{s}}$

<sup>12</sup>engl. equation of state (EOS) = Zustandsgleichung

'TiO\_shomate' auf t (true) bzw. f (false) ein- bzw. ausgeschaltet werden. Sie führen zu einer Änderung der Partialdrücke von TiO. In Abbildung 4.5 sind reine TiO Spektren mit Plezlisten mit eingeschalteten (unten) bzw. ausgeschalteten (Mitte) neuen EOS Daten zu sehen. Die Parameter sind wiederum  $T_{\text{eff}} = 2500$  K,  $\log(g) = 5.0$  und  $Z = 0$ .

Es wird zum Vergleich der Quotient der Spektren (oben) gezeigt. Wie man sieht, führen die neuen EOS Daten zu höheren TiO Partialdrücken und somit zu stärkeren Linien. Der Quotient 1 (graue Linie) wird nirgendwo unterschritten. Diese Verstärkung der Linien entspricht der von F. Allard erwarteten Wirkung der neuen EOS Daten.

## 4.2 VO Linienliste

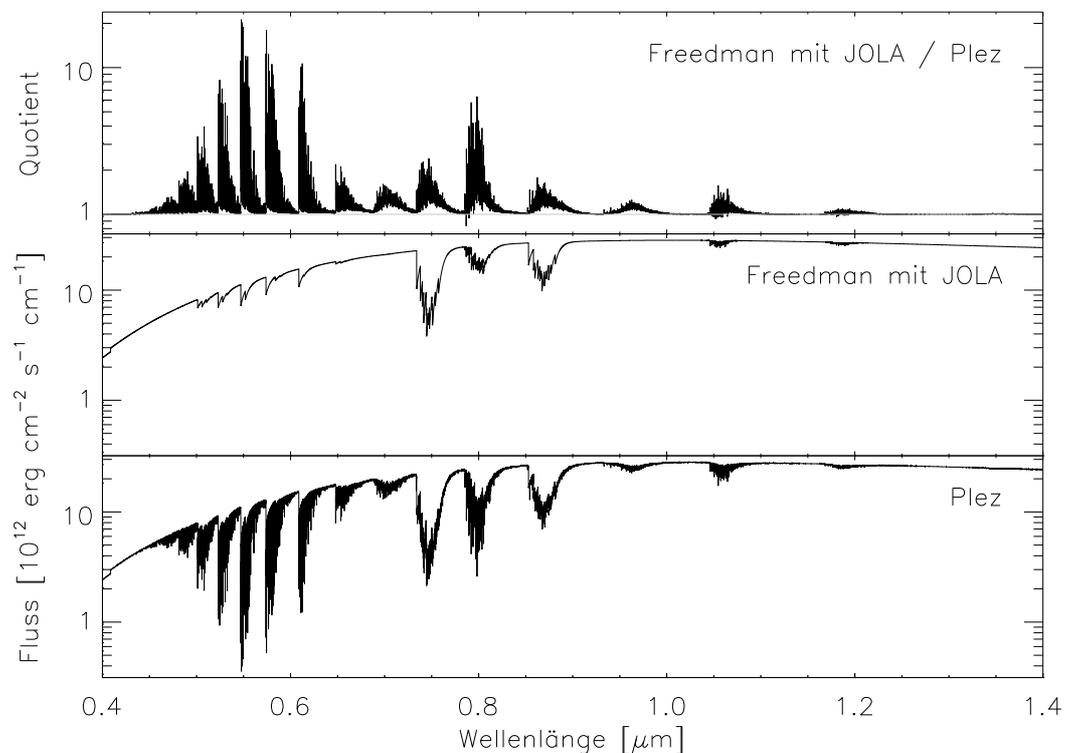


Abbildung 4.6: Das reine VO Spektrum von Freedman mit JOLA (Mitte) im Vergleich zu dem von Plez (unten) und der Quotient der beiden (oben).

Abbildung 4.6 zeigt je ein reines VO Spektrum bei  $T_{\text{eff}} = 2500$  K,  $\log(g) = 5.0$  und  $Z = 0$  mit der Liste von Freedman mit JOLA (Mitte) und von Plez (unten) und deren Quotient (oben).

Die 'just-overlapping line approximation' (JOLA; Zeidler-K.T. und Koester (1982)) wurde von F. Allard unterhalb von  $0.7 \mu\text{m}$  hinzugefügt, um sechs zusätzliche Bänder zu nähern, die in der Linienliste von Freedman nicht enthalten sind.

Die Grenzen von  $0.4 \mu\text{m}$  ( $4000 \text{ \AA}$ ) bis  $1.4 \mu\text{m}$  ( $14000 \text{ \AA}$ ) entsprechen den sichtbaren Linien der Quellen. Die Unterschiede in der Stärke der Linien sind sehr deutlich, wie man daran sehen kann, dass der Quotient der Spektren von Freedman (inklusive JOLA) durch Plez fast

überall größer als 1 (graue Linie) ist. Das mit der Linienliste von Plez berechnete Spektrum weist also fast durchgängig mehr Absorption und damit tiefere Linien auf, was sich u.a. auf die viel größere Zahl von Linien zurückführen lässt<sup>13</sup>.

Die neue Linienliste von Plez stellt gegenüber der von Freedman in jedem Fall eine Verbesserung dar, denn sie enthält nicht nur Linieninformationen über die sechs JOLA genäherten Bänder, sondern auch zwei weitere Bänder (bei  $0.7 \mu\text{m}$  und  $0.97 \mu\text{m}$ ) die in der anderen Liste bzw. Näherung gar nicht berücksichtigt werden. Des Weiteren ist auch die Zahl der Linien und damit die Absorption in der Liste von Plez deutlich größer als in der von Freedman bei den fünf Bändern über  $0.7 \mu\text{m}$ . Man sollte aber erwähnen, dass die Linienliste von Freedman nie veröffentlicht wurde, sondern nur eine persönliche Mitteilung war.

### 4.3 CaH Linienliste

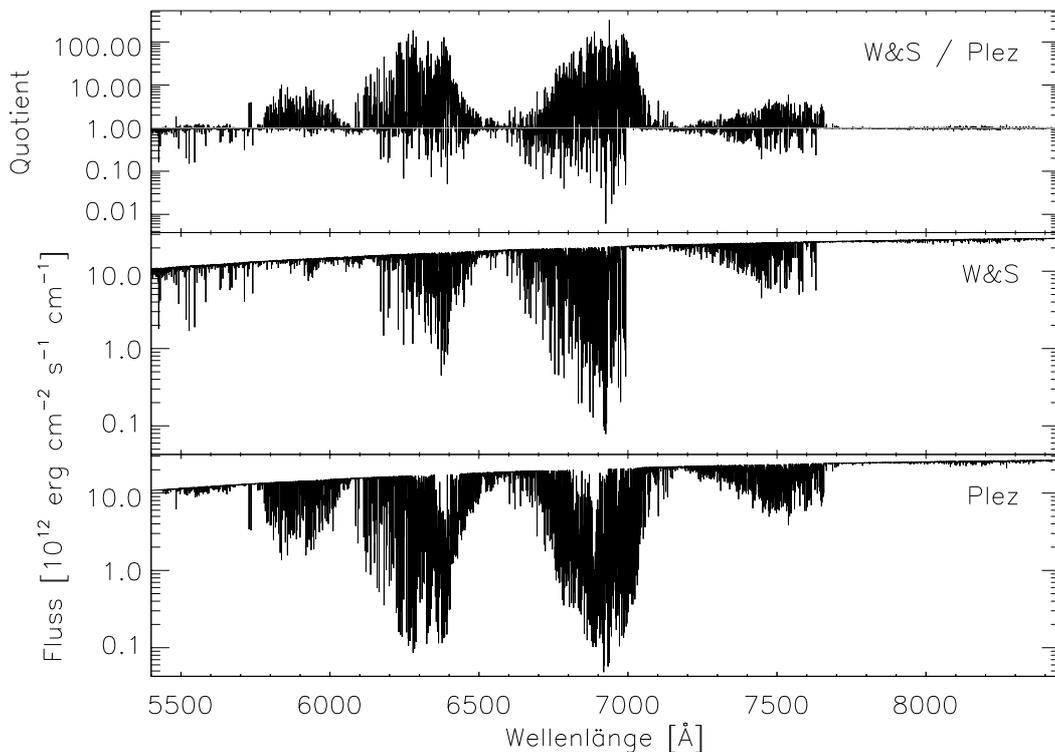


Abbildung 4.7: Die reinen CaH Spektren von Weck & Stancil (W&S) (unten), von Plez (Mitte) und der Quotient aus beiden (oben).

In Abbildung 4.7 ist ein reines CaH Spektrum von Plez (unten) und eines von Weck & Stancil (Mitte) bei  $T_{\text{eff}} = 2500 \text{ K}$ ,  $\log(g) = 5.0$  und  $Z = 0$  gezeigt. Der gewählte Wellenlängenbereich von etwa  $5400 \text{ \AA}$  bis  $8450 \text{ \AA}$  entspricht den sichtbaren Linien in der Linienliste von Plez.

Die CaH Linienliste von Weck & Stancil besitzt noch weitere Linien außerhalb dieser Grenzen und deckt einen Bereich von  $3000 \text{ \AA}$  bis  $14000 \text{ \AA}$  ab, wobei gerade unterhalb der  $5400 \text{ \AA}$

<sup>13</sup>Es sind 3 171 552 Linien in der Liste von Plez gegenüber den 7182 Linien in der von Freedman.

diese Absorptionslinien im Verhältnis zum übrigen Fluss recht stark sind, während sie oberhalb von 8450 Å nur kleine Absenkungen bewirken und eher vernachlässigt werden können. Innerhalb des Ausschnittes in Abbildung 4.7 sind die Linien von Plez in den Bändern stärker ausgeprägt, weswegen auch der Quotient im Mittel häufiger größer als 1 (graue Linie) ist. Die Linienliste von Plez bietet also ausgeprägtere Bänder (mit mehr Linien) als die von Weck & Stancil. Der Wellenlängenbereich der Liste von Weck & Stancil ist dafür aber deutlich größer und enthält sowohl höhere als auch niedrigere Übergänge.

