

Liniendiagnostik in einem planetarischen Nebel

Manfred Hanke (Gruppe 5: Hanke / Nieva)

7. Feb 2007

1 Zielsetzung

Es sollen die lokalen Plasmaparameter (T_e , n_e) in einem planetarischen Nebel aus beobachteten Intensitätsverhältnissen von verbotenen Linienübergängen der Ionen O II, O III, N II und S II bestimmt werden.

2 Methoden

Allen Ionen können als 5-Zustandssysteme betrachtet werden:

O II bzw. S II				O III bzw. N II			
Nr.	$2S+1L$	_____	J	Nr.	$2S+1L$	_____	J
#5	$2P$	_____	1/2	#5	$1S$	_____	0
#4		_____	3/2				
#3	$2D$	_____	3/2	#4	$1D$	_____	2
#2		_____	5/2				
#1	$4S$	_____	3/2	#3		_____	2
				#2	$3P$	_____	1
				#1		_____	0

Folgende (dipolverbotene) Übergänge sind für die Liniendiagnostik von Bedeutung:

Übergang	Wellenlänge	
	O II	S II
#3 ($2D_{3/2}$) → #1 ($4S_{3/2}$)	3726 Å	6716 Å
#2 ($2D_{5/2}$) → #1 ($4S_{3/2}$)	3729 Å	6731 Å
	O III	N II
#5 ($1S_0$) → #4 ($1D_2$)	4363 Å	5755 Å
#4 ($1D_2$) → #2 ($3P_1$)	4959 Å	6548 Å
#4 ($1D_2$) → #3 ($3P_2$)	5007 Å	6583 Å

Es wird nun die Näherung getroffen, daß Übergänge in ein höheres Niveau $j > i$ nur durch Elektronenstöße und Übergänge in ein niedrigeres Niveau $j < i$ nur von Elektronenstößen oder spontaner Emission erzeugt werden. Die Wahrscheinlichkeiten hierfür sind:

$$\begin{aligned}
 P_{i \rightarrow j > i} &= n_e \cdot \frac{8.629 \cdot 10^{-6}}{(T/K)^{1/2}} \cdot \frac{\Omega(j, i)}{g_i} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E_{j,i}}{k_B T}\right) \\
 P_{i \rightarrow j < i} &= n_e \cdot \frac{8.629 \cdot 10^{-6}}{(T/K)^{1/2}} \cdot \frac{\Omega(i, j)}{g_i} + A_{i,j}
 \end{aligned} \tag{1}$$

Dabei bezeichnet n_e die Elektronendichte, T die Temperatur, $\Omega(i, j)$ die "collision strength", g_i das statistische Gewicht, $\Delta E_{j,i} = E_j - E_i$ und $A_{i,j}$ den Einstein-Koeffizienten.

Mit diesen Übergangswahrscheinlichkeiten ergeben sich im stationären Gleichgewicht die folgenden Bilanzgleichungen für die Niveaus i :

$$\text{Verlust} = n_i \sum_{j \neq i} P_{i \rightarrow j} = \sum_{j \neq i} n_j P_{j \rightarrow i} = \text{Gewinn}$$

Diese Gleichgewichtsbedingungen lauten in Matrixschreibweise:

$$(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5) \begin{pmatrix} -\sum_{j \neq 1} P_{1 \rightarrow j} & P_{1 \rightarrow 2} & \cdots & P_{1 \rightarrow 5} \\ P_{2 \rightarrow 1} & -\sum_{j \neq 2} P_{2 \rightarrow j} & & P_{2 \rightarrow 5} \\ \vdots & & \ddots & \\ P_{5 \rightarrow 1} & & & -\sum_{j \neq 5} P_{5 \rightarrow j} \end{pmatrix} = \vec{0}$$

Das Gleichungssystem ist unterbestimmt (die Summe aller Reaktionsbilanzen ergibt $0 = 0$), eine Gleichung muß noch durch die inhomogene Gleichung der Teilchenzahlerhaltung ersetzt werden, z.B. $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + n_5 = 1$ (dann geben die n_i die relativen Besetzungszahlen an).

