

Påvirkningen av temperaturgradienter for tolkningen av rotasjonstemperaturer

Halvor Borge

Master i fysikk og matematikk

Innlevert: juni 2018

Hovedveileder: Patrick Joseph Espy, IFY

Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet
Institutt for fysikk

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE
UNIVERSITET

PÅVIRKNINGEN AV
TEMPERATURGRADIENTER FOR
TOLKNINGEN AV
ROTASJONSTEMPERATURER

Halvor Borge

24. juni 2018

Takk til

Jeg vil gi en stor takk til professor Patrick J. Espy og Christoph Franzen for all hjelpen og veiledningen de har gitt. Jeg ønsker også å takke Kate Faloon for modellen som ble brukt til å finne konsentrasjonene og temperaturene i atmosfæren til denne oppgaven.

Sammendrag

Hydroksyl (OH) utstråling er en fotokjemisk reaksjon som skjer i et relativt tynt område (~ 5 km) sentrert rundt ca 90 km høyde. I denne oppgaven ble det laget et syntetisk spektrum ved hjelp av en steady-state kjemimodell av OH som bruker den empiriske MSIS-modellen for bakgrunnsatmosfæren. MSIS-temperaturen og OH-intensitetsprofilen ble deretter brukt til å finne en vektet temperatur T_{eff} . Så ble denne sammenlignet med en temperatur T_{fit} både for rotasjonstilstander med rotasjonskvante J' opp til 9.5 og opp til 3.5. Resultatet ble at T_{fit} for lavere tilstander, $J' \leq 3.5$, passet bedre med T_{eff} enn for høyere J' . Dette bygger oppunder det Pendleton et al. [1993] viser til. I denne oppgaven ble det også undersøkt om det fantes overskuddspopulasjon for tilstandene som ikke var i NLTE som Pendleton et al. postulerer. Resultatet her var at hvor Pendleton et al. mener at molekyler i høyere J' alle er i NLTE er noen av disse faktisk et resultat av temperaturgradienten og ikke NLTE. Denne andelen må derfor trekkes fra hvis man ønsker å studere de faktiske effektene fra NLTE. Det ble også undersøkt om det var noen sesongmessige variasjoner i forhold til hvor godt T_{fit} passet. Resultatene i denne oppgaven ga at det virker som om det er relativt store variasjoner med størst avvik om vinteren og våren og minst om sommeren og høsten.

Innhold

1	Introduksjon	1
1.1	Tidligere analyser og bakgrunn	1
1.2	Bruk av astronomiske målinger i IR spekteret	2
1.3	Oppgavens oppbygging	2
2	Teori	4
2.1	OH stråling	4
2.2	OH produksjon	4
2.3	OH molekylets spektroskopi	5
2.4	OH i termisk likevekt	6
2.5	T_{eff} vs T_{fit}	7
2.6	Λ -dobling og Einsteinkoeffisienter	8
3	Analyse og resultater	9
3.1	LTE-analyse for $J' \leq 9.5$	9
3.2	LTE-analyse for $J' \leq 3.5$	10
3.3	Sesongmessige variasjoner for relativ intensitet	11
3.4	Overskuddspopulasjon relativ til $T(J' \leq 3.5) = T_{fit}$	12
4	Diskusjon	15
4.1	LTE for lavere tilstander	15
4.2	NLTE vs. temperaturgradient + NLTE	16
4.3	Andre mulige påvirkningsfaktorer	17
4.4	Usikkerhet	18
5	Konklusjon	19
	Referanseliste	22

Figurer

2.1	Figuren viser konsentrasjonen til O_3 , H og NO i forskjellige høyder. Det mørke båndet viser OH regionen.	5
2.2	Som kan sees i figuren består energitilstanden til atomet av rotasjons-, vibrasjons- og elektronbåndtilstander. Her går energiforskjellen i de forskjellige tilstandene fra rotasjon (minst) til elektronbånd (størst).	6
2.3	Figuren viser intensiteten for de forskjellige bølgelengdene for hhv 100 km, 90 km og 80 km funnet ved hjelp av Kate Faloons modell for vintersolverv 2016.	8
3.1	Figuren viser de behandlede intensitetene slik at helningen på kurven er $1/T$ sfa startenergien til hvert bånd delt på Boltzmanns konstant. Punktene viser de faktiske verdiene for alle J' og den røde linjen viser helningen til kun de tre første båndene.	11
3.2	Forholdet $I(T_{fit})$ relativ til $I(T_{eff})$ for hver J' hvor T_{fit} er beregnet fra alle J' . Figuren viser forholdet for data fra høstjevndøgn 2016. Den røde linjen viser et forhold på 1.	12
3.3	Forholdet $I(T_{fit})$ relativ til $I(T_{eff})$ for hver J' hvor T_{fit} er beregnet fra alle J' . Figuren viser forholdet for data fra vårjevndøgn 2016. Den røde linjen viser et forhold på 1.	13
3.4	Forholdet $I(T_{fit})$ relativ til $I(T_{eff})$ for hver J' hvor T_{fit} er beregnet fra alle J' . Figuren viser forholdet for data fra sommersolverv 2016. Den røde linjen viser et forhold på 1.	13
3.5	Forholdet $I(T_{fit})$ relativ til $I(T_{eff})$ for hver J' hvor T_{fit} er beregnet fra alle J' . Figuren viser forholdet for data fra vintersolverv 2016. Den røde linjen viser et forhold på 1.	14
3.6	Figuren viser forholdet mellom overskuddspopulasjonen relativ til populasjonen basert på temperaturen funnet fra de tre laveste J' -nivåene.	14
4.1	Figurene viser Boltzmannfordelignene for $P_1(2)$ til $P_1(10)$ linjene for $T=3000K$ (høyre) og $T=185K$ (venstre) relativt til den høyeste verdien for settet. Som man kan se vil høyere temperatur føre til sterkere intensitet for lengre bølgelengder. 3000K og 185K ble valgt ettersom at T_{eff} for vintersolverv var ca 185K og T for overskuddsenergien $\approx 3.6eV$ rett etter reaksjon (2.1) har en $T \sim 3000K$	16

4.2 Figuren viser intensitetsfordelingen for $P_1(2)$ til $P_1(10)$ linjene relativ til den linjen med høyest intensitet. Her har blå linjer $T=185K$ og rød har $T=3000K$. Som man kan se har den laveste temperaturen høyere intensitetsfordeling for de laveste båndene, mens høyere T vil ha en fordeling rundt en høyere λ som tilsvarer $J \sim 30$. Programmet som ble kjørt hadde bare opp til $P_1(10)$ og det viser derfor ikke fordelingen for høyere tilstander, som for blå vil bli ~ 0 , men disse vil uansett ha en stor T etter reksjonen (2.1) i forhold til den lokale gassen og derfor ikke i nærheten av LTE. 17

Tabeller

3.1	Tabellen viser startenergien for rotasjonstilstandene 1.5 til 9.5 for (9,7) vibrasjonsbåndet til OH. Verdiene er hentet fra HITRAN databasen.	9
3.2	Tabellen viser Einsteinkoeffisientene for rotasjonstilstandene 1.5 til 9.5 for (9,7)-vibrasjonsbåndet til OH. Verdiene er hentet fra HITRAN databasen.	9
3.3	T_{eff} for de forskjellige årstidene.	10
3.4	$T_{eff} - T_{fit}$ for periodene som ble analysert. Her ble temperaturgradienten til hele spekteret brukt.	10
3.5	$T_{eff} - T_{fit}$ for periodene når man bare brukte temperaturgradienten til $J' \leq 3$	10

1 | Introduksjon

1.1 Tidligere analyser og bakgrunn

Hydroksyl (OH) utstråling er en fotokjemisk reaksjon som skjer i et relativt tynt område (~ 5 km) sentrert rundt ca 90 km høyde. Grunnet den store avstanden mellom rotasjonslinjene i OH'et, kan rotasjonsstrukturen i båndet lett bli observert. Hvis man antar at rotasjonspopulasjonen er en Boltzmanndistribusjon i termodynamisk likevekt med atmosfæren rundt har man kunnet bruke intensiteten til rotasjonsstrukturen til å fjernmåle temperaturen til atmosfæren rundt 90 km.