Leider ist es mit der derzeitigen Auswahlstruktur von PHOENIX nicht möglich, die Moleküllinienliste von Plez in dem obigen Bereich zu wählen und nur die Linien von Weck & Stancil außerhalb des Bereiches dazuschalten.

Insgesamt dürften die vier starken Molekülbänder aber deutlich mehr Einfluss auf das Gesamtspektrum (besonders bei metallarmen Sternen<sup>14</sup>) haben als die schwachen Linien oberhalb von 8450 Å und die starken Linien unterhalb von 5400 Å.

#### 4.4 HITRAN Linienlisten

Die HITRAN Linienlisten wurden mit Messdaten aus der Erdatmosphäre erstellt, welche im Vergleich zu der eines Sternes mit ca. 296 K sehr kalt ist. Von diesen Labordaten aus wurde, ähnlich wie bei Plez, mittels 'ab initio' Berechnungen auf die Linienintensität bei höheren Temperaturen extrapoliert.

Heutige Beobachtungen von der Erde aus mit guter Auflösung reichen bis etwa 2.5 µm (25.000 Å) und von einem Satelliten im Weltraum aus auch bis 4-6 µm (40.000-60.000 Å). Theoretisch sind auch Messungen von höheren Wellenlängen möglich, aber diese werden von aktuellen Satelliten nur schlecht aufgelöst. Daher wurden alle Moleküle einzeln in einem Bereich von 3 000 Å bis 6 µm (60 000 Å) getestet.

Abbildung 4.8 zeigt alle HITRAN Moleküle, die bei einer Effektivtemperatur von 2500 K, einer Schwerebeschleunigung  $\log(g)$  von 5 und einer Metallizität  $Z$  von 0 sichtbare Linien aufwiesen. Die Spektren sind um die angegebenen Zahlen nach oben verschoben.

Die Gründe, weswegen die anderen Moleküle keine signifikanten Linien aufweisen, sind verschieden. Der einfachste ist der, dass dieses Molekül in PHOENIX nicht behandelt wird, also auch nicht entstehen kann. Davon sind besonders HBr, HOBr und HI betroffen, da in PHOENIX die Elemente Brom (Br) und Iod (I) nicht implementiert sind (siehe auch Tabelle 5.1 im Unterkapitel 5).

Bei der Molekülbildung ebenfalls nicht im Programm berücksichtigt werden C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, HCOOH, ClONO<sub>2</sub> und CH<sub>3</sub>OH, welche alle sehr groß sind und bei Temperaturen über der der Erdatmosphäre schnell dissoziieren.

Die Partialdrücke der Moleküle H<sub>2</sub>S, HO<sub>2</sub> und NO<sup>+</sup> und ihrer Isotopologe sind so gering, dass sie numerisch Null bei ihrer Berechnung werden. Der Konzentration von H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> ist ebenfalls sehr gering, numerisch aber nur beinahe Null.

Die Partialdrücke der Moleküle H<sup>18</sup>OD und H<sup>17</sup>OD sind Null, da diese Isotopologe in PHOENIX nicht bekannt sind, wohl aber die häufigsten anderen Isotopologe von H<sub>2</sub>O.

Die übrigen Moleküle, die keine Linien produzieren, besitzen 1-4 Größenordnungen niedrigere Partialdrücke als die sechs, die zumindest einige wenige Linien aufweisen. Dabei ent-

<sup>14</sup>Bei geringer Metallhäufigkeit sind auch die Elemente Ti, V, Ca und O seltener. Dies führt dazu, dass die Häufigkeit von TiO und VO mit  $n^2$  abnimmt, während Hydride wie CaH nur um einen Faktor  $n$  seltener sind, da H natürlich sehr häufig ist. Üblicherweise überdeckt TiO sonst CaH.

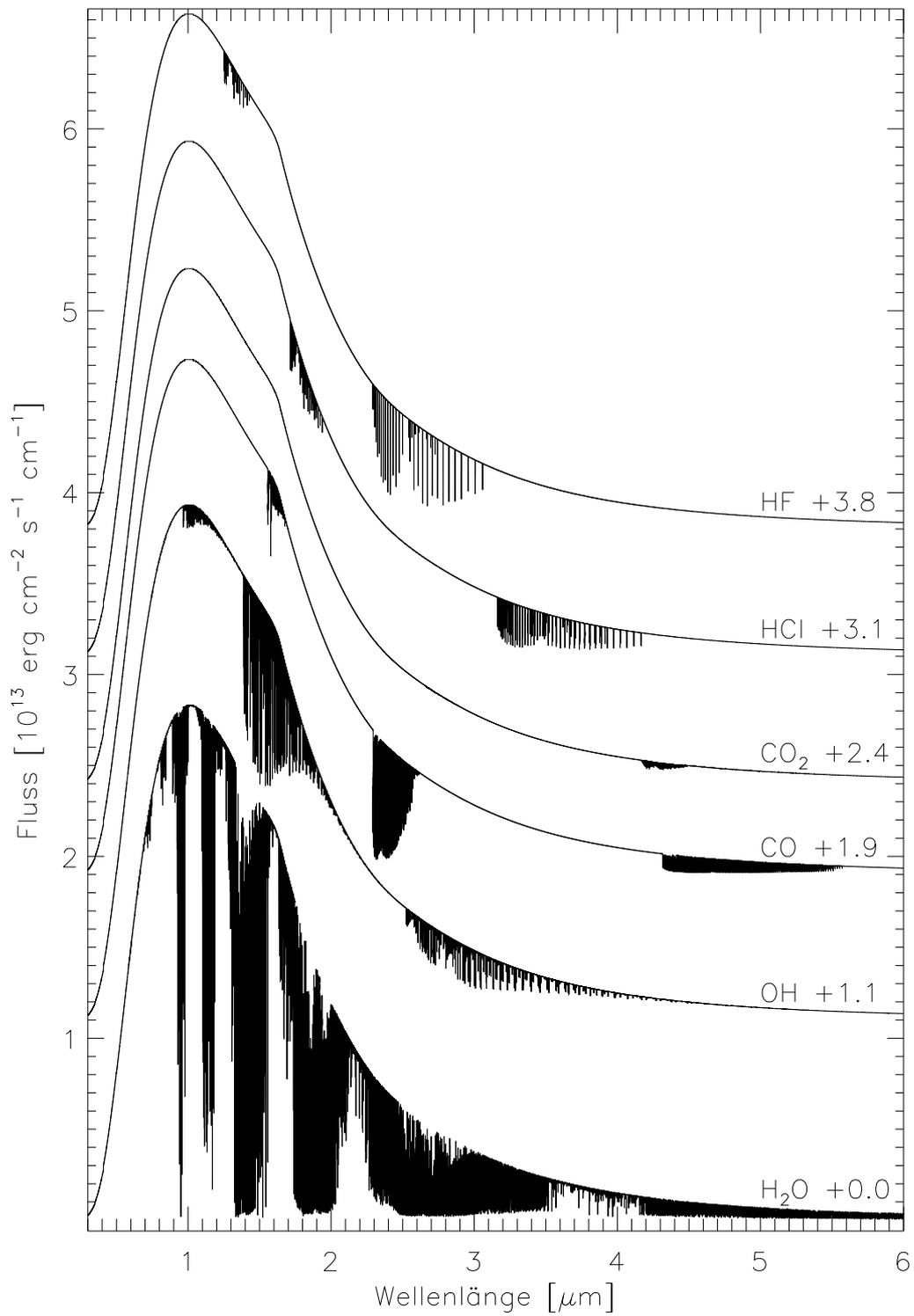


Abbildung 4.8: Reine Spektren des jeweiligen Moleküls ( $T_{\text{eff}} = 2500$  K,  $\log(g) = 5$ ,  $Z = 0$ ). Es werden alle sechs Spektren (mit Achsenverschiebung) gezeigt, die Linien aufweisen.

spricht das Verhältnis der Partialdrücke von H<sub>2</sub>O und CO (4 Größenordnungen), OH (3 Größenordnungen) bzw. HF und HCl (1 Größenordnung) in etwa dem Verhältnis der Stärke der Linien.

Die einzigen Ausnahmen bilden CO<sub>2</sub> und N<sub>2</sub>, wobei ersteres trotz etwas niedrigerem Partialdruckes scheinbar einige Resonanzlinien aufweist, während letzteres zwar eine signifikante Konzentration ähnlich der von OH besitzt, aber als symmetrisches Molekül keine Dipol- sondern nur schwächere Quadrupolübergänge besitzt.

