

SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM TTIK
KÍSÉRLETI FIZIKAI TANSZÉK

TDK DOLGOZAT

Molekulavonalak erősségének vizsgálata a
csillagok hőmérsékletének és felszíni nehézségi
gyorsulásának függésében

Készítette: **Truszek Márton**
Fizika BSc szakos hallgató

Témavezető: **Dr. Mészáros Szabolcs**
tudományos főmunkatárs, Eötvös Loránd Tudományegyetem
Gothard Asztrofizikai Observatórium és Multidiszciplináris Kutatóközpont

Belső konzulens: **Dr. Szalai Tamás**
adjunktus, SZTE TTIK Fizikai Intézet, Kísérleti Fizikai Tanszék

Szeged, 2022

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés és tudományos motiváció	2
1.1. A James Webb-űrtávcső	3
1.2. NIRSpec, MIRI és azok fluxuskalibrációja	4
2. A spektrumszintézis elméleti háttere	6
3. Rövid leírás a Synspec/Synple programról	8
3.1. A Synple telepítése	9
3.2. Példa a Synple használatára	9
3.3. A mikroturbulencia változtatása	10
3.4. Egyéb vonalszélesedés	11
3.5. A spektrumszintézis használata a dolgozatban	12
4. Molekulavonalak viselkedésének analízise	13
4.1. Áttekintés	13
4.2. Erősebb vonalakat létrehozó molekulák egyedi vizsgálata	17
4.2.1. CH	17
4.2.2. CN	18
4.2.3. CO	19
4.2.4. H ₂ O	20
4.2.5. MgH	21
4.2.6. NH	22
4.2.7. OH	23
4.2.8. OH ⁺	24
4.2.9. SiH	25
4.2.10. SiO	26
4.2.11. TiO	27
5. Összefoglalás	28
6. Köszönetnyilvánítás	29
Hivatkozások	30

1. Bevezetés és tudományos motiváció

Az elektromágneses sugárzás mind a mai napig a csillagászat legfontosabb információforrása a csillagokról. Az alaposabb megértésükhöz szükség van pontos spektroszkópai és fotometriai mérésekre, illetve az ezekhez kapcsolódó elméleti modellekre, amelyekkel összevetve a megfigyeléseket a meghatározható csillagok fizikai paraméterei. Az utóbbi évtizedek spektroszkópai égboltfelmérő programjai (pl. APOGEE, GALAH, Gaia) több millió csillagról készítettek nagyfelbontású spektrumokat, amelyek lehetővé tették a Galaxis nagyléptékű dinamikai, kinematikai és kémiai feltérképezését. Ezek a programok nem jöhettek volna létre a csillaglégkörök és spektrumok pontos modellezése nélkül.

A csillagok színekének modellezéséhez elengedhetetlen az atomok és molekulák energiaszintjei közötti átmenetek pontos ismerete, ezeket atomi és molekula-vonallistákban szokták gyűjteni össze. Jelen dolgozat célja annak vizsgálata, hogy az abszorpciós molekulavonalak erőssége hogyan függ a csillagok fő fizikai paramétereitől, az effektív hőmérséklettől (T_{eff}) és a felszíni nehézségi gyorsulástól ($\log g$). Dolgozatomban összesen 23 molekula spektrumát vizsgálom. Ezt elméleti színekpek kiszámolásával (spektrumszintézis) lehet elvégezni. Ennek lényege, hogy a csillaglégkörök tulajdonságainak és az atomok, illetve molekulák atomfizikai paramétereinek ismeretében a csillag spektruma modellezhető. Az alacsonyabb hőmérsékletű csillagok molekulavonalakban gazdag spektrumának megértéséhez elengedhetetlen fontosságú a pontos molekula-vonallisták ismerete, mivel a rengeteg vonal és a közöttük fellépő átfedések miatt a csillagok fizikai tulajdonságait és kémiai összetételét csak így tudjuk kiszámolni. A szintézist a Synspec (Ivan Hubeny és mtársai., 2021) nevű programmal végeztem, annak Synple (Ivan Hubeny és mtársai., 2021) csomagján keresztül, amely egy könnyen kezelhető python-os felületbe csomagolja a synspec háttérben futó számolásait.

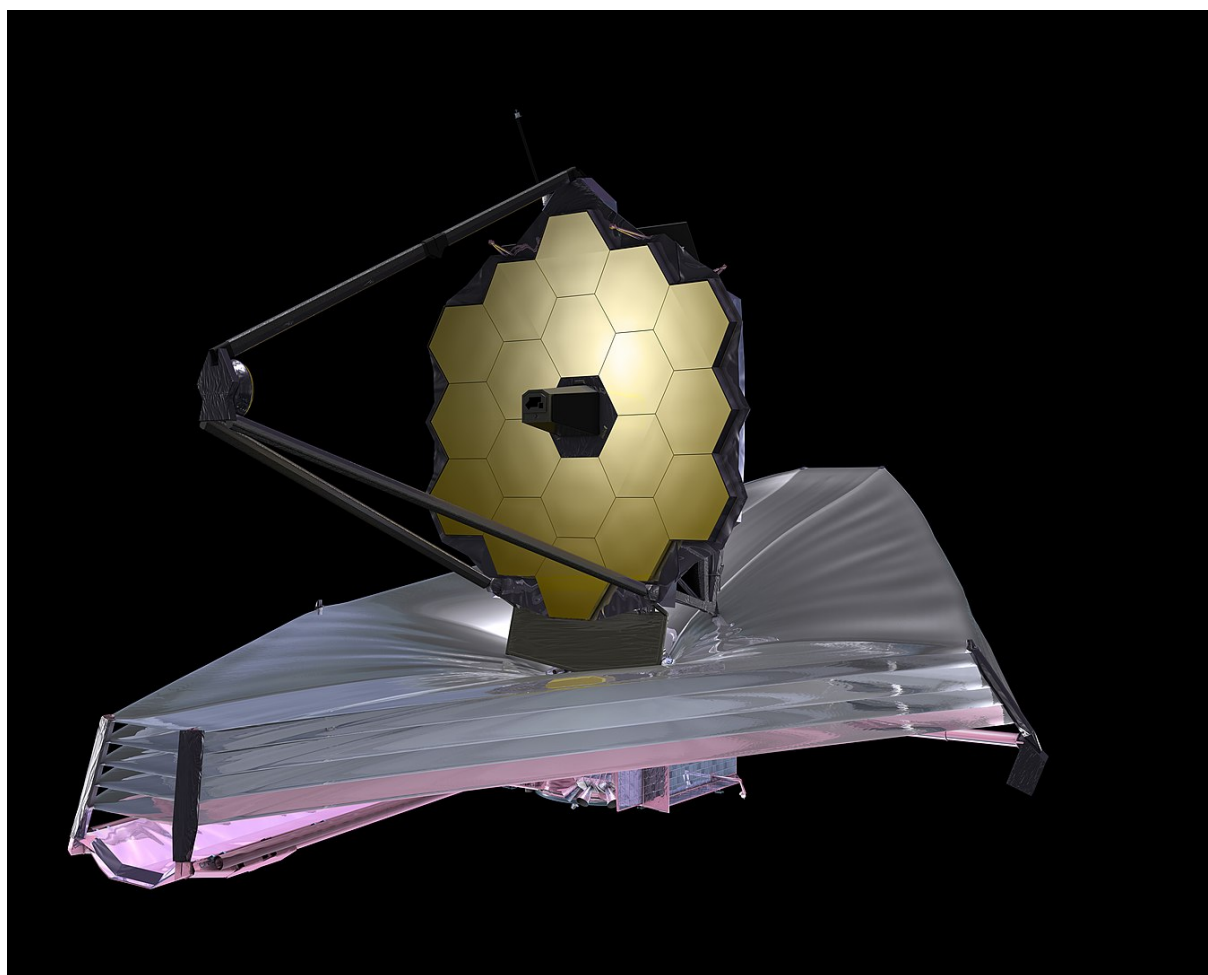
A következő évtizedek legfontosabb úrtávcsöve a 2021-ben felbocsátott James Webb Space-úrtávcső (James Webb Space Telescope, JWST) lesz, amely a közeli és közepes infravörös tartományban (600 nm – 28 μm) végzi nagy pontosságú észleléseit. A JWST műszereinek fluxuskalibrációjához szükséges elméleti spektrumadatbázisokat létrehozni. A JWST fluxus-kalibrációját a Space Telescope Science Institute (STScI) végzi (Gordon és mtársai., 2022), és a spektrális adatbázist az MTA–ELTE Lendület Tejútrendszer Kutatócsoport számítja. Ennek a projektnek részeként foglalkozom a molekulavonalak erősségének felszíni hőmérséklettől és felszíni nehézségi gyorsulástól való függésével. A molekulavonalak viselkedésének tanulmányozása segíthet megérteni az alacsony hőmérsékletű csillagok légkörében zajló atomfizikai folyamatokat, emellett betekintést nyújt a csillagok infravörös spektrumába, amelyet a JWST-űrteleszkóp is behatóan tud tanulmányozni, ezzel pontosítva jelenlegi ismereteinket. A felszíni gravitáció molekulavonalakra gyakorolt hatásának megismerésével pontosíthatjuk annak mérését.

Az effektív hőmérséklet és felszíni nehézségi gyorsulás molekulavonalak keletkezésére gyakorolt hatásának ismerete segít a Tejútrendszer kémiai összetételének feltérképezésében is, mivel a nagy spektroszkópai égboltfelmérő programok sok vörös óriás- és törpecsillagokat észlelnek, amelyek spektrumában rengeteg molekulavonal található. Az információ, hogy melyik molekula spektrumvonala melyik hőmérsékleti tartományban hanyagolható el, lehetővé teszi a gyorsabb modellszámításokat, mivel az adott hőmérséklet esetén az adott molekulák elhanyagolásával a számítások összetettsége, ezáltal a futási idő és gépigény is csökkenthető.

A spektrumszintézis elméleti háttéréről a 2. fejezetben írok, a synple használatát a 3. fejezetben részletezem. A 4. fejezetben az általam számolt molekulaszpektrumok elemzése olvasható.

1.1. A James Webb-űrtávcső

A James Webb¹ az infravörös tartományban érzékeny űrtávcső, amelyet 2021. december 25-én indítottak a Francia Guyanában található Guyana Űrközpontból egy Ariane-5 hordozórakétával. A távcső főtükre, amely az 1. ábrán látható, 18 hatszög alakú szegmensből áll, amelynek az effektív átmérője 6,5 méter. A tükröt a kiövés előtt összehajtották, hogy beférjen a hordozórakétába. Az űrtávcsövet a Nap–Föld-rendszer L_2 Lagrange-pontjába indították, a nagyjából 1 hónapos út során pedig a kilövéshez összehajtogatott távcső passzív hűtéséhez tartozó napernyőjét kicsomagolták, a főtökről oldalsó szegmenseit kihajtották, és fókuszálták azokat. A Lagrange-pontban való elhelyezkedés előnye, hogy a Föld termikus sugárzása nem zavarja a rendkívül érzékeny műszereket, és a távcső végig nagyjából ugyanolyan távolságban marad a Földtől.



1. ábra. A JWST teljesen kinyitott állapotban. A kép csak grafikus ábrázolás, a távcsövet utoljára kilövéskor látták. [forrás: https://en.wikipedia.org/wiki/James_Webb_Space_Telescope/]

¹<https://webb.nasa.gov/>

A JWST műszerei a következők:

- **NIRCam** (Near InfraRed Camera): infravörös képalkotó műszer, amely a látható tartomány határától ($0.6\ \mu\text{m}$) a közeli infravörös tartományig ($5\ \mu\text{m}$) érzékeny. A NIRCam 10 db 4 megapixeles szenzorból áll. Ez a műszer felel azért, hogy a távcső főtükkrét beállítsák és megfigyeljék.
- **NIRSpec** (Near InfraRed Spectrograph): egy multiobjektum-spektrográf a NIRCam hullámhossztartományában. A NIRSpec három üzemmódban működhet: alacsony felbontású prizmás üzemmód, $R = 1000$ felbontású, több objektum párhuzamos megfigyelésére alkalmas üzemmód, illetve $R = 2700$ nagyobb felbontású üzemmód.
- **MIRI** (Mid-InfraRed Instrument): közép infravörös hullámhossztartományban képes mérni, 5 és $27\ \mu\text{m}$ között. A műszer egy közép infravörös kamerát és egy közép infravörös spektrométert tartalmaz. A MIRI hőmérséklete nem haladhatja meg a $6\ \text{K}$ -t, a műszer hűtését folyékony héliummal oldják meg.
- **FGS/NIRISS** (Fine Guidance Sensor és Near InfraRed Imager and Slitless Spectrograph): az FGS feladata a távcső irányba állítása és a kép stabilizálása. A NIRISS modult infravörös képalkotásra és spektrszkópiára tervezték $0,8$ és $5\ \mu\text{m}$ közötti tartományban.

Ezeket a műszereket fogják fluxuskalibrálni annak a spektrumadatbázisnak a segítségével, amelyet az MTA-ELTE Lendület Tejútrendszer Kutatócsoport számol ki.

A NIRCam és a MIRI is rendelkezik egy koronagráffal, amely lehetővé teszi az exobolygók közvetlen megfigyelését is. A JWST fő profilja az exobolygók spektroszkópiai analízise, az első csillagok és galaxisok vizsgálata, illetve a csillag- és bolygókeletkezés pontosabb megértése.

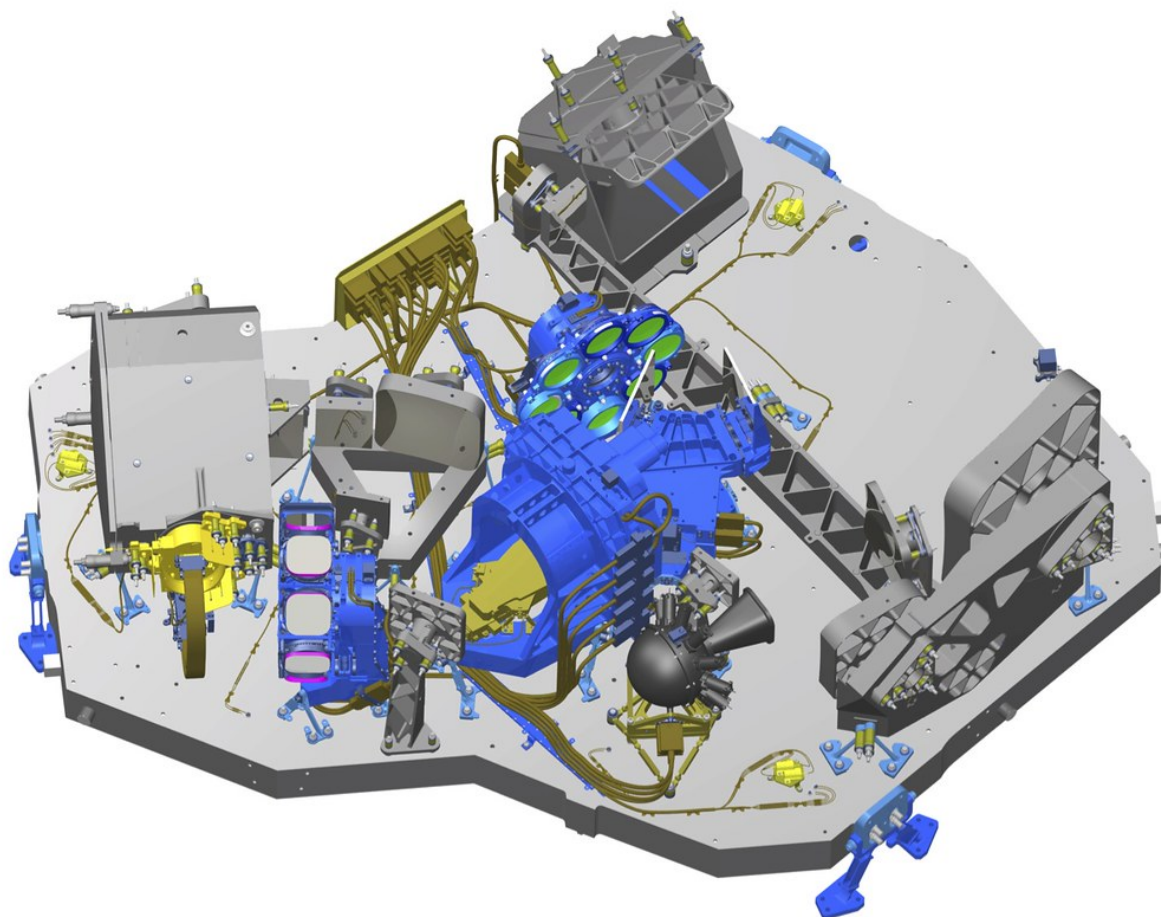
1.2. NIRSpec, MIRI és azok fluxuskalibrációja

A JWST egyik fő műszere, a Near InfraRed Spectrograph $0.6\ \mu\text{m}$ -tól $5\ \mu\text{m}$ -ig képes mérni az objektumok spektrális energiaeloszlását, amelyből meg lehet határozni a csillagok hőmérsékletét, tömegét és kémiai összetételét. A spektrográf felépítése a 2. ábrán látható. A NIRSpec különlegessége, hogy képes egyszerre akár 100 csillag spektrumát mérni, köszönhetően az egyedi mikro-elektromechanikus zárszerkezetének, amelynek elemeit egyesével lehet nyitni és zárni mágneses mező segítségével. Erre azért van szükség, hogy a halványabb objektumok fényét ne nyomják el a látómezőbe kerülő fényesebb csillagok.