Motivasjonen til denne oppgaven er å undersøke om OH er i lokal termodynamisk likevekt (LTE) med atmosfæren rundt den ved å anta en steady state i OH produksjon (beskrevet i kapittel 2.4). Med andre ord skal denne oppgaven undersøke om deeksitering av OH rotasjonstilstander er av en slik størrelse at den blir i termodynamisk likevekt med atmosfæren rundt. Hvis dette ikke er tilfellet skal det analyseres om noen av rotasjonstilstandene kan brukes til å finne den faktiske temperaturen til atmosfæren. Deler av teorien er hentet fra [Borge] som var et innledende prosjekt til denne oppgaven i faget TFY4510.

Helt siden McPherson og Jones i 1960 påviste at den spektroskopiske rotasjonstemperaturen (T_r) var avhengig av om det eksiterte OH-molekylet var i rotasjons-translasjonsmessig likevekt har denne metoden vært brukt til å måle den lokale gasstemperaturen til atmosfæren. Dette er fordi det ble funnet at det var "rimelig sikkert" at T_r faktisk var lik den lokale gasstemperaturen, til tross for relativt usikre målinger [McPherson og Jones 1960]. Dette var en påstand som to år senere også ble støttet av Wallace som også påpekte andre mulige bruksområder for T_r [Wallace 1962].

Det fantes imidlertid andre i samtiden som mente at den eksiterte OH'en ikke hadde den isotermiske Boltzmanndistribusjonen som McPherson og Jones påstod. En av disse var Shefov. Han mente at Boltzmanndistribusjonen ikke ville gjelde for rotasjonstilstand høyere enn 5 ($5 < N$) [Shefov 1961]. Han foretok senere at avvikene for disse $N > 5$ tilstandene kunne komme av signal til støy forholdet og signal til bakgrunnsstøy forholdet i målingene ettersom intensitetsfaktoren fra Benedict et al. [1953], hvor man neglisjerer rotasjons-vibrasjons interaksjon, ble brukt i alle målingene [Shefov 1972; Pendleton et al. 1993].

I nyere tid er det også blitt diskutert om T_r er i LTE, om den er i LTE kun for de laveste rotasjonstilstandene eller om den ikke er det i det hele tatt. En av de som tar til orde for LTE i lavere rotasjonstilstander er Pendleton et al. [1993]. Her vises det til at for lavere J hvor $\Delta\epsilon \leq kT$, hvor $T = T_{atm}$ og $\Delta\epsilon$ er

energiforskjellen mellom nivå J' og J'' , vil det være nok tid til å komme i termisk likevekt med gassen rundt. For høyere J' med $\Delta\epsilon > kT$ vil ikke molekylene ha nok tid til å gi fra seg energi til gassen rundt og derfor komme ned til ca samme energi. Pendleton sier derfor at man kan finne temperaturen til atmosfæren, men bare ved å finne temperaturgradienten til de laveste rotasjonstilstandene. Derfor vil faktiske målinger bestå av en temperaturgradient pluss en andel av populasjonen som ikke er i termodynamisk likevekt.

Blant de som mener at ingen av tilstandene er i lokal termodynamisk likevekt, såkalt NLTE, er Knoll og Unterguggenberger et al. Ved bruk av den relativt nye høyoppløselige echelle spektrografen UVES som ble brukt på data fra Very Large Telescope i Chile og sammenlignet med data fra SABER radiometeret på satellitten TIMED påstår de at andre faktorer, som for eksempel solsykluseffekter, fort vil drive tilstandene vekk fra LTE. Dette betyr at T_r aldri vil kunne bli lik T_{atm} [Knoll og Unterguggenberger et al. 2017].

Noen andre som også støtter denne hypotesen er Cosby og Slinger [2007]. De mener at temperaturforskjellen mellom veldig høye og lave vibrasjonstilstander er for lav til at noen av tilstandene er i LTE. De viser også til at populasjonen stort sett er uavhengig av vibrasjonstilstanden og siden reaksjon (2.1) er en sterkt eksotermisk reaksjon med en overskuddsenergi på ca 3.6eV vil ikke disse være i LTE.

1.2 Bruk av astronomiske målinger i IR spekteret

En annen underliggende motivasjon for denne oppgaven er at analysen til slutt kan være med på å løse noen av de problemene som oppstår når man prøver å foreta bakkebaserte astronomiske observasjoner. Hydroksyl utgjør den kraftigste bakgrunnstrålingen for landbaserte observatorier [Maihara et al. 1993]. Dette gjør det ideelt å måle OH ettersom at andre effekter bare kommer til å bidra med ca 5% til den målte intensiteten for disse bølgelengdene [Iwamuro et al. 1994]. Siden det infrarøde spekteret kan brukes til blant annet å se gjennom interstellar støv og detektere kaldere objekter som for eksempel planeter er dette en gunstig bølgelengde å bruke [Li og Draine 2001].

1.3 Oppgavens oppbygging

I denne oppgaven vil det undersøkes om en bakkebasert målestasjon som måler integralet av all OH utstråling for hver rotasjonslinje gjennom varierende OH-tetthet og temperatur faktisk gir opphav til temperaturen til atmosfæren

eller til NLTE distribusjon. Dette vil bli gjort ved å lage et syntetisk spektrum basert på temperaturene fra MSIS modellen, der vi antar LTE ved hver høyde. Deretter vil dette bli brukt til å finne temperaturgradienten til rotasjonstilstandene og den vektete temperaturen basert på OH-tettheten ettersom at det er dette som vil påvirke hvor mye stråling man får. Etter det vil det bli gjort en sammenligning mellom den vektete temperaturen, temperaturen funnet ved J' 1.5 til 9.5 og temperaturen funnet ved bare de tre laveste J' . Det vil også bli sett på overskuddspopulasjonen relativ til T for de tre laveste J' for å se hvor mye av populasjonen i de høyere tilstandene som er et resultat av temperaturgradienten gjennom OH laget og etter mulige ikke-Boltmannske distribusjoner over tilstandene. Det vil si at man vil se etter om det er mulig at det er en Boltzmannndistribusjon for lavere J' og en for høyere J' . Dette er av verdi fordi dette ikke vil være en NLTE effekt, men en faktor som må fjernes for å finne den faktiske NLTE effekten.

2 | Teori

2.1 OH stråling

OH blir produsert naturlig om natten via reaksjonen:



Her er OH^* en ustabil tilstand av OH. Når OH går fra å være ustabil til stabil vil den sende ut stråling med energi lik energiforskjellen mellom startbåndet og sluttbåndet i samsvar med Planck-Einstein relasjonen [Hemmer 2005]:

$$\Delta E = h\nu \quad (2.2)$$

Energien for reaksjonen (2.1) ligger i det infrarøde spekteret.

Det er gjort flere studier av infrarød stråling fra OH i atmosfæren. En av dem er [Baker og Stair 1988]. De gjorde 55 høydemålinger ved hjelp av 34 rakettoppskytinger og fant at OH^* i hovedsak befinner seg i et ca 8 km tykt lag i ca 80-90 km høyde. Strålingen fra dette laget kan bli observert fra satellittmålinger eller som et integral gjennom OH-laget fra bakken hvor det her kan forstyrre astronomiske målinger fra bakken som prøver å gjøre målinger i IR spekteret. Det er denne strålingen som blir brukt til å finne temperaturen til atmosfæren som en funksjon av høyden.