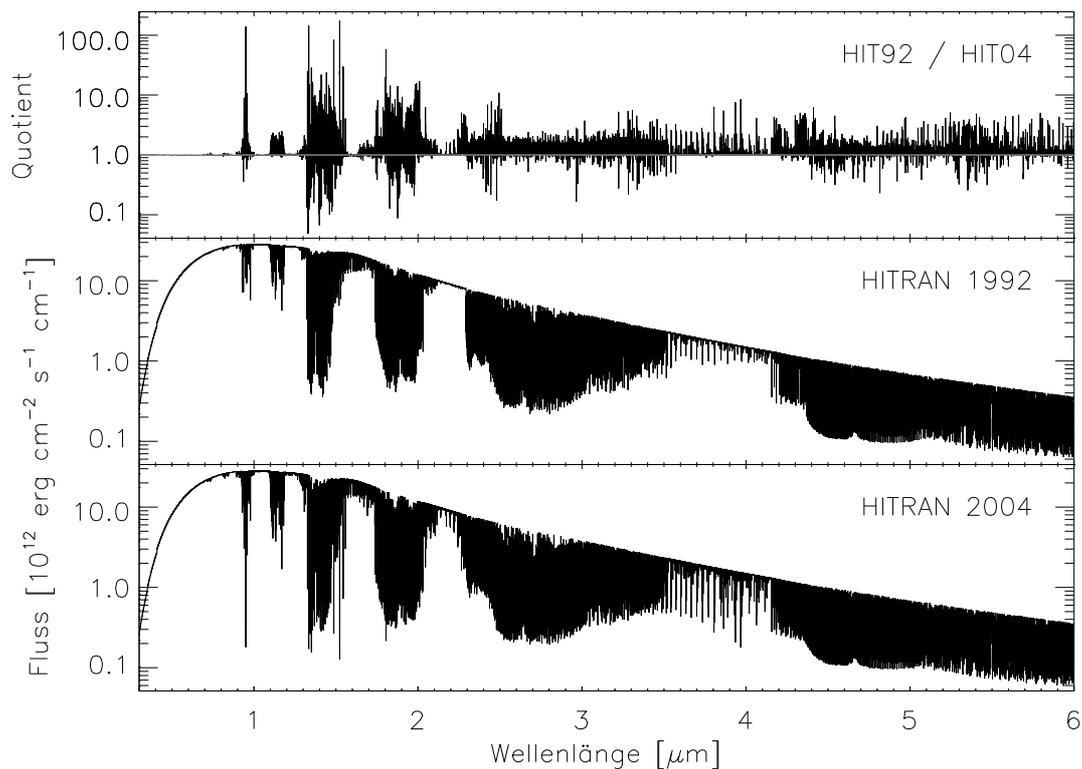


Abbildung 4.9: Spektren aller Moleküllinienlisten aus HITRAN 1992 (Mitte) im Vergleich zu denen aus HITRAN 2004 (unten) und der Quotient der selbigen (oben).

Abbildung 4.9 zeigt je ein Spektrum aller Moleküllinienlisten aus der HITRAN 1992 Datenbank und der HITRAN 2004 Datenbank. Der Quotient dieser Spektren wird ebenfalls gezeigt, um die Bereiche mit Unterschieden zu verdeutlichen. Hauptsächlich erkennt man, dass die neue Datenbank weitere Moleküllinien enthält und daher im Schnitt etwas tiefer liegt, da es mehr Absorption gibt. Dies erkennt man auch daran, dass der Quotient deutlich häufiger über 1 (graue Linie) liegt und der Nenner folglich kleiner als der Zähler war. Ansonsten sind die Unterschiede der beiden Datenbanken aber eher gering.

## 4.5 H<sub>2</sub>O Linienliste

Bei Temperaturen von 2500 K in späten M-Zwergen ist Wasser die Hauptquelle der Opazität der Sternatmosphäre und macht typischerweise 60% der Opazität im Infrarot aus.

Im Folgenden wird daher ein Blick auf die Wasserlinienliste von Barber & Tennyson (BT) geworfen und diese danach mit der von Partridge & Schwenke (PS) verglichen.

Die BT Linienliste enthält 505 806 202 Übergänge<sup>15</sup>, die bis zu einem Abschnitts-Drehimpuls von  $J = 50$  bzw. einer Abschnitts-Energie von  $E = 30\,000\text{ cm}^{-1}$  reichen.

Zum Vergleich, der höchste  $J$  Wert, welcher eine Vibrationsenergie von unter  $30\,000\text{ cm}^{-1}$  besitzt, ist 58. Die fehlenden Werte machen bei 4000 K aber weniger als 0.02% Beitrag aus (Barber *et al.* (2006)).

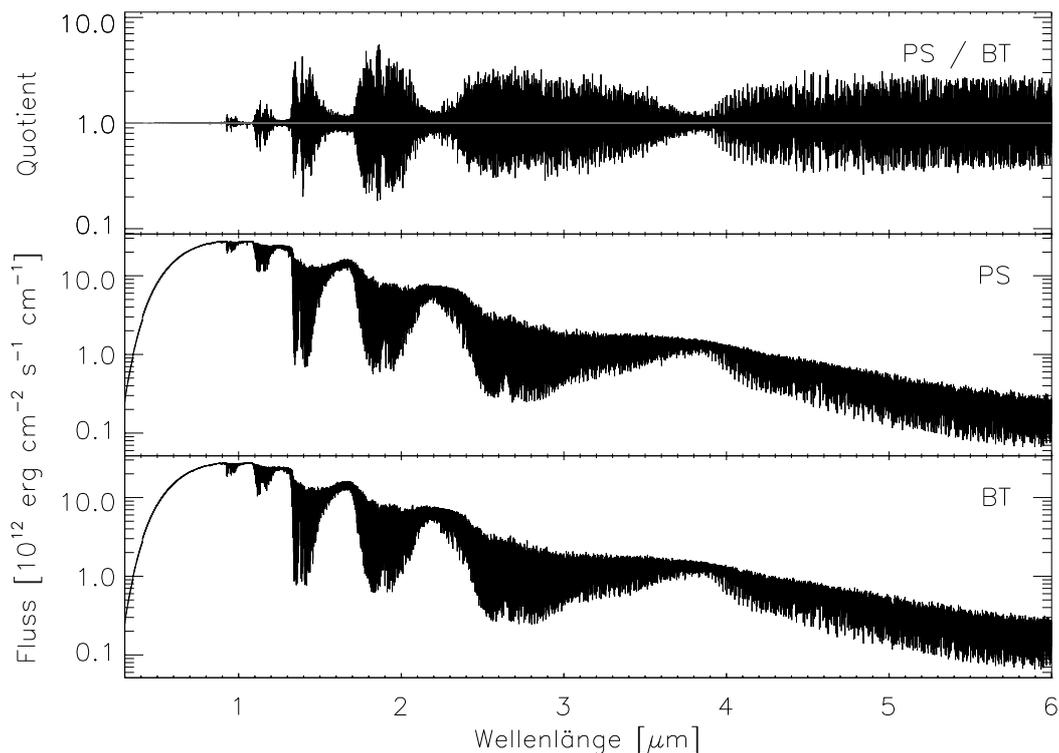


Abbildung 4.10: Das reine  $\text{H}_2\text{O}$  Spektrum von Partridge & Schwenke (PS) (Mitte) im Vergleich zu dem von Barber & Tennyson (BT) (unten) und deren Quotient (oben).

Die Abbildung 4.10 zeigt ein reines  $\text{H}_2\text{O}$  Spektrum mit der PS Moleküllinienliste (Mitte) von und der BT Liste (unten). Zum besseren Vergleich wird außerdem der Quotient (oben) aus beiden Spektren gezeigt.

Die Ähnlichkeit der beiden Spektren und die Spiegelsymmetrie des Quotienten zur grauen Linie deuten darauf hin, dass sich diese beiden Quellen nicht groß unterscheiden, sondern die Linien lediglich ein wenig zueinander verschoben sind. Eine gröbere Einteilung senkt den Quotienten gleichmässig in allen Bereichen, was diese Annahme weiter verstärkt<sup>16</sup>.

Ein Vergleich der Liniengenauigkeit der PS und BT Liste mit experimentell von Tennyson *et al.* (2001) gemessenen Wasserlinien ist in den Tabellen 4.2 bzw. 4.3 zusehen.

Aus Tabelle 4.3 wird ersichtlich, dass die PS Linienliste jenseits von  $10\,000\text{ cm}^{-1}$  steigend unzuverlässiger werden.

<sup>15</sup>nach Aussage der Autoren 65% mehr als alle anderen aktuellen  $\text{H}_2\text{O}$  Linienlisten

<sup>16</sup>Es wurde die ursprüngliche Auflösung von  $0.5\text{ \AA}$  über 1, 2.5, 5 bis  $10\text{ \AA}$  'gebinnt'.

innerhalb von $\Delta\nu$ [cm <sup>-1</sup> ]		0.1	0.3	1.0	3.0	5.0	10.0
BT	[%]	48.7	91.4	99.2	99.9	100	100
PS	[%]	59.2	85.6	92.6	96.5	97.0	98.1

Tabelle 4.2: Vergleich der theoretischen Werte von BT und PS mit 14 889 experimentell bestimmten Energieniveaus (nach Barber *et al.* (2006)).

Energiebereich [cm <sup>-1</sup> ]	Messwerte # gesamt	BT		PS	
		# mit $\Delta\nu > 2$ cm <sup>-1</sup>			
20 000-26 300	575	9		334	
15 000-20 000	2813	10		105	
10 000-15 000	6323	8		58	
7 000-10 000	3263	3		9	
< 7 000	1914	0		0	
Gesamt	14 889	30		506	

Tabelle 4.3: Verteilung der theoretischen Energien bei BT und PS mit einer Abweichung von über 2 cm<sup>-1</sup> in der Frequenz zu experimentellen Werten (nach Barber *et al.* (2006)).

Während die PS Linienliste also bei einer Effektivtemperatur von 2000 K noch gut mit der BT Liste konkurrieren kann, fehlen ihr bei 4000 K etwa 25% der Wasserdampflinien (Barber *et al.* (2006)). Der Unterschied durch diese fehlenden Linien ist aber allenfalls minimal und konnte bei einer Testrechnung mit  $T_{\text{eff}} = 4000$  K trotz Vergrößern einiger Bereiche nicht nachgewiesen werden.

Trotzdem ist die neue H<sub>2</sub>O Linienliste von Barber & Tennyson bis auf die Genauigkeit der Linien mit einer Abweichung von  $\Delta\nu < 0.1$  cm<sup>-1</sup> anscheinend gegenüber der von Partridge & Schwenke durchweg verbessert worden.