Az exobolygók légkörének vizsgálatára a MIRI-t használják. Alacsony felbontású spektroszkópiai üzemmódban a csillaga előtt átvonuló bolygót vizsgálják, míg koronagráfos leképezéssel közvetlenül is megfigyelik azokat (P. Patapis és mtsárai, 2022)

A fluxuskalibráció célja az, hogy a csillagászati méréseket az instrumentális egységekből átváltsuk fizikai mértékegységekbe. Erre gyakori módszer az, hogy mérjük meg a fluxussűrűségét egy adott csillagnak az instrumentális egységekben, majd hasonlítsuk össze egy elméleti fluxussal, amelynek paraméterei egy korábbi kalibrált mérés illesztéséből származnak. A megfelelően pontos fluxuskalibráció követelményei:

1. Több kalibrációs csillag mérései átlagolva



2. ábra. A NIRSpec közeli infravörös spektrográfról készült CAD rajz. [forrás: <https://www.flickr.com/photos/nasawebsite/5961539361/in/album-72157627124336667/>]

2. Magas minőségű csillaglégkör-modellek
3. Pontosan átvenni a korábbi méréseket a JWST által észkelhető halványabb csillagokhoz
4. Alacsony zajszintű JWST-mérések

A dolgozatomhoz tartozó számolások, illetve a kutatócsoport munkája a második pont-hoz tartozik. Az MTA–ELTE A Tejútrendszer Kémiai Feltérképezése Kutatócsoport egyik fontos projektje az, hogy az STScI (Space Telescope Science Institute) számára a JWST-fluxuskalibrációhoz spektrumszintézis használatával elméleti spektrumokat számoljon. Ennek szerves része az, hogy a különböző molekulák spektrumában a vonalak erősségének hőmérséklettől és felszíni gravitációs gyorsulástól való függését vizsgáljuk. A dolgozatomban ezt a kérdést járom részletesen körbe összesen 23 molekula abszorpciós spektrumának kiszámolásával. Erre többek közt azért van szükség, hogy a JWST-vel már spektroszkópiailag vizsgálható bolygólégkörök molekulavonalait meg lehessen különböztetni a csillagokban keletkező molekulavonalaktól.

2. A spektrumszintézis elméleti háttere

Az elméleti spektrumok szintéziséhez többféle megközelítés létezik. A dolgozatban szereplő spektrumok ún. 1D légkörmodellekkel számoltuk ki, amelyek azt feltételezik, hogy a csillag lokális termodinamikai egyensúlyban (LTE) van. Az 1D modellek bizonyos tulajdonságokat előre megadott paraméterként kezelnek, például a konvektív áramlásokat és a mikroturbulens sebességet. Ezen modellek radiatív-konvektív egyensúlyi közelítést alkalmaznak, és használatukkal viszonylag gyorsan lehet kapni egy kellően jó közelítésű spektrumot egy adott paraméterekkel rendelkező csillagról. Léteznek összetettebb légkörmodellek is, amelyek háromdimenziós hidrodinamikai és magnetohidrodinamikai simulációként modellezik a légkört, majd ebből spektrumszintézissel olyan színeképet lehet számolni, amelyben már a csillag mágneses mezeje is számításba van véve. A dolgozat számításaihoz a MARCS (Gustafsson és társai, 2008) modellatmoszférákat használtam.

Az összes spektrumszintézisére használt kód, a synspec is, a radiatív transzferegynletet oldja meg, mivel a csillag felszínéhez közel a radiatív folyamatok a dominánsak az energia továbbításában. A plánparalel radiatív transzferegynlet LTE rendszer esetében:

$$\mu \frac{dI_\lambda}{d\tau_\lambda} = I_\lambda - S_\lambda, \quad (1)$$

ahol λ a hullámhossz, I_λ az intenzitás, S_λ a forrásfüggvény, $\mu = \cos \Theta$, és Θ a felszín normálisa és a megfigyelési irány közötti szög. A τ_λ optikai mélység a $d\tau_\lambda = -\chi_\lambda(s)ds$ egyenletből származik, ahol s a légkör mélysége. A forrásfüggvény LTE esetén a következő módon áll elő:

$$S_\lambda = \frac{j_\lambda}{\chi_\lambda}, \quad (2)$$

ahol j_λ a teljes emissziós koefficiens, $\chi_\lambda = \alpha_\lambda + \sigma_\lambda$ a teljes extinkciós koefficiens térfogat-egységenként, amelyben α_λ az abszorpciók együttható, σ_λ a szórás együttható.

A spektrumvonalak szintetizálásához ismernünk kell a légkör opacitását (κ_λ). Az opacitás az extinkciós koefficiensen keresztül kapcsolódik a radiatív transzferegynletbe, ugyanis $\kappa_\lambda = \chi_\lambda/\rho$, ahol ρ a sűrűség. Az opacitás két komponensre bontható, a kontinuum-opacitásra ($\kappa_{\lambda,c}$), amely azon atomi és molekuláris átmenetektől származik, amelyeknek nincsen diszkrét hullámhosszuk. Ebbe a csoportba tartozik a fotoionizáció, a fékezési sugárzás és a Thompson-szórás. A másik típus a vonal-opacitás ($\kappa_{\lambda,l}$), amely a kötött energiaszintek közötti diszkrét átmenetek energiaelnyelését írja le. A teljes opacitás ezen kettő típusnak az összege.

Amennyiben feltesszük, hogy a csillagra az LTE-közelítés igaz, az atomi és molekuláris eloszlások kiszámíthatóak a Saha–Boltzmann-egyenletből. A Boltzmann- és Saha-egyenlet statisztikus fizikai alapokon nyugszik, a Boltzmann-egyenlet alakja a következő:

$$\frac{N_n}{N_0} = \frac{g_n}{g_0} \cdot e^{-\frac{E_n - E_0}{kT}}, \quad (3)$$

ahol N_n az n -edik energiaszinten lévő atom populációja, N_0 az alapállapotú energiaszinten lévő atomok száma, g_n és g_0 az n -edik, illetve alapállapotú energiaszint statisztikus súlya, E_n és E_0 az n -edik illetve alapállapotú szint energiája, k a Boltzmann-állandó, T az abszolút hőmérséklet. A Boltzmann-egyenlet megadja annak a valószínűségi eloszlását, hogy egy adott atom melyik energiaszinten található. A Boltzmann egyenlet matematika formájában a következő, ha összes semleges atomhoz viszonyítjuk:

$$\frac{N_n}{N^0} = \frac{N_n}{N_0} \frac{g_0}{z(T)}, \quad (4)$$

, ahol $N^0 = N_1 + N_2 + N_3 + \dots$ az összes energiaszinten lévő atomok koncentrációja, $z(T)$ pedig az úgynevezett partíciós függvény vagy állapotösszeg, amely megadja a rendszer mikroállapotainak számát a hőmérséklet függvényében.

$$z(T) = g_0 + g_1 e^{\epsilon_1/kT} + g_2 e^{\epsilon_2/kT} + \dots, \quad (5)$$

ahol $\epsilon_n = E_n - E_0$.

Ennek jelentősége az, hogy az abszorpciós vonalak létrejöttéhez az atomnak vagy molekulának egy gerjesztett energiaállapotra kell felugrania, és az ugrás energiájának megfelelő frekvenciájú fotont fog elnyelni.

A Saha-egyenlet az ionizált atomok számát adja meg a semleges atomok számához viszonyítva:

$$\frac{N_e N^+}{N^0} = \frac{2}{h^3} \frac{z^+(T)}{z(T)} (2\pi m_e kT)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-\zeta}{kT}}, \quad (6)$$

ahol N_e a szabad elektronok száma, N^+ az atomgyökök száma, N^0 a neutrális atomok száma a rendszerben. ζ az ionizációs energia, z^+ az ionizált atomok állapotösszege, h a Planck-állandó, m_e az elektron tömege.

A vonalak erősségét a Boltzmann- és Saha-egyenletek egyensúlya adja meg. A vonal-erősséget alapvetően az atomok oszcillátorerőssége, az adott kémiai elem abundanciája, illetve a vonalat létrehozó kvantumállapot populációja befolyásolja. A maximális vonal-erősség feletti hőmérsékleten a vonalgyengülést az okozza, hogy az atomok ionizálódnak, a neutrális atomok mennyisége csökken, ezáltal kevesebb fotonelnyelés történik. Ezt a jelenséget először a hidrogén vonalainál figyelték meg. Az n -edik energiaszintű atomok populációja a teljes populációhoz képest:

$$\frac{N_n}{N} = \frac{\frac{g_n}{z^0} e^{-\epsilon_n/kT}}{1 + \frac{1}{h^3 N_e} \frac{2z^+}{z^0} (2\pi m_e kT)^{\frac{3}{2}} e^{-\zeta/kT}}, \quad (7)$$

,ahol N a teljes atompopuláció nagysága, N_n az n -edik energiaszintű atomok populációja, z^0 a neutrális atomok állapotszáma.

A fentiekből következik, hogy az opacitások csak az elemgyakoriságtól, a lokális hőmérséklettől és a sűrűségtől függenek. Emellett az 1D modellek bevezetnek egy mikro-turbulencia nevű paramétert (v_{turb}), amely a fotonok szabad úthosszánál kisebb turbulenciák miatt bekövetkező Doppler-effektus által okozott szélesedést veszi figyelembe. Ezt a paramétert a számolások során úgy kell megadni, hogy a kapott spektrumvonalak a lehető legjobban visszaadják a méréseket. A fenti kifejtés alapján tehát kimondható, hogy az opacitás a hullámhossz, a lokális hőmérséklet, a sűrűség (nyomás) és a mikro-turbulencia függvénye: $\kappa \equiv \kappa(\lambda, T, p, v_{turb})$.

Ha az elempopulációk ismertek, a kontinuum- és vonalopacitások kiszámíthatóak. A spektrumszintézis számításgényesebb része a vonalopacitásokban rejlik, azon okból kifolyólag, hogy a molekulák esetén rengeteg vonal található a spektrumban, amelyekre ki kell számítani a vonalabszorpciót.

A molekulavonalaknak három típusa van: az elektronátmenetektől származó vonalak, a rezgési vonalak, illetve a rotációs vonalak. Az elektronátmenetektől származó vonalak

mechanizmusa megegyezik az atomi vonalakéval: az elektronok energiszintjei közti átmenetnek megfelelő energiájú fotont nyelnek el. Ezek a vonalak analitikusan nem számíthatók ki, numerikus megoldások léteznek csak. Elektronátmenetektől származó vonalak az ultraibolya tartománytól egészen infravörösre megtalálhatóak. A rotációs vonalak a molekulák forgási energiaváltozása során történő fotonelnyelésből származnak. Ezek a vonalak általában a távoli infravörös tartományban találhatók, alacsonyabbak az energiaszintek közti különbségek, mint az elektronátmenetek esetén. A rezgési vonalak esetén a rotációs állapot mellett a molekula rezgési állapota is megváltozik. Ezek a vonalak a közeli infravörös tartományban helyezkednek el.

3. Rövid leírás a Synspec/Synple programról

Ez a fejezet azzal a céllal készült, hogy a spektrumszintézis alapjait el lehessen sajátítani, mivel magyar nyelvű útmutató eddig nem készült. A Synple egy Python interfész a Synspec nevű, spektrálszintézist végző kódhoz és az ehhez kapcsolódó segédprogramokhoz. Képes az olyan LTE-modellekkel számolni mint a Kurucz, MARCS, Phoenix vagy TLUSTY, illetve ismeri az NLTE TLUSTY modellt is. A megfelelő kontinuum- és vonalopacitások alapértelmezetten benne vannak, a kémiai abundanciákat és mikroturbulens sebességeket pedig a megadott modellek biztosítják, de változtathatók is szükség szerint.

A csillagspektrumok kiszámításának legfontosabb lépése a radiatív transzferegnyet megoldása, amely a Synspec esetében a következőképpen néz ki:

$$\cos \Theta \frac{dT_\nu}{dz} = \eta_\nu - \kappa_\nu I_\nu(\Theta) + \int_0^\pi I_\nu(\Theta') \phi(\Theta') \sin \Theta' d\Theta', \quad (8)$$

ahol I_ν a fajlagos intenzitás, amely leírja a sugárzási teret. (a függőlegessel egy Θ szöget bezáró irányban egységnyi felületen egységnyi frekvenciatartományban mennyi sugárzási energia halad át). κ az opacitás (az elnyelt energia hányada hosszegységenként), η az emisszivitás (emittált energia, az intenzitással megegyező dimenziójú), ϕ pedig a szórási függvény (a Θ' irányból Θ irányba szórt fotonok száma).

Ha I_ν ismert, integrálásával megkaphatjuk a sztelláris fluxust:

$$H_\nu = \int_0^\pi I_\nu(\Theta) \cos(\Theta) \sin(\Theta) d\Theta. \quad (9)$$

Ezt aztán különböző nagyléptékű atmoszferikus turbulenciákat, rotációt és instrumentális profilt leíró egyenletekkel konvolválhatjuk.

A radiatív transzferegnyet megoldása előtt meg kell adnunk a csillag atmoszférájának fizikai modelljét annak érdekében, hogy κ , η és ϕ kiszámítható legyen. Ezek a modellek megadják a légkör termodinamikai állapotjelzőit (például hőmérséklet és sűrűség) a magasság függvényében, illetve a kémiai összetételt. Ez a modellatmoszféra az egyik bemeneti információ, amire a Synple-nek szüksége van. Természetesen egy részletes spektrum számításához szükségünk van a fény-anyag kölcsönhatások alapvető fizikai paramétereire (fotoionizációs hatáskeresztmetszetek, az atomi és molekuláris átmenetek valószínűségére, átmenetek energiái és a csillapítási konstansok), de ezen adatok egy általános gyűjteményét tartalmazza a Synspec egy standard formátumban a könnyű módosíthatóság érdekében.

A radiatív transzferegnyet megoldásához többféle publikus kód létezik, viszont a legtöbb mély ismereteket kíván a kapcsolódó fizikáról, illetve nehézkes a használatuk.

A Synple egy egyszerű csomagolása a FORTRAN nyelven írt Synspec kódnak, és öröklí az összes közelítést annak, például a hidrosztatikai egyensúlyt. Az általános fizikai adatok, amelyeket a Synple tartalmaz, a legtöbb megfigyelt csillagra használhatók. A felhasználónak ügyelnie kell arra, hogy milyen adatok lehetnek szükségesek a bemeneti atmoszférák számolásához, és ezek inkonzisztensek lehetnek azzal, amelyet a Synple átvett a modellből. Alapértelmezett módon a kémiai összetétel és a mikroturbulencia a modell-atmoszféra felépítésekor használt bemenetét a Synple is használja, de ez a felhasználó által változtatható.

3.1. A Synple telepítése

A Synple a github-on található a következő linken², és a

```
git clone https://github.com/callendeprieto/synple synple
```

paranccsal, vagy a weboldalon találhaó zip fájl letöltésével juthatunk hozzá.