2.2 OH produksjon

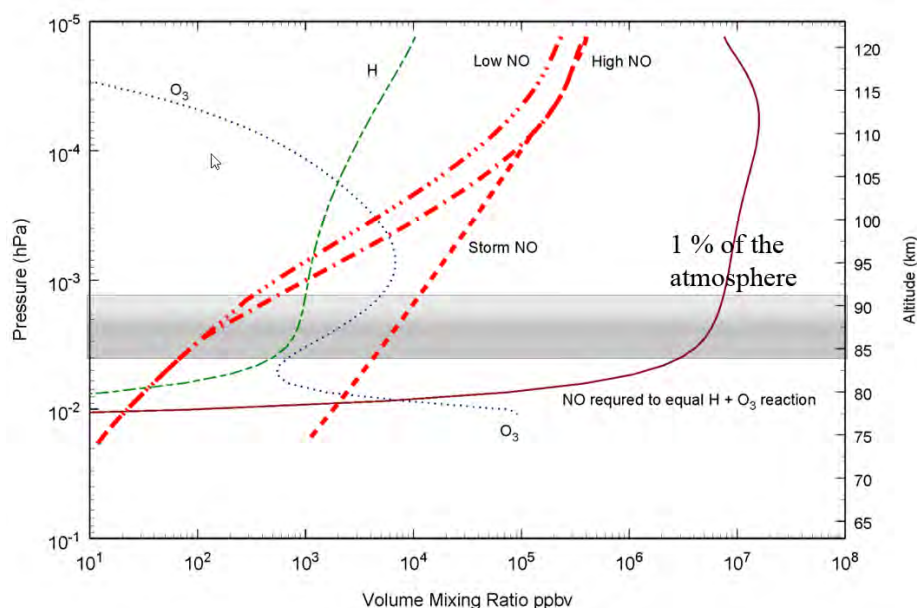
Som nevnt over vil ustabile OH molekyler sende ut stråling med energi lik energiforskjellen mellom de to tilstandene og disse radikale OH molekylerne dannes som et resultat av (2.1). Hydroksyket er ustabilt som et resultat av at det finnes andre rotasjons- og vibrasjonstilstander som har lavere potensiell energi som gjør at hydroksyket etterhvert vil gi fra seg denne energien for å komme ned i en stabil tilstand med lavere potensiell energi. Dette er en eksotermisk reaksjon som vil føre til at OH^* vil sende ut stråling som kan registreres som varme. Som man kan se i (2.1) er det konsentrasjonen til H og O_3 som avgjør hvor mye OH^* som dannes. Dette er gitt ved

$$P(OH^*) = k_{H+O_3}[H][O_3] \quad (2.3)$$

hvor k_{H+O_3} er likevektskonstanten.

Over 80 km vil konsentrasjonen til H være ganske konstant, mens konsentrasjonen til O_3 vil avhenge av forholdet mellom O og O_2 .

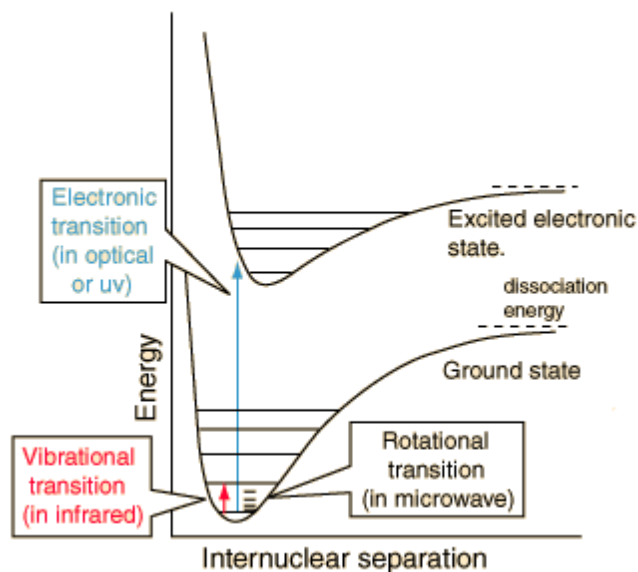
Over dette nivået vil økende høyde føre til minkende konsentrasjon av O_2 og svakt økende konsentrasjon av O og man kan finne at produktet av O og O_2 maksimeres ved rundt 87 km [Baker og Stair 1988]. Dette kan også sees i Figur 2.1. Dette gir et relativt tynt lag på ca 6-8 km hvor ustabilt OH kan forekomme naturlig via reaksjonen (2.1).



Figur 2.1: Figuren viser konsentrasjonen til O_3 , H og NO i forskjellige høyder. Det mørke båndet viser OH regionen.

2.3 OH molekylets spektroskopi

Det som bestemmer avstanden mellom energinivåene er rotasjonskonstanten. På grunn av den store masseforskjellen mellom et H- og et O-atom vil OH ha en høyere rotasjonskonstant enn andre diatomer. Som eksempel har OH 10 ganger større rotasjonskonstant enn de andre vanlige atmosfæriske gassene NO og CO [Herman og Horbeck 1953; Rank et al. 1965]. Dette vil føre til at 10 ganger så mange energinivåer er fylt opp. Dette medfører at NO og CO har 10 ganger så mange spektrallinjer som OH som igjen gjør at OH er enklere å måle fordi man trenger en lavere oppløsning.



Figur 2.2: Som kan sees i figuren består energitilstanden til atomet av rotasjons-, vibrasjons- og elektronbåndtilstander. Her går energiforskjellen i de forskjellige tilstandene fra rotasjon (minst) til elektronbånd (størst).

2.4 OH i termisk likevekt

Frem til nyere tid er det blitt antatt at OH^* har vært i termodynamisk likevekt med atmosfæren rundt. Dette har vært praktisk ettersom at man da har kunnet bruke bakkebaserte instrumenter til å ta integralet gjennom OH laget for så å finne temperaturen. Intensiteten til strålingen vil komme fra

$$I = \frac{N_0 2(2J + 1) A e^{-\frac{\epsilon}{kT}}}{Q} \quad (2.4)$$

hvor N_0 er startkonsentrasjonen, J er kvantetallet (totalt angular momentum quantum number), A er Einsteinkoeffisienten, k er boltzmanns konstant, ϵ er energien til initialtilstanden, T er temperaturen og Q er en korrigering av rotasjonstilstandene gitt som

$$Q = \frac{hcB}{kT}. \quad (2.5)$$

Her er hc Plancks konstant, T er i dette tilfellet temperaturen til omgivelsene og B er en energienhet knyttet til atomet som undersøkes [Herzberg 1950].

Fra ligning (2.4) kan man se at hvis man manipulerer ligningen litt vil man kunne få at temperaturen er en helning som funksjon av J , hvor resten er konstanter

eller variabler som man kan måle. Det er derfor mulig å finne temperaturen målt som et resultat fra alle båndene og mellom to og to bånd, og se om disse er de samme. På denne måten vil man kunne se om alle rotasjonsbåndene er i termodynamisk likevekt, om noen er det eller om ingen er i termodynamisk likevekt.

N_0 er i dette tilfellet OH konsentrasjonen for hver høyde. Dette blir funnet ved å bruke Kate Faloons modell [Faloon]. Denne er basert på den kjemisk empiriske atmosfæremodell kalt MSIS modellen og forutsetter blant annet at produksjonen av OH er lik utarmingen, en såkalt steady state [MSIS].

En annen måte å fremstille dette er ved formelen

$$\frac{d[OH]_{prod}}{dt} - \frac{d[OH]_{utarm}}{dt} = 0. \quad (2.6)$$

Modellen tar inn en gitt dato og bruker målte variabler til å gi en høydeprofil for T, O, N₂, O₂, OH og H for bakgrunnsatmosfæren.