## Kapitel 5

# Neue solare Häufigkeiten der Photosphäre

<i>Sym</i>	<i>No</i>	<i>Z</i>	2005	1995	$\Delta$ [%]	<i>Sym</i>	<i>No</i>	<i>Z</i>	2005	1995	$\Delta$ [%]
H	01	1	12.00	12.00	+0.00	He	02	2	10.93	10.99	-12.90
Li	03	3	3.25	3.31	-12.90	Be	04	4	1.38	1.15	+69.82
B	05	5	2.70	2.60	+25.89	C	06	6	8.39	8.55	-30.82
N	07	7	7.78	7.97	-35.43	O	08	8	8.66	8.87	-38.34
F	09	9	4.56	4.56	+0.00	Ne	10	10	7.84	8.08	-42.46
Na	11	11	6.17	6.33	-30.82	Mg	12	12	7.53	7.58	-10.87
Al	13	13	6.36	6.47	-22.38	Si	14	14	7.51	7.55	-8.80
P	15	15	5.36	5.45	-18.72	S	16	16	7.14	7.21	-14.89
Cl	17	17	5.50	5.50	+0.00	Ar	18	18	6.18	6.52	-54.29
K	19	19	5.08	5.12	-8.80	Ca	20	20	6.31	6.36	-10.87
Sc	21	21	3.05	3.17	-24.14	Ti	22	22	4.90	5.02	-24.14
V	23	23	4.00	4.00	+0.00	Cr	24	24	5.64	5.67	-6.67
Mn	25	25	5.39	5.39	+0.00	Fe	26	26	7.45	7.50	-10.87
Co	27	27	4.92	4.92	+0.00	Ni	28	28	6.23	6.25	-4.50
Cu	29	29	4.21	4.21	+0.00	Zn	30	30	4.60	4.60	+0.00
Ga	31	31	2.88	2.88	+0.00	Kr	32	36	3.28	3.23	+12.20
Rb	33	37	2.60	2.60	+0.00	Sr	34	38	2.92	2.90	+4.71
Y	35	39	2.21	2.24	-6.67	Zr	36	40	2.59	2.60	-2.28
Nb	37	41	1.42	1.42	+0.00	Ba	38	56	2.17	2.13	+9.65
La	39	57	1.13	1.22	-18.72	Cs	40	55	1.07	1.12	-10.87

Tabelle 5.1: Solare Häufigkeiten der Photosphäre mit  $A_{\text{El}}(\text{H}) = 12.00$  in logarithmischer Skala. Die Unterschiede zwischen alter und neuer Häufigkeit sind in Prozent angeben.

Tabelle 5.1 zeigt die solare Anzahlhäufigkeit der Photosphäre von Asplund *et al.* (2005) und von Grevesse und Noels (1995) (unveröffentlicht, in Jaschek und Jaschek (1995)) für 40 Elemente aufgeführt. Dabei ist *No* eine interne Nummerierung (entspricht der PHOENIX Variablen 'Nome') und *Z* die Ordnungszahl. Die Häufigkeiten sind in logarithmischer Skala im Vergleich zu H angegeben, wobei H auf den dafür üblichen Wert von 12.00 gesetzt ist.

(Eine Häufigkeit von 11.00 in dieser Skala bedeutet also genau einen Faktor 10 weniger Teilchen als Wasserstoff.) In der letzten Spalte ist jeweils der lineare Unterschied  $\Delta$  der neuen gegenüber der alten Häufigkeit in Prozent aufgeführt.

Die solaren Häufigkeiten der Photosphäre ( $A_{\text{El}}$ ) werden folgendermaßen auf das logarithmische Verhältnis zu Wasserstoff umgerechnet:

$$A_{\text{El}} = \left[ \log \frac{N_{\text{El}}}{N_{\text{H}}} + 12.00 \right] \quad (5.1)$$

wobei  $N$  die Teilchenzahldichte des entsprechenden Elementes (El) bzw. die von Wasserstoff (H) ist.

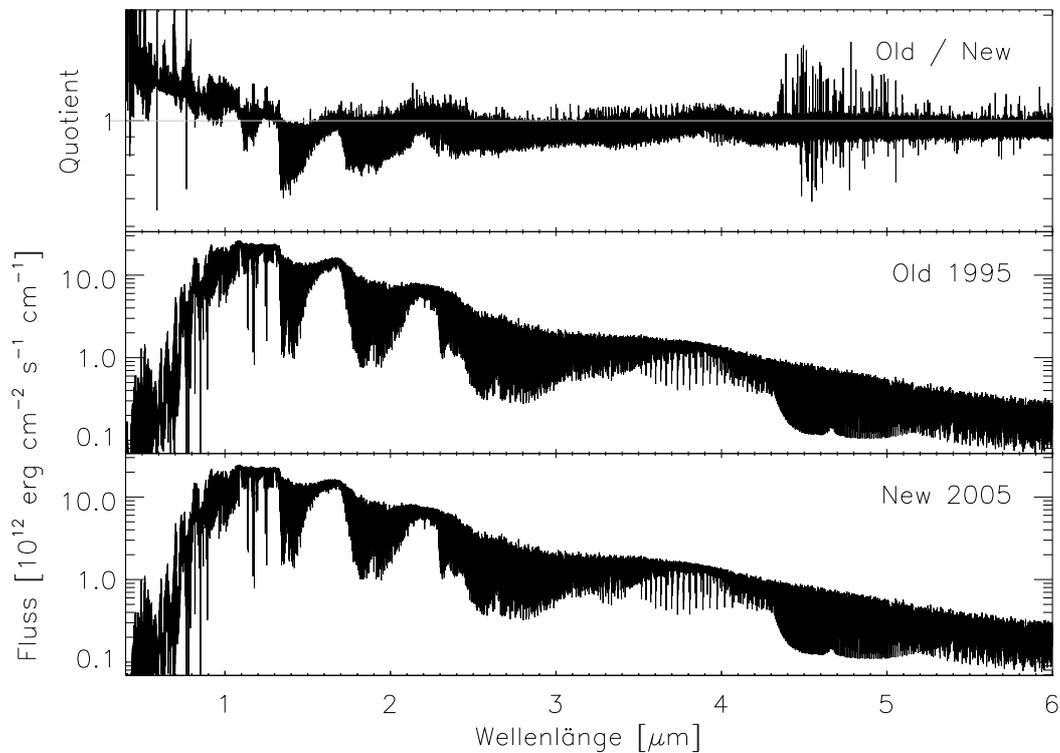


Abbildung 5.1: Zwei Spektren bei 2500 K,  $\log(g) = 5$  und  $Z = 0$  mit unterschiedlichen photosphärischen Anzahlhäufigkeiten und deren Quotient (oben).

Die Abbildung 5.1 zeigt ein Spektrum mit der neuen solaren Anzahlhäufigkeit von Asplund *et al.* (2005) (unten) im Vergleich mit alten von Grevesse und Noels (1995) (aus Jaschek und Jaschek (1995)) (Mitte) bei 2500 K,  $\log(g) = 5$  und  $Z = 0$ . Der Quotient der Spektren (oben) wird gezeigt, um deren Abweichungen voneinander zu verdeutlichen. Es wurde mit GAIA und GAIA2 Modellen gestartet, die mit den neuen Linienlisten und denselben Einstellungen, aber anderen Häufigkeiten, konvergiert sind.

Oberhalb von 1.3  $\mu\text{m}$  liegt der Quotient durchschnittlich unter 1 (graue Linie), woran man erkennen kann, dass die Absorption mit den neuen Häufigkeiten in vielen Bereichen weniger stark ist; deshalb ist die abgestrahlte Intensität stärker als die des alten Modells. Dies liegt an der geringeren Häufigkeit der Elemente O, C, Ti, Mg und Fe bei Asplund *et al.* (2005),

welche u.a. für die Bildung des überall starken  $\text{H}_2\text{O}$ , aber auch des  $\text{TiO}$ ,  $\text{MgH}$ ,  $\text{FeH}$  und  $\text{CO}$  benötigt werden.

Der große Anstieg im Quotienten unterhalb der Wellenlänge von  $1.3 \mu\text{m}$  resultiert daraus, dass die insgesamt abgestrahlte Energie (bzw. das Integral über alle Wellenlängen) durch  $T_{\text{eff}}$  und die Größe des Sterns ( $\log(g)$ ) bereits gegeben ist. Da im alten Modell die Abstrahlung oberhalb von  $1.3 \mu\text{m}$  geringer ist, muss dieses Defizit im Bereich  $0 < \lambda < 1.3 \mu\text{m}$  ausgeglichen werden.

## Kapitel 6

# Ausblick

Insbesondere die neuen Linienlisten für VO, aber auch für CaH und H<sub>2</sub>O scheinen eine Verbesserung im Vergleich zu älteren Listen zu bewirken. Lediglich bei der TiO Liste von Plez ließ sich eine Verschiebung im  $\delta$ -Band nachweisen und damit im Vergleich zu Beobachtungen eine Verschlechterung zu der älteren Linienliste von Schwenke.

In Zukunft wird der Umfang der verwendeten Linienlisten vermutlich mit deren Verfügbarkeit weiter steigen. Wünschenswert wäre neben der Verbesserung der Qualität (Vollständigkeit / Genauigkeit) der bestehenden Daten eine Vergrößerung des Energiebereiches der Linien und eine Erweiterung auf weitere Moleküle. Insbesondere sind mehr Linien für Hydride wie z.B. für FeH wünschenswert, um auch kühlere Sterne noch besser modellieren zu können.

Die Struktur des Moleküllinienlistenformates in PHOENIX könnte verbessert werden, um zusätzliche Informationen wie die Druckverbreiterung der Linien, die z.B. in der HITRAN Datenbank verfügbar ist, zu speichern und diese mit den in PHOENIX berechneten Werten zu vergleichen. Derzeit ist die Verfügbarkeit der Druckverbreiterung oder Dämpfung bei Molekülen aber noch zu gering, um ein solches Format standardisieren zu können.

Eine Verbesserung anderer Art wäre die Verwendung verschiedener Linienlisten des selben Moleküls nebeneinander. So wäre es z.B. sinnvoll an den hochaufgelösten, aber kleinen Bereich einer Liste den größeren Wellenlängenbereich einer anderen Liste so anzufügen, dass es keine Überlappung gibt. Dies ist insbesondere bei Simulationen wichtig, die einen größeren Wellenlängenbereich abdecken, da ansonsten nur die größere Liste mit schlechterer Genauigkeit ausgewählt werden müsste. Diese kombinierte Liste könnte dann einfach als neue Quelle der Masterliste hinzugefügt werden. (Die ursprünglichen Linienlisten müssen auf Grund der Abwärtskompatibilität ebenfalls erhalten bleiben.)

