

SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM TTIK
KÍSÉRLETI FIZIKAI TANSZÉK

TDK DOLGOZAT

Molekulák rotációs átmeneteinek modellezése asztrofizikai közegekben

Készítette: **Truszek Márton**

Csillagász MSc szakos hallgató

Témavezető: **Dr. Szalai Tamás**

adjunktus, SZTE TTIK Fizikai Intézet, Kísérleti Fizikai Tanszék



Szeged, 2024

Tartalomjegyzék

1. Célkitűzések	2
2. Elméleti összefoglaló	2
2.1. Molekulaspektroszkópia	2
2.1.1. Energiaszintek	2
2.1.2. Sugárzásos átmenetek	3
2.2. Radiatív transzferegyenlet és molekuláris populációk	5
2.3. Szökési valószínűség	8
2.4. Alkalmazási terület: nagy tömegű csillagok szupernóva-robbanásai	9
3. RADEX	9
3.1. A program limitációi	10
3.2. Pythonradex	10
3.2.1. Eltérések a RADEX és a pythonradex között	11
3.3. Radiatív transzferegyenlet megoldása, iterációs eljárás	11
3.4. Háttérsugárzás kezelése	14
3.5. Vonallisták	15
3.6. Fontosabb pythonradex modulok	16
4. Fizikai paraméterek illesztése	17
4.1. A saját kód bemutatása	17
4.2. χ^2 illesztés	20
5. SN1987A	21
5.1. Mérések	22
5.2. 3D illesztés	23
5.2.1. ALMA mérések illesztése	23
5.2.2. ALMA + Herschel mérések illesztése	24
5.3. A degeneráció problémája és 2D illesztés	24
6. Összefoglaló és jövőbeli tervek	27
Hivatkozások	30

1. Célkitűzések

Az asztrofizikai közegek molekuláris fejlődése mind a mai napig egy jelentős mértékben kutatott terület, legyen szó hűvösebb csillagködökről, protoplanetáris korongokról, vagy akár szupernóva-maradványokról. A molekulák vizsgálatához szükséges infravörös- illetve szubmilliméteres tartományokat vizsgáló eszközök megfigyelési érzékenysége és precizitása az utóbbi évtizedben ugrásszerű fejlődésen esett át, köszönhetően az olyan műszereknek, mint az ALMA, vagy a James Webb Űrteleszkóp. A megfigyeléseket szervesen kísérő elméleti modellezés az informatikai lehetőségek fejlődésével egyre kifinomultabban képes interpretálni az adatok mögött rejtőző fizikai valóságot. Dolgozatomban ez utóbbi, elméleti oldalt ismertetem alaposabban.

A munkám céljával azt tűztem ki, hogy egy tetszőleges asztrofizikai közeg fizikai paramétereit meghatározó kódot írjak. Az ehhez szükséges fizikai keretrendszer a fény-anyag kölcsönhatás, ezen belül a radiatív transzferelmélet adja. A programom alapjául a RAD-EX nevű, radiatív transzfer-kód szolgál, pontosabban annak Pythonos implementációja, a pythonradex. A fizikai paramétereket, mint a kinetikus hőmérséklet és a sűrűség, molekulák rotációs vonalaival határoztam meg. A módszerem az volt, hogy általam írt kód kiszámolja egy paraméter-rácson a molekulák rotációs vonalainak erősségét, és χ^2 illesztéssel határozom meg a közeg fizikai tulajdonságait.

A dolgozatomban felépítése a következő: a második fejezetben részletezem a kódom mögötti fizikát, a harmadik fejezetben a RADEX illetve pythonradex legfontosabb tulajdonságait, illetve a saját kódomat mutatom be, míg a negyedik fejezetben egy konkrét asztrofizikai közeg, az SN1987A szupernóva-maradvány analízisét végzem el.

2. Elméleti összefoglaló

2.1. Molekulaspektroszkópia

2.1.1. Energiaszintek

Az alábbi összefoglaló jelentős része a Bransden és Joachain 1983, Physics of atoms and molecules című könyvből, illetve Dr. Paragi Gábor Tamás, Atom- és molekulafizika kurzus órai jegyzeteiből származik.

A molekulák energiaszintjei és alapvetően a spektruma lényegesen bonyolultabb, mint az atomoké. A dolgozatomban csak a kétatomos molekulákkal foglalkozom, mivel a legtöbb asztrofizikai közegben leggyakrabban azok találhatók meg. A kétatomos molekulák energiaszintje felírható a

$$E_{svr} = E_s(R_0) + E_v + E_r \quad (1)$$

alakban, ahol $E_s(R_0)$ az elektromos energia, E_v a vibrációs energia, E_r a rotációs energia. Ez az egyenlet akkor igaz, ha a molekula Σ állapotban van, azaz $\Lambda = 0$, ahol Λ a mellékkvantumszám (teljes impulzusmomentum szimmetriatengelyre való vetítettjének a nagysága). A Λ analóg az atomfizikában használt l mellékkvantumszámmal. A munkám során a rotációs és vibrációs energiaszintek játszottak fontos szerepet.

A rotációs energiaszinteket a

$$E_R = \frac{\hbar^2}{2I} \mathcal{J}(\mathcal{J} + 1) \quad (2)$$

egyenlet írja le, ahol $\mathcal{J}$ a rotációs kvantumszám és I az impulzusmomentum. A vibrációs energiaszinteket első közelítésben harmonikus oszcillátorként lehet leírni, melyet egy anharmonikus taggal kiegészíthetünk, a pontosabb leírás érdekében,

$$E_v = \hbar\omega_0[(v + 1/2) - \beta(v - 1/2)^2], \quad (3)$$

ahol $\beta \ll 1$ az anharmonikus tag együtthatója, v a vibrációs kvantumszám, $\omega_0 = (k/\mu)^{1/2}$, ahol k a harmonikus oszcillátor erősségét írja le, μ a redukált tömeg.

Az energiaszintek közötti átmenetek vonalakat, illetve sávokat eredményeznek az asztrofizikai objektumok színeképeiben.

2.1.2. Sugárzásos átmenetek

A sugárzásos- vagy radiatív átmeneteknél a molekula egy fotonnal lép kölcsönhatásba, ami megszabja az átmenet tulajdonságait. A következőkben dipólus-közelítést alkalmazok, mivel a magasabb multipólusok sokkal gyengébb átmeneteket hoznak létre. A dipólus közelítésben az átmenet valószínűsége arányos a $\mathbf{D}$ elektromos dipól-operátor mátrixelemének erősségével.

$$\mathbf{D} = e \left(\sum_i Z_i \mathbf{R}_i - \sum_j \mathbf{r}_j \right), \quad (4)$$

ahol e az elemi töltés, Z_i az i -edik mag rendszáma, $\mathbf{R}_i$ az i -edik mag helye és $\mathbf{r}_j$ a j -edik elektron helye.

A spontán emissziós koefficiens a dipólus operátorral felírva:

$$A_{ul} = \frac{4}{3\hbar c^3} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \omega_{ul}^3 |\mathbf{D}_{ul}|^2, \quad (5)$$

ahol ω_{ul} az adott átmenet során kibocsájtott/elnyelt foton körfrekvenciája.

Molekuláknál Born-Oppenheimer közelítésben az elektromos, vibrációs és rotációs mozgások közötti csatolások elhanyagolhatóak, külön lehet azokat kezelni. A molekuláris dipólus-operátor diagonális elemeit a

$$D_{\alpha\alpha} = \langle \Psi_\alpha | \mathbf{D} | \Psi_\alpha \rangle, \quad (6)$$

várható érték írja le, ahol α tartalmazza az elektromos, vibrációs és rotációs állapotokat is és Ψ_α a teljes molekuláris hullámfüggvény. Szimmetrikus és homonukleáris molekuláknál a diagonális elemek értéke 0, mivel nincs eredő dipólus-momentum. Ez azt eredményezi, hogy nincsen tisztán rotációs és vibrációs átmenet, csak elektromossal együtt, mivel akkor jön csak létre eredő dipólusmomentum. Heteronukleáris molekuláknál lehetségesek ezek az átmenetek elektromos átmenet nélkül is.

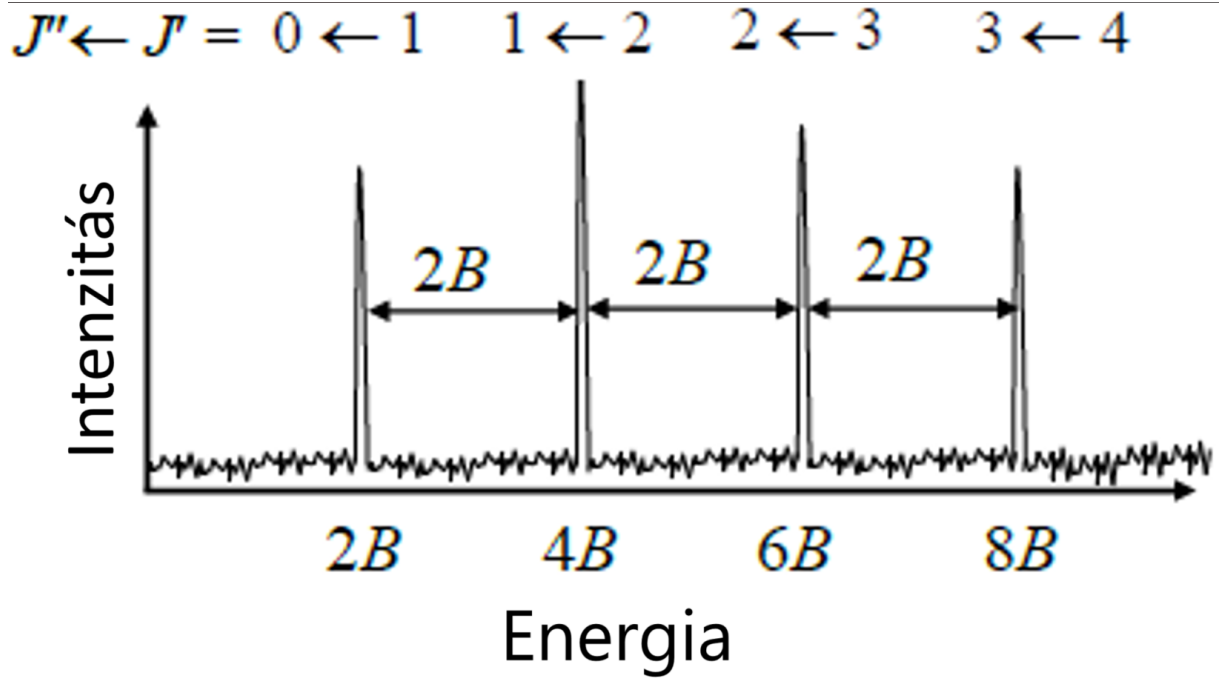
A **rotációs átmeneteket** kötik kiválasztási szabályok, mivel fotonnal való kölcsönhatás eredményei. A fotonnak $\hbar$ impulzusmomentuma van, amit a kölcsönhatás során az

impulzusmomentum-megmaradás miatt a molekulának átad, így az átmeneteket a következő kiválasztási szabályok irányítják:

$$\Delta J = \pm 1 \quad (7)$$

$$\Delta M_J = 0, \pm 1, \quad (8)$$

ahol J a $\mathbf{J}^2$ impulzusmomentum négyzet operátor sajátértéke és M_J a J_z impulzusmomentum z-irányú komponensének sajátértéke.



1. ábra. Ez az ábra szemlélteti a rotációs átmenetek viselkedését. Az átmenetek egyenközűen követik egymást, $2B$ energiakülönbséggel. Forrás: ¹

A kétatomos molekulák tisztán rotációs vonalai az elektromágneses színekép távoli infravörös és mikrohullámú tartományában vannak. A vonalak első közelítésben egymást egyenközűen követik, a frekvenciát a

$$h\nu_{J+1,J} = E_r(J+1) - E_r(J) = 2B(J+1) \quad (9)$$

formula adja meg, ahol

$$B = \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} \quad (10)$$

ahol R_0 az egyensúlyi távolság a két mag között. Ezt a spektrális viselkedést illusztrálja a 1. ábra. Természetesen ez egy közelítés, a vonalak a J növekedésével közelebb kerülnek, mivel a centrifugális erő miatt a magok távolodnak egymástól, és ez a 10. egyenlet szerint a B csökkenéséhez vezet.

