

Analys av HCN-emission från kometen C/2013 R1 (Lovejoy)

Kandidatarbete inom Rymd- och geovetenskap

PHILIP KÄLLSTRÖM
ALEXANDER LEVINSSON
ASTRID OLIVEFORS
ELIN TEGEHALL

KANDIDATARBETE 2015

**Analys av HCN-emission
från kometen C/2013 R1 (Lovejoy)**

PHILIP KÄLLSTRÖM
ALEXANDER LEVINSSON
ASTRID OLIVEFORS
ELIN TEGEHALL



CHALMERS

Institutionen för Rymd- och geovetenskap
CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA
Göteborg, Sverige 2015

Analys av HCN-emission från kometen C/2013 R1 (Lovejoy)

PHILIP KÄLLSTRÖM
ALEXANDER LEVINSSON
ASTRID OLIVEFORS
ELIN TEGEHALL

© Philip Källström, Alexander Levinsson, Astrid Olivefors, Elin Tegehäll, 2015.

Handledare: Eva Wirström, Institutionen för Rymd- och geovetenskap
Mikael Lerner, Institutionen för Rymd- och geovetenskap; Onsala rymdobservatorium
Examinator: Vincent Desmaris, Institutionen för Rymd- och geovetenskap
Magnus Thomasson, Institutionen för Rymd- och geovetenskap

Kandidatarbete RRYX02-15-03 2015
Institutionen för Rymd- och geovetenskap
Chalmers tekniska högskola
SE-412 96 Gothenburg

Kontakt:

phikal@student.chalmers.se
alelev@student.chalmers.se
oastrid@student.chalmers.se
elinte@student.chalmers.se

Omslag: Ett spektrum med alla observationer av C/2013 R1 (Lovejoy) gjorda mellan den 16 november och 15 december 2013 på Onsala rymdobservatorium, som visar de tre rotationsövergångarna $J = 1 - 0$ för HCN.

Typsatt i L^AT_EX
Göteborg, Sverige 2015

Sammanfattning

I den här rapporten presenteras resultat från observationer av kometen C/2013 R1 (Lovejoy) utförda med 20-metersteleskopet vid Onsala rymdobservatorium under hösten 2013. Projektet omfattar analys av rådata från observationsdagarna då emission för rotationsövergången $J = 1 - 0$ för molekylän vätecyanid (HCN) observerades. Detektioner har kunnat göras för sju olika datum då C/2013 R1 (Lovejoy) befann sig på avståndet 0,94-0,82 AU från solen, strax innan perihelium. Produktionstakten för HCN ökar från $3 \cdot 10^{26} \text{ s}^{-1}$ till $5 \cdot 10^{26} \text{ s}^{-1}$ med det minskande avståndet till solen. En av dagarna har även delats upp i medelvärdesbildningar över kortare tidsintervall för vilka en periodisk variation i produktionstakten kan urskönjas men inte bekräftas.

För att genomföra beräkningar och behandling av data har två datorprogram nyttjats. Det första är *xs*, ett datareduceringsprogram som används för att behandla mätdata från radioastronomiska observationer, skrivet av Per Bergman vid Onsala rymdobservatorium. Det andra är programmet *mom* som utvecklats av Stefanie Milam vid NASA Goddard Space Flight Center.

Abstract

In this report, results from the observations of comet C/2013 R1 (Lovejoy) carried out with the 20 meter telescope at Onsala Space Observatory during the autumn of 2013 are presented. The project comprises the analysis of data from the observation dates when emission from the rotational transition $J = 1 - 0$ for the molecule hydrogen cyanide (HCN) were observed. Detections have been made for seven different dates when C/2013 R1 (Lovejoy) were at a distance of 0.94-0.82 AU from the sun, just before perihelion. The production rate increases from $3 \cdot 10^{26} \text{ s}^{-1}$ to $5 \cdot 10^{26} \text{ s}^{-1}$ with the decreasing distance to the sun. One of the days has also been divided in mean value formations over shorter time intervals for which a periodic variation in the production rate can be discerned although not confirmed.

To perform calculations and processing of data, two computer programs have been used. The first is *xs*, a data reduction software for radio astronomical observations, written by Per Bergman at Onsala Space Observatory. The second program is *mom*, developed by Stefanie Milam at NASA Goddard Space Flight Center.