$$(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5) \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & P_{1 \rightarrow 2} & \cdots & P_{1 \rightarrow 5} \\ 1 & -\sum_{j \neq 2} P_{2 \rightarrow j} & & P_{2 \rightarrow 5} \\ \vdots & & \ddots & \\ 1 & & & -\sum_{j \neq 5} P_{5 \rightarrow j} \end{pmatrix}}_{=: \mathbf{M}} = (1, 0, 0, 0, 0) \tag{2}$$

$$\Leftrightarrow (n_1, n_2, n_3, n_4, n_5) = (1, 0, 0, 0, 0) \mathbf{M}^{-1}$$

Die ersten Zeile der inversen Matrix von **M** enthält also die relativen Besetzungszahlen.

Die Intensität J einer Liniesübergangs $i \rightarrow j$ berechnet sich aus der Besetzungszahl n_i , dem Einstein-Koeffizienten $A_{i,j}$ als Rate der spontanen Emission und der Photonenenergie $h\nu_{i,j}$:

$$I(i \rightarrow j) = n_i \cdot A_{i,j} \cdot (E_i - E_j) \quad (3)$$

Für Intensitätsverhältnisse von Linien des gleichen Ions reichen die oben berechneten relativen Besetzungszahlen aus.

3 Durchführung

In der SUBROUTINE `get_at` werden die Atomdaten für ein bestimmtes Ion, das im COMMON-Block `/ionname/` als Variable `ion` übergeben wird, aus der Datei `pn.dat` in die Variablen `Omega`, `A`, `g`, `E` des COMMON-Blocks `/atomic/` eingelesen. Dazu wird die Datei zuerst zeilenweise durchsucht, bis als Text das gewünschte Ion erscheint. Im Anschluß sind dann immer die Kollisionsstärken, und die Einsteinkoeffizienten im Schema einer unteren Dreiecksmatrix, dann in einer Zeile die statistischen Gewichte und schließlich die Energieniveaus angegeben.

Die FUNCTION `P(i, j)` berechnet die Übergangswahrscheinlichkeit (Gleichung 1). Dazu wird vorausgesetzt, daß die Atomdaten bereits in den COMMON-Block `/atomic/` gelesen wurden und daß die Plasmaparameter `T`, `ne` (Temperatur und Elektronendichte) im COMMON-Block `/par/` verfügbar sind. Die Berechnung erfolgt in einer einfachen Fallunterscheidung, ob Anregung ($i < j$) oder Abregung ($i > j$) vorliegt. (Der Fall $i = j$ sollte nicht vorkommen.)

Die SUBROUTINE `getRat` ist für den Hauptteil, nämlich die Berechnung der Linienverhältnisse, verantwortlich. Die Routine ist nicht spezifisch für ein Ion, es wird wieder vorausgesetzt, daß die Parameter des Ions und des Plasmas bereits in den entsprechenden COMMON-Blöcken gesetzt sind. (Das soll zur Erhöhung der Rechengeschwindigkeit beitragen, damit nicht immer alle Werte als Übergabeparameter weitergereicht werden müssen.)

Zuerst wird die Matrix **M** nach Gleichung 2 konstruiert, indem in einer Doppelschleife über `n` und `m` die entsprechenden Matrixelemente `Mat(n,m)` zugewiesen werden: $M_{n,1}$

wird stets auf 1 gesetzt, danach hängt die Berechnung von $n \begin{cases} = \\ \neq \end{cases} m$ ab. Im ersten Fall wird in einer Schleife über `j` die negative Summe $-\sum_{j \neq n} P(n, j)$ berechnet, ansonsten ist $M_{n,m} = P(n, m)$.

Dann wird die SUBROUTINE `minv` aus der INCLUDEten Datei `minv.f` aufgerufen, um die 5×5 -Matrix `Mat` zu invertieren. Da `Mat(1,i)` jetzt die relative Besetzungszahl des i -ten Niveaus enthält, können jetzt ganz leicht Intensitätsverhältnisse von Übergangslinien nach Gleichung 3 berechnet werden. Die hier betrachteten Linien entstehen als Übergänge $2 \rightarrow 1$ und $3 \rightarrow 1$ (bei O II und S II), $4 \rightarrow 2$, $4 \rightarrow 3$ und $5 \rightarrow 4$ (bei O III und N II). Darum reicht z.B. die Berechnung der Verhältnisse $\frac{I(2 \rightarrow 1)}{I(3 \rightarrow 1)}$, $\frac{I(4 \rightarrow 2)}{I(5 \rightarrow 4)}$ und $\frac{I(4 \rightarrow 3)}{I(5 \rightarrow 4)}$. Diese werden in den Variablen `R21_31`, `R42_54`, `R43_54` des COMMON-Blocks `/ratios/` gespeichert.