¹https://en.wikipedia.org/wiki/Rotational_spectroscopy#/media/File:Rotational_spectrum_example.png

Vibrációs átmenet akkor jöhet létre, ha a

$$D_{v',v} = \langle \Psi_{v'} | \mathbf{D} | \Psi_v \rangle = \int \Psi_{v'} \mathbf{D}(R) \Psi_v dR \quad (11)$$

várható érték nem tűnik el. Ha $\mathbf{D}$ nem független R -től, akkor felírható hatványsor alakban:

$$\mathbf{D}(R) = \mathbf{D}(R_0) + (R - R_0) \left. \frac{d\mathbf{D}}{dR} \right|_{R=R_0} + \dots \quad (12)$$

a magasabb rendű tagokat elhanyagolva, R_0 a vibrációs alapállapotban lévő nukleáris szeparáció. Ebben az állapotban a vibrációs energiaszintek a fent részletezett módon egy harmonikus oszcillátor sajátértékeiként viselkednek. A kiválasztási szabályt az adja, hogy a 11. egyenlet csak akkor nem tűnik el, ha

$$\Delta v = v' - v = \pm 1 \quad (13)$$

Mivel a harmonikus oszcillátor modell csak közelítés, így az anharmonikus tagok megjelennek a $\Delta v = \pm 2, \pm 3, \dots$ eseteket is, de ezek az átmenetek nagyságrendekkel gyengébbek.

Mivel a foton abszorpciója $\hbar$ impulzusmomentum elnyelését igényli, így a vibrációs átmeneteket mindig kísérik a rotációs átmenetek, az azokhoz tartozó kiválasztási szabályokkal. Egy Σ állapotban lévő molekula esetén, ha az átmenet két rovibrációs állapot, $(v, \mathcal{J})$ és $(v', \mathcal{J}')$ között történik, ahol a vibrációs kvantumszám $v' = v + 1$, a rotációs kvantumszám változása szerint két halmazra lehet bontani az átmenetet.

Az egyik az R ág. Ebben az esetben $\Delta \mathcal{J} = +1$, azaz az átmenet után a rotációs kvantumszám növekszik. Az ezekhez tartozó frekvenciákhoz az összefüggés a következő:

$$h\nu^R = E(v + 1, \mathcal{J} + 1) - E(v, \mathcal{J}) = 2B(\mathcal{J} + 1) + \hbar\omega_0, \quad \mathcal{J} = 0, 1, 2, \dots \quad (14)$$

A másik a P ág. Ebben az esetben $\Delta \mathcal{J} = -1$. A frekvenciákra az előzőhöz hasonló összefüggés:

$$h\nu = E(v + 1, \mathcal{J} - 1) - E(v, \mathcal{J}) = -2B\mathcal{J} + \hbar\omega_0, \quad \mathcal{J} = 1, 2, 3, \dots \quad (15)$$

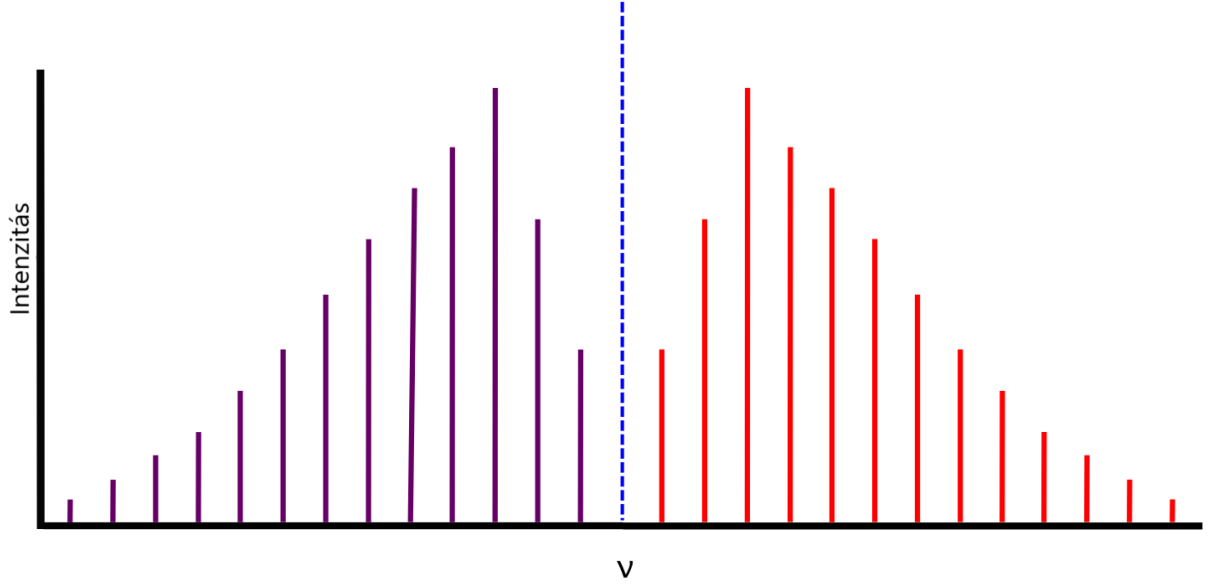
A két ág együtt alkotja a vibrációs-rotációs, röviden rovibrációs sávokat. Ezek a vonalak a közép-infravörös tartományban találhatók, a vibrációs átmenetek nagyobb energiája miatt. Mint ahogy a fenti egyenletekből látszik, egy sávon belül a vonalak $2B/h$ frekvenciakülönbséggel követik egymást, kivéve a $\nu_0 = \omega_0/2\pi$ vibrációs frekvenciánál, ahol $4B/h$ a rés, ahogy a 2. ábrán is látható.

2.2. Radiatív transzferegnyenlet és molekuláris populációk

Az alábbi összefoglaló a van der Tak és tsai. 2007 és Doktori kurzusok fizikából (szerk: Hevesi Imre, JATEPress, 2014; 33. o.), Dr. Vinkó József "Sugárzási folyamatok az asztrofizikában" című fejezetből származik.

A radiatív transzferegnyenlet a sugárzás terjedését írja le egy adott közegben, melyet ds távolságon a következőképp lehet megadni:

²https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_%28Physical_and_Theoretical_Chemistry%29/Spectroscopy/Rotational_Spectroscopy/Rovibrational_Spectroscopy



2. ábra. Rovibrációs sáv szerkezete, harmonikus oszcillátor és merev rotátor közelítésben.
Forrás: ²

$$\frac{1}{\alpha_\nu \rho} \frac{dI_\nu}{ds} = -I_\nu + \frac{\chi_\nu J_\nu + j_\nu}{\alpha_\nu + \chi_\nu}, \quad (16)$$

ahol j_ν a lokális emissziós együttható, α_ν a lokális abszorpciós együttható, χ_ν a szórási koefficiens, I_ν a fajlagos intenzitás, J_ν az átlagos intenzitás. Ezekből definiálható a forrásfüggvény, S_ν :

$$S_\nu \equiv \frac{\chi_\nu J_\nu + j_\nu}{\alpha_\nu + \chi_\nu}, \quad (17)$$

A radiatív transzferegyenlet integrális alakja:

$$I_\nu = I_\nu(0)e^{-\tau_\nu} + \int_0^{\tau_\nu} S_\nu(\tau'_\nu) e^{-(\tau_\nu - \tau'_\nu)} d\tau'_\nu \quad (18)$$

ahol τ_ν az optikai mélység, $d\tau_\nu = \alpha_\nu ds$, I_ν a közegből induló sugárzás, $I_\nu(0)$ pedig a háttérsugárzás, ami belép a közegbe.

A fenti egyenletek egyaránt leírják a kontinuum sugárzást és a vonalas sugárzást is. A továbbiakban csak a molekulák kötött-kötött átmeneteiről lesz szó. Legyen az adott molekulának N állapota, A_{ul} a spontán emissziós ráta, B_{ul} és B_{lu} a indukált emisszió és abszorpció Einstein-koefficiense, u a felső és l az alsó energiaszint. C_{ul} és C_{lu} az ütközési ráta.

Az ütközési ráta felírható:

$$C_{ul} = n_{col} \gamma_{ul}, \quad (19)$$

ahol n_{col} az ütközési partner számsűrűsége (cm^{-3}) és γ_{ul} az ütközés által alsó energiaszintre való átmenet rátája ($\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$). Ez a ráta a σ ütközési hatáskeresztmetszetnek a Maxwelli átlaga:

$$\gamma_{ul} = \left(\frac{8kT_{kin}}{\pi\mu} \right)^{-1/2} \left(\frac{1}{kT_{kin}} \right)^2 \int \sigma E e^{-E/kT_{kin}} dE, \quad (20)$$

ahol E az ütközési energia, k a Boltzmann-állandó, T_{kin} a kinetikus energia és μ a molekula redukált tömege. A magasabb energiaszintre való átmenet megkapható egy egyensúlyi összefüggés alapján:

$$\gamma_{lu} = \gamma_{ul} \frac{g_u}{g_l} e^{-h\nu/kT_{kin}}, \quad (21)$$

ahol g_i az i -edik állapot statisztikai súlya.

A lokális emisszió az $u \rightarrow l$ átmenetnél:

$$j_\nu = \frac{h\nu_{ul}}{4\pi} n_u A_{ul} \phi_\nu, \quad (22)$$

ahol n_i az i -edik állapotban lévő molekulának a számsűrűsége, ν_{ul} az $u \rightarrow l$ átmenethez tartozó laboratóriumi frekvencia, ϕ_ν a vonalprofilt leíró függvény. Az abszorpciókoefficiens felírható a

$$\alpha_\nu = \frac{h\nu_{ul}}{4\pi} (n_l B_{ul} \varphi_\nu - b_u B_{lu} \psi_\nu) \quad (23)$$

alakban, ahol φ_ν és ψ_ν az abszorpció- és indukált emissziós átmenet vonalprofilja.

A továbbiakban az emittált fotonoknál teljes szög- illetve frekvencia-eloszlást feltételezünk, azaz $\phi_\nu = \varphi_\nu = \psi_\nu$. Ez szigorúan csak akkor érvényes, ha az ütközési gerjesztés dominál. Ez a feltételezés megengedi, hogy a forrásfüggvényt a következő alakban írjuk fel:

$$S_{\nu_{ul}} = \frac{n_u A_{ul}}{n_l B_{lu} - n_u B_{ul}} = \frac{2h\nu_{ul}^3}{c^2} \left(\frac{g_u n_l}{g_l n_u} - 1 \right)^{-1}, \quad (24)$$

ahol kihasználtuk az Einstein-relációkat. Bevezethető a T_{ex} gerjesztési hőmérséklet a Boltzmann-egyenlet alapján:

$$\frac{n_u}{n_l} = \frac{g_u}{g_l} e^{-(E_u - E_l)/kT_{ex}}, \quad (25)$$

ahol E_i az i -edik állapot energiaszintje. Ezzel a forrásfüggvény felírható úgy, hogy $S_{\nu_{ul}} = B_\nu(T_{ex})$, egy T_{ex} hőmérsékletű feketetest-sugárzásának fajlagos intenzitása.

A sugárzásos átmenetek természetes vonalprofilja a Lorentz-függvény. A kialakulását a félklasszikus modellel lehet legegyszerűbben leírni, ahol a kibocsátó atomot/molekulát egy csillapított oszcillátornak tekintjük. A vonalprofilt leíró függvény:

$$\phi_{\nu,L} = \frac{\Gamma}{4\pi^2(\nu - \nu_{ul})^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}, \quad (26)$$

ahol Γ az állapot élettartamának reciprokával analóg mennyiség.

Az intersztelláris közegekben a domináns vonalszélesedési mechanizmus a Doppler-szélesedés, amelyet a gáz részecskéinek véletlenszerű mozgása okoz. Mivel ezt a mozgást egy Gauss-eloszlással lehet leírni, így jó közelítéssel a vonalprofil jellemezhető egyszerűen egy Gauss-profillal:

$$\phi_\nu = \frac{1}{\nu_D \sqrt{\pi}} \exp \left\{ - \left(\nu - \nu_{ul} - \vec{v} \cdot \vec{n} \frac{\nu_{ul}}{c} \right)^2 / \nu_D^2 \right\}, \quad (27)$$

ahol ν_D a Doppler-szélesség, $\vec{v}$ a mozgó gáz sebességvektora a szóródás pozíciójában, $\vec{n}$ a fénysugár irányvektora és c a fénysebesség. A Doppler-szélesség az $1/e$ -ad résznél vett

szélessége a profilnak, tehát egyenlő a $\Delta V/2 \cdot \sqrt{\ln 2}$ -vel, ahol ΔV a vonal félértékszélessége (FWHM).