2.5 T_{eff} vs T_{fit}

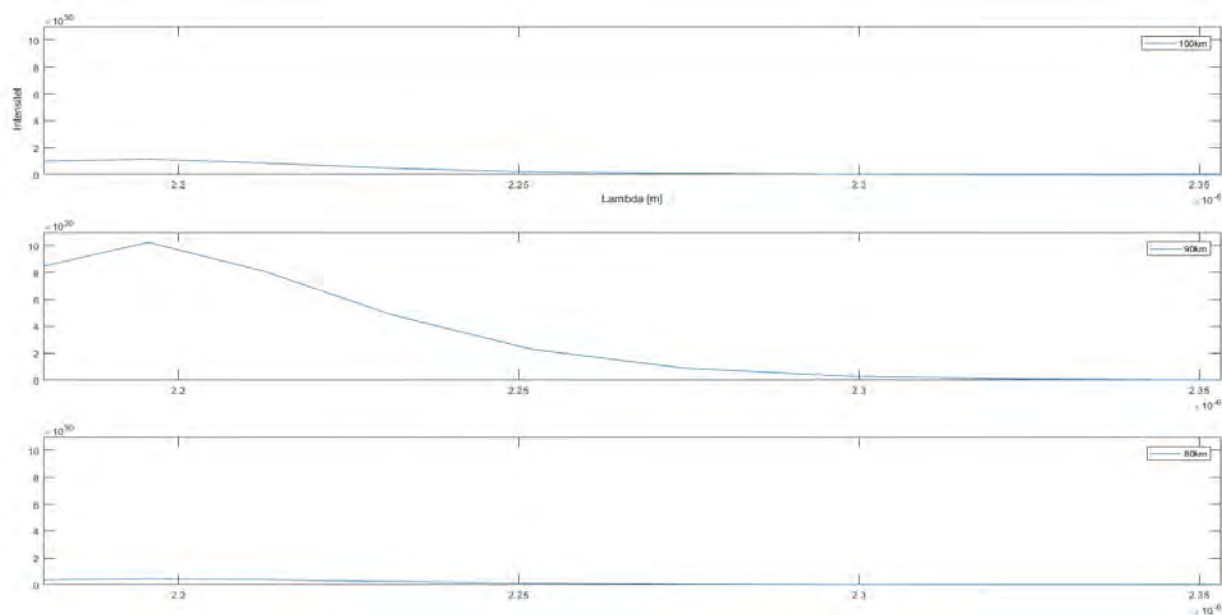
Siden Faloons modell gir ut OH tettheten og atmosfæretemperaturen for hver km mellom 75 km og 125 km kan man bruke dette til å lage et syntetisk spektrum for hver høyde gitt at man antar en Boltzmanndistribusjon karakterisert ved temperaturprofilen fra MSIS. Når man har gjort dette kan man ta integralet over høyden for de forskjellige bølgelengdene for å sammenligne med hva man forventer å se fra et bakkebasert instrument. Som man kan se i Figur 2.3 er både maks intensitet mye høyere og halen til fordelingen for 90 km lengre enn for 80 km og 100 km som et resultat av at det er høyere konsentrasjon av OH. En annen ting man kan se er at alle kurvene følger en Boltzmann distribusjon.

For å få en temperatur å sammenligne med blir det funnet det vektete snittet med hensyn på tettheten til OH og atmosfæretemperaturen fra MSIS for det undersøkte området 75-125 km gitt ved

$$\langle T \rangle = \frac{\int T(z) * [OH(z)] dz}{\int [OH(z)] dz} = T_{eff}. \quad (2.7)$$

I denne oppgaven må ingtraltegnet byttes ut med summetegn ettersom at både temperaturen og OH-tettheten ikke er kontinuerlige mellom grensene, men er gitt for hver km.

Når denne er funnet kan man begynne å se på om temperaturen fra rotasjons-deeksiteringene gir samme verdier som den vektete temperaturen. Da kan man også se om det er en sammenheng mellom årstider og hvor godt T_{fit} passer for



Figur 2.3: Figuren viser intensiteten for de forskjellige bølgelengdene for hhv 100 km, 90 km og 80 km funnet ved hjelp av Kate Faloons modell for vintersolverv 2016.

hver sesong. Dette er av interesse ettersom det virker som om det er en sammenheng mellom de forskjellige årstidene og strålingen utgitt fra OH [Espy et al. 2007].

2.6 Λ -dobling og Einsteinkoeffisienter

Et fenomen for diatomiske molekyler er at de kan ha en såkalt Λ -dobling. Dette er når molekylene har flere mulige tilstander de kan degenerere til. Dette betyr at for hvert energinivå er det to mulige tilstander som må skilles ved kvantetallet for banespinnet [Bransden og Joachain 2003]. At det er flere mulige utfall betyr også at man er nødt til å bruke statistisk fordeling når man skal finne energien som sendes ut når molekylet går fra en tilstand til en annen.

Her brukes Einsteinkoeffisienter for det spesifikke molekylet som man ønsker å undersøke. Disse koeffisientene sier noe om hvor mange deeksiteringer man forventer å se fra en tilstand til en annen per sekund [Hilborn 1982]. Vanlig notasjon for Einstein koeffisienter er $A(v', v, J', J'')$ hvor v' og v er hhv start- og sluttnivå for vibrasjon og J' og J'' er hhv start- og sluttnivå for rotasjon. Det er denne faktoren som ligger bak variabelen A i ligning (2.4).

3 | Analyse og resultater

I dette kapittelet skal det sees på hva som ble gjort med dataene, hvilke metoder som ble brukt, samt resultatene og analysen som ble foretatt av dem.

I denne oppgaven ble (9,7) vibrasjonsovergang i P grenen med rotasjonstilstandene J' fra 1.5 til 9.5 analysert. OH-molekylet vil ha en Λ -dobling, som forklart over, men bare en av disse grenene ble brukt i analysen ettersom disse grenene er veldig like. Dette kan man se ut ifra ligning (2.4) og tabellene 3.2 og 3.1 som er hhv Einsteinkoeffisientene $A(7,9,J',J'')$ og de tilhørende initialenergiene til rotasjonsnivåene. Dataene er hentet fra HITRAN databasen [HITRAN].

Tabell 3.1: Tabellen viser startenergien for rotasjonstilstandene 1.5 til 9.5 for (9,7) vibrasjonsbåndet til OH. Verdiene er hentet fra HITRAN databasen.

J	1.5	2.5	3.5	4.5	5.5	6.5	7.5	8.5	9.5
Bånd 1 * 10^4 [cm ⁻¹]	2.6186	2.6242	2.6321	2.6423	2.6549	2.6696	2.6867	2.7060	2.7274
Bånd 2 * 10^4 [cm ⁻¹]	2.6186	2.6242	2.6321	2.6423	2.6548	2.6696	2.6866	2.7059	2.7274

Tabell 3.2: Tabellen viser Einsteinkoeffisientene for rotasjonstilstandene 1.5 til 9.5 for (9,7)-vibrasjonsbåndet til OH. Verdiene er hentet fra HITRAN databasen.

J	1.5	2.5	3.5	4.5	5.5	6.5	7.5	8.5	9.5
Bånd 1	48.8200	60.4400	65.7900	69.1800	71.7400	73.7900	75.4400	76.8000	77.8600
Bånd 2	48.8200	60.4500	65.8000	69.2100	71.7500	73.8000	75.4800	76.8400	77.9100

Spektrumet måtte derfor skaleres slik at integralet over bølgelengdene under spektrumet som ble laget var lik den totale intensiteten funnet fra MSIS variablene for hver høyde.