Die SUBROUTINE `prTble(dT, fac_ne, loop1n)` soll eine Wertetabelle mit den Linienverhältnissen in Abhängigkeit von der Temperatur `T` und Elektronendichte `ne` erstellen. Der Bereich $6000 \text{ K} \leq T \leq 20000 \text{ K}$ soll dabei mit der Schrittweite `dT`, der Bereich $1/\text{cm}^3 \leq n_e \leq 10^6/\text{cm}^3$ mit dem Faktor `fac_ne` (logarithmisch konstante Schrittweite) abgedeckt werden. Der INTEGER `loop1n` gibt lediglich an, ob in der Doppelschleife zuerst über `ne` (`loop1n=1`) oder `T` (sonst) iteriert werden soll, was für die graphische Darstellung am Schluß relevant ist. Zu Beginn wird einmalig `get_at` aufgerufen, um sicherzustellen, daß die Atomdaten initialisiert sind. Danach wird im Wesentlichen nur noch die (`loop1n` entsprechende) Doppelschleife über `ne` und `T` ausgeführt: Nach dem Aufruf von `getRat` können die Linienverhältnisse den Variablen des COMMON-Blocks `/ratios/` entnommen werden. Die Ausgabe erfolgt in die Datei mit der Nummer 11, die vor Aufruf von `prTble` geöffnet werden muß.

Für den zweiten Teil, der Erstellung eines Diagnose-Diagramms, müssen die Parameterwerte `T`, `ne` zu vorgegebenen Linienverhältnissen bestimmt werden. Das erfolgt in der SUBROUTINE `search(nr, ratio)`. Der INTEGER `nr` gibt an, welches der Verhältnisse den Wert `ratio` annehmen soll: `nr=1, 2, 3` \Rightarrow `R21_31`, `R42_54`, `R43_54`.

In einer Schleife über `ne` wird der passende Wert von `T` mit einem Sekantenverfahren gesucht, indem zwei Verhältnisse `R1` und `R2` zu den Werten `T` und `T+dT` berechnet werden, und dann der (linearisiert) zu `ratio` passende Wert `T` extrapoliert wird. Um zu steile Extrapolationen zu vermeiden, wird `T` auf den Bereich von 1000 K bis 100000 K beschränkt. Die Prozedur beginnt mit `dT=50` und wird dann in 5 Schritten bei Halbierung von `dT` wiederholt. Die Ausgabe erfolgt in die Datei mit der Nummer 12, die wieder bereits geöffnet sein muß.

Im Hauptprogramm wird nun zuerst `prTble` für jedes Ion ('O II', 'S II', 'O III' und 'N II') aufgerufen, nachdem eigene Dateien für die Ausgabe geöffnet worden sind. Danach werden die Parameter zu den in IC 5217 gemessenen Linienverhältnissen (siehe 5) mittels `search` gesucht.

4 Fortran-Programm

```

SUBROUTINE get_at()
  INTEGER lineNr
  CHARACTER*100 text
  CHARACTER*10 ion
  DOUBLE PRECISION Omega, A, g, E
  DIMENSION Omega(5,5), A(5,5), g(5), E(5)
  COMMON /ionname/ ion
  COMMON /atomic/ Omega, A, g, E
  WRITE(*,*) ion
  OPEN(UNIT=10, FILE='pn.dat')
  READ(10,*) lineNr, text
  IF(text.NE.ion) GOTO 100
  collision strength
  READ(10,*) lineNr, text

```



```

ion = "O_III"; OPEN(UNIT=12, FILE='4b_ne-T_OIII.dat ')
CALL search(2, 36.31d0, 1.02)
CALL search(3, 102.3d0, 1.02)
CLOSE(12)