Der Verbrauch an zusätzlichem Plattenspeicher ist dabei nicht problematisch, denn zum einen besitzt PHOENIX einen Modus, der eine Auswahl der benötigten/eingestellten Linien in einer separaten Liste vor der ersten Iteration erstellt und zum anderen ist die technische Weiterentwicklung der Festplatten und deren Lesegeschwindigkeit genügend schnell.

Es bietet sich im Anschluss an diese Diplomarbeit an, einen detaillierten Vergleich zwischen den mit den neuen Moleküllinienlisten, den neuen TiO EOS Daten und den neuen solaren photosphärischen Anzahlhäufigkeiten erzeugten Spektren und denen von Beobachtungen vorzunehmen. Hierfür müsste zunächst ein neues Gitter<sup>1</sup> neuer Modelle berechnet werden, welches, sollte es den Standard verbessern, veröffentlicht werden kann.

---

<sup>1</sup>Variation der Temperatur, der Gravitation, der Metallizität für Vergleiche mit Beobachtungen

## Anhang A

# Implementation der Linienlisten

### A.1 PHOENIX internes Linien-Speicherformat

PHOENIX nutzt ein spezielles Speicherformat für die darin verwendeten Linienlisten. Alle benötigten Größen werden in 'Integer'-Variablen abgespeichert, um die benötigte Speicherkapazität zu reduzieren. Vorrangiges Ziel ist dabei nicht die Einsparung von Festplatten, sondern die Verringerung von I/O Vorgängen<sup>1</sup>, die äußerst zeitintensiv sind, da das Programm mit mehr als einer Milliarde von Linien arbeitet. Der Verlust der Genauigkeit in den hinteren Stellen ist dabei nicht kritisch, während der Gewinn an Speicherkapazität einen Faktor 3.125 im Vergleich zu 'Real'-Variablen beträgt (16 Byte gegenüber von 50 Byte, siehe Tabelle A.1). Die Linienliste selbst wird nicht im ASCII<sup>2</sup>, sondern im binären Format gespeichert, was wiederum mehr als einen Faktor 2 an Festplattenspeicher einspart.

<i>Name</i>	<i>Integer</i>	<i>Größe</i>	<i>Real</i>	<i>Physikalische Bedeutung</i>
iwl	kind=4	4 Byte	8 Byte	Wellenzahl [nm]
ielion	kind=2	2 Byte	(4 Byte)	Interner Molekül-Code
ielo	kind=2	2 Byte	8 Byte	Anregung [ $\text{cm}^{-1}$ ] des unteren Niveaus
igflog	kind=2	2 Byte	8 Byte	gf-Wert
igr	kind=2	2 Byte	8 Byte	Dämpfungskonstante / frei bei Molekülen
igs	kind=2	2 Byte	8 Byte	Dämpfungskonstante / frei bei Molekülen
igw	kind=2	2 Byte	8 Byte	Dämpfungskonstante / frei bei Molekülen

Tabelle A.1: Die 16 Byte einer einzelnen Linie in PHOENIX.

Die Variablen igr, igs und igw in Tabelle A.1 werden bei Atomen verwendet, um die Dämpfungskonstanten zu speichern. Da diese für Moleküle üblicherweise nicht verfügbar waren, wurden in diese freigewordenen Plätze zusätzliche Informationen gespeichert (siehe hierzu das Kapitel A.1.1). Seit der Verfügbarkeit dieser Dämpfungskonstanten in zumindest der HITRAN2004 Datenbank lässt sich überlegen, diese künftig auch für Moleküle zu speichern. *Integer* gibt den genauen Typ der Variablen, *Größe* deren Platzverbrauch an. Unter *Real* steht der hypothetische Platzbedarf dieses Variablentyps mit gleichem Wertebereich.

<sup>1</sup>engl. Input / Output = Eingabe / Ausgabe

<sup>2</sup>American Standard Code for Information Interchange

Der zweite Eintrag in dieser Spalte ist eingeklammert, da der Molekül-Code ohnehin ganzzahlig ist und daher als Integer gespeichert werden muss.

Die aktuelle PHOENIX Version benutzt Blöcke von jeweils 65536 Linien, wobei jede Linie durch die Variablen *iwl*, *ielion*, *ielo*, *igflog*, *igr*, *igs* und *igw* beschrieben wird und zusammen 16 Bytes groß ist (siehe auch Tabelle A.1 für Details).

Um im letzten Block das Ende der Linien zu markieren, werden (end of data sign) die folgenden Liniendaten bis zum Ende des Blockes alle mit  $-1$  aufgefüllt. Es ist möglich, dass ein ganzer 65536er Block mit  $-1$  vollgeschrieben wird, wenn der vorherige Block exakt gefüllt und zumindest ein Liniendatensatz mit  $-1$  gebraucht wird. Aber dies ist der denkbar schlechteste Fall und im Mittel dürfte nur ein halber Block gefüllt sein. Dieser scheinbare Verlust an Plattenplatz beläuft sich aber höchstens auf 1 MB (65536 Linien mal 16 Byte = 1.048.576 Byte) pro Liste. Die Linienlisten sind aber in einer Masterliste<sup>3</sup> zusammengefasst, so dass nur ein solcher Block am Ende existiert.

Bevor nun die Linienlisten in das PHOENIX Liniendatenschema konvertiert werden, ist es wichtig, die neuen Listen zunächst nach kritischen Werten<sup>4</sup> zu durchsuchen, diese zu filtern und einen ersten Überblick über die Qualität und die unteren und oberen Grenzen zu erhalten.

### A.1.1 Technische Details

Die Umrechnung der Wellenlänge, der Anregung des unteren Niveaus und des *gf*-Wertes in Integerzahlen erfolgt mit den folgenden Formeln:

$$iwl = \text{Integer} \left( \frac{\ln('Wellenlänge')}{\ln(1 + \frac{1}{2000000})} + 0.5 \right) \quad (\text{A.1})$$

$$ielo/igflog = \text{Integer} \left( \ln('Anregung/gf-Wert') * \frac{1000}{\ln(10)} \right) + 16384 \quad (\text{A.2})$$

wobei die Wellenlänge in Nanometern und die Anregung des unteren Niveaus in inversen Zentimetern eingesetzt wird. (Der einzusetzende *gf*-Wert für HITRAN ergibt sich aus der Gleichung 3.4 im Unterkapitel 3.2.1.)

Diese Umrechnung von reellen Zahlen in ganze Zahlen geht auf R. Kurucz zurück, der als erster diese Verschlüsselung bei seinen Linienlisten benutzte. Der Fehler ist dabei für die Wellenlänge geringer als  $5 \cdot 10^{-7}$ , da aufgrund des Logarithmus für kleine Zahlen die Schritte feiner als für große sind<sup>5</sup>. Für die etwas gröber gespeicherte Anregung bzw. den *gf*-Wert ergibt sich ein Fehler von maximal  $2.3 \cdot 10^{-3}$ , der damit ebenfalls annehmbar klein ist.

Die Variablen *igr*, *igs* und *igw*, die bei Atomen für die Dämpfungskonstanten benötigt werden, wurden mit zusätzlichen, möglicherweise später nützlichen Informationen gefüllt.

Im Fall der Linienlisten von Plez enthält:

- *igr* die untere Rotationsquantenzahl plus die Übergangskennzeichnung, deren Kodierung aus Anhang B zu entnehmen ist  $\rightarrow igr = J_{\text{low}} \cdot 10 + \text{tran.id}$
- *igs* die obere und untere Vibrationsquantenzahl des Moleküls  $\rightarrow igs = v_{\text{up}} \cdot 100 + v_{\text{low}}$

<sup>3</sup>derzeit knapp 20 GB groß mit mehr als  $10^9$  Linien.

<sup>4</sup>Viele Autoren benutzen negative und damit häufig unphysikalische Werte, um unvollständige Datensätze zu kennzeichnen. Solche Eingaben sind z.B. bei einer log-Berechnung problematisch.

<sup>5</sup>wobei die  $+0.5$  in der Formel nur zum korrekten Auf- bzw. Abrunden in Fortran dient.

- und igw den elektronischen Übergang, dessen Kodierung ebenfalls in Anhang B zu finden ist.

Die Linienlisten von HITRAN enthalten hingegen in den Dämpfungskonstanten für:

- igr das statistische Gewicht des oberen Niveaus, welches trotz des höheren Float-Formates in der HITRAN Datenbank ohne Rundungen als ganze Zahl in die Integer-Variable gespeichert werden kann  $\rightarrow \text{igr} = g'$
- igs das statistische Gewicht des unteren Niveaus (siehe igr)  $\rightarrow \text{igs} = g''$
- und igw die (redundante<sup>6</sup>) Isotopologenummer, welche natürlich auch bereits in elion codiert ist.  $\rightarrow \text{igw} = I$

### A.1.2 Speicherformate

Little Endian und Big Endian sind die beiden gängigen (der vier möglichen) Verfahren, um eine Zahl, die einen Speicherblock übersteigt, in einem längeren Speicherbereich abzulegen. Dies ist in Tabelle A.2 für das Big Endian und Little Endian Format exemplarisch für die Zahl 12345678 dargestellt.

0x0040000...	...0	...1	...2	...3	0x0040000...	...0	...1	...2	...3
Big Endian	1 2	3 4	5 6	7 8	Little Endian	7 8	5 6	3 4	1 2

Tabelle A.2: 'Big Endian' und 'Little Endian' Format des Ausdruckes 12 34 56 78 im willkürlich gewählten Speicherbereich von 0x0040000 0 bis 0x0040000 3

Daraus wird deutlich, dass bei Verwechslung / Vermischung des Formates beim Auslesen die Zahl 78563412 entstünde. Während die Intel Rechnerarchitektur<sup>7</sup> das Little Endian Format benutzt, wurde z.B. bei der PPC, SPARC und MC68k Architektur das Big Endian Speicherformat umgesetzt.