3.1 LTE-analyse for $J' \leq 9.5$

Tidsperioden som ble undersøkt var sommer- og vintersolverv og vår- og høst-jevndøgn. Dette var for å se etter eventuelle forskjeller i årstidene. Plasseringen for input data i Kate Faloons modell ble satt til å være på koordinatene (28.75728 N, 17.88508 V). Dette er fordi det er plasseringen til Nordisk optisk teleskop (NOT). Grunnen til at denne posisjonen ble valgt var fordi hvis man skal etterprøve resultatene fra denne oppgaven er det fornuftig å sette posisjonen til et sted man relativt lett kan få data fra. Året som ble valgt for alle årstidene var 2016.

Først ble T_{eff} funnet ved hjelp av (2.7). Dette ga følgende resultater:

Tabell 3.3: T_{eff} for de forskjellige årstidene.

Årstid	Vår	Sommer	Høst	Vinter
$T_{eff}[K]$	192.1900	179.0421	189.8118	185.1079

Etter å ha brukt metoden beskrevet i kapittel 2.2 og 2.3 ga det syntetiske spekteret for alle J' temperaturgradienten T_{fit} sammenlignet med den vektete temperaturen T_{eff} følgende resultater:

Tabell 3.4: $T_{eff} - T_{fit}$ for periodene som ble analysert. Her ble temperaturgradienten til hele spekteret brukt.

Årstid	Vår	Sommer	Høst	Vinter
$\Delta T[K]$	-1.2335	-0.4588	-0.4107	-2.1230

Som man kan se er avviket om vinteren over 5 ganger større enn om høsten. Siden modellen som ble brukt antar LTE må denne forskjellen komme fra temperaturgradienten gjennom OH laget.

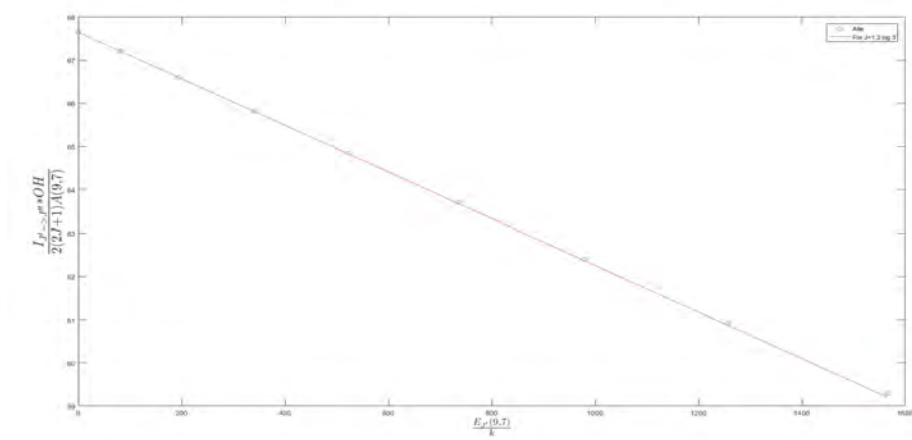
3.2 LTE-analyse for $J' \leq 3.5$

Ut ifra fortegnet i tabell 3.4 kan man se at helningen til temperaturgradienten til J' for alle årstidene er for slak i forhold til det man kan forvente fra T_{eff} . Dette argumenterer for at det bare er de første rotasjonstilstandene som er i LTE ettersom at temperaturgradienten blir slakere for høyere J' . Hvis man sammenligner temperaturgradienten til kun de 3 første nivåene av J' med T_{eff} får man i stedet:

Tabell 3.5: $T_{eff} - T_{fit}$ for periodene når man bare brukte temperaturgradienten til $J' \leq 3$.

Årstid	Vår	Sommer	Høst	Vinter
$\Delta T[K]$	-0.1546	-0.0409	-0.0469	-0.2833

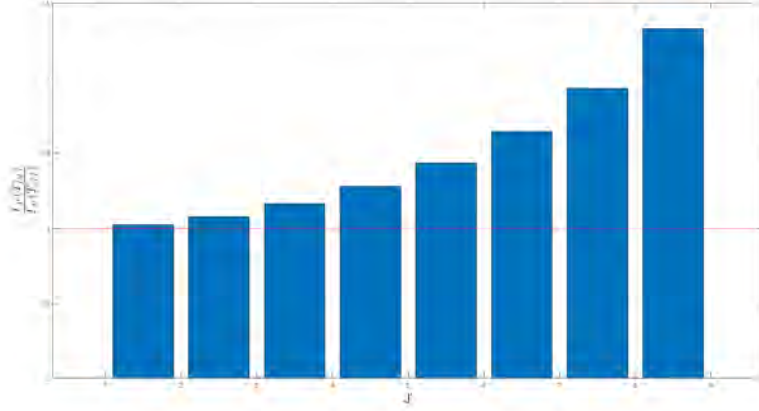
Fra tabell 3.5 kan man se at avviket for alle sesonger ble redusert med en faktor på ca 10. Programmet ble også satt til å finne avviket mellom T_{eff} og T_{fit} for $J' \leq 4.5$, men dette ga en ΔT som var ca dobbelt så stor som for $J' \leq 3.5$. Igjen kan man se at alle temperaturgradientene er litt slakere enn hva man hadde forventet fra T_{eff} , men at avviket er sterkt redusert ved å bare velge de lavere tilstandene.



Figur 3.1: Figuren viser de behandlede intensitetene slik at helningen på kurven er $1/T$ sfa startenergien til hvert bånd delt på Boltzmanns konstant. Punktene viser de faktiske verdiene for alle J' og den røde linjen viser helningen til kun de tre første båndene.

3.3 Sesongmessige variasjoner for relativ intensitet

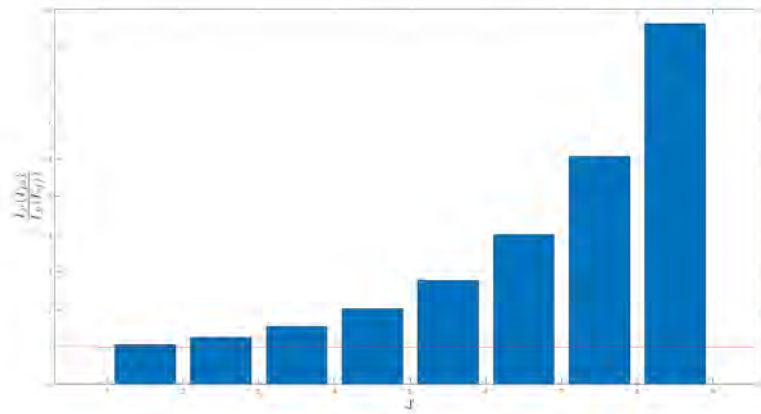
Som man kan se i Figur 3.2 til 3.5 er det store sesongmessige forskjeller på hvor stort forholdet mellom intensiteten til T_{eff} og T_{fit} er. Her er gradienten over alle J' brukt til å finne T_{fit} . Man kan for eksempel se at for sommer og høst er forholdet mellom $I(T_{eff})$ og $I(T_{fit})$ rundt 2.5 for $J' = 8.5$, mens tilsvarende for vinteren er forholdet over 80. Dette stemmer også overens med resultatene i tabell 3.4.



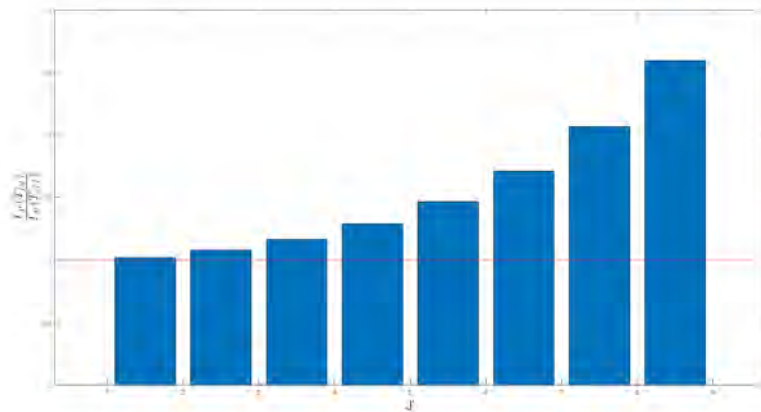
Figur 3.2: Forholdet $I(T_{fit})$ relativ til $I(T_{eff})$ for hver J' hvor T_{fit} er beregnet fra alle J' . Figuren viser forholdet for data fra høstjevndøgn 2016. Den røde linjen viser et forhold på 1.