A felhasználó által telepített Python (3.x)-nak rendelkeznie kell a `subprocess`, `numpy` és `scipy` modulokkal. A telepítéshez szükséges egy Fortran fordító és az alapértelmezett GNU C fordító. A telepítés a következő módon történik:

```
cd synple/synspec ; make ; cd ../..
```

Az atomi és molekuláris vonallisták meglehetősen nagy fájlok és külön le kell tölteni azokat, a telepítésük:

```
cd synple/linelists ; make ; cd ../..
```

Az automatikus letöltés `wget`-et igényel, vagy a vonallisták manuálisan letölthetőek³ és a `synple/linelist` mappába be kell másolni azokat.

A `synple`-t láthatóvá kell tenni a Pythonnak úgy, hogy hozzá kell adni a `synple` mappáját a `PYTHONPATH` változóhoz. Ha például a felhasználó a `home` mappába helyezte a `synple`-t, akkor ezt a következő shell-parancs beírásával teheti meg.

```
bash: export PYTHONPATH='PYTHONPATH:$HOME/synple'
csh: setenv PYTHONPATH = 'PYTHONPATH:$HOME/synple' .
```

Az atomi- és molekula-vonallisták csomagja, amit a `synple v1.1` biztosít, legalább 12 GB.

3.2. Példa a Synple használatára

Ebben a példában a Kurucz-féle szoláris modellt használjuk. A spektrumnak egy kis részét generáljuk le a Ca I 6162 Å vonal körül. Az `ipython` indítása után a standard szintézisrutint importáljuk:

```
$ ipython
Python 3.6.8 (default, Jan 14 2019, 11:02:34)
Type 'copyright', 'credits' or 'license' for more information
IPython 7.4.0 -- An enhanced Interactive Python. Type '?' for help.
```

```
In [1]: from synple import syn
```

²<https://github.com/callendeprieto/synple>

³<ftp://carlos.allende@ftp.ll.iac.es/linelists>

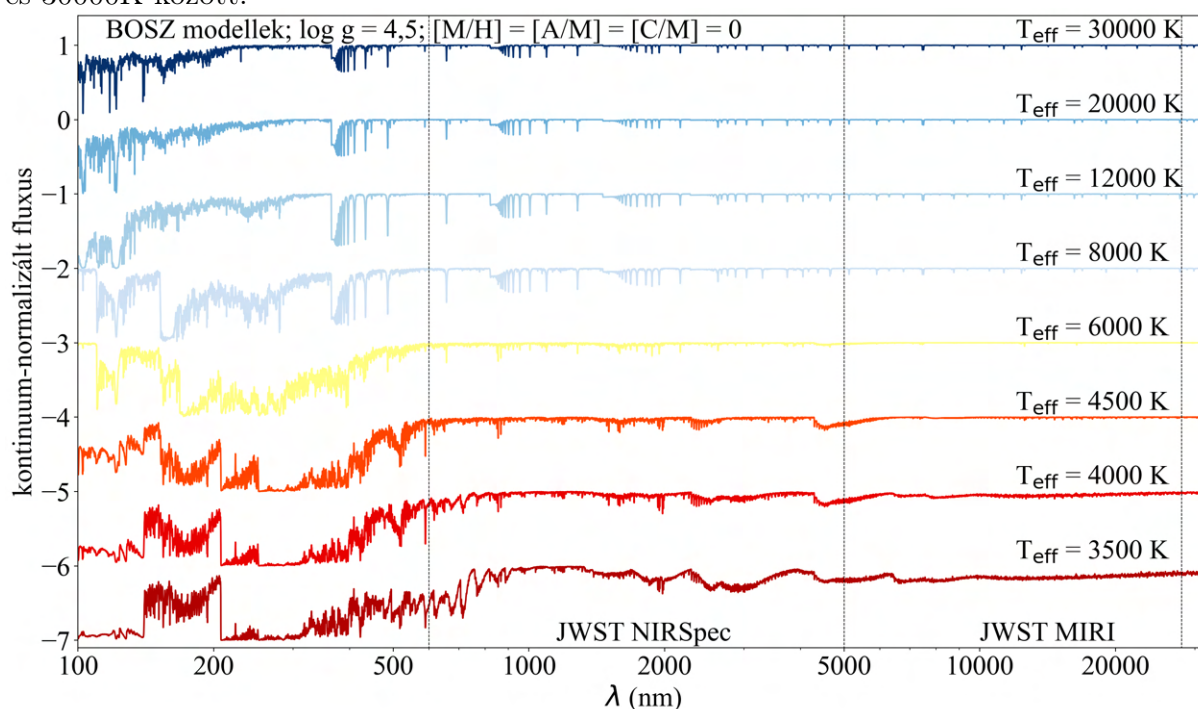
Ezután számíttassuk ki a `ksun.mod` modellatmoszféra spektrumát a 6160 és 6164 Å tartományban.

```
In [2]: wave, flux, cont = syn('ksun.mod', (6160,6164) )
teff,logg,vmicro= 5777.0 4.437 2.0
syn ellapsed time 48.8003294467926 seconds
```

Ezzel meg is van a spektrum. A `syn` rutin három numpy-tömböt hoz létre, amelyekben a hullámhosszak (`wave`), a fluxusok (`flux`, H_λ) és a kontinuum fluxusok (`cont`) vannak. Egy kontinuumnormalizált fluxust a `matplotlib` segítségével így ábrázolhatjuk:

```
In [4]: plot(wave,flux/cont)
```

A 3. ábrán a BOSZ-modellek kontinuumnormalizált spektrumsorozata látható 3500 K és 30000K között.



3. ábra. Elméleti spektrumok nagy effektív hőmérsékleti tartományban. Az ábra jól bemutatja, hogy a vonalerőségek a csillag felszíni hőmérsékletétől erősen függenek. A grafikon nem a saját számolásom eredménye, a BOSZ spektrális adatbázisból származik (Ralph Bolin és mtársai, 2017).

3.3. A mikroturbulencia változtatása

A legtöbb modellatmoszféra hidrosztatikai egyensúlyban van, tehát a nyomás egyensúlyt tart a gravitációval, ami a legtöbb esetben jó közelítést ad. A valódi atmoszférákban azonban a turbulenciákat, konvekciókat, meridiális cirkulációkat is modellezni kell. A turbulens mozgások modellezésének hiányában a számolt vonalprofilok keskenyebbek lesznek, mint az észlelték. Ennek az egyik megoldása az úgynevezett mikroturbulencia, amely az abszorbeáló részecskék kisléptékű mozgásából származik. A `synple` automatikusan beleveszi a modellben tárolt mikroturbulenciát, de ez az érték felülírható a `vmicro` paraméterrel:

```
In [5]: wave2, flux2, cont2 = syn('ksun.mod', (6160,6164), vmicro = 1. )
teff,logg,vmicro= 5777.0 4.437 1.0
```

3.4. Egyéb vonalszélesedés

A spektrumvonalak számolásánál több vonalkiszélesedési mechanizmust is figyelembe kell venni, ezek a határozatlansági reláció, a mikroturbulencia, az abszorbeáló atomok és molekulák hőmozgása, illetve a szabad elektronokkal és hidrogénnel való ütközéseik miatti kiszélesedések. Mindezeket a tényezőket a synple-ben figyelembe lehet venni. A vonalszélesedés egyéb forrásai:

- **Makroturbulencia:** Amíg a *vmicro* megoldja a kisléptékű sebességtereket, addig a makroturbulenciával a foton méreténél nagyságrendekkel nagyobb léptékű sebességterek hatását lehet modellezni. Ez általában egy Gauss-féle sebességfüggvénnyel való konvolválást jelent, amelyet a Synple a *vgconv* rutinnal végez.
- **Rotáció:** A csillagok rotációja szélesíti a spektrális profilokat. Azért, hogy ezt a Doppler-hatást numerikusan figyelembe vegyük, a Synple a forgás nélküli fluxust konvolválja a megfelelő függvénnyel. Ez a *rotconv* rutinnal van implementálva. A számolásaim során a rotációt nem vettem figyelembe.
- **Instrumentális profil:** A műszerek eltorzítják a csillag spektrumát, mivel az konvolválódik az instrumentális profillal. Ha a felbontóképesség állandó, ez a hatás általában egy makroturbulenciával közelíthető, amelynél a Gauss-profil szélessége állandó a sebességtérre. Lehet a félértékszélesség állandó, ekkor a felbontás a λ függvényében változik, illetve a felbontás is lehet állandó, ekkor a konvolválás a logaritmikus hullámhossztéren történik, és a félértékszélesség fog változni, amelyet a Synple a *vgconv* rutinnal kezel. A munkám során ez utóbbit alkalmaztam.

A következő példa demonstrálja, hogyan konvolváljunk rotációs profillal ($v \sin i = 5 \text{ km/s}$, egy konstans felbontású ($\text{FWHM} = 0,2 \text{ km/s}$) Gauss-profillal, majd mindkettővel:

```
In [10]: from synple import rotconv, lgconv
In [11]: wave2, flux2 = rotconv(wave, flux/cont, 5.)
In [12]: wave3, flux3 = vgconv(wave, flux/cont, 0.2)
In [13]: wave4, flux4 = vgconv(wave2, flux2, 0.2)
```

A számolásaim során a *vgconv* rutint a következő módon alkalmaztam:

```
wave2, flux2 = vgconv(wave, flux, 15, 3)
wave2, cont2 = vgconv(wave, cont, 15, 3)
```

Az első sorban a hullámhossz- és fluxustömböket konvolválom $\log \lambda$ térben egy 15 km/s félértéktékszélességű Gauss-függvénnyel, utána felbontáselemenként 3 ponton mintavételezem. Ugyanezet a lépést megcsinálom a kontinuumtömbökre is. Így egy $R = 20000$ felbontású spektrumot kaptam.

Ezek a rutinok közvetlenül is implementálva vannak Pythonban. A Synspec-nek van egy társított FORTRAN programja, amely kezeli a rotációs és instrumentális profilokkal való konvolúciót: *rotin*. Úgy is ki lehet ezeket számolni, hogy a *syn* rutinban meg kell adni a *fwhm* és *vrot* paramétereket. Erre példa a fenti értékekkel:

```
In [19]: wave2, flux2, cont2 = syn('ksun.mod', (6160,6164) , vrot = 5.0,
fwhm = 0.2 )
```

3.5. A spektrumszintézis használata a dolgozatban

A molekulavonalak szintetizálásakor az általam számolt hullámhossztartomány 50–32500 nm-ig, azaz az extrém ultraibolyától a távoli infravörösre terjed. Ahhoz, hogy a Synple spektrumot számoljon, az atomi vonallistát mindenképpen meg kell neki adni, és azon felül lehet molekuláris vonallistákkal számolni, amelyekben az atomok és különböző izotópjaik atomfizikai paraméterei találhatóak. Először számoltam egy csak atomi vonallistát tartalmazó spektrumot minden modellre a következő módon:

```
linelist0 = ['gfAT0.19']
```

Ezután kiszámoltam egy olyan spektrumot, amelyben az atomi vonallista, és az egyik molekula van:

```
linelist0 = ['gfAT0.19', 'OH-kmol2020j.20']
```

Itt a `gfAT0.19` az atomos vonallista, `OH-kmol2020j.20` az aktuális molekuláris vonallista, ami ebben a példában az OH.

Maga a számolás az `mpsyn` rutinnal történt, amely annyiban különbözik a `syn` rutintól, hogy képes több szálon futtatni a szintetizálást olyan módon, hogy a hullámhossztartományt felbontja, és a különböző tartományokat külön processzoron számolja. Erre azért van szükség, mert a spektrumszintézis meglehetősen számításigényes, több szálon futtatva is órákig tart. A szkript az `mpsyn`-t a következő módon használta:

```
wave, flux, cont = mpsyn(model, (499,320500), vmicro = micro,  
linelist = linelist0, nthreads=8)
```

Az `mpsyn` hasonló módon kéri a változókat, mint a `syn`, a `model` változóba lehet a modell-atmoszférákat megadni egy listában, amin végig fog futni a Synple. A hullámhossztartományt tuple-ként kell megadni, és 499 Å-tól fut, a későbbi interpoláció megkönnyítésének érdekében. A `vmicro` továbbra is a mikroturbulencia, amely az összes számolásomban 2 km/s volt. A `linelist` argumentumban vannak benne a fent definiált vonallisták, a `nthreads` pedig azt szabályozza, hogy a szintézis hány szálon fusson.

A számolásaim során a MARCS modellatmoszférákat (Gustafsson és mtársai, 2008) használtam. A MARCS modellek egydimenziós LTE modellek, amelyek plánparalel és szférikus geometriával is rendelkezhetnek. A plánparalel atmoszférák a törpecsillagok légkörét, míg a szférikus atmoszféramodellek az óriáscsillagok légkörét közelítik meg megfelelően. A munkám során csak szoláris metallicitással, a következő felszíni hőmérséklet és $\log g$ rácson számoltam:

- $T_{\text{eff}} = 2800 \text{ K}, 3000 \text{ K}, 3200 \text{ K}, 3500 \text{ K}, 4000 \text{ K}, 4500 \text{ K}, 5000 \text{ K}, 5500 \text{ K}, 6000 \text{ K}, 7000 \text{ K}, 8000 \text{ K}$
- $\log g = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, azonban 6000 K-től a magasabb hőmérsékletek felé $\log g = 0, 7000 \text{ K-től } \log g = 1$ és 8000 K esetében $\log g = 2$ modellekkel nem számoltam, mivel ilyen paraméterekkel rendelkező csillagok nem léteznek.

Miután a spektrumokat a program legenerálta, mintavételeztem és interpoláltam azokat, a későbbi használatot megkönnyítve. A kapott spektrumok logaritmikus hullámhossztéren lettek konvolálva, $R = 20000$ felbontással. Az $R = 20000$ felbontás kiválasztásának oka az, hogy ezen felbontás környékén sok nagyfelbontású spektrográf működik.

4. Molekulavonalak viselkedésének analízise

4.1. Áttekintés

A munkám során összesen 23 molekula vonalait számítottam ki az összes modell-atmoszférára 50 nm és 32500 nm között, amelyek a következők: AlH, AlO, C₂, CaH, CaO, CH, CN, CO, CrH, FeH, H₂, H₂O, MgH, MgO, NaH, NH, OH, OH⁺, SiH, SiO, TiH, TiO, VO. Az AlH és a TiH esetén az általam vizsgált paraméterterben abszorpciós vonalakat nem találtam. A vizsgálatom során a molekulavonalak effektív hőmérséklettől való függését 2 különböző log g mellett vizsgáltam: fiatal fősorozati csillagokban, azaz log $g = 5$ esetben, illetve óriáscsillagoknál, azaz log $g = 0$ mellett. A vonalak log g függését azon a hőmérsékleten vizsgáltam, ahol a vonalak a legerősebbek, vagy ahol nagy eltérést tapasztaltam fősorozati és óriáscsillagokban lévő vonalak erőssége között.

A grafikonokat úgy készítettem, hogy a molekuláris és atomi vonalakat tartalmazó fluxusokat elosztottam a atomi vonalakat tartalmazó fluxusokkal. Az összes spektrum azonos hullámhosszbeosztásokra van interpolálva, ezért lehet ezt az osztást pontonként elvégezni.

Az 1. és 2. táblázatban az vizsgált molekulákhoz használt vonallisták láthatóak, illetve a hozzájuk tartozó hivatkozások. A legtöbb molekula esetén a vonallisták Robert L Kurucz weboldalán⁴ találhatóak. A H₂O és a TiO esetén a molekulák az EXOMOL projekt weboldalán⁵ találhatóak.

1. táblázat. Az általam vizsgált molekulák listája, a dolgozat során használt jelöléssel. A második sorban a használt vonallisták vannak. A harmadik sorban a vonallistát létrehozó cikkekre hivatkozok.