```

c

```

ion = "N_II"; OPEN(UNIT=12, FILE='4b_ne-T_NII.dat ')
CALL search(2, 12.30d0, 1.02)
CALL search(3, 38.90d0, 1.02)
CLOSE(12)

```

c

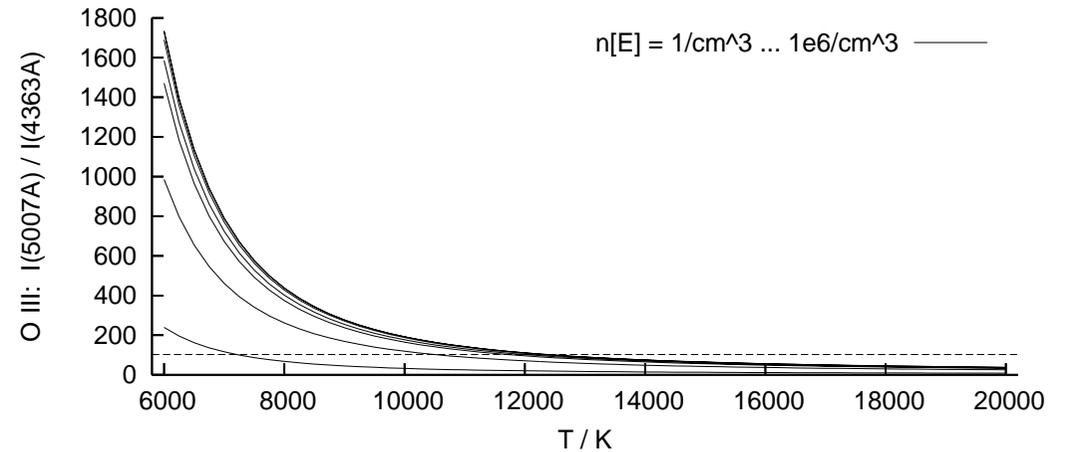
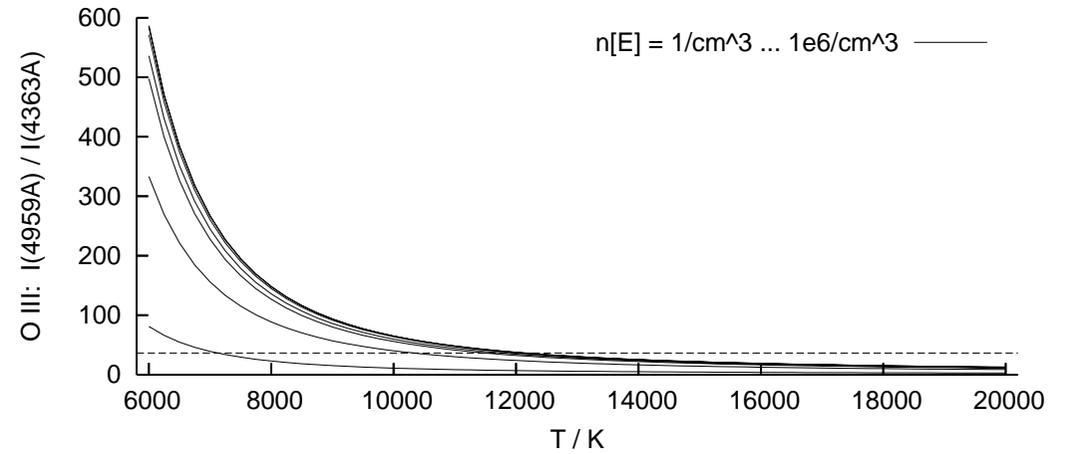
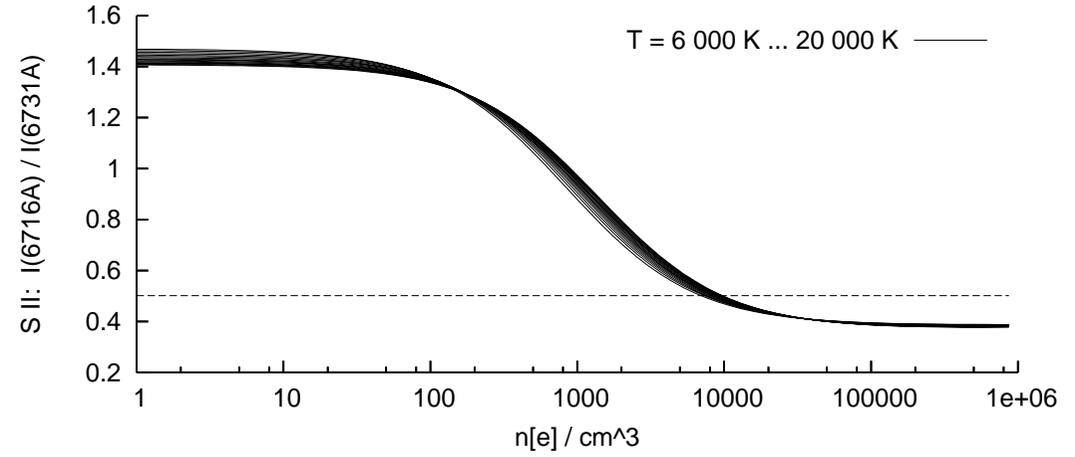
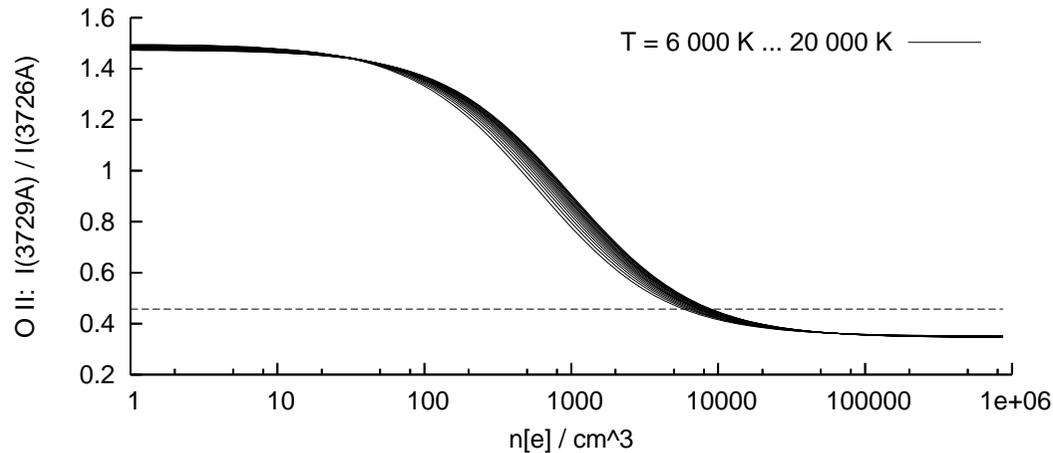
END