3.4 Overskuddspopulasjon relativ til $T(J' \leq 3.5)$ $= T_{fit}$

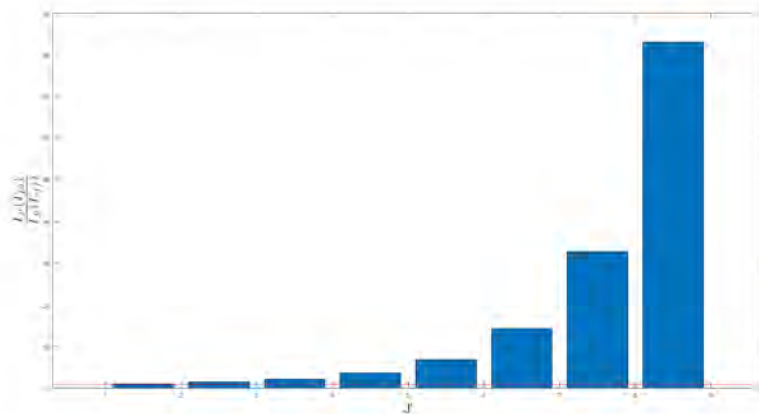
For å analysere om det finnes partikler som faktisk er i LTE, men kan mistolkes som NLTE, kan man se på overskuddspopulasjonen relativ til populasjonen man forventer å se når man bruker temperaturgradienten til $J' \leq 3.5$. Dette er fordi denne gradienten har vist seg å være mye nærmere T_{eff} enn T_{fit} fra alle J' , og modellen som ble brukt forutsetter LTE. Dette blir gjort ved å manipulere ligning (2.4) slik at man først finner populasjonen ved hjelp av data fra MSIS modellen og så finner populasjonen når man setter $T(J' \leq 3.5) = T_{fit}$. Figur 3.6 viser resultatet fra denne beregningen. Som man kan se er forholdet til overskuddspopulasjonen ≈ 1 for de tre første tilstandene, men så øker forholdet mellom dem for høyere J' -verdier. Dette gir også mening når man ser på Figur 3.5 hvor forholdet til intensiteten til T_{fit} fra alle J' relativ til T_{eff} også øker for stigende J' .



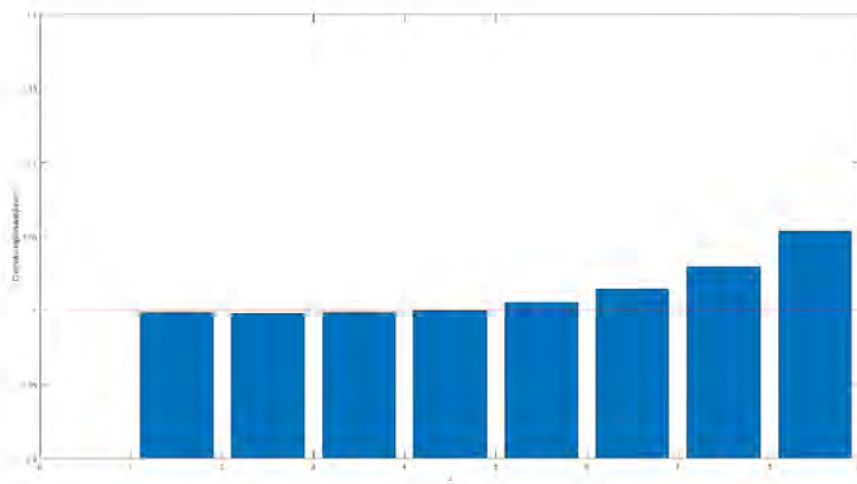
Figur 3.3: Forholdet $I(T_{fit})$ relativ til $I(T_{eff})$ for hver J hvor T_{fit} er beregnet fra alle J . Figuren viser forholdet for data fra vårjevndøgn 2016. Den røde linjen viser et forhold på 1.



Figur 3.4: Forholdet $I(T_{fit})$ relativ til $I(T_{eff})$ for hver J hvor T_{fit} er beregnet fra alle J . Figuren viser forholdet for data fra sommersolverv 2016. Den røde linjen viser et forhold på 1.



Figur 3.5: Forholdet $I(T_{fit})$ relativ til $I(T_{eff})$ for hver J' hvor T_{fit} er beregnet fra alle J' . Figuren viser forholdet for data fra vintersolverv 2016. Den røde linjen viser et forhold på 1.



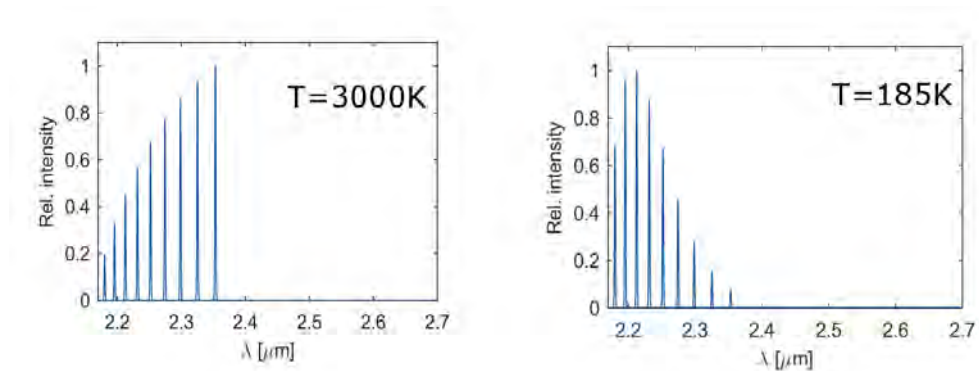
Figur 3.6: Figuren viser forholdet mellom overskuddspopulasjonen relativ til populasjonen basert på temperaturen funnet fra de tre laveste J' -nivåene.

4 | Diskusjon

4.1 LTE for lavere tilstander

Fra tabell 3.4 og 3.5 kan man se at temperaturgradienten til $J' \leq 3.5$ ga et mye mindre avvik fra den vektete temperaturen T_{eff} enn gradienten funnet over alle J' opptil 9.5. Som nevnt over vil reaksjon (2.1) ha en overskuddsenergi på ca 3.6eV. Dette gjør at OH'et nesten bare ender i de høyere tilstandene hvor energinivået også er høyere. Dette kan man se ut ifra Figur 4.1 og ihvertfall når de sammenlignes med felles referanse som i Figur 4.2. Her er de blå linjene beregnet for en temperatur på ca 185K ettersom at dette var ca T_{eff} for vintersolverv og de blå linjene er beregnet for $T=3000K$ ettersom overskuddsenergien rett etter reaksjon (2.1) har en $T \sim 3000K$ [Espy og Borge]. Dette vil føre til at bakkebasert måleinstrument som måler integralet over alle høyder og for alle bølgelengder generelt vil gi en for høy temperaturgradient.