Molekula jele	Molekula-vonallisták	Hivatkozások
AlH	molecules/alh/alhax.asc molecules/alh/alhxx.asc	Yurchenko és mtársai, 2018
AlO	molecules/alo/alopatrascu.as	Patrascu és mtársai 2005
C ₂	molecules/c2/c2dabrookek.asc linelists/linesmol/c2ax.asc linelists/linesmol/c2ba.asc linesmol/c2ea.asc	Brooke és mtársai, 2012
CaH	molecules/cah/cah.asc	Yadin és mtársai, 2012, Shayesteh és mtársai 2013, Weck és mtársai, 2003, Li és mtársai, 2012, Gustavsson és mtársai, 1985
CaO	molecules/cao/caoyurchenko.asc	Yurchenko és mtársai, 2015
CH	molecules/ch/chmasseron.asc	Masseron és mtársai, 2014
CN	molecules/cn/cnaxbrookek.asc molecules/cn/cnbxbrookek.asc molecules/cn/cnxx12brooke.asc	Brooke és mtársai, 2014
CO	molecules/co/coax.asc linelists/linesmol/coxx.asc	http://kurucz.harvard.edu

⁴<http://kurucz.harvard.edu/>

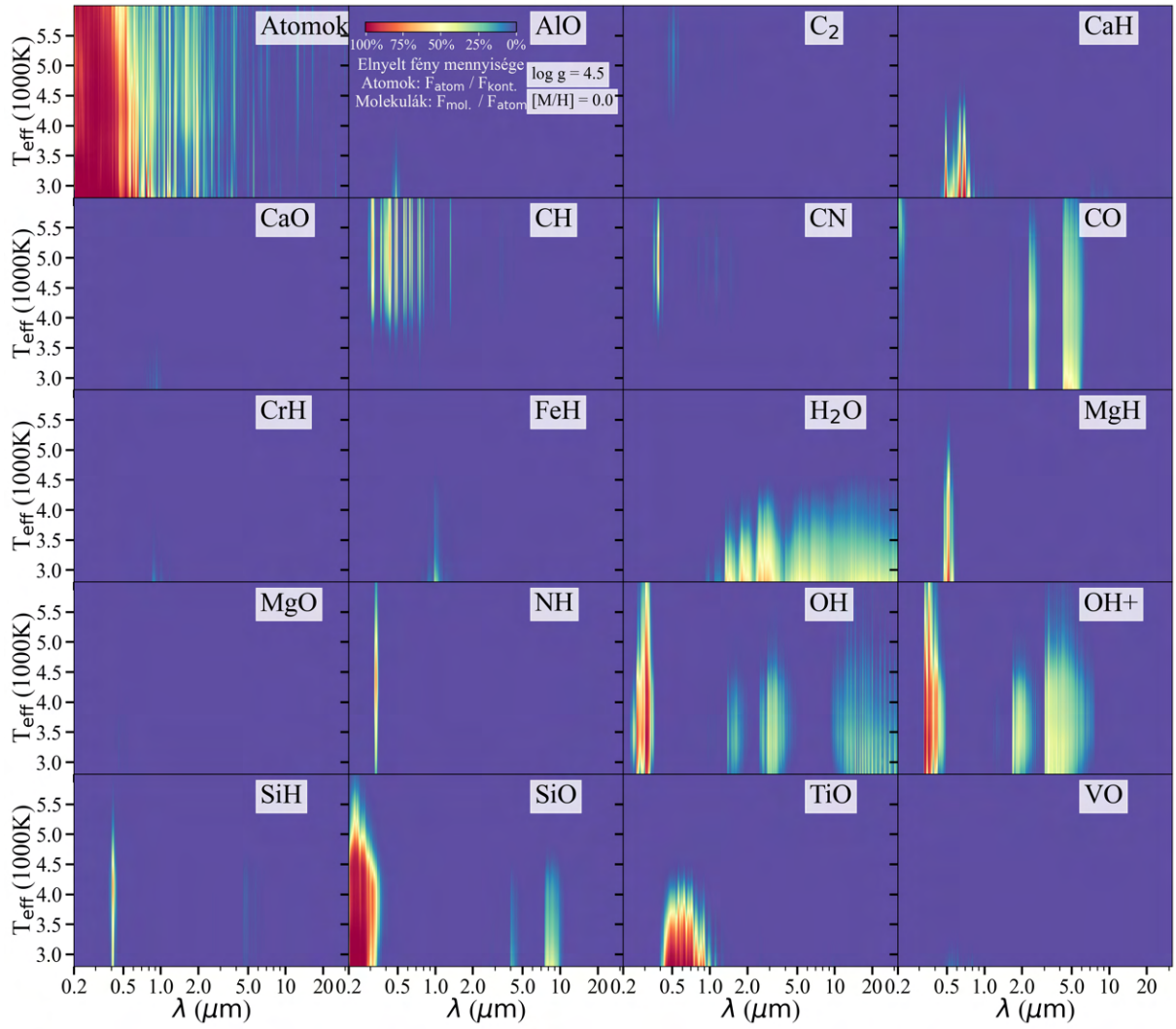
⁵<https://www.exomol.com/data/molecules/>

2. táblázat. Az 1. táblázat folytatása

Molekula jele	Molekula-vonallisták	Hivatkozások
CrH	molecules/crh/crhaxbernath.asc	Bauschlicher és mtársai, 2001 Burrows és mtársai, 2002
FeH	molecules/feh/fehfx.asc	Dulick és mtársai, 2003
H ₂	linelists/linesmol/h2.asc linelists/linesmol/h2bx.asc linelists/linesmol/h2cx.asc molecules/h2/h2xx.asc	http://kurucz.harvard.edu
H ₂ O	/H2O/1H2-16O.POKAZATEL	Barton és mtársai, 2017a,b
MgH	molecules/mgh/mgh.asc	GharibNezhad és mtársai, 2013 Shayesteh és mtársai, 2007 Hinkle és mtársai, 2013 Yadin és mtársai 2012
MgO	molecules/mgo/mgodaily.asc	Daily és mtársai, 2002
NaH	molecules/nah/nahrivlin.asc	Rivlin és mtársai, 2015
NH	linelists/linesmol/nh.asc	http://kurucz.harvard.edu
OH	molecules/oh/ohupdate.asc	http://kurucz.harvard.edu
OH ⁺	molecules/ohplus/ohplusax.asc molecules/ohplus/ohplusxx.asc	Hodges és mtársai, 2018
SiH	molecules/sih/sihaxsightly.asc molecules/sih/sihxxsightly.asc	Yurchenko és mtársai, 2018
SiO	linelists/linesmol/sioax.asc linelists/linesmol/sioex.asc linelists/linesmol/sioxx.asc	http://kurucz.harvard.edu
TiH	molecules/tih/tih.asc	Burrows és mtársai, 2005
TiO	/molecules/TiO/	McKemmish és mtársai, 2019
VO	molecules/vo/vomyt.asc	McKemmish és mtársai, 2016

A 4. ábrán azon 19 molekulának az effektív hőmérséklettől való függése látható logaritmikus hullámhossztéren, amelyek erősebb abszorpciós sávokkal rendelkeznek. A felszíni nehézségi gyorsulásra egy interpolált grafikonon, mivel a legtöbb fősorozati csillagnak ez a felszíni gyorsulása, azonban erre a $\log g$ értékre nem számoltam külön. Az effektív hőmérsékletek 2 K lépésközzel lettek interpolálva a rácspontok között. A vonalak erőssége egy színskálán lett definiálva. Az 5. ábrán ugyanezen molekuláknak a vonalai láthatóak, azzal a különbséggel, hogy $\log g = 0$, azaz óriáscsillagokról van szó. A két ábrán található vonalak viselkedéséről általánosságban elmondható, hogy a törpecsillagokban a vonalak magasabb hőmérsékleti tartományokban is megjelennek. A legjelentősebb vonalakat létrehozó molekulák a következők: CH, CN, CO, H₂O, MgH, NH, OH, OH⁺, SiH, SiO, TiO. Ezeket a molekulákat részletesen is tárgyalni fogom. A gyengébb vonalakat létrehozó molekulák vonalairól az alábbiak mondhatóak el.

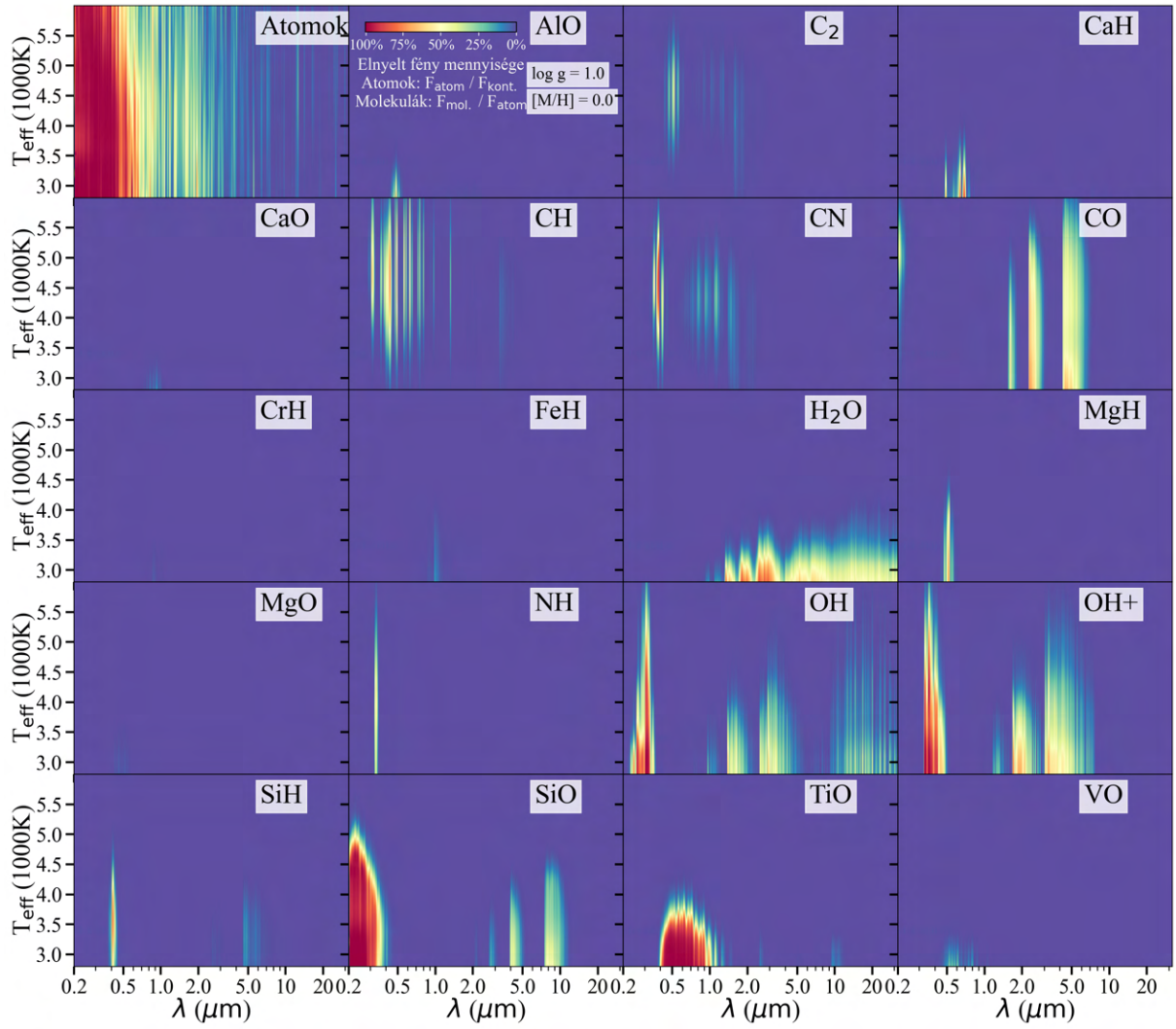
- Az AlO 4000 K felett tűnik el, a vonalai 500 nm körül találhatóak. Ezek a vonalak óriáscsillagokban erősebbek, de alacsonyabb hőmérsékleten tűnnek el, mint fősorozati csillagok esetén. A vonalak erőssége a hőmérséklet növekedésével csökken.
- A C₂ molekula magasabb hőmérsékletű csillagokban hoz létre vonalakat, 2800 K és 6000 K között láthatóak vonalak és óriáscsillagokban 4500 K-en a legerősebbek. Ezek



4. ábra. Molekulavonalak viselkedése törpecsillagokban. A hullámhossz logaritmikus skálán változik, 0,2-32,5 μm -es tartományban. Az y tengelyen a csillag effektív hőmérséklete van ábrázolva, a vonalak erősségét pedig a szín mutatja.

a vonalak óriáscsillagokban jelentősebbek, az infravörös tartományban is megjelenő vonalcsoportokat alkotnak.

- A CaH alacsony hőmérsékleti tartományokban, 4500 K alatt hoz létre vonalakat, amelyek 450 nm és 1300 nm között találhatók. A vonalak a felszíni nehézségi gyorsulás csökkenésével növekednek, óriáscsillagokban a legerősebbek. A vonalak erőssége a hőmérséklet növekedésével csökken.
- A CaO gyenge vonalakat hoz létre főszorozati és óriáscsillagokban egyaránt, ezek a vonalak 4000 K alatt figyelhetők meg, 700 nm és 1100 nm között találhatók. A vonalak erőssége a hőmérséklet növekedésével csökken.
- A CrH 3500 K felett eltűnik, alatta gyenge vonalakat hoz létre 700 nm és 1300 nm között.
- A FeH vonalai 4500 K alatt figyelhetők meg, 700 nm és 1600 nm között jönnek létre gyenge vonalak.

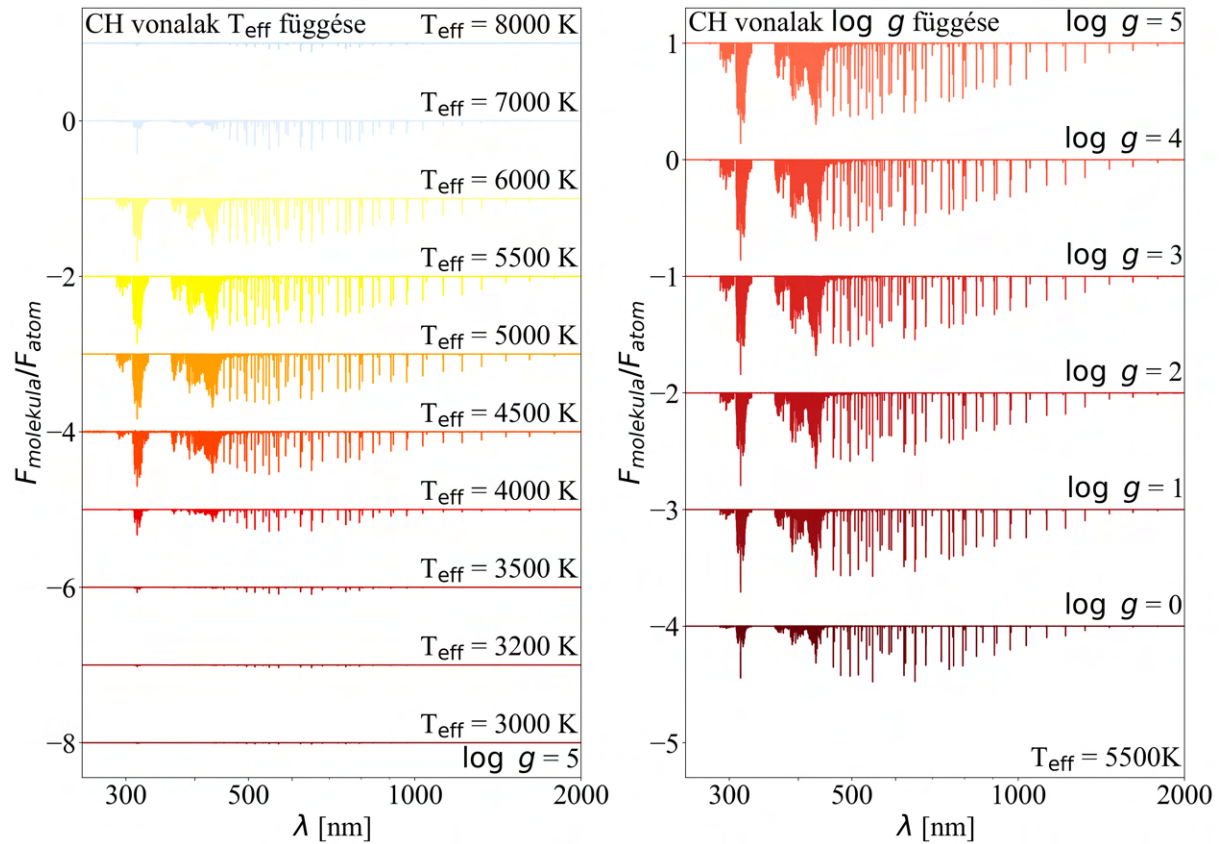


5. ábra. Molekulavonalak viselkedése óriáscsillagokban. A hullámhossz logaritmikus skálán változik, 0,2-32,5 μm -es tartományban. Az y tengelyen a csillag effektív hőmérséklete van ábrázolva, a vonalak erősségét pedig a szín mutatja, minél pirosabb, annál mélyebb a vonal.