Ha a vonalprofil pontosan szeretnénk leírni, akkor a Lorentz-függvény és Gauss-függvény konvolúcióját kell használni, azaz a Voigt-profil. Általában azonban elegendő a Gauss-függvényt használni, mivel a Lorentz-profilja a vonalaknak sokkal keskenyebb, így a konvolúció során jó közelítéssel Dirac-delta-függvényként kezelhető.

Ha az n_i populációk ismertek, a radiatív transzferegyenlet egzaktul megoldhatóvá válik. Például LTE esetében (Lokális Termodinamikai Egyensúly), a gáz kinetikus hőmérsékletének (T_{kin}) ismeretében az n_i -ket a Boltzmann-egyenleten keresztül meg lehet határozni. Azonban sok csillagközi és cirkumsztelláris közeg esetén a sűrűség túl alacsony ahhoz, hogy elérje a lokális termodinamikai egyensúlyt, de a statisztikus egyensúly (SE) gyakran feltételezhető:

$$\frac{dn_i}{dt} = 0 = \sum_{j \neq i}^N n_j P_{ji} - n_i \sum_{j \neq i}^N P_{ij} = \mathcal{F}_i - n_i \mathcal{D}_i, \quad (28)$$

ahol P_{ij} az i -edik szint megsemmisülési rátája, és a P_{ij} keletkezési együttható az alábbi módon számítható ki:

$$P_{ij} = \begin{cases} A_{ij} + B_{ij} \bar{J}_\nu + C_{ij} & (i > j) \\ B_{ij} \bar{J}_\nu + C_{ij}, & (i < j). \end{cases} \quad (29)$$

A (13)-as egyenletben lévő

$$B_{ij} \bar{J}_\nu = B_{ij} \int_0^\infty J_\nu \phi_\nu d\nu \quad (30)$$

tag az i -edik állapotról a j -edik állapotra lévő indukált gerjesztési átmenetek számát adja meg, és

$$J_\nu = \frac{1}{4\pi} \int I_\nu d\Omega \quad (31)$$

ahol az I_ν fajlagos intenzitást a $d\Omega$ térszögre integráljuk és átlagoljuk irány szerint. Ezzel az SE egyenlet magába foglalja a nem lokális sugárzás hatásait is.

2.3. Szökési valószínűség

A radiatív transzferegyenlet megoldásában a fő nehézség a molekuláris szintek populációinak és a lokális sugárzási térnek a kölcsönös függéséből származik. A sugárzási teret nem lehet meghatározni a molekuláris szintek populációjának ismerete nélkül, és fordítva. Ennek feloldásához általában iteratív módszerek szükségesek. Például ha inhomogén, vagy egy geometriailag komplex objektumra szeretnénk számolni, akkor hosszú számítások szükségesek, rengeteg rácponttal. Azonban ha csak a közeg globális tulajdonságai a fontosak, akkor a számításokat lényegesen megkönnyíthetjük a β geometriailag átlagolt szökési valószínűség bevezetésével. A β paraméter azt a valószínűséget adja meg, hogy egy foton mekkora valószínűséggel szökik ki a közegből. Ez a valószínűség csak a τ optikai mélységtől és a közeg geometriájától függ és kapcsolatban van a közegbeli sugárzási tér intenzitásával:

$$\bar{J}_{ul} = S_{\nu_{ul}}(1 - \beta). \quad (32)$$

Ez az egyenlet elhanyagolja a külső sugárzás hatását, de az könnyen beilleszthető. A számításaim során egy statikus, gömbszimmetrikus geometriájú közeggel számoltam, amelyre a szökési valószínűség (Osterbrock és Ferland 2006):

$$\beta = \frac{1.5}{\tau} \left[1 - \frac{2}{\tau^2} + \left(\frac{2}{\tau} + \frac{2}{\tau^2} \right) e^{-\tau} \right] \quad (33)$$

2.4. Alkalmazási terület: nagy tömegű csillagok szupernóva-robbanásai

A szupernóva-maradványok molekuláris vizsgálata még sok nyitott kérdést tartogat. A nagy sebességgel táguló burok hűlése közben össze tudnak állni molekulák, melyek a későbbi porképződés egyik fontos lépését alkothatják, emiatt egy jelenleg is aktívan kutatott terület.

A több mint 8 naptömegű csillagok magjában a fúziós folyamatok egészen a vasig eljutnak³. Ebben az állapotban a mag hőmérséklete eléri a $8 \cdot 10^8$ K-t, a nyomás a 10^{10} g/cm³-t, ekkor lehetővé válik az inverz béta bomlás, a protonok és elektronok neutronokká alakulnak át. Emiatt lecsökken a szabad elektronok nyomása, emiatt a már degenerált mag instabillá válik és összeomlik. Ezt a folyamatot nevezzük magkollapszusnak. A kollapszust csak a neutronok degenerációs nyomása képes megállítani, ekkor a nyomás hirtelen megnő, létrejön a neutroncsillag. A neutroncsillagra hulló kiterjedt csillaganyag lepattan a felszínéről, emiatt a még beeső és már visszapattant anyag ütközésénél egy nagy sűrűségű lökéshullám jön létre, ami felfűti és szétveti a csillag anyagát. Ezt a folyamatot nevezzük szupernóva-robbanásnak. 3-4 hónappal a robbanás után a maradvány annyira szétterjed és a sűrűsége annyira lecsökken, hogy elkezd átlátszóvá válni, ez a nebuláris fázis.

A molekulák jelenléte fontos szerepet játszik a szupernóva-maradványok termális fejlődésében. A párszáznapos maradványok esetén a CO emisszió általi hűlés a domináns folyamat (Liu és Dalgarno 1995). Ezenfelül a molekulavonalak releváns nyomjelzői a közeg sűrűségének, hőmérsékletének és tágulási sebességének.

3. RADEX

A RADEX (van der Tak és tsai. 2007) egy egydimenziós nLTE radiatív transzfer kód, azaz nem feltételezi a Lokális Termodinamikai Egyensúlyt. A program infravörös- és rádió tartományokban képes elméleti spektrumvonalakat számolni a molekulaátmenetek és a szökési valószínűség közelítés figyelembe vételével. A számolásokhoz izotermikus és homogén közeget feltételez. A program iteratívan számítja ki a statisztikai egyensúly egyenleteit, optikailag vékony közelítést használva kezdeti feltételnek. A RADEX egyszerre 7 ütközési partnerrel tud számolni. Sűrű molekuláris felhőkben H₂ a fő ütközési partner a legtöbb molekula esetén, azonban különböző hatáskeresztmetszetek eltérhetnek az ortho- és parahidrogén esetén. Orthohidrogén esetén az atommagok spinje ugyanabba az irányba áll, míg parahidrogénnél ellentétes irányba. Ionos molekuláknál, mint például az OH⁺, az elektronokkal való ütközés is fontos lehet.

³<http://astro.u-szeged.hu/oktatas/asztrofizika/html/node53.html>

3.1. A program limitációi

Minden modellnél, legyen az analitikus vagy numerikus, fontos ismerni az érvényességi korlátait, jellemzőit, közelítéseit.

A program nem veszi figyelembe a folytonos opacitást, mint például a por, vagy a szabad-szabad kölcsönhatás által létrehozott kontinuumot. Ezeknek a sugárzása hosszabb hullámhosszakon, illetve alacsony koncentrációknál elhanyagolható, hatásuk azokban a régiókban válik jelentőssé, ahol nagy az oszlópsűrűség, mint például a protoplanetáris korongok, illetve a távoli infravörösben rövidebb hullámhosszakon.

A kód további korlátja, hogy egyszerre csak egy molekulát kezel, tehát a különböző molekulák átmeneteinek az átfedését nem veszi figyelembe. Ilyen átfedések létrejöhetnek rádió- és infravörös tartományban is. Speciális esetekben ugyanannak a molekulának a hiperfinom átmeneteihez tartozó vonalak is átfedhetnek.

Bizonyos molekulák esetében, különösen kis sűrűség vagy erős sugárzási tér esetén előfordulhat populáció-inverzió, amely negatív optikai úthosszt eredményez és a sugárzás nemlineáris erősítését. Ezt a jelenséget nevezik mézernek (MASER), amely a radiatív transzferegnyenlet nem lokális kezelését igényli, többek között az irányfüggés részletes mintavételezését, melyet a RADEX nem tud kezelni. Alapvetően a szökési valószínűségközelítés érvényes, amíg a mézerek nem telítettek, ez $\tau \approx -1$ -nél fordul elő. A gyakorlatban ez azt jelenti, hogy a számított vonalak intenzitása $\tau \lesssim -0.1$ esetén pontatlanabb lesz, $\tau \lesssim -1$ esetben pedig teljesen el kell hagyni az adott vonalat.

3.2. Pythonradex

A `pythonradex`⁴, a RADEX kód Pythonos implementációja. A kód az ALI (Accelerated Lambda Iteration, gyorsított lambda iteráció) használatával oldja meg az nLTE radiatív transzferegnyenletet, a szökési valószínűségek kiszámításával. Ezenfelül egy kényelmes módszert ad a LAMDA adatbázisban⁵(Schöier és tsai. 2005) található vonallisták olvasásához.

A program telepítéséhez a linkelt github oldalról le kell tölteni a csomagot, majd a `setup.py`-t tartalmazó mappából terminálból lehet telepíteni:

```
python3 setup.py install
```

Előfordulhat, hogy rendszergazdai jogosultság kell a telepítéshez. A telepítés után a következő paranccsal lehet ellenőrizni, hogy minden a megfelelő módon települt a rendszerre:

```
python3 setup.py test
```

Ha a telepítés sikeres, akkor csak egy figyelmeztetést fog adni a program, amit akkor ír ki, ha az optikai mélység negatív.

⁴<https://github.com/gica3618/pythonradex>

⁵<https://home.strw.leidenuniv.nl/~moldata/>

3.2.1. Eltérések a RADEX és a pythonradex között

A különbség a kimeneti adatokban van. A RADEX a vonalak integrált fluxusát antenna-hőmérsékletben (T_R) adja meg, hogy közvetlenül összehasonlítható legyen a mért adatokkal. A korábban kiszámított τ optikai mélységből és T_{ex} gerjesztési hőmérsékletből a teljes intenzitás:

$$I_{tot} = B_\nu(T_{ex})(1 - e^{-\tau}) + I_{bg}e^{-\tau}. \quad (34)$$

Ez az az összintenzitás, amit detektálunk a vonalból, I_{bg} a háttér intenzitása. Ebből a megfigyelő kivonja a háttér intenzitását, így megkapva a tisztán a közegből érkező sugárzást:

$$I_{measured} = (B_\nu(T_{ex}) - I_{bg})(1 - e^{-\tau}). \quad (35)$$

A RADEX által számolt T_R az ehhez az $I_{measured}$ intenzitáshoz tartozó Rayleigh-Jeans hőmérséklet.

$$T_R = \frac{c^2}{2k\nu^2} I_{measured} \quad (36)$$

Ezzel szemben a pythonradex a fluxust közvetlenül számítja ki, a Rayleigh-Jeans-közelítés használata nélkül.

3.3. Radiatív transzferegnyenlet megoldása, iterációs eljárás

Mint ahogy az elméleti összefoglalóban is említettem, a radiatív transzferegnyenlet megoldásánál a fő nehézség a sugárzási tér és a molekuláris populációk csatolódásából származik.

Az alább ismertetett megoldási eljárás jelentős része C. P. Dullemond előadás jegyzeteiből származik⁶

Az egyik alapköve a radiatív transzferegnyenlet megoldásának a viszonylag egyszerű **lambda iteráció** (LI, Lambda Iteration). A működési elve a következő:

1. Adjunk egy kezdeti feltételezést a J_ν átlagos intenzitásra
2. Formálisan integráljuk ki a transzferegnyenletet kellően sok irányban, hogy legyen egy becslésünk a J_ν -re.
3. Számítsuk ki $J_\nu - t$ az összes pontra, ezzel kiszámítva a szórás intenzitását, j_ν -t
4. Vissza a 2. lépésre.