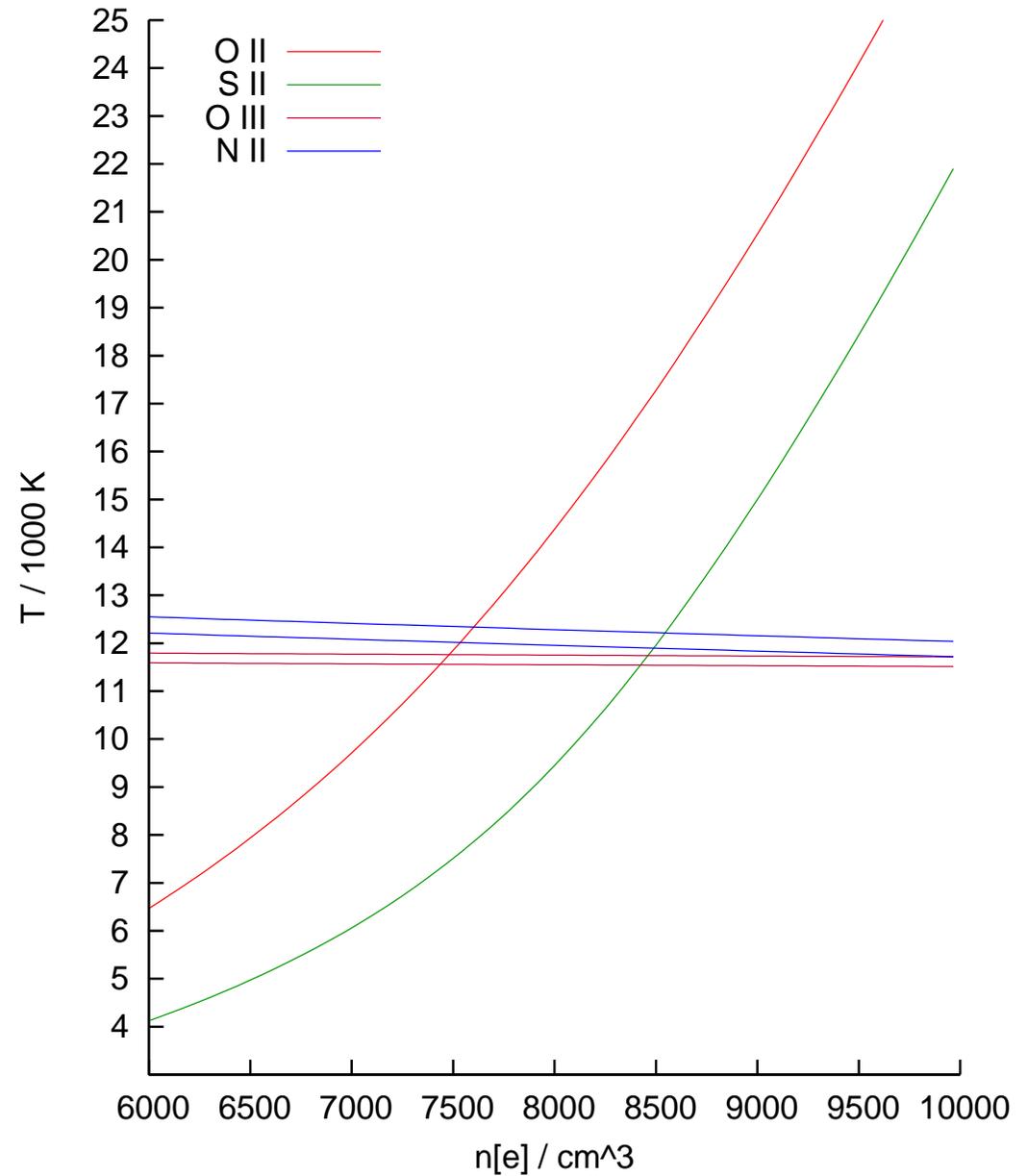
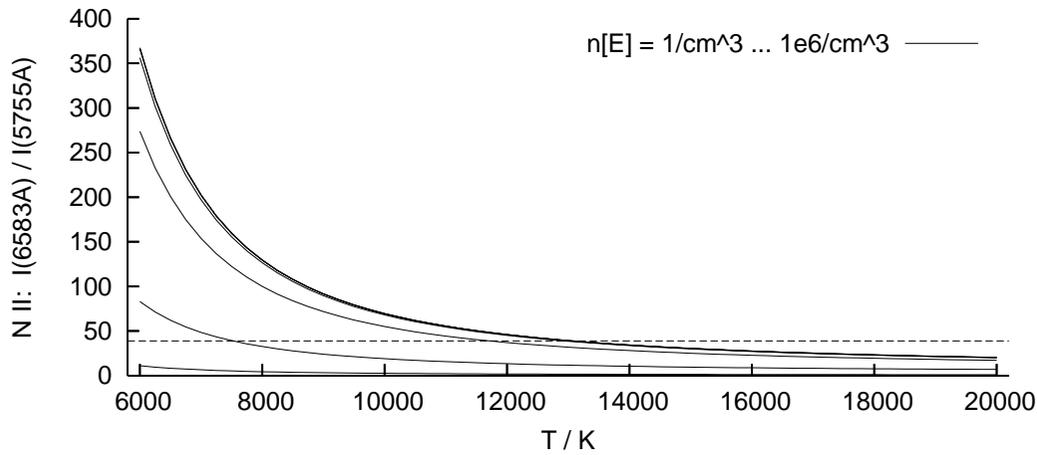