- A H_2 vonalai az ultraibolya tartományban találhatók, 90 nm és 200 nm között, amelyek 3500 K felett látszódnak és a hőmérséklet növekedésével erősödnek. Ezen vonalak a felszíni nehézségi gyorsulás növekedésével erősödnek. Az infravörös tartományban egyetlen erős vonal található, amely a hőmérséklet növekedésével gyengül és 5000 K felett tűnik el.
- Az MgO rendkívül gyenge vonalait 4000 K alatt figyelhetjük meg, 400 nm és 600 nm között.
- A VO molekula 3500 K felett tűnik el, vonalai 400 nm és 1100 nm között találhatók, a hőmérséklet és a felszíni nehézségi gyorsulás növekedésével a vonalak erőssége csökken.

4.2. Erősebb vonalakat létrehozó molekulák egyedi vizsgálata

4.2.1. CH



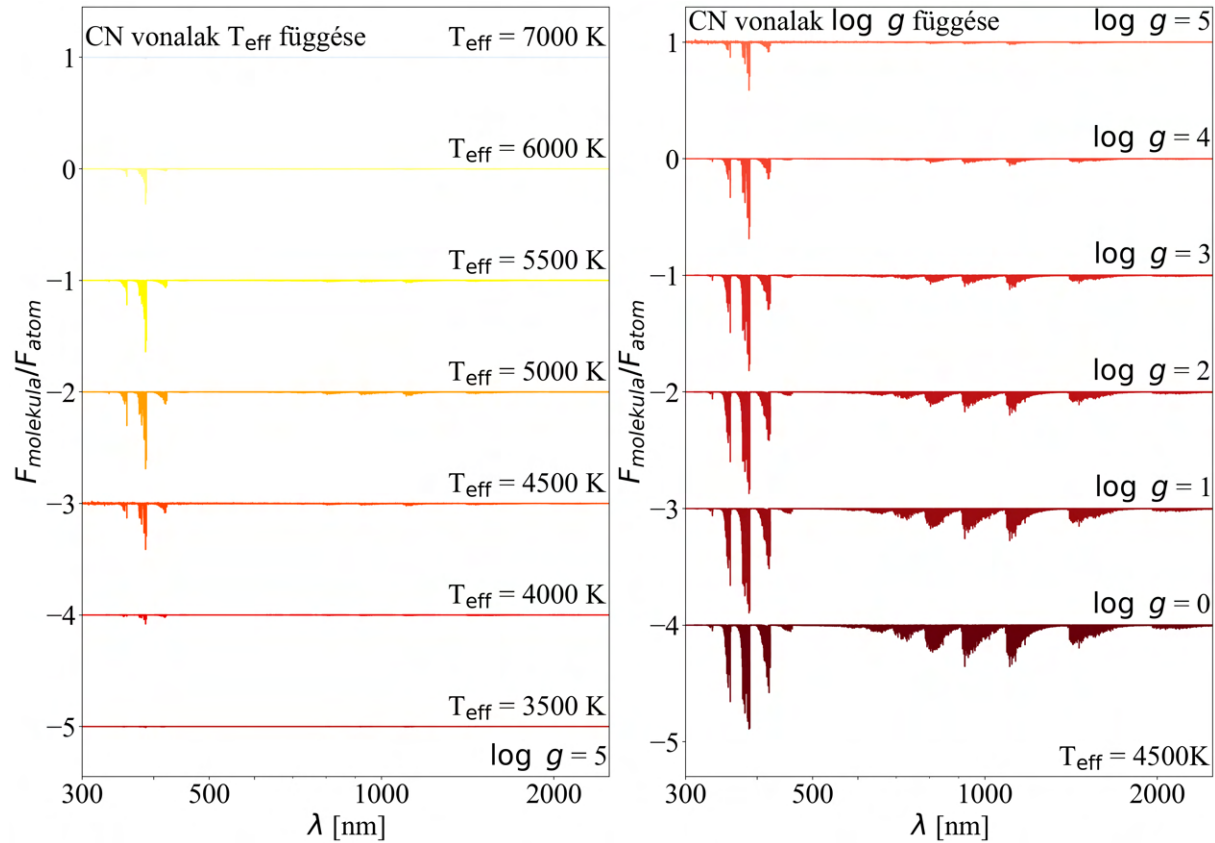
6. ábra. A CH molekula vonalainak függése az effektív hőmérséklettől és a felszíni nehézségi gyorsulástól.

A CH vonalai a hűvös és a Napnál forróbb fősorozati csillagok légkörében is megtalálhatóak, azaz 3000 K és 8000 K között. A vonalerősség maximuma 5500 K-es felszíni hőmérsékletnél található. A vonalerősségek viselkedése a Saha–Boltzmann-egyenlettel magyarázható a legkönnyebben. 5500 K alatt a CH molekulák kisebb hányadának van elég energiája ahhoz, hogy gerjesztődjenek, 5500 K felett pedig kevesebb molekula jön létre a magas hőmérsékleten bekövetkező ionizáció miatt, ezért kisebb lesz a koncentrációja, gyengébbek lesznek a vonalak.

A CH abszorpciósvonalait a 6. ábra alapján három csoportba lehet sorolni. Az első csoport 275 és 325 nm között van, 3200 K és 8000 K között látszódik. A második csoport 350 nm és 450 nm között található, 3500 K és 8000 K között látható. A harmadik csoport 450 nm és 1800 nm között van, 3000 K és 8000 K között található, és gyökeresen eltér az első kettőtől, egymástól távolabb állnak.

A felszíni nehézségi gyorsulás növekedésével a CH vonalai erősödnek. Óriáscsillagokban, azaz $\log g = 0$ esetben a vonalerősségek eltolódnak, alacsony hőmérsékleteken erősebbek, már 2800 K-en is megtalálhatóak, míg 8000 K-en már nem figyelhetők meg. A vonalerősség maximuma 4500 K-es felszíni hőmérsékletnél van. Az infravörös tartományban megjelenik egy újabb vonalcsoport, amely 3300 K és 5500 K között található, és gyengébb a többinél, és 5500 K felett tűnik el.

4.2.2. CN

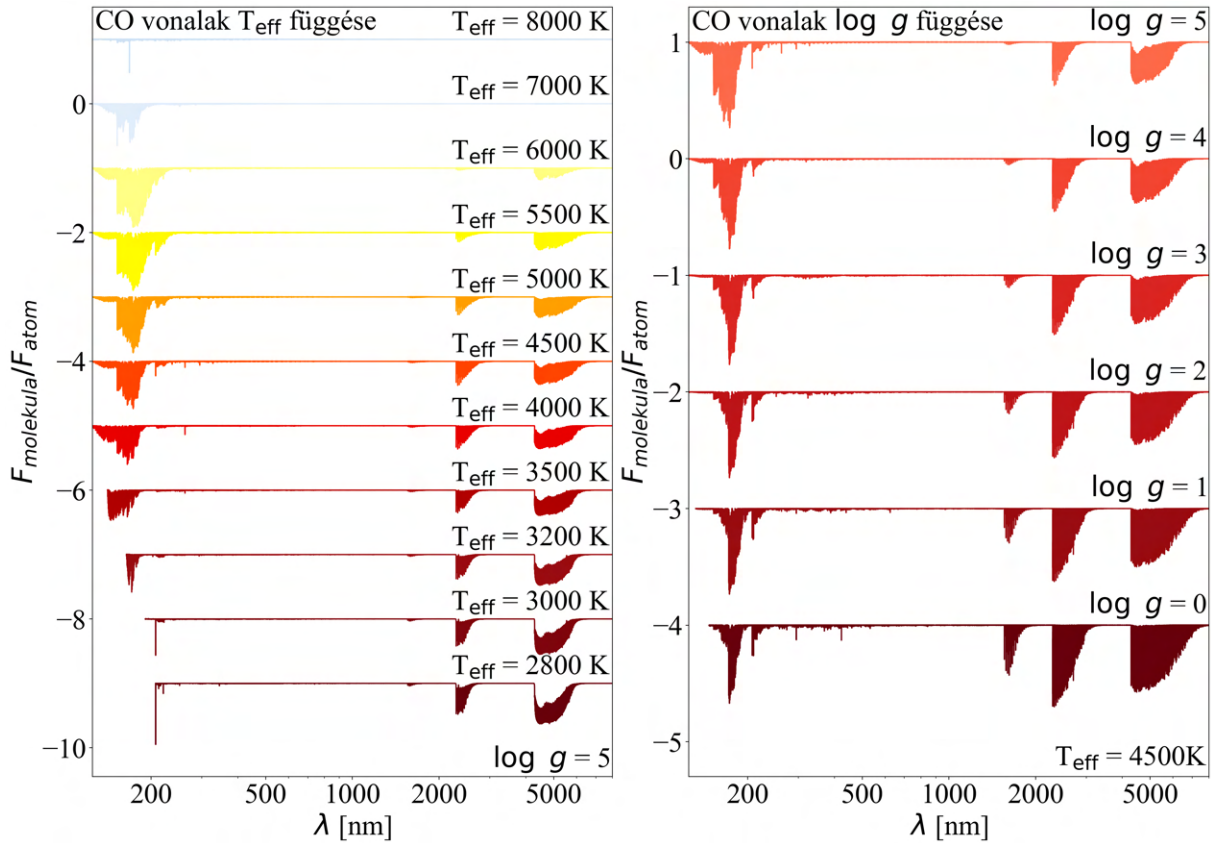


7. ábra. A CN molekula vonalainak függése az effektív hőmérséklettől és a felszíni nehézségi gyorsulástól.

A CN vonalai a látható és az infravörös tartományban találhatók, 350 nm-től 2500 nm-ig. Vonalai főszorozatbeli csillagokban, azaz $\log g = 5$ esetben 3500 K és 6000 K között figyelhetők meg, és 5000 K-nél a legerősebbek. A viselkedés oka az, hogy alacsony hőmérsékleteken a CN molekulák közül kevesebb képes a vonalakat létrehozó energiaátmenetekre, magas hőmérsékleten pedig a molekula felbomlik, a koncentráció csökken, ezáltal gyengülnek a vonalak. A látható tartományban lévő vonalak 350 nm és 450 nm között vannak. Az infravörös tartományban lévő vonalak főszorozatbeli csillagoknál gyengék.

A vonalerőségek a felszíni nehézségi gyorsulás csökkenésével növekednek, ez a viselkedés a 7. ábrán látszódik. Óriáscsillagoknál, azaz $\log g = 0$ esetben a vonalak 2800 K felszíni hőmérsékletű csillagok színekében is megtalálhatóak. Az összes vonalcsoport erősödik, az infravörös tartományban lévő csoportok jelentőssé válnak. Az infravörös tartományban lévő vonalak 2800 K és 5000 K között figyelhetők meg. Az első csoport 550 nm és 750 nm, a második vonalcsoport 750 nm és 800 nm, a harmadik vonalcsoport 800 nm és 900 nm, a negyedik vonalcsoport 900 nm és 1100 nm, az ötödik vonalcsoport 1100 nm és 1400 nm, a hatodik vonalcsoport 1400 nm és 1800 nm, a hetedik vonalcsoport pedig 2000 nm és 2500 nm között található.

4.2.3. CO

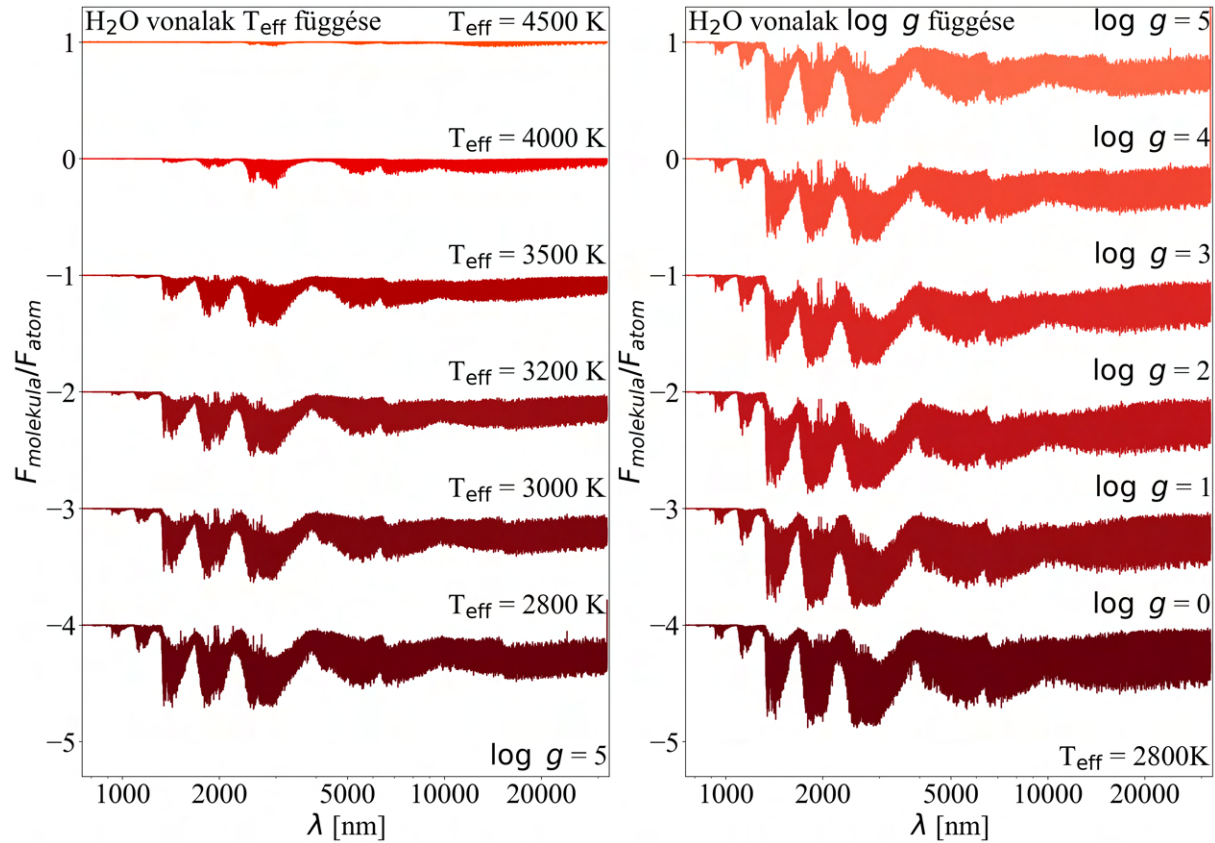


8. ábra. A CO molekula vonalainak függése az effektív hőmérséklettől és a felszíni nehézségi gyorsulástól.

A CO molekula vonalai az összes általam számolt spektrumban megtalálhatóak, erős vonalakat hoz létre az ultraibolya és az infravörös tartományban is. Az ultraibolya tartomány vonalai, amelyek 125 nm-től 250 nm-ig találhatóak, 3200 K és 8000 K között figyelhetők meg, és 5500 K-nél a legerősebbek. A molekulavonalaknak ezen viselkedését a Saha–Boltzmann-egyenlet írja le. Az infravörös tartományban a 8. ábrán látható módon a CO vonalai három csoportot alkotnak. Az első csoport 1500 nm és 1700 nm között található, a második csoport 2300 nm-től 2800 nm-ig tart, a harmadik csoport pedig a 4300 nm és 6600 nm közötti tartományban figyelhető meg. Ezek a vonalak 2800 K-es felszíni hőmérsékletnél a legerősebbek, majd a hőmérséklet növekedésével fokozatosan gyengülnek, az első vonalcsoport 5000 K felett, a másik kettő csoport pedig 7000 K felett tűnik el színeképben.

A felszíni nehézségi gyorsulás csökkenésével a vonalak maximumai eltolódnak az óriáscsillagokban, azaz $\log g = 0$ esetben. Az ultraibolya tartományban lévő vonalak 3500 K és 6000 K között figyelhetők meg, és 5500 K-es felszíni hőmérsékleten a legerősebbek. Az infravörös tartományban található vonalak erősebbek, a maximális vonalerősség 4500 K-nél található. A vonalcsoportok 2800 K-től látszódnak, az első csoport 5000 K-ig látszódik, a második és harmadik csoportok pedig 6000 K-ig figyelhetők meg.