Ez az iteráció lényegében változtat a globális (radiatív transzferegnyenlet) és lokális (szórási tényezők) számítások között. Ennek a fizikai interpretációja abból származik, hogy első körben egy szóródást számol, utána kettőt, és így tovább. Ez alapján tehetünk egy durva becslést a módszer konvergenciájára. Vegyünk egy gázfelhőt, melyben csak szórás van, abszorpció nincs ($\alpha = 0$), és az optikai mélység, $\tau \gg 1$. Ebben az esetben egy foton átlagosan τ^2 -szer szóródik. Tehát N_{iter} legalább τ^2 kell hogy legyen (általában több), mire elérjük a konvergenciát.

Ebben rejlik a lambda iteráció legnagyobb gyengesége: nagy optikai mélység esetén rendkívül lassan konvergál. Ha bele vesszük az abszorpciót is, akkor a szórások száma:

⁶https://www.ita.uni-heidelberg.de/~dullemond/lectures/radtrans_2012/

$$N_{sct} = \min\left(\tau^2, \frac{1}{\alpha}\right) \quad (37)$$

Ahhoz, hogy a lambda iteráció biztosan konvergáljon, az iterációk száma

$$N_{iter} \gg \langle N_{sct} \rangle \quad (38)$$

kell hogy legyen. Látszik, hogy ennél egy szofisztikáltabb módszer kell, a gyorsított lambda iteráció.

Ennek megértéséhez a **lambda operátorra** van szükség. A lambda operátor kiszámítja a J_ν átlagos intenzitást minden x ponton, ismerve $S_\nu(x')$ -t minden x' ponton. Természetesen ehhez ismernünk kell $\alpha_\nu(x')$ -t és a fényforrásokat minden x' ponton. Ahhoz, hogy kiszámítsuk az összes x pontra, mindegyikre haddatni kell a lambda operátort.

$$J_\nu = \Lambda[S_\nu] \quad (39)$$

Példaképp írjuk fel az S_ν forrásfüggvényt LTE esetben:

$$S_\nu = \epsilon_\nu B_\nu(T) + (1 - \epsilon_\nu) J_\nu \quad (40)$$

ahol $\epsilon_\nu = \frac{\alpha_\nu^{abs}}{\alpha_\nu^{abs} + \alpha_\nu^{sct}}$, α_ν^{abs} az abszorpció tényező, α_ν^{sct} a szórás tényező. Ezt az egyenletet lambda operátorral is felírhatjuk:

$$S_\nu = \epsilon_\nu B_\nu(T) + (1 - \epsilon_\nu) \Lambda[S_\nu] \quad (41)$$

Az előbb tárgyalt lambda iteráció ezt az egyenletet oldja meg, úgy hogy:

$$S_\nu^{n+1} = \epsilon_\nu B_\nu(T) + (1 - \epsilon_\nu) \Lambda[S_\nu^n] \quad (42)$$

Osszuk fel a közegünket N cellára. Ezáltal a lambda operátort fel lehet írni mátrix alakban. A frekvenciafüggést innentől nem jelöltem a könnyebb átláthatóság érdekében:

$$J_i = \Lambda[S_i] = \sum_{j=1}^N \Lambda_{ij} S_j, \quad (43)$$

illetve egy szemléletesebb formában:

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ \vdots \\ J_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \dots & \Lambda_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Lambda_{N1} & \dots & \Lambda_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_1 \\ \vdots \\ S_N \end{pmatrix} \quad (44)$$

Tegyük fel, hogy ezt a mátrixegyenletet meg lehet oldani (általában természetesen túl nagy a közvetlen megoldáshoz). Ebben az esetben a 41. egyenletet át lehet rendezni a következő formába:

$$[1 - (1 - \epsilon)\Lambda]S = \mathbf{M}S = \epsilon B(T) \quad (45)$$

innen pedig invertálással megkapható a forrásfüggvény:

$$S = \mathbf{M}^{-1} \epsilon B(T) \quad (46)$$

A gyorsított lambda iterációnak az alapötlete az, hogy hozzunk létre egy Λ^* közelítő operátort, amely az alábbi tulajdonságokkal rendelkezik:

- Λ^* legyen könnyen tárolható,
- az $[1 - (1 - \epsilon)\Lambda^*] = \epsilon B$ mátrixegyenlet legyen gyorsan megoldható,
- Λ^* legyen egy közelítése Λ -nak,
- azokon a rácspontokon, ahol Λ^* nem biztosítható, hogy Λ jó közelítése, tartson 0-hoz.

Ezekből a feltételekből látszik, hogy Λ^* egy olyan operátor, amelyben kevés nem nulla elem van. Az ezekkel a feltételekkel létrehozott Λ^* operátor segítségével ketté lehet bontani a Λ operátort:

$$\Lambda = (\Lambda - \Lambda^*) + \Lambda^* \quad (47)$$

Ezt visszahelyezve a 41 egyenletbe:

$$S = \epsilon B(T) + (1 - \epsilon)(\Lambda - \Lambda^*)S + (1 - \epsilon)\Lambda^*S \quad (48)$$

Ezt átrendezve:

$$[1 - (1 - \epsilon)\Lambda^*]S = \epsilon B(T) + (1 - \epsilon)(\Lambda - \Lambda^*)S \quad (49)$$

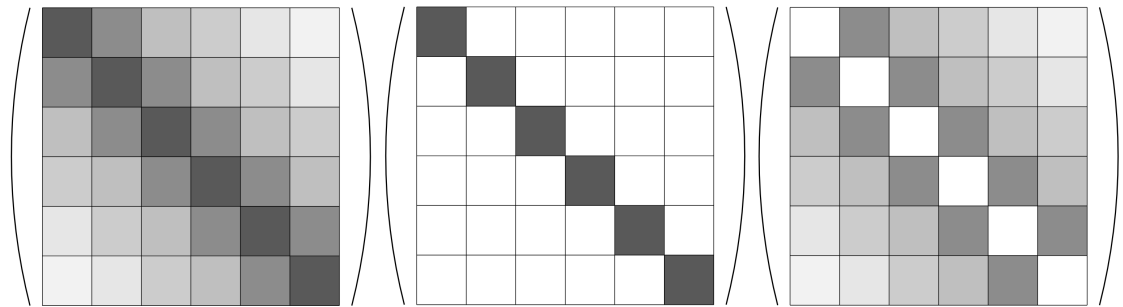
Ez az egyenlet még mindig túl komplex ahhoz, hogy analitikusan megoldható legyen, tehát iterálni kell. Viszont itt már Λ helyett $(\Lambda - \Lambda^*)$ -al iterálunk, ami jelentősen gyorsabb:

$$[1 - (1 - \epsilon)\Lambda^*]S^{n+1} = \epsilon B(T) + (1 - \epsilon)(\Lambda - \Lambda^*)S^n \quad (50)$$

Minden iterációs lépésnél ki kell számítani ezt a mátrixegyenletet, viszont abból fakadón, hogy Λ^* -nak kevés nem zérus eleme van, ez egy gyors folyamat. Ez a módszer a gyorsított lambda iteráció, azaz az **ALI**.

Tehát Λ^* okos kiválasztásával jelentősen csökkenthető a konvergenciához szükséges idő. A legegyszerűbb választás:

$$\Lambda^* = \text{diag}(\Lambda). \quad (51)$$



3. ábra. A Λ , $\text{diag}(\Lambda)$ és Λ^* mátrixok. Minél sötétebb az adott cella, annál több a szóródás. Forrás: ⁷

Ezt hívják lokális operátornak, mivel csak azok a mátrixelemek vannak benne, amelyek önmagukkal csatolódnak. A jó tulajdonsága ennek az operátornak, hogy diagonális, tehát

⁷https://www.ita.uni-heidelberg.de/~dullemond/lectures/radtrans_2012/

triviális invertálni. Fizikai értelmezése az, hogy Λ^* az a része a Λ operátornak, ahol a fotonok többször szóródnak ugyanazon cellában. Ez az a része az iterációnak, ami rendkívüli módon lelassítja az iterációt. Tekintve, hogy külső megfigyelőként irreleváns, hogy egy adott cellán belül hogyan szóródik a foton, csak az, ahogy a cellák között, így az erre szánt számítások feleslegesen növelik a számítási időt. Ezt a Λ^* -ot választva kiszedjük az iterációból az önmagával csatlódó részét a Λ operátorból, és azt analitikusan megoldjuk.

A **pythonradex** ugyanezt a módszert alkalmazza az nLTE radiatív transzferegyenlet megoldására. A lambda operátor ebben az esetben:

$$J_\nu = \Lambda(S_\nu) = \beta(S_\nu)I_{ext} + (1 - \beta(S_\nu))S_\nu, \quad (52)$$

ahol β a szökési valószínűség és I_{ext} a külső sugárzási tér. A lokális Λ^* operátor itt is leválasztható. Ebben az esetben az ALI metódust arra használjuk, hogy a J_ν átlagos intenzitást beillesszük a statisztikai egyensúly egyenletébe (28). A forrásfüggvényt az Einstein-együtthatókkal kifejezve a következő egyenletet kapjuk:

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} = \sum_{j>i} (x_j A_{ji} \beta + (x_j B_{ji} - x_i B_{ij}) \beta I_{ext}) - \sum_{j<i} (x_i A_{ij} \beta + (x_i B_{ij} - x_j B_{ji}) \beta T_{ext}) \\ + \sum_{j \neq i} (x_j C_{ji} - x_i C_{ij}) = 0, \end{aligned} \quad (53)$$

ahol x_i az i -edik állapota a molekulának. A pythonradex ezeket az egyenleteket oldja meg iteratíván.

3.4. Háttérsugárzás kezelése

A sugárzási hátteret a felhasználó saját maga alakíthatja ki. Alapvetően be van építve a **pythonradex.helpers** modulba a kozmikus mikrohullámú háttérsugárzás, tetszőleges vöröseltolódásra.

```
pythonradex.helpers.generate_CMB_background(z=0).
```

Van beépített Planck-függvény:

```
pythonradex.helpers.B_nu(nu, T),
```

ahol tetszőleges hőmérsékletű feketetest hátteret be lehet állítani. Ez a funkció hasznos lehet, ha például egy kiterjedt csillaglégkört vizsgálunk, ahol a csillag háttérsugárzása jelentős.

Van háttérsugárzás nélküli opció is:

```
pythonradex.helpers.zero_background(nu).
```

A felhasználó létrehozhat saját sugárzási hátteret is, például nem termikus sugárzáshoz.

3.5. Vonallisták

A vonallistában találhatóak a molekuláris energiaszinteknek és az átmeneteknek a fizikai tulajdonságai. A LAMDA adatbázis vonallistái alapvetően 3 nagy részből állnak. Az első az molekuláris energiaszinteket tartalmazza, illetve a molekula nevét és tömegét atomi tömegegységben. A táblázatos rész az energiaszintekhez kapcsolódó, első oszlopban egy sorszámot kapnak, majd az energiaszintek, végül a statisztikus súly következik. Az ezután következő sorokat már nem használja a RADEX, a könnyebb olvashatóság érdekében oda lehet írni kvantumszámokat. Példaképp a szén-monoxid vonallistáját mutatom be (Yang és tsai. 2010 és Jankowski és Szalewicz 2005).

! MOLECULE						
CO						
! MOLECULAR WEIGHT						
28.0						
! NUMBER OF ENERGY LEVELS						
41						
! LEVEL	+	ENERGIES (cm ⁻¹)	+	WEIGHT	+	J
1		0.000000000		1.0		0
2		3.845033413		3.0		1
3		11.534919938		5.0		2
4		23.069512649		7.0		3
5		38.448164669		9.0		4
6		57.670329083		11.0		5
7		80.735459105		13.0		6
8		107.642407981		15.0		7
9		138.390328288		17.0		8

A sugárzásos, vagy radiatív átmenetek a következő nagy tömb a vonallistában. Itt a felépítés a következő: az átmenet sorszáma, felső és alsó átmenet száma, A_{ij} . Alapvetően a program ennyit használ, a többi szintén a könnyebb olvashatóság és felhasználás érdekében hasznos lehet, mint például az átmenethez tartozó frekvencia, vagy a felső szint energiája Kelvinben.