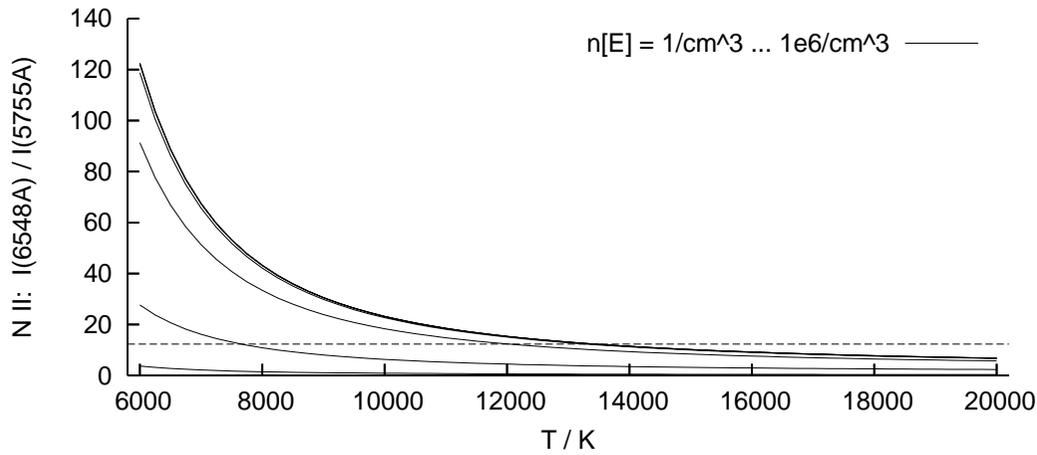
5 Ergebnisse und Auswertung