Es ist bei der Konvertierung der Linienliste also wichtig, sich über die Rechnerarchitektur im Klaren zu sein. PHOENIX legt seine Linienlisten im Big Endian Format ab, so dass am einfachsten ein entsprechender PC benutzt werden kann oder aber auf einem Intel PC eine Routine die Zahlen entsprechend vor dem Speichern vertauschen muss.

Dieser Unterschied kann eine schwerwiegende Fehlerquelle darstellen, die im besten Fall zu Programmabbrüchen (ein Wert ist  $-1$  oder die Liste ist nicht mehr sortiert) führt und im schlimmsten Fall unbemerkt bleibt.

<sup>6</sup>andere nützliche Informationen der HITRAN Datenbank ließen sich nicht zufriedenstellend auf einen Integer dieses Typs abbilden.

<sup>7</sup>Korrekterweise müsste man eigentlich von der Architektur des Prozessors sprechen.



## Anhang B

# Tabellen

### B.1 Tabellen zur Kodierung der Moleküldaten

Eine Übersicht über die Isotopologen der neuen Moleküle von Plez (interner PHOENIX Code 193-198 & 291) und der HITRAN Datenbank (Code 199-290) und deren Molmassen findet sich in Tabelle B.1.

Tabelle B.1: Auszug der Molekülliste aus molx.f

<i>Int</i>	<i>Isotopolog</i>	<i>Molmasse</i>	<i>Int</i>	<i>Isotopolog</i>	<i>Molmasse</i>
193	$^{46}\text{Ti}^{16}\text{O}$	61.9475	194	$^{47}\text{Ti}^{16}\text{O}$	62.9467
195	$^{48}\text{Ti}^{16}\text{O}$	63.9429	196	$^{49}\text{Ti}^{16}\text{O}$	64.9428
197	$^{50}\text{Ti}^{16}\text{O}$	65.9397	198	$^{51}\text{V}^{16}\text{O}$	66.9389
199	$\text{H}_2^{16}\text{O}$	18.0106	200	$\text{H}_2^{18}\text{O}$	20.0148
201	$\text{H}_2^{17}\text{O}$	19.0148	202	$\text{H}^{16}\text{OD}$	19.0168
203	$\text{H}^{18}\text{OD}$	21.0211	204	$\text{H}^{17}\text{OD}$	20.0211
205	$^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$	43.9898	206	$^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$	44.9932
207	$^{12}\text{C}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$	45.9941	208	$^{12}\text{C}^{16}\text{O}^{17}\text{O}$	44.9940
209	$^{13}\text{C}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$	46.9974	210	$^{13}\text{C}^{16}\text{O}^{17}\text{O}$	45.9974
211	$^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$	47.9983	212	$^{12}\text{C}^{17}\text{O}^{18}\text{O}$	46.9983
213	$^{16}\text{O}_3$	47.9847	214	$^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$	49.9890
215	$^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$	49.9890	216	$^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{17}\text{O}$	48.9890
217	$^{16}\text{O}^{17}\text{O}^{16}\text{O}$	48.9890	218	$^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$	44.0010
219	$^{14}\text{N}^{15}\text{N}^{16}\text{O}$	44.9981	220	$^{15}\text{N}^{14}\text{N}^{16}\text{O}$	44.9981
221	$^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{18}\text{O}$	46.0053	222	$^{14}\text{N}^{14}\text{N}^{17}\text{O}$	45.0053
223	$^{12}\text{C}^{16}\text{O}$	27.9949	224	$^{13}\text{C}^{16}\text{O}$	28.9983
225	$^{12}\text{C}^{18}\text{O}$	29.9992	226	$^{12}\text{C}^{17}\text{O}$	28.9991
227	$^{13}\text{C}^{18}\text{O}$	31.0025	228	$^{13}\text{C}^{17}\text{O}$	30.0025
229	$^{12}\text{CH}_4$	16.0313	230	$^{13}\text{CH}_4$	17.0347
231	$^{12}\text{CH}_3\text{D}$	17.0376	232	$^{16}\text{O}^{16}\text{O}$	31.9898
233	$^{16}\text{O}^{18}\text{O}$	33.9941	234	$^{16}\text{O}^{17}\text{O}$	32.9940
235	$^{14}\text{N}^{16}\text{O}$	29.9980	236	$^{15}\text{N}^{16}\text{O}$	30.9950
237	$^{14}\text{N}^{18}\text{O}$	32.0022	238	$^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$	63.9619
239	$^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$	65.9577	240	$^{14}\text{N}^{16}\text{O}_2$	45.9929
241	$^{14}\text{NH}_3$	17.0265	242	$^{15}\text{NH}_3$	19.0236

Tabelle B.1: Weiter: Auszug der Molekülliste aus molx.f

<i>Int</i>	<i>Isotopolog</i>	<i>Molmasse</i>	<i>Int</i>	<i>Isotopolog</i>	<i>Molmasse</i>
243	H <sup>14</sup> N <sup>16</sup> O <sub>3</sub>	62.9956	244	<sup>16</sup> OH	17.0027
245	<sup>18</sup> OH	19.0070	246	<sup>16</sup> OD	18.0090
247	H <sup>19</sup> F	20.0062	248	H <sup>35</sup> Cl	35.9767
249	H <sup>37</sup> Cl	37.9737	250	H <sup>79</sup> Br	79.9262
251	H <sup>81</sup> Br	81.9241	252	H <sup>127</sup> I	127.9123
253	<sup>35</sup> Cl <sup>16</sup> O	50.9638	254	<sup>37</sup> Cl <sup>16</sup> O	52.9608
255	<sup>16</sup> O <sup>12</sup> C <sup>32</sup> S	59.9670	256	<sup>16</sup> O <sup>12</sup> C <sup>34</sup> S	61.9628
257	<sup>16</sup> O <sup>13</sup> C <sup>32</sup> S	60.9703	258	<sup>16</sup> O <sup>12</sup> C <sup>33</sup> S	60.9664
259	<sup>18</sup> O <sup>12</sup> C <sup>32</sup> S	61.9712	260	H <sub>2</sub> <sup>12</sup> C <sup>16</sup> O	30.0106
261	H <sub>2</sub> <sup>13</sup> C <sup>16</sup> O	31.0139	262	H <sub>2</sub> <sup>12</sup> C <sup>18</sup> O	32.0148
263	H <sup>16</sup> O <sup>35</sup> Cl	51.9716	264	H <sup>16</sup> O <sup>37</sup> Cl	53.9686
265	<sup>14</sup> N <sup>14</sup> N	28.0061	266	H <sup>12</sup> C <sup>14</sup> N	27.0109
267	H <sup>13</sup> C <sup>14</sup> N	28.0143	268	H <sup>12</sup> C <sup>15</sup> N	28.0079
269	<sup>12</sup> CH <sub>3</sub> <sup>35</sup> Cl	49.9923	270	<sup>12</sup> CH <sub>3</sub> <sup>37</sup> Cl	51.9894
271	H <sub>2</sub> <sup>16</sup> O <sub>2</sub>	34.0055	272	<sup>12</sup> C <sup>12</sup> CH <sub>2</sub>	26.0157
273	<sup>12</sup> C <sup>13</sup> CH <sub>2</sub>	27.0190	274	<sup>12</sup> C <sup>12</sup> CH <sub>6</sub>	30.0470
275	<sup>31</sup> P <sup>3</sup> H <sub>3</sub>	33.9972	276	<sup>12</sup> C <sup>16</sup> O <sup>19</sup> F <sub>2</sub>	65.9917
277	<sup>32</sup> S <sup>19</sup> F <sub>6</sub>	145.9625	278	H <sub>2</sub> <sup>32</sup> S	33.9877
279	H <sub>2</sub> <sup>34</sup> S	35.9835	280	H <sub>2</sub> <sup>33</sup> S	34.9871
281	H <sup>12</sup> C <sup>16</sup> O <sup>16</sup> OH	46.0055	282	H <sup>16</sup> O <sub>2</sub>	32.9977
283	<sup>35</sup> Cl <sup>16</sup> O <sup>14</sup> N <sup>16</sup> O <sub>2</sub>	96.9567	284	<sup>37</sup> Cl <sup>16</sup> O <sup>14</sup> N <sup>16</sup> O <sub>2</sub>	98.9537
285	<sup>14</sup> N <sup>16</sup> O <sup>+</sup>	29.9980	286	H <sup>16</sup> O <sup>79</sup> Br	95.9211
287	H <sup>16</sup> O <sup>81</sup> Br	97.9190	288	<sup>12</sup> C <sup>12</sup> CH <sub>4</sub>	28.0313
289	<sup>12</sup> C <sup>13</sup> CH <sub>4</sub>	29.0347	290	<sup>12</sup> CH <sub>3</sub> <sup>16</sup> OH	32.0262
291	<sup>40</sup> CaH	26.9906			

Im Folgenden bezeichnet *Int* immer die interne numerische Repräsentation des *Zweiges* bzw. des elektronischen *Übergangs* in PHOENIX.

Die letzte Ziffer '0' in der internen Repräsentation *Int* wurde zur Markierung von fehlerhaften, unbekanntem Einträgen benutzt, um diese später leicht finden zu können. Daher gibt es keine Zahlen wie 10, 20 etc. die auf 0 enden. Die Anzahl der jeweiligen *Zweige* des Isotops ist in der dazugehörigen Spalte angegeben. Wie man sieht, gibt es kaum Ausreisser bei den *Zweigen* und selbst der seltenste kommt mehrere hundert Male vor.

Etwas anderes gilt für die vorkommenden elektronischen *Übergänge*. Hier ist der Unterschied in der Anzahl der *B3 – E3 Übergänge* bei den TiO Isotopologen deutlich.