40

! NUMBER OF RADIATIVE TRANSITIONS										
! TRANS	+	UP	+	LOW	+	EINSTEIN A(s ⁻¹)	+	FREQ(GHz)	+	E_u(K)
1		2		1		7.203e-08		115.2712018		5.53
2		3		2		6.910e-07		230.5380000		16.60
3		4		3		2.497e-06		345.7959899		33.19
4		5		4		6.126e-06		461.0407682		55.32
5		6		5		1.221e-05		576.2679305		82.97
6		7		6		2.137e-05		691.4730763		116.16
7		8		7		3.422e-05		806.6518060		154.87
8		9		8		5.134e-05		921.7997000		199.11
9		10		9		7.330e-05		1036.9123930		248.88
10		11		10		1.006e-04		1151.9854520		304.16

A harmadik és egyben legterjedelmesebb része a vonallistának az ütközéses átmeneteket tartalmazza. Mint ahogy az elméleti összefoglalóban is írtam, az ütközéses átmenetek kulcsszerepet játszanak a molekuláris populációk kialakításában. A szén-monoxid esetén az ütközésekhez tartozó átmeneti valószínűségek 2 és 3000 K között vannak megadva, 820 para-H₂ és ortho-H₂ ütközéses átmenetre, mivel azokat nem kötik a kiválasztási szabályok, így bármilyen két energiaszint között megtörténhetnek. A táblázat felépítése hasonló a radiatív esethez, az első két oszlopban az átmenet sorszáma, a felső- illetve alsó energiaszint száma, illetve a γ_{ij} ütközési átmenet rátája található.

```
! NUMBER OF COLL PARTNERS
2
! COLLISIONS BETWEEN
2 CO-ph2 from Yang et al. (2010)
! NUMBER OF COLL TRANS
820
! NUMBER OF COLL TEMPS
25
! COLL TEMPS
2.0      5.0      10.0     20.0     30.0
! TRANS+ UP+ LOW+ COLLRATES (cm^3 s^-1)
1      2      1      2.954E-11 3.251E-11 3.302E-11 3.249E-11
2      3      1      2.870E-11 2.882E-11 3.015E-11 3.088E-11
3      3      2      8.890E-11 7.838E-11 7.150E-11 6.440E-11
4      4      1      4.650E-12 4.820E-12 5.162E-12 5.518E-12
5      4      2      4.734E-11 4.758E-11 5.011E-11 5.091E-11
```

3.6. Fontosabb pythonradex modulok

A magja a pythonradex kódnak a **Nebula class**, amely megoldja a radiatív transzfer-egyenletet.

```
class pythonradex.nebula.Nebula(datafilepath, geometry,
ext_background, Tkin, coll_partner_densities, Ntot,
line_profile, width_v, partition_function=None,
verbose=False)
```

Ez az objektum hozza létre az emittáló gázfelhőt, a bemeneti paraméterek alapján. A következő paramétereket használja:

- **datafilepath**: A molekula vonallistájának az elérési útvonala.
- **geometry**: A kód geometriája, jelenleg 4 van implementálva: a gömbszimmetrikus "uniform sphere" és "uniform sphere RADEX", a hengersizimmetrikus, vékony korong "face-on uniform slab" és "uniform shock slab RADEX".
- **ext_background**: Háttérsugárzás függvénye. A 2.4-es fejezetben részletezett módon lehet megadni, W/m²/Hz/sr mértékegységben.

- **Tkin:** A közeg kinetikus hőmérséklete kelvinben.
- **coll_partner_densities:** Az ütközési partner számsűrűsége m^{-3} -ben. A python-radex a "H2", "para-H2", "ortho-H2", "e", "H", "He", "H+" kulcsszavakat tudja kezelni.
- **Ntot:** A molekula oszlopsűrűsége m^{-2} -ben.
- **line_profile:** Vonalprofil. Lehet Gauss-profil a "Gaussian" kulcsszóval, vagy téglalapos a "rectangular" kulcsszóval.
- **width_v:** A vonal szélessége m/s-ban. Gauss-profil esetén a vonal félértékszélessége.
- **partition_function:** Egyedi partíciós függvény megadása. "None" esetén kiszámítja a vonallista alapján.
- **verbose:** Plusz információkat kiír, ha "True".

A gázfelhő definiálása után meg kell oldani a radiatív transzferegyenletet:

```
solve_radiative_transfer()
```

Ez a parancs megoldja a radiatív transzferegyenletet az ALI módszerrel. A megoldást a

```
print_results()
```

paranccsal kapjuk meg. Ekkor kiírja az összes átmenethez a populációkat, gerjesztési hőmérsékleteket, frekvenciákat, optikai mélységeket. Ha a vonalak intenzitása kell, azt a

```
compute_line_fluxes(solid_angle)
```

paranccsal kaphatjuk meg, ha a kód látszó térszögét ismerjük (**solid_angle**).

4. Fizikai paraméterek illesztése

A munkám során létrehoztam egy kódot, amellyel tetszőleges asztrofizikai közegre meg tudom határozni a kinetikus hőmérsékletet, az ütközési partner sűrűségét és az adott molekula oszlopsűrűségét. A kód egy 3 dimenziós paraméterterben felvett rácpontokon számolja ki a radiatív transzferegyenletet, és a mérésből származó vonalerőségekkel a χ^2 -et kiszámítja.

4.1. A saját kód bemutatása

A program 2 fő részből áll. A fő függvényem, a **get_radex_chi2** függvény vezérli a radiatív transzferegyenlet megoldását, illetve a χ^2 kiszámítását az argumentumában megadott paraméterekre.

```
def get_radex_chi2(params, molecule, geometry,
    ext_background, line_profile, width_v, solid_angle,
    transitions, measurements, OPR):
    Tkin = params[0]
    coll_partner_dens = params[1]
    Ntot = params[2]
    coll_partner_densities =
        {'para-H2': coll_partner_dens * 1. / (OPR + 1),
         'ortho-H2': coll_partner_dens * OPR / (OPR + 1)}
```

Az illesztendő fizikai paraméterek egy tömbként vannak kezelve, a később részletezett iterálás módszere miatt. A függvény argumentumai ezen kívül megegyeznek az előző fejezetben bemutatott `pythonradex.nebula.Nebula()` objektumával. Az ütközési partner a munkám során a H_2 volt, így az ortho-para arány (OPR) külön paraméterként állítható.

```
example_nebula = nebula.Nebula(
    datafilepath=molecule, geometry=geometry,
    ext_background=ext_background, Tkin=Tkin,
    coll_partner_densities=coll_partner_densities,
    Ntot=Ntot, line_profile=line_profile,
    width_v=width_v)
example_nebula.solve_radiative_transfer()
example_nebula.compute_line_fluxes(solid_angle=solid_angle)
```

A `get_radex_chi2` függvény ezen része kezeli a gázfelhő definiálását, a radiatív transzferegynletet és a molekulavonalak integrált fluxusának számítását, az előző fejezetben részletezett módon.

```
flux = np.zeros(len(transitions))
nu0 = np.zeros(len(transitions))
data = LAMDA_file.read(molecule, read_frequencies=True)
rad_transitions = data['radiative_transitions']
iter = np.arange(len(transitions))
for i in np.arange(len(transitions)):
    rad_trans = rad_transitions[transitions[i]]
    nu0[iter[i]] = rad_trans.nu0/constants.giga
    convert = 9.418e19 * nu0[i]**-1
    flux[iter[i]] =
        example_nebula.obs_line_fluxes[transitions[i]]
        *convert

chi_2 = chi2(flux, measurements)
return chi_2
```

A függvény ezen részében az összes átmenetre számolt fluxus közül kiválasztom a mérésekhez tartozó átmeneteket, a `transitions` tömbbel. A tömbben az átmenetek sorszáma

található, nullától kezdve.

Az első két sorban definiálom a megoldáshoz szükséges tömböket. A harmadik és negyedik sorban egy másik pythonradex rutint használok, amely segítségével lehet olvasni a vonallistából, mivel a későbbi mértékegységváltáshoz szükségem van az átmenet frekvenciájára. A pythonradex a fluxusokat W/m^2 egységben számítja, melyet át kell váltani a mérés mértékegységére.

A for ciklust az átmenetek sorszámaival irányítom. A ciklusban a LAMDA file-ból kiolvasom a központi frekvenciát GHz-ben, a `LAMDA_file.read()` függvénnyel. A `convert` változó végzi a mértékegységváltást, esetemben W/m^2 -ről $Jy \cdot km/s$ -ra. Ezután a mérésekhez tartozó modellfluxusokat kiolvasom a radiatív transzferegyenlet megoldásából, és a korábban definiált `flux` tömbbe teszem, már megfelelő mértékegységben.

A χ^2 meghatározásához egy segédfüggvényt definiáltam, amely a mért- és modellfluxusok alapján kiszámítja a χ^2 -et.

```
def chi2(obs,exp):
    X2 = np.zeros(len(obs))
    iter = np.arange(len(obs))
    for i in iter:
        X2[i] = (obs[i]-exp[i])**2/exp[i]
    chi2d = np.sum(X2)
    return chi2d
```

A χ^2 meghatározásának jól ismert módja:

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(E_i - O_i)^2}{E_i} \quad (54)$$

ahol E a mért fluxus, O a modellezett fluxus. Általában fordítva szokás definiálni, mivel a megfigyelt mennyiséget hasonlítjuk a modellhez, viszont ebben az esetben a megfigyelt fluxus a referencia. Ezt a χ^2 -et adja megoldásként a `get_radex_chi2` függvény, amelyet a további analízishez használok.

A kódom további része ezt a függvényt vezérli.

```
f = open(filename,mode = 'w')
f.write
('Tkin[K]_Coll_partner_densities[cm^-3]_Ntot[cm^-2]_chi^2\n')

with Pool(processes = 11) as p:
    result = p.map(radex_starmap_3d,iterable)
    p.close()
    p.join()
    for i in range(len(result)):
        f.write(result[i])
    print(result)

f.close()
```

A radiatív transzferegyenlet megoldása sok időt vesz igénybe, így fontos, hogy egyszerre több szálon futhasson. Ezt a funkciót a **Pool** objektum kezeli, amely felosztja a feladatot. A munkám során 10, vagy 11 szálon futtattam a számításokat egy laptopon, AMD Ryzen 5 7535HS processzorral. Az átlagos futási idő egy 65x65x65-ös rácson 7 óra volt, ha 11 magon futtattam le. A **map** függvény meghívja a **radex_starmap_3d** segédfüggvényt, amelynek már csak 3 változtatható paramétere van.

```
def radex_starmap_3d (params):
    chi_2 = get_radex_chi2(params, molecule, geometry,
                           ext_background, line_profile, width_v,
                           solid_angle, transitions, measurements, OPR)

    result = str(params[0]) + '└' + str(params[1]) + '└'
    + str(params[2]) + '└' + str(chi_2) + '\n'

    return result
```

Ez a függvény a **get_radex_chi2** függvény könnyebb kezelése miatt hasznos. A megoldást már formázott szöveggént adja vissza, melyben a kinetikus hőmérséklet, ütközési partner sűrűsége, molekula oszlopsűrűsége és χ^2 sorrendben.

A **map** függvény argumentumában van az **iterable** változó, amely listaként tartalmazza a fizikai paramétereket:

```
T_kin = np.linspace(7, 200, n)
N_tot = np.linspace(5e18, 5e19, n)
Coll_partner_dens = np.linspace(5e3/constants.centi**3,
                                1e9/constants.centi**3, n)
iterable = list(product(T_kin, Coll_partner_dens, N_tot))
```

A paramétereket a **numpy.linspace** függvénnyel két határérték között egyenletes beosztással definiálom. Az **iterable** változó létrehoz egy listákból álló listát, a paraméterek Descartes-szorzatából, azaz minden paraméter-kombinációval.

4.2. χ^2 illesztés

Miután megvan minden pontra a χ^2 , kell egy módszer annak eldöntésére, hogy a paraméterter melyik tartományának van kellő valószínűséggel egyezése. Ugyanúgy, mint ahogy a mérések sem lehetnek tökéletesen pontosak, a modell-illesztésnek is van egy bizonytalansága. Nem csak egy paraméterhármas tudja a mért vonalerősségeket reprodukálni. A megoldásomat épp ezért kontúrgrafikonokon ábrázolom: a kontúrvonalak a határai a jó illeszkedésnek.