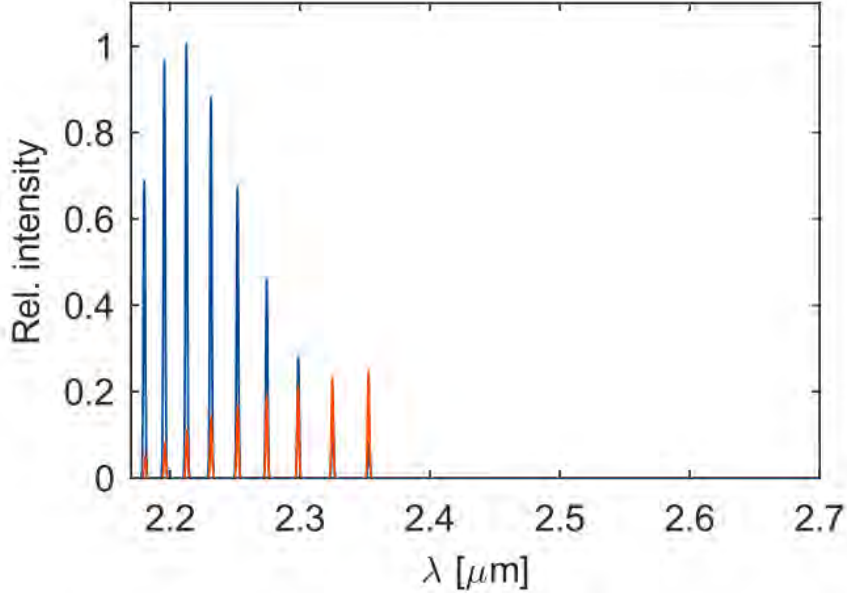
Fra disse fordelingene kan man se at alle bånd opp til $P_1(6)$ er veldig lave for $T=3000K$. Dette betyr at hvis populasjonen til disse båndene er ca lik populasjonen beregnet for de faktiske temperaturene funnet ved MSIS-modellen, og fremstilt i Figur 3.6, må en stor del av disse komme fra deeksitering fra høyere tilstander. Dette har gitt molekylene tid til å kollider og gi fra seg en del av den kinetiske energien til omgivelsene, mens de i de høyere tilstandene ikke vil ha hatt tid til å gi ifra seg noe av sin høye kinetiske energi. Molekylet vil helst hoppe ned 2 tilstander om gangen som man kan se ut ifra dataene i HITRAN databasen. Dette vil si at de i tilstandene $J' \leq 3.5$ statistisk sett vil ha gjort minst tre deeksiteringer og siden raten som tilstandene vil eksistere med er proporsjonal med ν^3 vil IR ha en lengre levetid enn det man forventer å se fra både synlig lys og UV [HITRAN]. Dette gjør at de høyere tilstandene fortsatt kan ha en Boltzmanndistribusjon, som kom fra reaksjon (2.1), men uten å være i LTE, mens de i lavere tilstand vil ha hatt tid til å avklimatisere seg til temperaturen til gassen rundt seg. Disse lave tilstandene vil også kunne ha en Boltzmanndistribusjon ettersom at deeksiteringen fra de høyere nivåene vil være en statistisk prosess basert på Einsteinkoeffisientene. Dette sammen med den relativt lange levetiden for hver tilstand vil gi dem en god sjanse til å kunne havne i LTE med gassen rundt.



Figur 4.1: Figurene viser Boltzmannfordelignene for $P_1(2)$ til $P_1(10)$ linjene for $T=3000\text{K}$ (høyre) og $T=185\text{K}$ (venstre) relativt til den høyeste verdien for settet. Som man kan se vil høyere temperatur føre til sterkere intensitet for lengre bølgelengder. 3000K og 185K ble valgt ettersom at T_{eff} for vintersolverv var ca 185K og T for overskuddsenergien $\approx 3.6\text{eV}$ rett etter reaksjon (2.1) har en $T \sim 3000\text{K}$.

4.2 NLTE vs. temperaturgradient + NLTE

Som postulert av Pendleton et al. vil det være en overskuddspopulasjon for de høyere tilstandene. Ettersom at dataene i denne oppgaven kommer fra MSIS som forutsetter at alt faktisk er i LTE for alle høyder kan man ut ifra Figur 3.6 se at det likevel vil være en overskuddspopulasjon når man velger en temperaturgradient som gjør at $T_{fit} \approx T_{eff}$. Mens Pendleton et al. [1993] viser til at det er en overskuddspopulasjon med en faktor ~ 2 for $J' = 7.5$ som han mener kommer fra partikler i NLTE kan man fra Figur 3.6 se at for dette båndet er det en overskuddsfaktor på ca 1.04. Dette betyr at ca 4% av det Pendleton et al. mener kommer fra NLTE faktisk kommer fra temperaturgradienten og ikke NLTE.



Figur 4.2: Figuren viser intensitetsfordelingen for $P_1(2)$ til $P_1(10)$ linjene relativ til den linjen med høyest intensitet. Her har blå linjer $T=185\text{K}$ og rød har $T=3000\text{K}$. Som man kan se har den laveste temperaturen høyere intensitetsfordeling for de laveste båndene, mens høyere T vil ha en fordeling rundt en høyere λ som tilsvarer $J \sim 30$. Programmet som ble kjørt hadde bare opp til $P_1(10)$ og det viser derfor ikke fordelingen for høyere tilstander, som for blå vil bli ~ 0 , men disse vil uansett ha en stor T etter reksjonen (2.1) i forhold til den lokale gassen og derfor ikke i nærheten av LTE.

4.3 Andre mulige påvirkningsfaktorer

Som man kan se fra tabell 3.4 og Figurene 3.2 til 3.5 er det store sesongmessige variasjoner. Dette er i samsvar med det som ble funnet i Espy et al. [2007] hvor målingene om vinteren er varmere, men også spredt utover et større intervall enn målingene om sommeren. Dette vil føre til at det vil være vanskeligere å finne en T_{fit} som passer T_{eff} for vinteren enn for sommeren. Dette er også i samsvar med resultatene i tabell 3.4.

En annen mulig påvirkningsfaktor er gravitasjonsbølger som beskrevet av Franzen et al. [2018]. Disse vil kunne endre både temperaturen og OH-tettheten de går igjennom og vil derfor også kunne endre overskuddspopulasjonen. Dette vil igjen kunne gjøre at man mistolker en del av overskuddspopulasjonen som NLTE, når de egentlig er et resultat av andre faktorer.

En mulig fortsettelse av denne studien kan være å simulere disse type bølger for

å se hva slags og hvor stor effekt dette har på temperaturgradienten. Dette vil også vise om det er en enda større andel som blir feiltolket som NLTE når det egentlig er et resultat av temperaturgradienten.

4.4 Usikkerhet

Siden dataene i denne oppgaven er kommet fra et syntetisk spektrum via MSIS-modellen vil det ikke være noen usikkerheter rundt resultatene. På en annen side vil dataene til et syntetisk spektrum heller aldri kunne bli bedre enn den beste modellen og siden selv den beste modellen ikke har alle variablene vil det fort kunne avvike fra faktiske målinger.

En annen faktor som kan få resultatene til å variere er svingninger fra år til år. Programmet som ble kjørt ble også testet for to andre tilfeldige år, men resultatene ble tilnærmet de samme som i tabell 3.4. Et av forslagene for videre arbeid er å kjøre programmet for en lengre tidsperiode da man har MSIS-data fra 1960 og frem til i dag. Dette vil gi et sikrere resultat og bedre forutsetning for å analysere de sesongmessige variasjonene i mer detalj.

5 | Konklusjon

Basert på steady state modellen MSIS er det blitt lagd et syntetisk spektrum som er blitt behandlet og analysert. Selv om T_{fit} aldri ble helt lik T_{eff} kan man ved å velge en temperaturgradient ut ifra de lavere rotasjonstilstandene få T_{fit} til å bli veldig nær T_{eff} . Dette kan man lese fra tabell 3.4 og 3.5 hvor man kan se at avviket har sunket med en faktor ~ 10 ved valget av temperaturgradient basert på $J' \leq 3.5$ i stedet for opptil 9.5. Som nevnt i kapittel 4.4 vil det være flere andre faktorer som vil være med å endre både T og OH-tettheten som blant annet gravitasjonsbølger og sesongmessige variasjoner. Dette gjør at hvis man henter ut faktiske målinger, som i dette tilfellet ville være fra NOT, kan de variere en del både fra T_{eff} og $T(J' \leq 3.5)_{fit}$ funnet i denne oppgaven.