<i>Int</i>	<i>Zweig</i>	<sup>46</sup> Ti <sup>16</sup> O	<sup>47</sup> Ti <sup>16</sup> O	<sup>48</sup> Ti <sup>16</sup> O	<sup>49</sup> Ti <sup>16</sup> O	<sup>50</sup> Ti <sup>16</sup> O
1	R1	134732	133483	177382	134732	128846
2	R2	122459	121460	156000	122459	117903
3	R3	123050	121930	156927	123050	118133
4	P1	134439	133165	177344	134439	128671
5	P2	122191	121135	155837	122191	117633
6	P3	123375	122395	157801	123375	118758
7	Q1	117779	116370	155388	117779	111470
8	Q2	106052	105013	136542	106052	101239
9	Q3	109110	108006	139584	109110	104006
11	R	101004	99873	132003	101004	95878
12	P	100433	99256	130968	100433	95280
13	Q	86776	85815	117493	86776	82249
14	OP12	54829	53942	86251	54829	50767
15	QP21	53852	52953	83945	53852	49798
16	OP23	53954	53062	84425	53954	49986
17	QP32	54006	53084	84421	54006	49950
18	SR21	53638	52819	82044	53638	49854
19	SR32	53526	52665	82343	53526	49653
21	RQ21	60841	60020	87463	60841	57193
22	RQ32	61143	60172	88565	61143	57436
23	QR12	52138	51312	81089	52138	48242
24	QR23	51332	50489	79509	51332	47384
25	PQ12	60093	59188	85328	60093	56581
26	PQ23	58963	58070	83082	58963	55609
27	SQ31	21610	20995	41943	21610	18731
28	TR31	16657	16104	35838	16657	14411
29	RP31	15509	15030	34064	15509	13219
31	PR13	14722	14250	32874	14722	12400
32	OQ13	20699	20091	40767	20699	17785
33	NP13	15953	15492	34770	15953	13733

Tabelle B.2: Anzahl der *Zweige* bei den TiO Isotopologen von Plez.

<i>Int</i>	<i>Plez</i>	Übergang	<sup>46</sup> Ti <sup>16</sup> O	<sup>47</sup> Ti <sup>16</sup> O	<sup>48</sup> Ti <sup>16</sup> O	<sup>49</sup> Ti <sup>16</sup> O	<sup>50</sup> Ti <sup>16</sup> O
1	<i>A</i>	$\alpha$	254356	252080	334133	243809	243662
2	<i>B</i>	$\beta$	60760	60319	76880	58607	58639
3	<i>G</i>	$\gamma$	415321	410349	574680	392791	392833
4	<i>H</i>	$\gamma'$	1081891	1068532	1474820	1022693	1023128
5	<i>D</i>	$\delta$	103639	102320	138995	98041	98085
6	<i>E</i>	$\epsilon$	114051	111078	221696	99931	99768
7	<i>P</i>	$\phi$	59676	58699	84074	55190	55191
8	<i>C</i>	<i>B3-E3</i>	1033	656	36197	0	0
9	<i>F</i>	<i>a-f</i>	64138	63606	80515	61506	61492

Tabelle B.3: Bezeichnung des elektronischen *Übergangs* beim TiO, dessen numerische Codierung im Programm (*Int*) und bei *Plez* und die Anzahl bei den einzelnen Isotopologien.

<i>Int</i>	<i>Zweig</i>	VO	<i>Int</i>	<i>Zweig</i>	VO	<i>Int</i>	<i>Zweig</i>	VO
1	R1	110916	18	RP31	47013	36	OP34	63849
2	R2	108062	19	PR13	47511	37	QR12	64018
3	R3	108858	21	PQ12	82985	38	OP23	65012
4	R4	111013	22	PQ34	82530	39	OP12	64734
5	P1	111234	23	RP42	46145	41	TR42	47475
6	P2	108248	24	PR24	47441	42	SQ42	50466
7	P3	108096	25	TR31	47995	43	SQ31	51244
8	P4	110254	26	NP13	48482	44	OQ24	51550
9	Q1	71385	27	SR43	64339	45	OQ13	51626
11	Q2	69028	28	SR32	65010	46	NP24	47835
12	Q3	69123	29	SR21	64569	47	TQ41	27760
13	Q4	70867	31	QR34	64137	48	UR41	25408
14	RQ32	84634	32	QP43	63227	49	NQ14	28980
15	PQ23	84786	33	QP32	64357	51	SP41	23406
16	RQ43	82417	34	QP21	64405	52	MP14	26540
17	RQ21	83216	35	QR23	64852	53	OR14	24514

Tabelle B.4: Anzahl der *Zweige* für beide VO Isotope gemeinsam. Es wurde eine andere Nummerierung der *Zweige* als die beim TiO gewählt.

<i>Int</i>	<i>Plez</i>	Übergang	VO
1	<i>A</i>	$\alpha$	1317256
2	<i>B</i>	$\beta$	1420988
8	<i>C</i>	<i>B3-E3</i>	433308

Tabelle B.5: Bezeichnung des elektronischen *Übergangs* beim VO, dessen numerische Codierung im Programm (*Int*) und bei *Plez* und die Anzahl des jeweiligen *Übergangs*. Die Nummerierung entspricht der der *Übergänge* des TiO in Tabelle B.3.

<i>Int</i>	<i>Zweig</i>	<i>Total</i>	<i>A-X</i>	<i>B-X</i>	<i>Int</i>	<i>Zweig</i>	<i>Total</i>	<i>A-X</i>	<i>B-X</i>
1	R1	3543	1787	1756	17	RQ21	3536	1770	1766
2	R2	3505	1771	1734	21	PQ12	3576	1802	1774
5	P1	3543	1781	1762	29	SR21	1776	1776	0
6	P2	3465	1729	1736	34	QP21	1736	1736	0
9	Q1	1812	1812	0	37	QR12	1773	1773	0
11	Q2	1760	1760	0	39	OP12	1766	1766	0

Tabelle B.6: Anzahl der *Zweige* für CaH, sortiert nach den elektronischen Übergängen *A-X* und *B-X*. Die Nummerierung der *Zweige* entspricht der des VO Moleküls in Tabelle B.4.

## Anhang C

### Glossar: englische Begriffe

<i>Englisch</i>	<i>Deutsch</i>
ab initio calculation	'ab initio' Berechnung
active galactic nuclei (AGN)	Aktive Galaktische Kerne
atomic number	Kernladungszahl / Ordnungszahl (Z)
binning	(Klassen-) Einteilung
bound-bound transition	gebunden-gebunden Übergang
bound-free transition	gebunden-frei Übergang
branch ratio	Zweig Kennziffer
cataclysmic variables (CV)	kataklysmische Variable
equation of state (EOS)	Zustandsgleichung
excitation energy	Anregungsenergie
free-free transition	frei-frei Übergang
half-width at half-maximum (HWHM)	halbe Breite bei halber Höhe
input / output (I/O)	Eingabe / Ausgabe
isotopologue	Isotopolog
isotopomer	Isotopomer
local thermodynamic equilibrium (LTE)	lokales thermodynamisches Gleichgewicht
mixing length theory (MLT)	Mischungsweg-Theorie
non-local thermodynamic equilibrium (NLTE)	nicht-lokales thermodynamisches Gleichgewicht
partial pressure	Partialdruck
root mean squared velocity (r.m.s. velocity)	Wurzel aus dem mittleren Geschwindigkeitsquadrat
source function	Ergiebigkeitsfunktion (Quellfunktion)
transition id	Übergangskennzeichnung

Tabelle C.1: Die in der Diplomarbeit verwendeten englischen Begriffe.

# Literaturverzeichnis

- Anders, E. und Grevesse, N., *Abundances of the elements - Meteoritic and solar*, *Geochimica Cosmochimica Acta* **53**, 197–214 (1989).
- Asplund, M., Grevesse, N., und Sauval, A. J. (2005), The Solar Chemical Composition, in *ASP Conf. Ser. 336: Cosmic Abundances as Records of Stellar Evolution and Nucleosynthesis*, pages 25–+.
- Barber, R., Tennyson, J., Harris, G., und Tolchenov, R., *A high accuracy computed water line list*, *astro-ph/0601236*, Submitted to *MNRAS*, 8 (2006).
- Baschek, B. und Scholz, M. (1982), *Physics of stellar atmospheres*, Heidelberg, Springer.
- Biermann, L., *Untersuchungen über den inneren Aufbau der Sterne. IV. Konvektionszonen im Innern der Sterne. (Veröffentlichungen der Universitäts-Sternwarte Göttingen, Nr. 27.) Mit 5 Abbildungen.*, *Zeitschrift für Astrophysics* **5**, 117–+ (1932).
- Böhm-Vitense, E. (1989), *Introduction to Stellar Astrophysics*, Introduction to Stellar Astrophysics, by Erika Böhm-Vitense, pp. 256. ISBN 0521348692. Cambridge, UK: Cambridge University Press, August 1989.
- Borysow, A. und Frommhold, L., *Collision-induced rototranslational absorption spectra of N<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> pairs for temperatures from 50 to 300 K*, *Astrophysical Journal* **311**, 1043–1057 (1986a).
- Borysow, A. und Frommhold, L., *Theoretical collision-induced rototranslational absorption spectra for modeling Titan's atmosphere - H<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> pairs*, *Astrophysical Journal* **303**, 495–510 (1986b).
- Borysow, A. und Frommhold, L., *Theoretical collision-induced rototranslational absorption spectra for the outer planets - H<sub>2</sub>-CH<sub>4</sub> pairs*, *Astrophysical Journal* **304**, 849–865 (1986c).
- Borysow, A. und Frommhold, L., *Collision-induced rototranslational absorption spectra of CH<sub>4</sub>-CH<sub>4</sub> pairs at temperatures from 50 to 300 K*, *Astrophysical Journal* **318**, 940–943 (1987a).
- Borysow, A. und Frommhold, L., *Collision-induced Rototranslational Absorption Spectra of N<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> Pairs for Temperatures from 50 to 300 K: Erratum*, *Astrophysical Journal* **320**, 437–+ (1987b).