4.2.4. H₂O



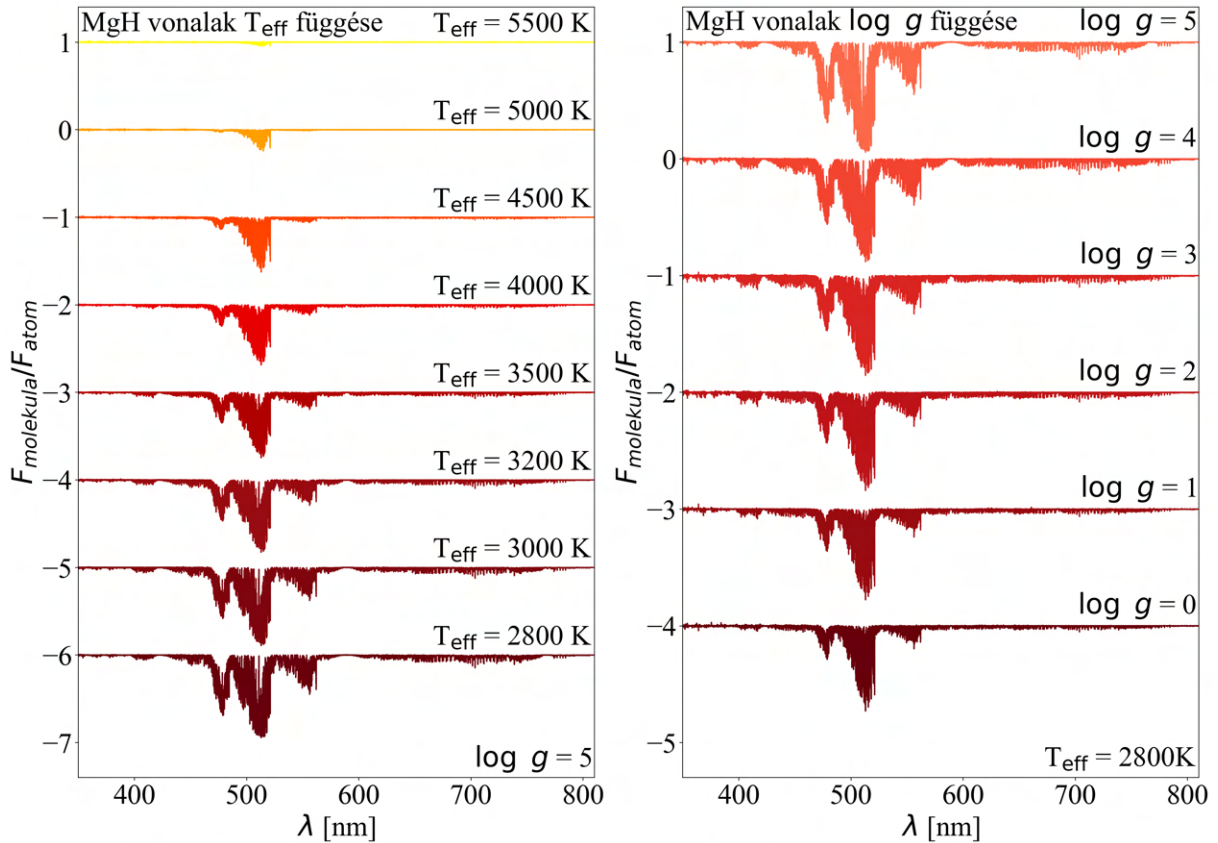
9. ábra. A H₂O molekula vonalainak függése az effektív hőmérséklettől és a felszíni nehézségi gyorsulástól.

A H₂O vonalai a hűvösebb csillagok infravörös színképében jelentősek, a teljes vonalrendszer 900 nm és 32500 nm között figyelhető meg. A vonalak főszorozati csillagokban ($\log g = 5$) 4500 K felett tűnnek el, és 2800 K-es felszíni hőmérsékleten a legerősebbek. Ennek magyarázata abban kereshető, hogy a H₂O molekulák csak alacsonyabb hőmérsékleten jönnek létre a légkörben, a hőmérséklet növekedésével a molekulák felbomlanak, ezáltal gyengülnek a vonalak.

A H₂O vonalai a 9. ábrán látható módon komplex rendszerben állnak, egymással érintkező csoportokban, amelyek lefedik az egész infravörös tartományt. Az első vonalcsoport 900 nm és 1100 nm, a második vonalcsoport 900 nm és 1300 nm, a harmadik vonalcsoport 1300 és 1700 nm, a negyedik vonalcsoport 1700 nm és 2300 nm, az ötödik vonalcsoport 2300 nm és 3900 nm, a hatodik vonalcsoport 3900 nm és 10000 nm, míg a hetedik vonalcsoport 10000 nm és 32500 nm között található.

A felszíni nehézségi gyorsulás csökkenésével a vonalak erőssége növekszik. Óriáscsillagokban, azaz $\log g = 0$ esetben a vonalak 4000 K-ig látszódnak.

4.2.5. MgH



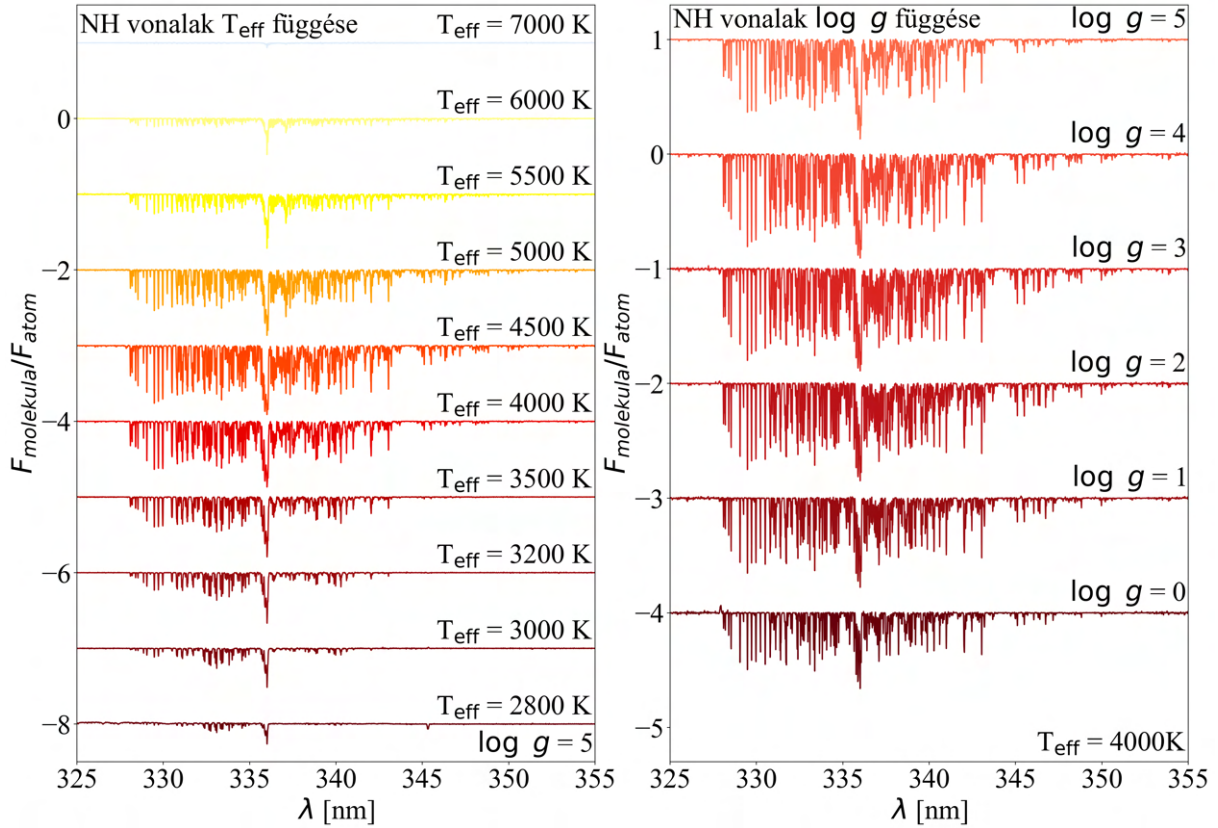
10. ábra. Az MgH molekula vonalainak függése az effektív hőmérséklettől és a felszíni nehézségi gyorsulástól.

Az MgH vonalai 400 nm és 800 nm között találhatóak, azaz a látható és a közeli infravörös tartományban. Ahogy a 10. ábrán megfigyelhető, az MgH vonalai fősorozati csillagokban 5500 K felett tűnnek el, és 2800 K felszíni hőmérséklet mellett a legerősebbek. Ennek magyarázata az, hogy a molekulák alacsony hőmérsékletek mellett jönnek létre nagyobb valószínűséggel, a hőmérséklet növekedésével a molekulák energiája akkorára nő, hogy alkotóelemeikre esnek szét.

A vonalak erőssége a a felszíni nehézségi gyorsulás csökkenésével csökken, a legerősebbek a törpecsillagokban, a leggyengébbek az óriáscsillagokban. Fősorozati csillagokban az infravörös tartományban lévő vonalcsoport, amely 600 nm és 800 nm között helyezkedik el, gyengébb, mint a látható tartományban lévő. Ezek a vonalak 5000 K alatt jelennek meg. A látható tartományban lévő vonalcsoport három fő részre osztható. Az első része, amely 480 nm-nél található, 5000 K felett tűnik el, a második része, amely 590 nm és 525 nm között helyezkedik el és a legerősebb vonalakat adja, 5500 K felett tűnik el, a harmadik része 525 nm és 600 nm között van, és 4500 K felett tűnik el.

Óriáscsillagokban a vonalak alacsonyabb hőmérsékleteken tűnnek el, a legerősebb csoport 4500 K alatt figyelhető meg.

4.2.6. NH



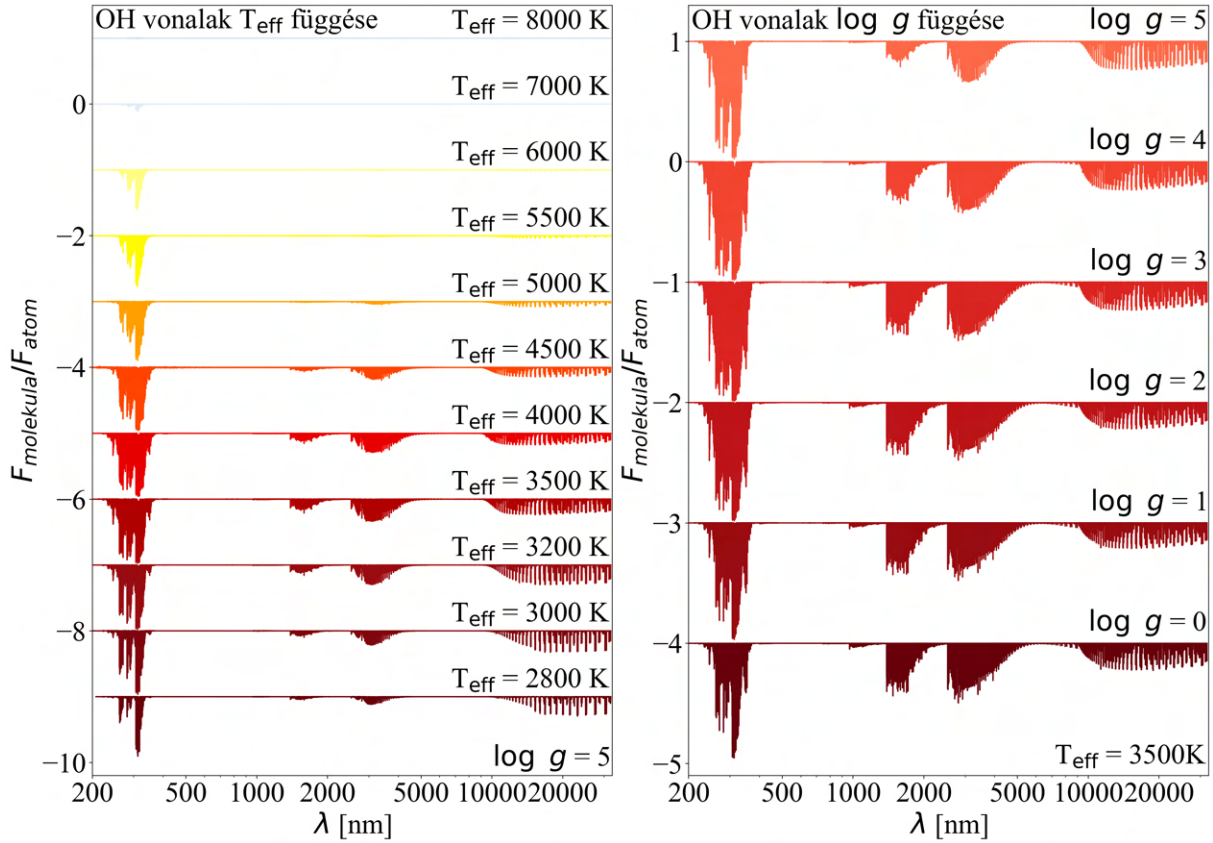
11. ábra. Az NH molekula vonalainak függése az effektív hőmérséklettől és a felszíni nehézségi gyorsulástól.

Az NH molekula a spektrum egy keskeny sávjában hoz létre erős vonalakat, 325 és 355 nm között, azaz a közeli ultraibolya tartományban. Az NH vonalai 2800 K és 7000 K között jelennek meg és 4500 K-nél a legerősebbek, ami a 11. ábrán látszódik. Ezen viselkedést a Saha–Boltzmann-egyenlettel lehet magyarázni. Alacsony hőmérsékleteken az NH nem rendelkezik elég energiával ahhoz, hogy a megfelelő átmenetekhez tartozó fotont elnyelje. Magasabb hőmérsékleteken pedig az NH felbomlik, csökken a koncentrációja, ezáltal kevesebb és gyengébb vonalat hoz létre.

A fősorozatbeli csillagok, azaz $\log g = 5$ esetén a vonalak erősségének hőmérséklettől való függése alapján a következő csoportokat különböztethetjük meg: 325 nm és 333 nm között található az első vonalcsoport, amely 2800 K-től 6000 K-ig jelenik meg, és viszonylag ritkásabb, egyenkénti vonalak figyelhetők meg. A második csoport 333 nm és 336 nm között tűnik fel, amely 2800 K és 6000 K között figyelhető meg, és az első csoportnál erősebb vonalakat tartalmaz. 336 nm körül található egy erős vonalcsoport, amely 7000 K-es felszíni hőmérséklet esetén is megfigyelhető. A negyedik vonalcsoport 336 nm és 344 nm között van, 3000 K-től 6000 K-ig találhatóak benne vonalak. Az ötödik vonalcsoport 344 nm és 355 nm között hoz létre az eddigieknél gyengébb vonalakat, amelyek 4000 K és 6000 K között jönnek létre.

Az NH vonalainak erőssége a felszíni nehézségi gyorsulás csökkenésével az alacsonyabb hőmérsékleti tartományokba tolódik, a vonalak maximális erőssége 2800 K-nél lesz, és 6000 K felett eltűnnek a vonalak.