A kontúrvonalakhoz tartozó értéket a következő formulával határoztam meg:

$$\chi_{\alpha}^2 = \chi_{min}^2 + \Delta(f, \alpha) \quad (55)$$

ahol χ_{min}^2 az éppen számolt paraméter-tartományon a legkisebb χ^2 , χ_{α}^2 az α szignifikancia-értékhez tartozó χ^2 , $\Delta(f, \alpha)$ pedig az f szabadsági fokhoz és α szignifikancia-szinthez

tartozó kritikus érték, ami megegyezik a χ^2 valószínűségi sűrűség függvény értékével az α pontban⁸ (Avni 1976). Ezeket a kritikus értékeket táblázatokban szokás megadni, illetve a `scipy.stats.chi2.pdf` függvény közvetlenül kiszámítja. Az általam használt α értékek a standard normális eloszlásból jól ismert 1σ , 2σ , 3σ értékekhez tartozó 0.68, 0.90, 0.99.

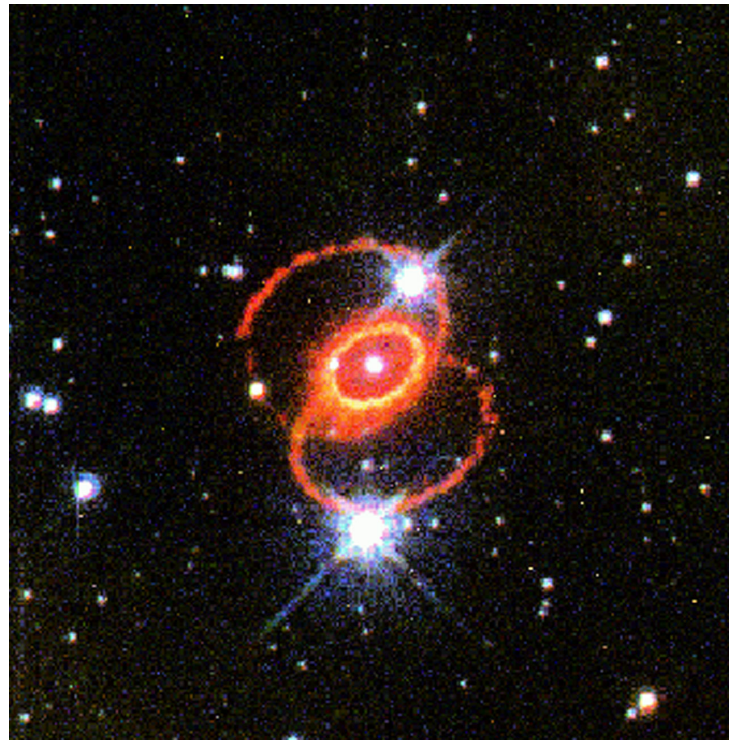
5. SN1987A

A kódomat alapvetően tetszőleges asztrofizikai közegek vizsgálatára írtam. A szupernóvák és szupernóva-maradványok vizsgálata a szegedi Asztrofizikai Kutatócsoport fő irányvonalala, így kézenfekvő volt egy szupernóva-maradvány vizsgálata a munkám során. Azért választottam az SN1987A-t, mivel ez az egyik legközelebbi és legalaposabban vizsgált maradvány.

Az SN1987A szupernóva 1987. február 23-án robbant fel a Nagy Magellán Felhőben. A közelsége miatt ez volt az első szupernóva, melyet a teljes elektromágneses tartományon megfigyeltek, illetve ezen esemény kapcsán történt az első neutrínó-észlelés szupernóvából. Ez a legtöbbet tanulmányozott szupernóva, melyről mind a mai napig készülnek mérések a gamma-tartománytól egészen a rádióig.

Az SN1987A II-es típusú, tehát erős hidrogénvonalakat észleltek a korai színeképében. A II-es típusú szupernóvák mindegyike magkollapszus útján keletkezik, aminek az alapelvét korábban részleteztem.

A robbanás környezetében kialakul három cirkumsztelláris gyűrű, melyet a progenitor nagyjából 20000 éve dobott le magáról. A gyűrűk hengerszimmetriája egy erős bizonyíték amellett, hogy a szülőcsillag kettős rendszer tagja volt. A hátramaradó társcsillag észlelésének a hiánya arra utal, hogy a két csillag a robbanás előtt ütközött.

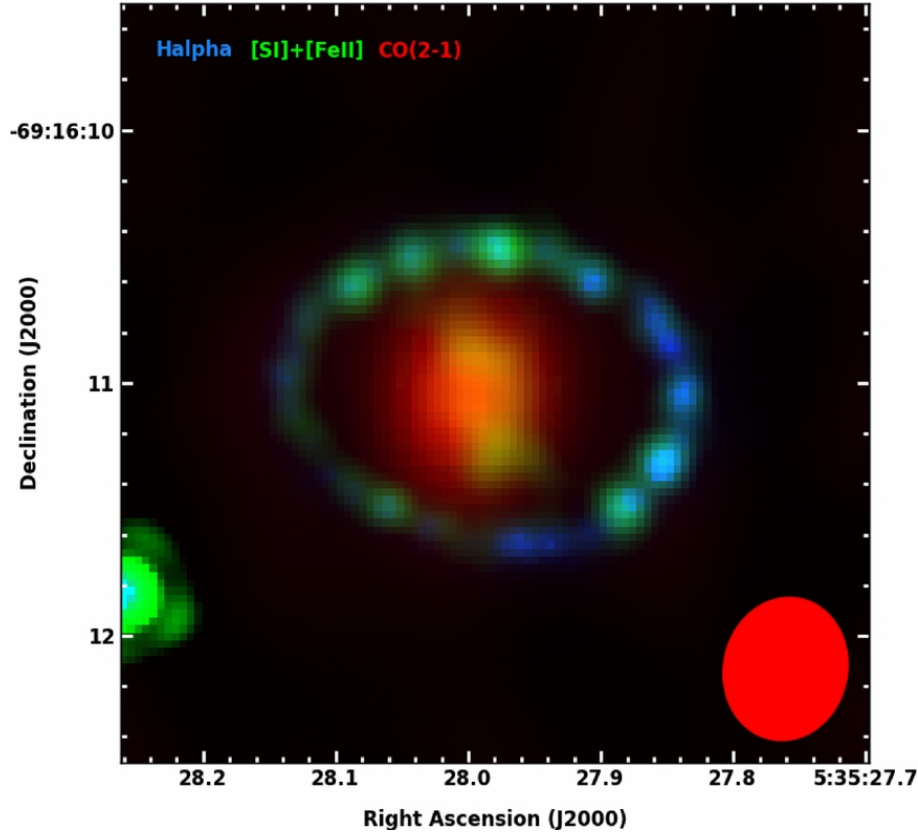


4. ábra. Az SN1987A, 1995-ben a Hubble Űrteleszkóp felvételén. Forrás: ⁹

⁸https://ned.ipac.caltech.edu/level5/Wal2/Wal3_4.html

5.1. Mérések

A munkám során négy szén-monoxid vonalról készült mérést használtam, melyet a Kamenetzky és tsai. 2013 cikkben közöltek. A szupernóva-maradványt az ALMA (Atacama Large Millimeter/submillimeter Array) műszereivel mérték 2012-ben.



5. ábra. Kompozit kép az SN1987A-ról a Kamenetzky és tsai. 2013 cikkből. A belső régió, ahonnan a szén-monoxid vonalakat észlelték (pirossal színezett) az ALMA akkori felbontásának a határán volt, melyet a piros ellipszissel ábrázoltak a kép jobb alsó sarkában.

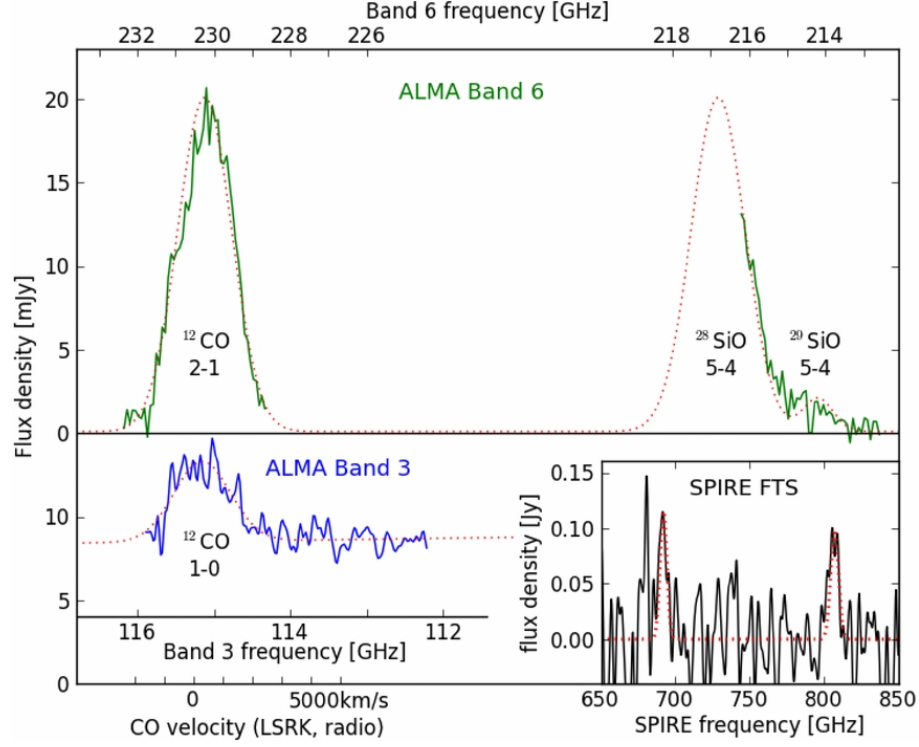
Az általuk mért adatok:

Vonal	ν (GHz)	FWHM (km/s)	Integrált fluxus (Jy km/s)
^{12}CO (1-0)	115.271	2270 ± 190	11.6 ± 1.2
^{12}CO (2-1)	230.538	2150 ± 50	46.0 ± 1.9

1. táblázat. ALMA mérések. A frekvenciát a vonallistából olvastam ki.

A másik két vonalat a Herschel Űrteleszkóp SPIRE műszerével (Groenewegen és tsai. 2011) 2012. június 12-én mérték. Kettő ^{12}CO vonalat detektáltak (6. ábra).

⁹<https://esahubble.org/images/opo9719b/>



6. ábra. A mért spektrumok a Kamenetzky és tsai. 2013 cikkből. A jobb alsó sarokban a Herschel SPIRE műszere által mért ^{12}CO (6-5) és (7-6) vonalak láthatóak, míg a másik két grafikonon az ALMA által mért (1-0) és (2-1) vonalak.

Vonal	ν (GHz)	FWHM (km/s)	Integrált fluxus (W/m^2)
^{12}CO (6-5)	576.268	2300	$(8.0 \pm 2.0) \cdot 10^{-18}$
^{12}CO (7-6)	691.473	2300	$(7.5 \pm 2.5) \cdot 10^{-18}$

2. táblázat. Herschel mérések. A frekvenciát a vonallistából olvastam ki. A mértékegységet a Kamenetzky és tsai. 2013 cikk által közölt mértékegységben tüntettem fel. Az 1. táblázattól eltérő mértékegységre a χ^2 számításánál különösen figyelnem kellett.

5.2. 3D illesztés

5.2.1. ALMA mérések illesztése

A paraméterek illesztését első közelítésben 3D rácson kezdtem. A stratégiám az volt, hogy egy kezdőértékből elindulva mindig arra felé változtattam a paraméterhármasomat, amerre a χ^2 csökkent. Ezt a folyamatot követve megtaláltam a legjobban illeszkedő modelleket. Első körben csak az ALMA adataira illesztettem, mivel lényegesen kisebb a bizonytalanságuk. A grafikonokat úgy készítettem, hogy kiválasztottam a legjobb χ^2 értékű pontot, és ezt a pontot szelő 3 síkot ábrázoltam. Mint ahogy a 7. ábrán látható, a kinetikus hőmérséklet vs. szén-monoxid oszlopsűrűség függvényen az illesztés egy zárt tartományt talált, egyedül a hőmérséklet bizonytalansága nagy. Viszont a másik két grafikonon látszik egy probléma. A $T_{\text{kin}} - n_{\text{H}_2}$ grafikonon nem lehet látni egy olyan jól behatárolt tartományt, amelyre a két paraméter együtt jó eredményt adna. Ez a grafikon alapján a kinetikus hőmérséklet akármekkora lehet, ami nyilvánvalóan téves. Az $N_{\text{CO}} - n_{\text{H}_2}$ grafikonon is látszik egy hasonló probléma: a hidrogén sűrűsége $5 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-3}$ -tól egészen 10^9 cm^{-3} vál-

tozhat, ami egy abszurd mértékben széles tartomány. Ebből látszik, hogy mindössze 2 vonalerősségre nem lehet 3 dimenziós illesztést elvégezni.