Für den planetarischen Nebel IC 5217 wurden folgende Intensitätsverhältnisse gemessen:

$$\begin{aligned}
 \text{O II: } \frac{I(3729 \text{ \AA})}{I(3726 \text{ \AA})} &= 10^{0.90-1.24} = 0.4571 \\
 \text{S II: } \frac{I(6716 \text{ \AA})}{I(6731 \text{ \AA})} &= 10^{0.11-0.41} = 0.5012 \quad \left(\text{Das ist } \frac{I(3 \rightarrow 1)}{I(2 \rightarrow 1)} = \left(\frac{I(2 \rightarrow 1)}{I(3 \rightarrow 1)}\right)^{-1}.\right) \\
 \text{O III: } \frac{I(4959 \text{ \AA})}{I(4363 \text{ \AA})} &= 10^{2.62-1.06} = 36.31, \quad \frac{I(5007 \text{ \AA})}{I(4363 \text{ \AA})} = 10^{3.07-1.06} = 102.3 \\
 \text{N II: } \frac{I(6583 \text{ \AA})}{I(5755 \text{ \AA})} &= 10^{1.39+0.20} = 38.90, \quad \frac{I(6548 \text{ \AA})}{I(5755 \text{ \AA})} = 10^{0.89+0.20} = 12.30
 \end{aligned}$$

Diese Verhältnisse werden im folgenden graphisch dargestellt, und zwar für O II und S II (die kaum temperaturabhängig sind) als Funktion von n_e , und für O III und N II (die über weite Bereiche nur schwach von der Elektronendichte abhängig sind) als Funktion von T :





Man sieht an den ersten beiden Diagrammen (O II und S II-Linienverhältnisse), daß die Elektronendichte n_e konsistent zwischen $6000/\text{cm}^3$ und $10000/\text{cm}^3$ liegt. Hier befindet man sich noch im steileren Bereich des funktionalen Zusammenhangs, d.h. n_e hängt einigermaßen empfindlich von den gemessenen Verhältnissen ab.

Die anderen Diagramme (O III und N II-Linienverhältnisse) deuten (ebenfalls konsistent) auf eine Temperatur von ca. 12000 K hin. Hier ist man bereits im relativ flachen Teil der Kurve, so daß die Resultate als genauer (da nicht so stark von den Meßgrößen abhängig) zu betrachten.

Diese Ergebnisse spiegeln sich auch im folgenden Diagnostik-Diagramm wieder, dem die Mittelwerte $T \approx 12000\text{ K}$ und $n_e \approx 8000/\text{cm}^3$ entnommen werden können:

| Mh