4.2.7. OH



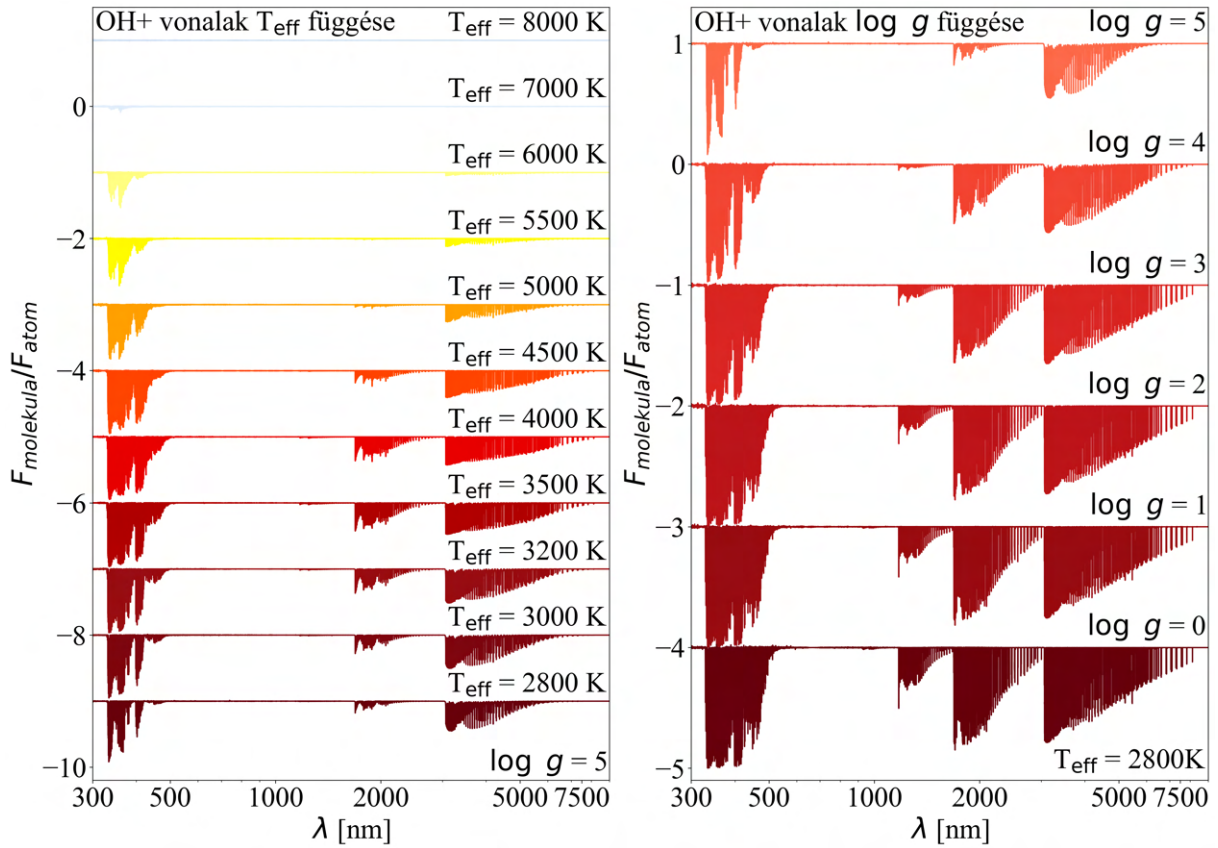
12. ábra. Az OH molekula vonalainak függése az effektív hőmérséklettől és a felszíni nehézségi gyorsulástól.

Az OH molekulák vonalai a csillagok színekében jelentős vonalakat hoz létre 200 nm-től 32500 nm-ig, azaz a közép-ultraibolyától a távoli infravörös tartományig. A vonalak széles hőmérsékleti tartományban megtalálhatóak, egészen 2800 K-től 7000 K-ig és a vonalak maximális erőssége 3500 K felszíni hőmérsékletnél van. Ennek magyarázatát a Saha–Boltzmann-törvényben találhatjuk.

Főorozati csillagokban, amelyeknek spektrumai a 12. ábrán látszódnak, azaz $\log g = 5$ esetben négy vonalcsoport figyelhető meg. Az első vonalcsoport a közeli ultraibolya tartományban található, 200 nm és 400 nm között, a csoportban lévő vonalak 2800 K és 7000 K között jönnek létre. A második csoport a közeli infravörös tartományban található 1400 nm és 2200 nm között, ezek a vonalak 2800 K és 4500 K között figyelhetők meg. A harmadik vonalcsoport 2500 nm és 5000 nm között található, a vonalai 2800 K és 5500 K között jelennek meg. A negyedik vonalcsoport 9100 nm és 32500 nm között látható, a vonalai 2800 K és 6000 K között figyelhetők meg.

A felszíni nehézségi gyorsulás csökkenésével az alacsony hőmérsékleteken létrejövő vonalak erőssége csökken, míg magas hőmérsékleten a vonalerősségek csökkennek. Óriás-csillagokban, azaz $\log g = 0$ esetben a maximális vonalerősség 2800 K-nél figyelhető meg, a hőmérséklet növekedésével fokozatosan gyengül, végül 6000 K felett tűnnek el az OH vonalak. A közeli infravörös tartományban megjelenik két új vonalcsoport, melyek 700 nm és 950 nm között, illetve 950 nm és 1400 nm között találhatóak.

4.2.8. OH⁺



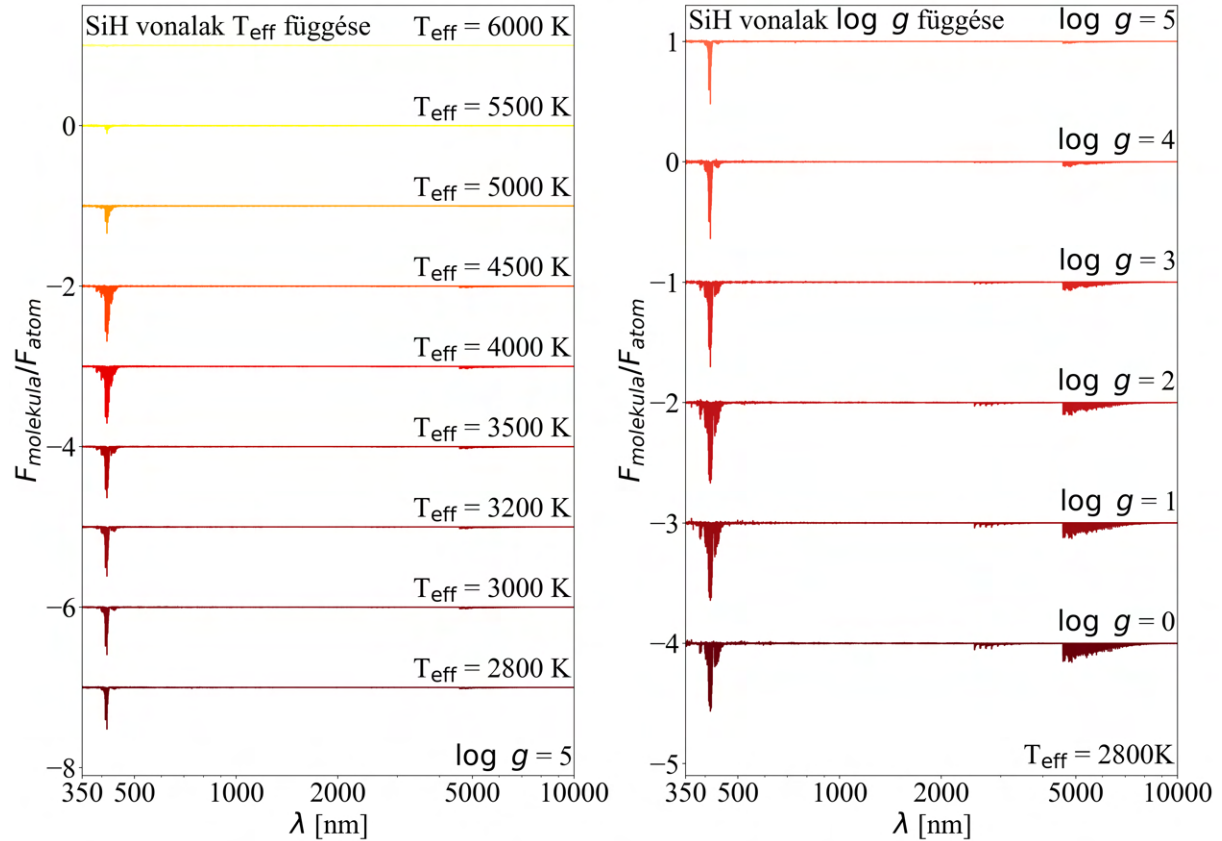
13. ábra. Az OH⁺ molekula vonalainak függése az effektív hőmérséklettől és a felszíni nehézségi gyorsulástól.

Az OH⁺ vonalai megfigyelhetők mind hűvös, mind forró csillagokban, 2800 K és 7000 K között. Erős vonalakat mutat 300 és 500 nm között, azaz a közeli ultraibolya és a látható tartományban. Ezek a vonalak 4000 K felszíni hőmérsékletnél a legerősebbek. Ennek oka a Saha–Boltzmann-egyenletben kereshető. 4000 K alatt a molekulák termikus energiája nem képes olyan állapotba hozni az OH⁺ molekulákat, hogy az adott átmenethez tartozó hullámhosszúságú fotont elnyelje, 4000 K felett pedig elkezdi felbomlani a molekula, ezzel csökken annak koncentrációja, és gyengülnek a vonalak.

Az OH⁺ infravörös tartományban található vonalai meglehetősen összetett módon állnak össze, amelyek a 13. ábrán láthatóak. A vonalak hátrpm csoportba rendeződnek, amelyek érintkeznek. Az első csoport 1200 nm és 1700 nm között van, vonalai a törpecsillagokban gyengék és 4000 K felett eltűnnek. A második csoport 1700 nm és 3050 nm között található, és 5500 K felett tűnik el. A harmadik csoport 3050 nm és 8000 K között van, a legerősebb a három közül, és 6000 K felett tűnik el. Az infravörös tartományban lévő vonalcsoportok 3200 K felszíni hőmérsékletnél a legerősebbek.

A felszíni nehézségi gyorsulás növekedésével az OH⁺ vonalainak viselkedése alapvetően megváltozik. Óriáscsillagoknál a maximális vonalerősség eltolódik, már 2800 K felszíni hőmérsékletnél fellép, és onnantól kezdve magasabb hőmérsékletek felé gyengül, majd 6000 K felett el is tűnik. Az infavörös tartományban lévő vonalcsoportoknál is megfigyelhető ez a jelenség, a maximális vonalerősség 2800 K-nél van. Az első csoport vonalai erősebbek, mint a törpéknél, és 4500 K felett tűnnek el. A második és harmadik csoport alacsony hőmérsékletű vonalai erősebbek, és 5000 K, illetve 6000 K felett tűnnek el.

4.2.9. SiH



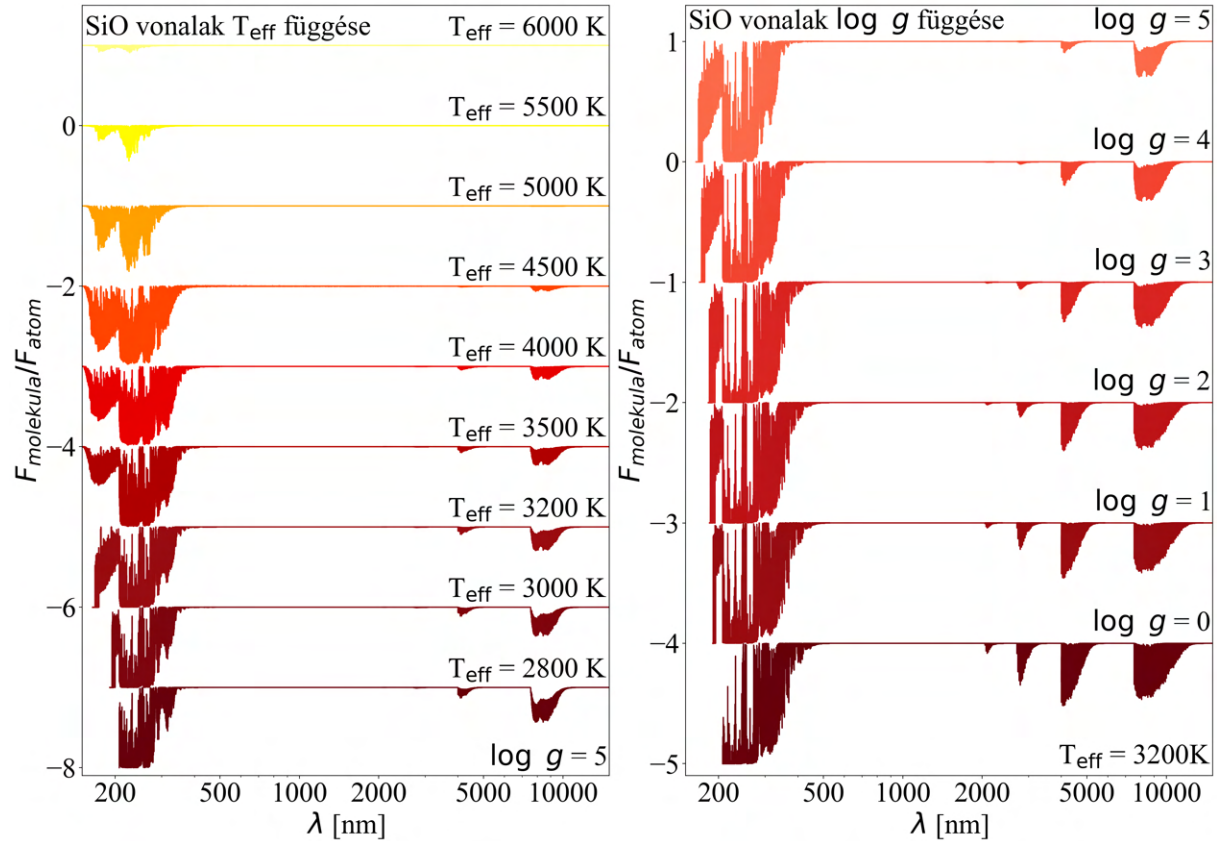
14. ábra. A SiH molekula vonalainak függése az effektív hőmérséklettől és a felszíni nehézségi gyorsulástól.

A SiH molekula vonalai, amelyek a 14. ábrán láthatóak, 400 nm-től 10000 nm-ig találhatóak meg, azaz a látható tartománytól az infravörös tartományig. A SiH vonalak 2800 K-től 5500 K-ig figyelhetők meg, és 4000 K-es felszíni hőmérséklet esetén maximális a vonalerősség. Ennek magyarázata a Saha–Boltzmann-egyenletben található meg, alacsony hőmérsékleten kevés molekula rendelkezik elég energiával ahhoz, hogy az adott átmenet-hez tartozó fotonelnyelés megtörténjen, magasabb hőmérsékleteken a SiH molekula pedig elkezd felbomlani, ezzel a koncentrációja csökken, és gyengülnek a vonalak.

Főszorozati csillagokban, azaz $\log g = 5$ esetben két vonalcsoport figyelhető meg, az egyik a látható tartományban, 400 nm és 450 nm között, a második vonalcsoport pedig 4600 nm és 8000 nm között található, és 2800 K-től 4500 K-ig jelennek meg gyenge vonalak.

A felszíni nehézségi gyorsulás csökkenésével az SiH molkulavonalai alacsony hőmérsékletű csillagok esetén erősödnek, míg magasabb hőmérsékleteken gyengülnek. Az infravörös tartományban található vonalakban jelentős erősödés figyelhető meg, illetve megjelenik egy újabb vonalcsoport, amely 2500 nm és 3800 nm között található, illetve 2800 K és 3500 K között figyelhető meg.

4.2.10. SiO



15. ábra. A SiO molekula vonalainak függése az effektív hőmérséklettől és a felszíni nehézségi gyorsulástól.