5.2.2. ALMA + Herschel mérések illesztése

Az analízist azzal folytattam, hogy a nagyobb bizonytalanságú, magasabb rotációs kvantumszámú átmeneteket is belevettem az illesztésbe. Az így kapott grafikonok láthatóak a 8. ábrán. Mint látható, a Herschel mérési adatainak figyelembe vételével a kinetikus hőmérsékletnek a felső korlátját sikerült pontosítani, legalábbis a $T_{kin} - N_{CO}$ paraméterek függésében. A szén-monoxid oszlopsűrűsége egy szépen behatárolt tartományban található, $1.18 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-2}$ és $2.83 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-2}$ között. A hidrogén sűrűségével azonban még mindig probléma van. Az $N_{CO} - n_{H_2}$ grafikon alapján lehet adni egy alsó korlátot, ami $1.5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-3}$, viszont a $T_{kin} - n_{H_2}$ grafikon alapján pedig alacsonyabb tartományokban illeszkedik megfelelően.

Mind a négy vonal illesztésével tehát arra a következtetésre jutottam, hogy bár a paramétereket pontosabban meghatároztam, tisztán 3D-s paraméterterén történő illesztéssel nem lehet egyértelműen megadni azokat. A grafikonok alapján a T_{kin} és n_{H_2} között korreláció van, amely degenerációt okoz az illesztésben.

5.3. A degeneráció problémája és 2D illesztés

A degeneráció feloldásának egyik módja az, hogy az egyik korrelált paramétert rögzítjük. A további analízisemben az n_{H_2} -t rögzíttem egy állandó értékre, és a másik két paraméterből létrehozott két dimenziós rácson számoltam. A 2D számolásnak a másik előnye, hogy sokkal rövidebb idő alatt tudok nagyobb felbontású számításokat végezni, mivel a futási idő n^2 -el arányos, nem n^3 -el.

Először a $T_{kin} - n_{H_2}$ függést vizsgáltam meg alaposabban, azt néztem meg, hogy az n_{H_2} változásával milyen módon változik a $T_{kin} - N_{CO}$ grafikon.

A 9. ábrán látható, hogy a alacsonyabb hidrogén-sűrűség esetén az illesztett T_{kin} növekszik, míg az N_{CO} számottevően nem változik számottevően.

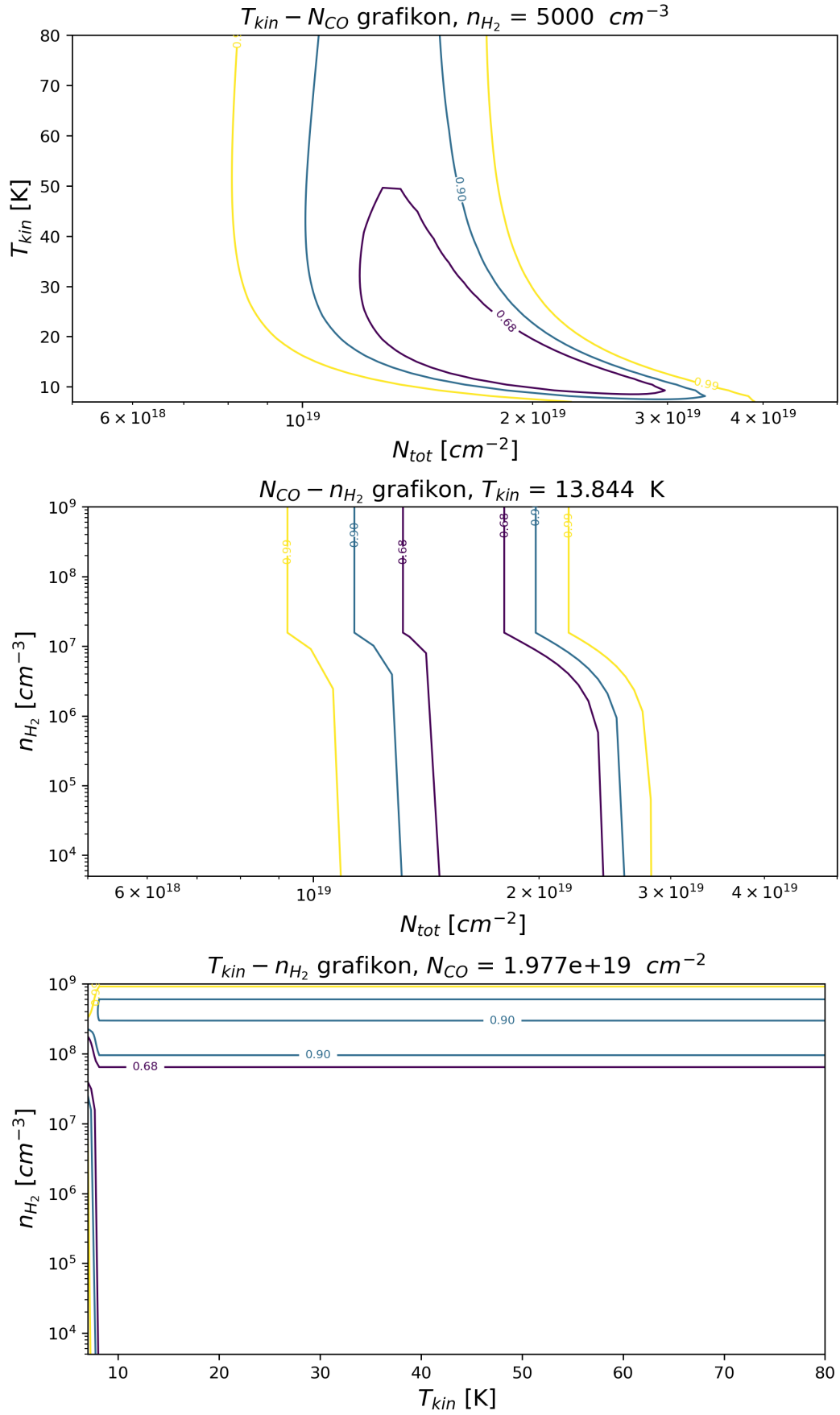
Az egyedüli kérdés abból fakad, hogy mekkora n_{H_2} -érték írja le reálisan a közeget. A Matsuura és tsai. 2017 cikkben két lehetséges értéket vizsgáltak: $n_{H_2} = 10^5 \text{ cm}^{-3}$ és 10^6 cm^{-3} . A saját illesztésem alapján a $2.5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-3}$ érték látszik a legjobbnak, mivel a 8. ábra 2. és 3. grafikonja ezen érték körül fed át (10. ábra).

Az illesztett kinetikus hőmérséklet- és szén-monoxid oszlopsűrűség-tartományok:

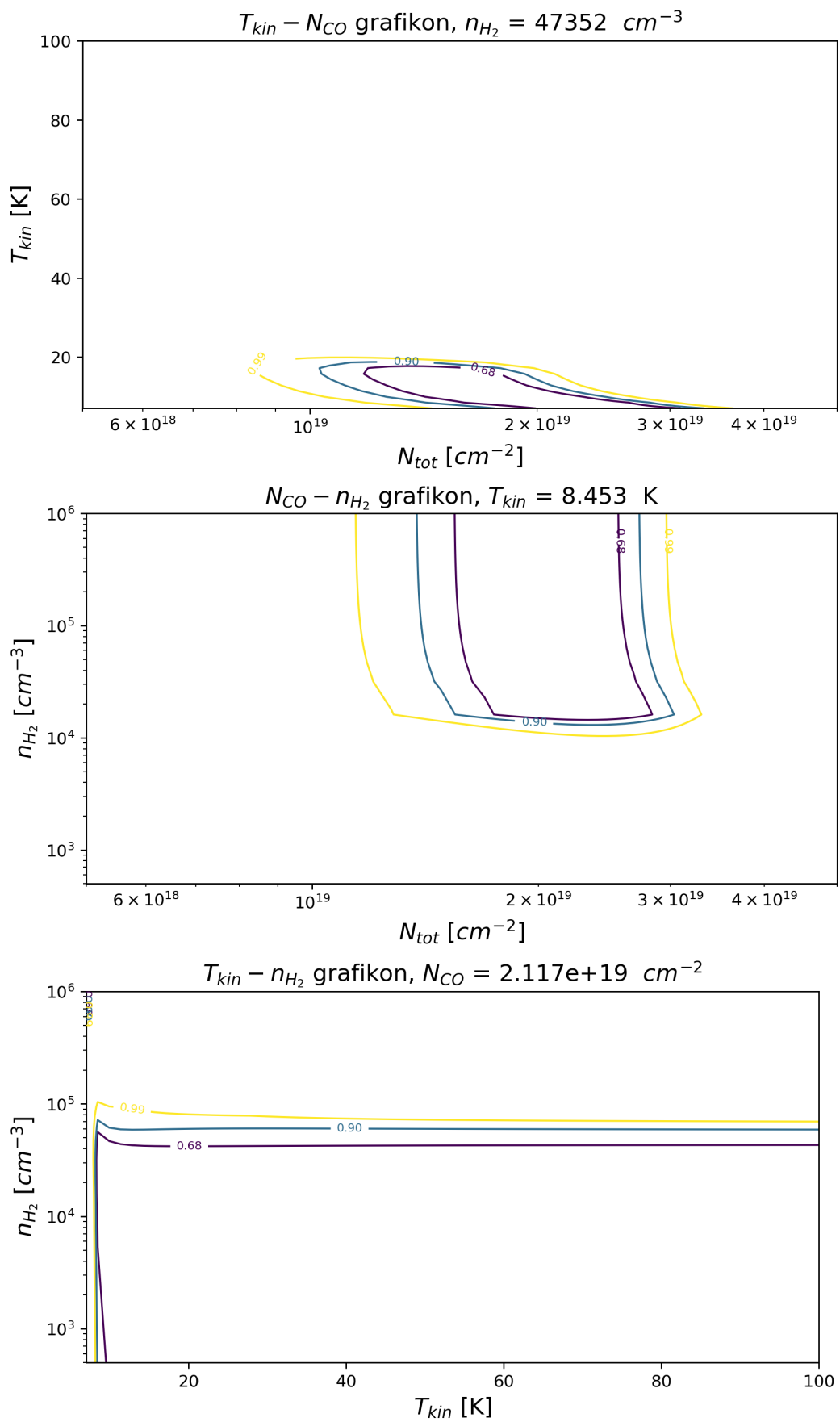
$n_{H_2} (\text{cm}^{-3})$	$N_{CO} (\text{cm}^{-2})$	$T_{kin} \text{ K}$
10^6	$1.22 \cdot 10^{19} - 3.00 \cdot 10^{19}$	$7^* - 14.16$
10^5	$1.20 \cdot 10^{19} - 3.05 \cdot 10^{19}$	$7^* - 16.05$
$2.5 \cdot 10^4$	$1.15 \cdot 10^{19} - 3.13 \cdot 10^{19}$	$7^* - 20.47$

3. táblázat. * A legalacsonyabb hőmérséklet, amin tudtam számolni, az 7 K, ez a kinetikus hőmérséklet alatt a kód nem tudott gerjesztési hőmérsékletet számolni.