- Borysow, A., Jorgensen, U. G., und Zheng, C., *Model atmospheres of cool, low-metallicity stars: the importance of collision-induced absorption.*, *Astronomy and Astrophysics* **324**, 185–195 (1997).
- Borysow, A. und Tang, C., *Far Infrared CIA Spectra of N<sub>2</sub> – CH<sub>4</sub> Pairs for Modeling of Titan's Atmosphere*, *Icarus* **105**, 175–183 (1993).
- Bönsch, G. und Potulski, E., *Measurement of the refractive index of air and comparison with modified Edlén's formulae*, *Metrologia* **35**, 133–139 (1998).
- Demtröder, W. (1996), *Experimentalphysik 3 - Atome, Moleküle und Festkörper*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Dobrodey, N. V., *Radiative transitions in TiO: Ab initio oscillator strengths and lifetimes for low-lying electronic states*, *Astronomy and Astrophysics* **365**, 642–655 (2001).
- Edlén, B., *The refractive index of air*, *Metrologia* **2**, 71–80 (1966).
- Emsley, J. (1995), *The Elements*, Oxford Chemistry Guides, Oxford University Press, New York, NY.
- Goorvitch, D., *Infrared CO line for the X 1 Sigma(+) state*, *Astrophysical Journal, Supplement* **95**, 535–552 (1994).
- Goorvitch, D. und Chackerian, C., *Calculation of (12)C(16)O and (13)C(16)O X(1)Sigma(+) rovibrational intensities for V less than or equal to 20 and J less than or equal to 150*, *Astrophysical Journal, Supplement* **91**, 483–489 (1994a).
- Goorvitch, D. und Chackerian, C., *Rovibrational intensities of the minor isotopes of the CO X<sup>1</sup>Sigma<sup>+</sup> state for V less than or equal to 20 and J less than or equal to 150*, *Astrophysical Journal, Supplement* **92**, 311–321 (1994b).
- Gruszka, M. und Borysow, A., *Roto-Translational Collision-Induced Absorption of CO<sub>2</sub> for the Atmosphere of Venus at Frequencies from 0 to 250 cm<sup>-1</sup>, at Temperatures from 200 to 800 K*, *Icarus* **129**, 172–177 (1997).
- Haken, H. und Wolf, H. (1998), *Molekülphysik und Quantenchemie*, 3. Auflage, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York.
- Hauschildt, P. H. und Baron, E., *Numerical solution of the expanding stellar atmosphere problem*, *Journal of Computational and Applied Mathematics* **109**, 41–63 (1999).
- Herzberg, G. (1989), *Molecular Spectra and Molecular Structure I, Spectra of Diatomic Molecules*, Van Nostrand Reinhold Company, New York (Reprint 2nd Edition).
- Husson, N., Bonnet, B., Scott, N. A., und Chedin, A., *Management and Study of Spectroscopic Information-The GEISA program*, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **48**, 509–518 (1992).
- Jaschek, C. und Jaschek, M. (1995), *The behavior of chemical elements in stars*, Cambridge; New York: Cambridge University Press, 1995.

- Jorgensen, U. G., *Effects of TiO in stellar atmospheres*, *Astronomy and Astrophysics* **284**, 179–186 (1994).
- Kurucz, R., *Atomic data for opacity calculations.*, *Atomic data for opacity calculations. Kurucz CD-ROM No. 1.* Cambridge, Mass.: Smithsonian Astrophysical Observatory, 1993. **1** (1993a).
- Kurucz, R., *Diatomic Molecular Data for Opacity Calculations.*, *Diatomic Molecular Data for Opacity Calculations. Kurucz CD-ROM No. 15.* Cambridge, Mass.: Smithsonian Astrophysical Observatory, 1993. **15** (1993b).
- Langhoff, S. R., *Theoretical Study of the Spectroscopy of TiO*, *Astrophysical Journal* **481**, 1007–+ (1997).
- Langhoff, S. R., Schwenke, D. W., und Partridge, H. (1996), Determination of opacity data bases for TiO and H<sub>2</sub>O, in *IAU Symp. 178: Molecules in Astrophysics: Probes & Processes*, pages 295–+.
- Merrill, P. W., Deutsch, A. J., und Keenan, P. C., *Absorption Spectra of M-Type Mira Variables.*, *Astrophysical Journal* **136**, 21–+ (1962).
- Mihalas, D. (1970), *Stellar atmospheres*, Series of Books in Astronomy and Astrophysics, San Francisco: Freeman, —c1970.
- Mihalas, D. (1978), *Stellar atmospheres /2nd edition/*, San Francisco, W. H. Freeman and Co., 1978. 650 p.
- Miller, S., Tennyson, J., Jones, H., und Longmore, A. (1994), Computation of Frequencies and Linestrengths for Triatomic Molecules of Astronomical Interest, in *Molecular Opacities in the Stellar Environment*, edited by Thejll, P. und Jorgensen, U., I.A.U. Colloquium 146, Niels Bohr Institute and Nordita press, Copenhagen.
- Partridge, H. und Schwenke, D. W., *The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive ab initio calculations and experimental data*, *Journal of Chemical Physics* **106** (1997).
- Phillips, J. G. und Davis, S. P., *On the carrier of the band at 700 nanometers in the iron hydride spectrum*, *Astrophysical Journal* **409**, 860–868 (1993).
- Plez, B., *A new TiO line list*, *Astronomy and Astrophysics* **337**, 495–500 (1998).
- Rothman, L., Jacquemart, D., und et al., *The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database*, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **96**, 139–204 (2005).
- Rothman, L. S., Gamache, R. R., Tipping, R. H., Rinsland, C. P., Smith, M. A. H., Benner, D. C., Devi, V. M., Flaud, J.-M., Camy-Peyret, C., und Perrin, A., *The HITRAN molecular data base - Editions of 1991 and 1992*, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **48**, 469–507 (1992).
- Samuelson, R. E., Nath, N. R., und Borysow, A., *Gaseous abundances and methane supersaturation in Titan's troposphere*, *Planet. Space Sci.* **45**, 959–980 (1997).

- Schryber, H., Miller, S., und Tennyson, J., *Computed Infra Red Absorption Properties of Hot Water Vapor*, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **53**, 373 (1995).
- Schweitzer, A., *Spectra of M dwarfs in non-LTE and with low metallicities*, *Ph.D. Thesis* (1999).
- Schwenke, D. W. (1998), Opacity of TiO from a coupled electronic state calculation parametrized by AB initio and experimental data, in *Chemistry and Physics of Molecules and Grains in Space. Faraday Discussions No. 109*, pages 321–+.
- Tennyson, J., Zobov, N., Williamson, R., Polyansky, O., und Bernath, P., *Theoretical study of the rovibrationally resolved transitions of CaH*, *Journal of Chemical Physics* **114**, 10430 (2001).
- Tsuji, T. (1995), The Bottom of the Main Sequence - and Beyond, in *Proceedings of the ESO Workshop Held in Garching, Germany, 10-12 August 1994, XVII*, 309 pp.. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York. Also *ESO Astrophysics Symposia (European Southern Observatory)*, edited by Tinney, C.
- Tsuji, T., Ohnaka, K., und Aoki, W., *Dust formation in stellar photospheres: a case of very low mass stars and a possible resolution on the effective temperature scale of M dwarfs.*, *Astronomy and Astrophysics* **305**, L1+ (1996a).
- Tsuji, T., Ohnaka, K., Aoki, W., und Nakajima, T., *Evolution of dusty photospheres through red to brown dwarfs: how dust forms in very low mass objects.*, *Astronomy and Astrophysics* **308**, L29–L32 (1996b).
- Unsöld, A. und Baschek, B. (1999), *Der neue Kosmos*, Einführung in die Astronomie und Astrophysik, XIV, 571 S. 278 Abb., 20 in Farbe. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York.
- Weck, P., Stancil, P., und Kirby, K., *Theoretical study of the rovibrationally resolved transitions of CaH*, *Journal of Chemical Physics* **118** (2003).
- Zeidler-K.T., E. M. und Koester, D., *On the 'just overlapping line approximation' for molecular absorption*, *Astronomy and Astrophysics* **113**, 173–175 (1982).

## Danksagung

An der Vollendung dieser Diplomarbeit waren viele Personen -bewusst wie unbewusst-beteiligt. Die Liste aller Namen wäre recht lang und ich würde bestimmt jemanden dabei vergessen, deswegen möchte ich hiermit zunächst allgemein allen diesen Menschen danken. Mein besonderer Dank im Einzelnen geht an:

Peter H. Hauschildt für die Vergabe des Themas, die Betreuung während der Arbeit und für die geduldigen Erklärungen zu PHOENIX.

Jürgen H. M. M. Schmitt dafür, dass er sich als Zweitkorrekteur geopfert hat.

Birgit Fuhrmeister und Jan Robrade für das Korrekturlesen bestimmter Kapitel und die hilfreichen Anmerkungen zum Inhalt und zur Struktur der Arbeit.

Moritz Günther für die vielen Tipps und das Vorabkorrekturlesen.

Carolin Liefke für den Beistand mit IDL.

Christian Schröder für die nette Zeit als Schreibtischnachbar.

Meiner Arbeitsgruppe (Andreas Schweitzer, Alexander Petz, Matthias Dehn, Sebastian Knop, Christine Johnas, Daan van Rossum, Dennis Jack) für die Beantwortung meiner Fragen zu Phoenix und den Clustern (und Chris im Speziellen für das Antreiben, endlich mit dem Schreiben zu beginnen).

Den übrigen Mitarbeitern der Sternwarte für freundlich Aufnahme und kollegiale Behandlung.

Der Hamburger Sternwarte (bzw. der Verwaltung dahinter) für die hervorragende Ausstattung des Arbeitsplatzes.

Der Freien und Hansestadt Hamburg für das (noch) kostenfreie Studium an der Universität.

Meinen Eltern für die großzügige Unterstützung während meines Studiums.

Und allen meinen Freunden dafür, dass sie Nachsicht geübt haben, wenn ich wieder einmal zu spät aus dem Büro zu einer Verabredung gekommen bin.

**Erklärung:**

Ich versichere, dass ich diese Diplomarbeit selbständig angefertigt und nur die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Weiterhin stimme ich zu, dass dieses Exemplar einer Bibliothek zur Verfügung gestellt und auch ausgeliehen werden kann.

Hamburg, den 31.01.2006

(Alexander Christopher Wawrzyn)