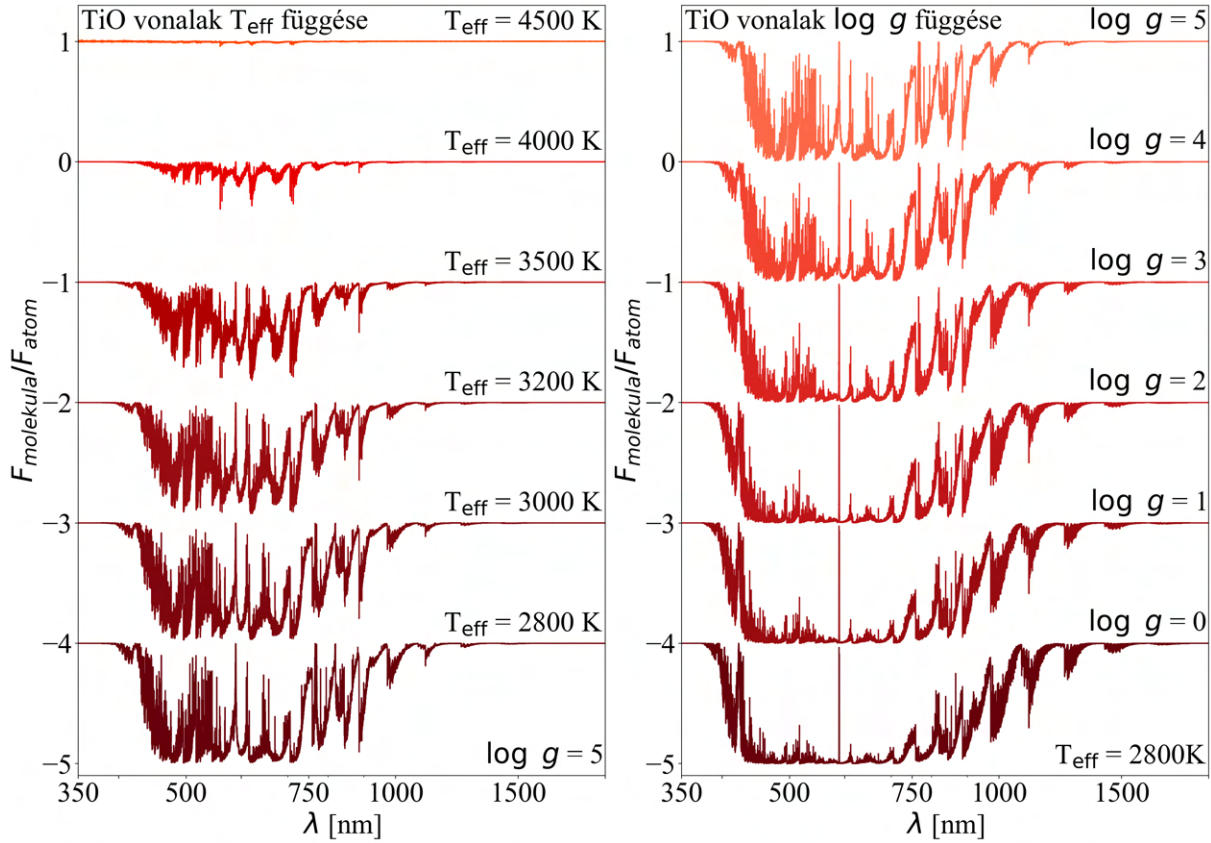
A SiO a hűvös és Naphoz közeli hőmérsékletű csillagok színeképében figyelhető meg, 2800 K és 6000 K között. Erős vonalakat mutat 150 és 600 nm között, azaz a távoli ultraibolya tartománytól a látható tartományig. Ezen vonalak 4000 K felszíni hőmérsékletnél a legerősebbek. Ennek oka a Saha–Boltzmann-egyenletben található. 4000 K alatt kevesebb SiO van olyan energiaállapotban, hogy gerjeszthető legyen, ezáltal kevesebb fotonelnyelés történik, 4000 K felett pedig a magas hőmérséklet miatt kevesebb SiO van a légkörben, a koncentráció csökkenésével a létrehozott vonalak erőssége is csökken.

A felszíni nehézségi gyorsulás a SiO ezen tartományában található vonalait gyengén befolyásolja, a növekedésével a vonalerősségek kicsit csökkennek. Az infravörös tartományban található vonalak viselkedése azonban jelentősen eltér ettől.

A SiO-nak 2800 K hőmérsékleten és $\log g = 0$ esetben négy infravörös vonalcsoportja van, amelyek magasabb hőmérséklet és felszíni gyorsulás esetén fokozatosan eltűnnek. Óriáscsillagok, azaz $\log g = 0$ esetben az első vonalcsoport 2000 és 2300 nm között van, a leggyengébb az összes közül, és 3500 K felett eltűnik. A második vonalcsoport 2700 és 3300 nm között van és 4000 K felett tűnik el. A harmadik vonalcsoport 4000 és 4500 nm között van, és 4500 K felett tűnik el. A negyedik vonalcsoport 7550 és 12800 nm között található, a legerősebb az infravörös vonalcsoportok közül és 4500 K felett tűnik el.

A főszorozati csillagok, azaz $\log g = 5$ esetben az első infravörös vonalcsoport teljesen eltűnik, ami a 15. ábrán látható. A második, harmadik és negyedik vonalcsoport megjelenik a színeképben, de gyengébbek.

4.2.11. TiO



16. ábra. A TiO molekula vonalainak függése az effektív hőmérséklettől és a felszíni nehézségi gyorsulástól.

A TiO a hűvösebb csillagok optikai tartományában erős vonalakat hoz létre 400 és 1200 nm között. A vonalak 2800 K hőmérsékletű csillagok esetében a legerősebbek, az erősségük a hőmérséklet növekedésével csökken, a molekulavonalak 4500 K alatti csillagok spektrumában találhatóak meg. A 16. ábrán láthatóan a vonalak erőssége a felszíni nehézségi gyorsulás növekedésével csökken. Óriáscsillagokban, azaz alacsony felszíni nehézségi gyorsulás esetén a közepes és távoli infravörös tartományban is jelennek meg TiO-vonalak. Az első infravörös vonalcsoport 2500 és 3000 nm között jelenik meg 3500 K alatt. A második vonalcsoport 4900 és 5600 nm között jelenik meg, gyengébb az előzőnél, és szintén 3500 K. A harmadik vonalcsoport 9200 és 12500 nm között található és a három közül a legerősebb vonalakat adja, amelyek 4000 K alatt tűnnek fel. Mindhárom infravörös vonalcsoportra jellemző, hogy a hőmérséklet növekedésével a vonalak erőssége csökken. A vonalerősségek csökkenésének magyarázata az lehet, hogy a molekula csak az alacsonyabb felszíni hőmérsékletű csillagok légkörében jön létre, ahogyan a hőmérséklet növekszik, a TiO koncentrációja a légkörben csökken, ezáltal kevesebb fényt is nyel el.

5. Összefoglalás

A JWST a jelenkor egyik legjelentősebb űrtávcsöve. A műszereinek fluxukalibrációja rendkívül fontos ahhoz, hogy a mérésekből kiolvasható adatokból a valós fizikai paramétereket tudjuk származtatni. A fluxuskalibrációhoz szükséges elméleti spektrumokat az MTA-ELTE Lendület Tejútrendszer Kutatócsoport számítja, a kutatócsoport tagjaként a számolt spektrumokban található molekula-vonalak viselkedését tanulmányoztam. Az STScI-vel való együttműködés 2013 óta tart, jelenleg több mint 600000 spektrumból álló rács létrehozásán dolgozunk. A vizsgálatom fő célja annak kiderítése volt, hogy 23 molekula vonalait milyen effektív hőmérsékleti tartományokban kell figyelembe venni. Ennek a jelentősége abban rejlik, hogy az exobolygók légkörében található molekulavonalakat el tudjuk különíteni a központi csillag vonalaitól.

A vizsgálati módszerem a spektrumszintézis volt, amelyet a Synspec nevű kódval végeztem el egy könnyen kezelhető pythonos felületen keresztül. Az elméleti spektrumok számításához a Synspec-nek szüksége van csillaglégkör-modellekre, amelyekben a légkör fő termodinamikai állapotjelzői, mint a hőmérséklet és nyomás vannak megadva a felszíntől való távolság függvényében. A munkám során a MARCS modellatmoszférákat alkalmaztam. A Synspec-nek szüksége van vonallistákra is, amelyekben az atomok és molekulák atomfizikai paraméterei találhatóak meg. A légkörmodellek és vonallisták ismeretében a Synspec megoldja a radiatív transzferegyenletet, amelynek eredményeképp kapunk egy részletes spektrumot az adott paraméterekkel rendelkező csillagról.

A molekulák által létrehozott vonalakat úgy tanulmányoztam, hogy számítottam minden modellatmoszférára egy csak atomos vonallistát tartalmazó spektrumot, illetve egy olyan spektrumot, amelyben az atomos vonallista és az adott molekula vonallistája is szerepelt. Ezeket a spektrumokat $R = 20000$ felbontásra konvolváltam és azonos hullámhosszakra interpoláltam a későbbi analízishez.

A molekulavonalak erősségét úgy vizsgáltam, hogy az atomi és molekuláris vonalakat tartalmazó spektrumot osztottam el az atomi vonalakat tartalmazó spektrummal, ezzel olyan spektrumokat előállítva, amelyben csak az adott molekula vonalai szerepelnek. Ezeket a spektrumokat ábrázoltam az effektív hőmérséklet és felszíni nehézségi gyorsulás függvényében, és ezeket a grafikonokat vizsgáltam.

Arra az eredményre jutottam, hogy a főszorozati csillagokban a molekulavonalak általában gyengébbek, mint az óriáscsillagokban, és magasabb hőmérsékleti tartományokban jelennek meg. A legtöbb molekula 7000 K alatt figyelhető meg, efelett csak a CH és CO vonalai jelennek meg gyengén. A legerősebb abszorpciós vonalakkal a CH, CN, CO, H₂O, NH, OH, OH⁺, SiH, SiO és TiO rendelkeznek.

A TiO és H₂O, SiH és SiO infravörös tartományban lévő erős abszorpciós vonalakkal rendelkező csoportjai 4500 K alatt figyelhetőek meg. A CH vonalai 3000 K-től megfigyelhetőek egészen 8000 K-ig. A CN, CO, OH, OH⁺ infravörös tartományban lévő vonalcsoportjai 6000 K alatt figyelhetőek meg, és a csillagok infravörös színképének meghatározó részei.

A munkám során hasznos tudásra tettem szert a spektrumszintézisről, illetve az abszorpciós vonalak létrejöttének fizikájáról. A jövőben a csillagok bolometrikus korrekcióit tervezem számolni elméleti spektrumok segítségével. A bolometrikus korrekció összeköti a csillagok abszolút magnitúdóját a luminozitásával, ami a csillagok egyik legfontosabb fizikai paramétere. Az új spektrummodellek felhasználásával várhatóan a korábbiaknál pontosabb bolometrikus korrekciókat fogok tudni meghatározni.

6. Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom témavezetőmnek, Dr. Mészáros Szabolcsnak, akinek szakmai iránymutatása, oktatása és technikai szakértelme létfontosságú volt ezen dolgozat létrejöttéhez. Köszönöm belső témavezetőmnek, Dr. Szalai Tamásnak a támogatását és a tanácsait a munkám kezdete óta. Hálával tartozom az MTA–ELTE Tejútrendszer kutatócsoport minden tagjának valamint a Gothard Asztrofizikai Obszervatórium minden munkatársának, akik az ötleteikkel minden héten segítették a kutatásomat. Külön köszönöm Dr. Kovács Józsefnek a technikai tanácsokat és a segítséget. Mindezek mellett köszönöm családom és barátaim végtelen támogatását.

Hivatkozások

- [1] Bauschlicher, C.W., Ram, R.S., Bernath, P.F., Parsons, C.G., and Galehouse, D. 2001. JCP 115, 1312-1318
- [2] Bohlin, Ralph C.; Mészáros, Szabolcs ; Fleming, Scott W.; Gordon, Karl D.; Korkemöer, Anton M.; Kovács, József The Astronomical Journal, Volume 153, Issue 5, article id. 234, 11 pp. (2017).
- [3] Brooke, J.S.A., Bernath, P.F., Schmidt, T.W., and Bacsikay, G.B. 2012. Arxiv:1212.2102v2
- [4] Brooke, J.S.A., Ram, R.S., Western, C.N., Li, G. Schwenke, D.W., and Bernath, P.F. 2014. Einstein A Coefficients and Oscillator Strengths for the A2Pi-X2Sigma+ (Red) and B2Sigma+-X2Sigma+ (Violet) Systems and Rovibrational Transitions in the X2Sigma+ State of CN. ApJS 210, 23 (15pp)
- [5] Burrows, A., Ram, R.S., Bernath, P.F., Sharp, C.M., and Milsom, J.A. 2002. ApJ 577, 986-992
- [6] C. Allende Prieto, I. Hubeny, T. Lanz, Y. M. Osorio, 2021, Synple User's Guide
- [7] Daily, J.W., Dreyer, C., Abbud-Madrid, A., and Branch, M.C. 2002. J. Mol. Spect. 214, 111-116
- [8] Dulick, M., Bauschlicher, C.W., Burrows, A., Sharp, C.M., Ram, R.S., Bernath, P. 2003. ApJ 594, 651-663
- [9] GharibNezhad, E., Shayesteh, A., and Bernath, P.F. 2013. MNRAS 432, 2043-2047
- [10] Gordon, Karl D.; Bohlin, Ralph; Sloan, G. C.; Rieke,; Volk,; Boyer, Martha; Muzerolle, James; Schlawin, Everett; Deustua, Susana E.; Hines, Dean C.; Kraemer, Kathleen E.; Mullally, Susan E.; Su, Kate Y. L., 2022, The Astronomical Journal, Volume 163, Issue 6, id.267, 13 pp.
- [11] Gustafsson, B. ; Edvardsson, B. ; Eriksson, K. ; Jørgensen, U. G. ; Nordlund, Å. ; Plez, B., Astronomy and Astrophysics, Volume 486, Issue 3, 2008, pp.951-970
- [12] Gustavsson, T., Klynning, L., and Lindgren, B. 1985. Phys. Scr. 31, 269-274
- [13] Hinkle, K.H., Wallace, L., Ram, R.S., Bernath, P.F., Sneden, C., and Locatello, S. 2013. ApJ.Supp. 207, 26 (7pp)
- [14] Hodges, J.N., Bittner, D.M., and Bernath, P.F. 2018. ApJ 855,21,4pp
- [15] Hubeny, Ivan ; Allende Prieto, Carlos ; Osorio, Yeisson ; Lanz, Thierry; 2021, eprint arXiv:2104.02829
- [16] Jofré, Paula ; Heiter, Ulrike ; Soubiran, Caroline, 2019, Annual Review of Astronomy and Astrophysics, vol. 57, p.571-616
- [17] Li, G., Harrison, J.J., Ram, R.S., Western, C.M., and Bernath, P.F. 2012. JQSRT 113, 67-74
- [18] McKemmish, L. K., Masseron, T., Hoeijmakers, H. J., Perez-Mesa, V., Grimm, S. L., Yurchenko, S. N., Tennyson, J., "ExoMol Molecular line lists - XXXIII. The spectrum of Titanium Oxide", Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 488, 2836-2854 (2019)
- [19] McKemmish, L.K., Yurchenko, S.N., and Tennyson, J. 2016, MNRAS 463, 771-793

- [20] Patapis, P. ; Nasedkin, E. ; Cugno, G.; Glauser, A. M. ; Argyriou, I. ; Whiteford, N. P. ; Mollière, P. ; Glasse, A. ; Quanz, S. P.; *Astronomy & Astrophysics*, Volume 658, id.A72, 18 pp
- [21] Patrascu, A.T., Yurchenko, S.N., and Tennyson, J. 2005. *MNRAS* 449, 3613-3619
- [22] Polyansky, O. L., Kyuberis, A. A., Zobov, N. F., Tennyson, J., Yurchenko, S. N., Lodi, L., "ExoMol molecular line lists XXX: a complete high-accuracy line list for water", *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 480, 2597-2608 (2018)
- [23] Rivlin, T., Lodi, L., Yurchenko, S.N., Tennyson, J., and Le Roy, R.J. 2015, *Monthly Notices in press*
- [24] Shayesteh, A., Henderson, R.D.E., LeRoy, R.J., and Bernath, P.F. 2007. *J. Phys. Chem. A* 111, 12495
- [25] Shayesteh, A., Ram, S.R., and Bernath, P.F. 2013. *JMS* 288, 46-51
- [26] Weck, P.F., Stancil, P.C., Kirby, K. 2003. *J. Chem. Phys.* 118, 9997-10005
- [27] Yadin, B., Veness, T., Conti, P., Hill, C., Yurchenko, S.N., and Tennyson, J. 2012. *M.N.R.A.S.* 425, 34-43
- [28] Yurchenko, S.N., Blissett, A., Asari, U., Vasilios, M., Hill, C., and Tennyson, J. 2015. [arXiv:1512.08987](https://arxiv.org/abs/1512.08987)
- [29] Yurchenko, S.N., Sinden, F., Lodi, L., Hill, C., Gorman, M.N., and Tennyson, J. 2018, *MNRAS* 473, 5324-5333
- [30] Yurchenko, S.N., Williams, H., Leyland, P.C., Lodi, L., and Tennyson, J. 2018. *MNRAS* 479, 1401-1411