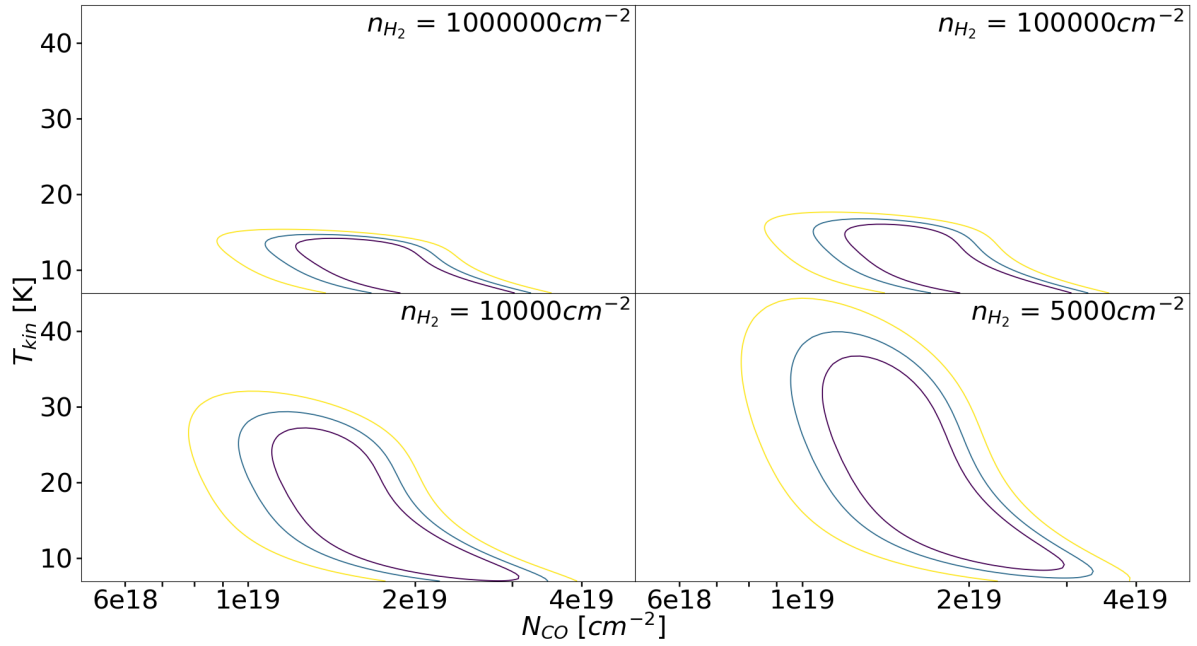
A különböző n_{H_2} értékeknél kapott N_{CO} jó egyezést mutat, a hőmérséklet pedig a már részletezett módon növekszik a hidrogén sűrűségével.



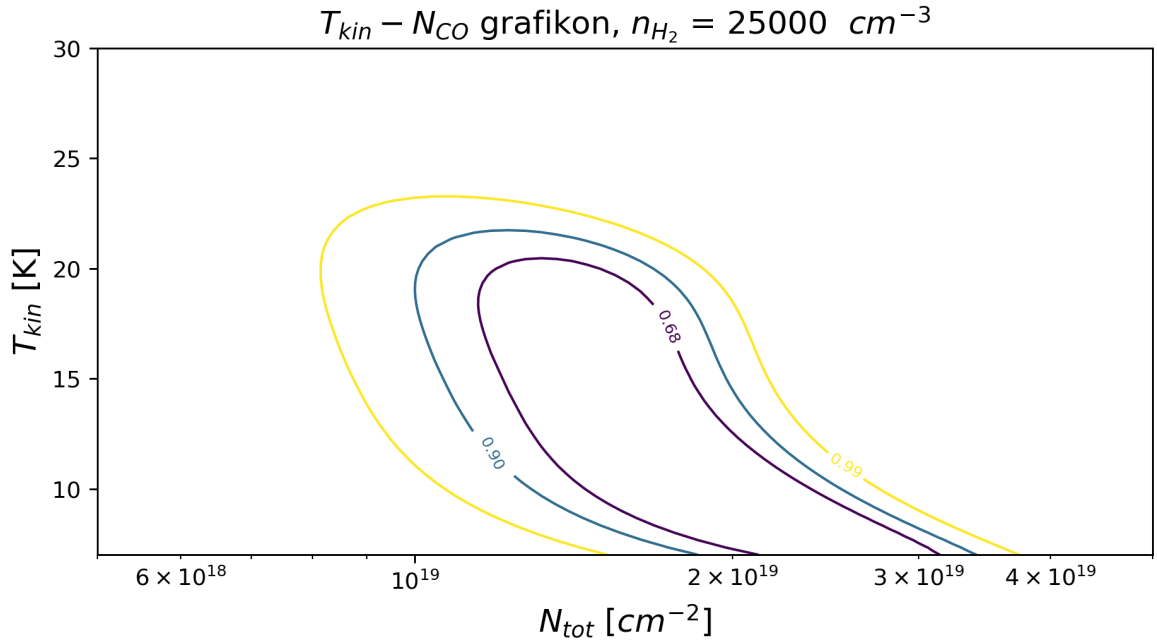
7. ábra. 3D illesztés utáni grafikonok az ALMA adataival



8. ábra. 3D illesztés utáni grafikonok az ALMA és Herschel adataival



9. ábra. $T_{kin} - N_{CO}$ grafikon-sorozat, egyre csökkenő n_{H_2} értékeknél.



10. ábra

6. Összefoglaló és jövőbeli tervek

A munkám során létrehoztam egy kódot, amellyel tetszőleges asztrofizikai közegre meg lehet határozni a T_{kin} , N_{mol} és n_{col} paramétereket, molekuláris rotációs vonalak illesztésével. Ennek bemutatására elvégeztem az SN1987A szupernóva-maradvány CO molekulaátmeneteinek és egyértelműen meg tudtam határozni az N_{CO} oszlopsűrűséget, illetve n_{H_2} rögzítésével a T_{kin} kinetikus hőmérsékletet is meghatároztam.

Jövőbeli terveim között szerepel, hogy a kódot kiterjesszem vibrációs sávok vizsgálatához. A LAMDA formátumot követve létre lehet hozni egyéni vonallistákat, amennyiben

más adatbázisokból ismertek a radiatív- illetve ütközéses átmenetek, valamint az energiaszintek. Ezzel a fejlesztéssel lehetővé tenném, hogy közép-infravörös tartományban, a James Webb Űrtávcső publikus adatait használva végezhessem el az analízist.

Az adatok közötti korreláció feltérképezése nagy kihívást jelent. Az egyik legjobb módszer rá az MCMC (Monte Carlo Markov Lánc) analízis. A működési elve az, hogy tetszőleges, egymástól kellően távol fekvő kezdőpontokból indulva véletlenszerűen "letapogatja" az állapotteret. Terveim szerint a kódomba be fogok építeni egy MCMC modult, az SN1987A-nál tapasztalt degenerációk feloldására.

A munkám során csak statikus gömbszimmetrikus esetre számoltam. Ez sok esetben jó közelítés, viszont van kifejezetten szupernóvákra kifejlesztett szökési valószínűség, az úgynevezett Sobolev vagy LVG (Large Velocity Gradient, Nagy sebességgradiens) közelítés (Sobolev 1960), amely táguló gázfelhőkre, így szupernóva-maradványokra egy jó közelítés. A pythonradex nem tartalmazza ezt a szökési valószínűséget, így tervezem a modulon belül ezt a geometriát implementálni.

Munkám során elmélyítettem a tudásomat a molekulafizika és a radiatív transzferelmélet területéről, illetve rengeteg programozási tapasztalattal lettem gazdagabb.

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom témavezetőmnek, Dr. Szalai Tamásnak, akinek szakmai iránymutatása, oktatása és technikai szakértelme létfontosságú volt ezen dolgozat létrejöttéhez, emellett köszönöm családom és barátaim végtelen támogatását.

Hivatkozások

Hivatkozások

- Avni, Y. (1976. dec.). “Energy spectra of X-ray clusters of galaxies.” 210, 642–646. old. DOI: 10.1086/154870.
- Bransden, B.H. és C.J. Joachain (1983). *Physics of Atoms and Molecules*. Pearson Education. Longman. ISBN: 9780582444010. URL: https://books.google.hu/books?id=b6x_z8nZbw0C.
- Groenewegen, M. A. T. és tsai. (2011. febr.). “MESS (Mass-loss of Evolved StarS), a Herschel key program”. 526, A162, A162. DOI: 10.1051/0004-6361/201015829. arXiv: 1012.2701 [**astro-ph.SR**].
- Jankowski, Piotr és Krzysztof Szalewicz (2005. szept.). “A new ab initio interaction energy surface and high-resolution spectra of the H₂-CO van der Waals complex”. 123.10, 104301–104301. old. DOI: 10.1063/1.2008216.
- Kamenetzky, J. és tsai. (2013). “CARBON MONOXIDE IN THE COLD DEBRIS OF SUPERNOVA 1987A”. *The Astrophysical Journal Letters* 773.2, L34. old. DOI: 10.1088/2041-8205/773/2/L34. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/2041-8205/773/2/L34>.
- Liu, Weihong és A. Dalgarno (1995. nov.). “The Oxygen Temperature of SN 1987A”. 454, 472. old. DOI: 10.1086/176498.
- Matsuura, M. és tsai. (2017. ápr.). “ALMA spectral survey of Supernova 1987A – molecular inventory, chemistry, dynamics and explosive nucleosynthesis”. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 469.3, 3347–3362. old. ISSN: 0035-8711. DOI: 10.1093/mnras/stx830. eprint: <https://academic.oup.com/mnras/article-pdf/469/3/3347/17709647/stx830.pdf>. URL: <https://doi.org/10.1093/mnras/stx830>.
- Osterbrock, D.E. és G.J. Ferland (2006). *Astrophysics Of Gas Nebulae and Active Galactic Nuclei*. G - Reference, Information and Interdisciplinary Subjects Series. University Science Books. ISBN: 9781891389344. URL: <https://books.google.hu/books?id=HgfrkDjBD98C>.
- Schöier, F. L. és tsai. (2005. márc.). “An atomic and molecular database for analysis of submillimetre line observations”. 432.1, 369–379. old. DOI: 10.1051/0004-6361:20041729. arXiv: astro-ph/0411110 [**astro-ph**].
- Sobolev, V. V. (1960). *Moving Envelopes of Stars*. DOI: 10.4159/harvard.9780674864658.
- van der Tak, F. F. S. és tsai. (2007. jún.). “A computer program for fast non-LTE analysis of interstellar line spectra. With diagnostic plots to interpret observed line intensity ratios”. 468.2, 627–635. old. DOI: 10.1051/0004-6361:20066820. arXiv: 0704.0155 [**astro-ph**].
- Yang, Benhui és tsai. (2010. aug.). “Rotational Quenching of CO due to H₂ Collisions”. 718.2, 1062–1069. old. DOI: 10.1088/0004-637X/718/2/1062. arXiv: 1004.3923 [**astro-ph.SR**].

Cím: Molekulák rotációs átmeneteinek modellezése asztrofizikai közegekben

Szerző: Truszek Márton

Saját munka:

Célok:

- Asztrofizikai módszerek alaposabb megismerése rotációs vonalak használatával.
- Tetszőleges asztrofizikai közeg kinetikus hőmérsékletét, hidrogén sűrűségét és az adott molekula oszlopsűrűségét meghatározó kód írása.

Módszerek:

- A pythonradex kód használatával írtam egy kódot, ami molekulák rotációs vonalakat illeszt egy 3D-, vagy 2D rácson, χ^2 minimalizálással. A kódom a LAMDA (Leiden Atomic and Molecular Database) molekuláris vonallistáit használja.
- A kódomat sikerült több szálon futtatható módon megcsinálni, ezzel drasztikusan csökkentve a futási időt.
- A kapott adatsorokat egy másik általam írt kóddal kontúr-grafikonokon ábrázoltam, a további analízist elősegítve.

Eredmények

- A munkám során készített kód képes tetszőleges asztrofizikai közegre fizikai paramétereket illeszteni, az összes LAMDA adatbázisban található vonallistával, illetve saját készítésű vonallistákkal is.
- A kódommal elvégeztem az SN1987A szupernóva-maradvány radiatív modellezését, ALMA és Herschel spektrumok használatával. A 3D illesztés során kiderült, hogy a paraméterek között korrelációk lépnek fel, melyet a jelenlegi módszerem nem tud megoldani, így 2D illesztés használatával meghatároztam különböző hidrogén sűrűségek mellett a szupernóva-maradvány kinetikus hőmérsékletét és szén-monoxid oszlopsűrűségét.