Når det gjelder overskuddspopulasjonen kan man se at det i tilfellet for $T(J' \leq 3.5) = T_{fit}$ fortsatt vil være overskudd for høyere J' . Dette fører til at det Pendleton et al. [1993] postulerer om en temperaturgradient pluss en rest som består av molekyler i NLTE ikke stemmer helt. Her virker det som om man får to Boltzmanndistribusjoner, en rundt de lavere tilstandene, som et resultat av flere deeksiteringer ned til disse tilstandene og som gir en temperaturgradient rundt T_{eff} , og en som et resultat av reaksjonen (2.1) som lager OH⁺, som har en langt høyere temperatur. Som nevnt i kapittel 4.2 vil deler av denne overskuddspopulasjonen være på grunn av temperaturgradienten som ble funnet for å passe T_{eff} og ikke NLTE. Denne andelen må derfor trekkes fra hvis man ønsker å studere de faktiske effektene fra NLTE.

Referanseliste

[Baker og Stair 1988] Baker D.J. and Stair J.T. Rocket measurements of the altitude distributions of the hydroxyl airglow, *Physica Scripta.*, Vol. 37, s. 611-622, 1988.

[Benedict et al. 1953] Benedict, W. S., E. K. Plyler, and C. J. Humphreys, The emission spectrum of OH from 1.4 to 1.7 μ , *J. Chem. Phys.*, 21(3), 398-402, 1953

[Borge] Borge, H., Konsentrasjonspåvirkende effekter på hydroksyl utstråling, NTNU, 2017

[Bransden og Joachain 2003] Bransden, B.H. og Joachain, C.J., *Physics of Atoms Molecules*, 2. utg., Prentice Hall, 2003

[Cosby og Slinger 2007] Cosby, P. C. og Slinger, T. G., OH spectroscopy and chemistry investigated with astronomical sky spectra, *Canadian Journal of Physics*, Vol. 85, No. 2, p. 77-99, 2007

[Espy et al. 2007] Espy, P. J., Stegman J., Forkman P. og Murtagh D., Seasonal variation in the correlation of airglow temperature and emission rate, *Geophysical Research Letters*, vol. 34, 2007

[Espy og Borge] Espy og Borge, privat kommunikasjon

[Faloon] Faloon og Espy, privat kommunikasjon

[Franzen et al. 2018] Franzen, C., Espy, P. J., Borge, H. og Hibbins, R. E., Effects of the Atmospheric Temperature Structure on the Rotational Distribution of the High Vibrational Levels of the Hydroxyl Airglow, Birkeland centre for space science, 2018

[Hemmer 2005] Hemmer, P.C. *Kvantemekanikk. 5. Ug, s. 12*: Trondheim: Tapir Akademiske Forlag, 2005.

[Herman og Horbeck 1953] Herman, R. C. og Horbeck, G. A., Vibration-Rotation Bands of OH*, *Astrophysical Journal*, vol. 118, s.214, 1953.

[Herzberg 1950] Herzberg, G., *Molecular spectra and molecular structure*, D. van Nostrand company, 2. ed., s. 124-128, 1950

[Hilborn 1982] Hilborn, Robert C., Einstein coefficients, cross sections, f values, dipole moments, and all that, *American Journal of Physics*. 50, 1982

[HITRAN] Rothman, L. S., Gordon, I. E., Babikov, Y., Barbe, A., Benner, D. C., Bernath, P. F., Birk, M., Bizzocchi, L., Bouden, V., Brown, L. R., Campargue, A., Chance, K., Cohen, E. A., Cohen, L. H., Devi, V. M., Drouin, B. J.,

Fayt, A., Flaud, J.-M., Gamache, R.R., Harrison, J.J., Hartmann, J.-M., Hill, C., Hodges, J.T., Jacquemart, D., Jolly, A., Lamouroux, J., LeRoy, R.J., Li, G., Long, D.A., Lyulin, O.M., Mackie, C.J., Massie, S.T., Mikhailenko, S., Müller, H.S.P., Naumenko, O.V., Nikitin, A.V., Orphal, J., Perevalov, V., Perrin, A., Polovtseva, E.R., Richard, C., Smith, M.A.H., Starikova, E., Sung, K., Tashkun, S., Tennyson, J., Toon, G.C., Tyuterev, V.I. og Wagner, G., The HITRAN2012 molecular spectroscopic database, *Journal of Quantitative Spectroscopy Radiative Transfer* 130, s. 4–50, 2013.

[Iwamuro et al. 1994] Iwamuro F., Maihara T., Oya S., Tsukamoto H., Hall D.N.B., Cowie L.L., Tokunaga A.T. og Pickles A.J. Development of an OH-airglow suppressor spectrophotograph. *Astronomical Society of Japan*, Vol. 46, s.518, 1994.

[Knoll og Unterguggenberger et al. 2017] Noll, S., Kimeswenger, S., Proxauf, B., Unterguggenberger, S., Kausch, W., og Jones, A. M., 15 years of VLT/UVES OH intensities and temperatures in comparison with TIMED/SABER data, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 2017

[Li og Draine 2001] Li A. og Draine B. T. Infrared Emission from Interstellar Dust. II. The Diffuse Interstellar Medium. *The American Astronomical Society*, Vol. 554, 2001.

[Maihara et al. 1993] Maihara T., Iwamuro F., Yamashita T., Hall D.N.B., Cowie L.L., Tokunaga A.T. og Pickles A., Observations of the OH airglow emission, *Astronomical Society of the Pacific*, Vol. 105, s. 940-944, 1993.

[McPherson og Jones 1960] McPherson, D. H., og A. Vallance Jones, A study of the latitude dependence of OH rotational temperatures for Canadian stations, *J. Atm. Terr. Phys.*, 17, 302-308, 1960.

[MSIS] Picone, J. M., NRLMSISE-00 empirical model of the atmosphere: Statistical comparisons and scientific issues, *Journal of Geophysical Research*, 107(A12), 2002

[Pendleton et al. 1993] Pendleton, W. R., Espy, P. J. og Hammond, M. R., Evidence for Non-Local-Thermodynamic-Equilibrium Rotation in the OH Nightglow, *Journal of geophysical research*, vol. 98, s. 11,567-11,579, 1993

[Rank et al. 1965] Rank, D. H., Pierre, A. G. St. og Wiggins, T. A., Rotational and vibration constants of CO, *Journal of Molecular Spectroscopy*, Volume 18, s. 418-427, 1965.

[Shefov 1961] Shefov, N. N., On determination of the rotational temperatures of OH bands in Spectral Electrophotometrical and Radar Research of Aurora and Airglow, *Academy of Sciences, Moscow*, 1961

[Shefov 1972] Shefov, N. N., Remarks on the OH Rotational Temperature in the Night Glow, *Can. J. Phys.*, 50, 1225-1226, 1972

[Wallace 1962] Wallace L., The OH nightglow emission, J. Atmos. Sci.,19, 1-16, 1962

Figurer

Figur 2.2: <http://www.hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/molecule/rotrig.html>
[Nedlastet: 25.11.2017]

Figur 2.1: Espy P. J., NTNU, med data fra MSIS modell (Picone, J. M., A. E. Hedin, D. P. Drob, and A. C. Aikin, NRLMSISE-00 empirical model of the atmosphere: Statistical comparisons and scientific issues, J. Geophys. Res., 107(A12), 1468, doi:10.1029/2002JA009430, 2002.)