Förord

Vi vill tacka Onsala rymdobservatorium och institutionen för Rymd- och geovetenskap för möjligheten att genomföra ett mycket intressant projekt. Ett stort, varmt tack också till våra handledare Eva Wirström och Mikael Lerner, som entusiasmerat oss med sitt engagemang från början till slut. Utan er hade inte projektet varit möjligt att genomföra. Till sist ett tack också till alla de som tagit sig tid att läsa igenom rapporten och kommit med intressanta synpunkter.

Philip, Alexander, Astrid, Elin

Göteborg, maj 2015

Innehåll

1	Inledning	1
1.1	Syfte	1
1.2	Avgränsningar	2
1.3	Metod	2
1.4	Rapportstruktur	2
2	Teori	3
2.1	Radioastronomi	3
2.1.1	Signalmottagning	5
2.1.2	Observationsteknik och signalbehandling	9
2.1.3	Observationstid	13
2.1.4	Onsala rymdobservatorium	13
2.2	Kometer	15
2.2.1	Solsystemets bildande och uppbyggnad	15
2.2.2	Klassificering av kometer	15
2.2.3	Kometers uppbyggnad	16
2.2.4	Kometers rotation	19
2.2.5	Kunskapen om kometer i ett vidare sammanhang	19
2.3	Kvantfysiken bakom strålningsemission	21
2.3.1	Energiövergångar för molekyler	21
2.3.2	Tvånivåsystem	22
2.3.3	Atomär finstruktur och hyperfinstruktur	24
2.3.4	Hyperfinstruktur för HCN med rotationsövergång $J = 1 - 0$	26
2.4	Strålningstransport	27
2.4.1	Ekvationen för strålningsintensitet	27
2.4.2	Härledning av uttryck för kolumntäthet	28
2.5	Hasermodellen	29
2.6	Kometen C/2013 R1 Lovejoy	30
2.6.1	Omloppsbana	30
2.6.2	Kemisk sammansättning	30
2.6.3	Produktionstakt av HCN	31
3	Databehandling	32
3.1	Datareducering	32
3.1.1	Urval av data	32
3.1.2	Vikning av spektra	33
3.1.3	Baslinjeanpassning	34
3.1.4	Medelvärdesbildning	35
3.2	Integrerad intensitet	35
3.3	Kolumntäthet	37
3.4	Produktionstakt	38
3.4.1	Molekylernas medellivslängd	39

3.4.2	Molekylernas hastighet	39
3.4.3	Teleskophuvudlobens halvvärdesbredd på kometens avstånd	40
4	Resultat	41
4.1	Framtagna emissionsspektra	41
4.2	Beräknade produktionstakter av HCN	43
4.2.1	Medelvärdesbildning över enskilda dagar och alla observationsdagar	43
4.2.2	Medelvärdesbildning över uppdelade tidsintervall den 24 november	44
5	Diskussion	46
5.1	Trender i resultat	46
5.1.1	Tendenser till periodisk variation under den 24 november	46
5.2	Jämförelse med publicerade resultat	46
5.3	Approximationernas validitet	48
5.3.1	Rayleigh-Jeans approximation	48
5.3.2	Optiskt djup	49
5.3.3	Lokal termodynamisk jämvikt och temperaturer	49
5.3.4	Hasermodellens validitet i sammanhanget	49
5.4	Parametrar till mom	50
5.5	Databehandling i xs	50
6	Slutsatser	52
	Litteraturförteckning	53
	Bilagor	57
A	Facktermer	57
B	Komplementerande resultat	58
B.1	Utvald data med integrerade intensiteter	58
B.2	Spektra över enskilda dagar med detektion av HCN	59
B.3	Spektra över uppdelning av 24 november	62
B.4	Spektra över enskilda dagar utan detektion av HCN	64
C	Proposaler	66
C.1	ISON-proposal	66
C.2	Lovejoy-proposal	72

Kapitel 1

Inledning

I utkanten av solsystemet, bortom Neptunus, finns en mängd vilande kroppar av is och stoft, varav de flesta inte är mer än några kilometer stora. Dessa så kallade kometer har befunnit sig i omlopp långt bort från solen sedan tiden då solsystemet bildades, men då och då blir deras banor störda av till exempel gravitationen från en större förbipasserande kropp och börjar falla in mot solsystemets centrum (de Pater & Lissauer 2010).

Den is som varit fryst börjar värmas upp när kometerna närmar sig solen. Kring avståndet 3 AU^1 från solen börjar kometen producera ånga av vatten och andra flyktiga ämnen som bildar vad som kan liknas vid en atmosfär, en gaskoma, runt kometen. Gaserna i koman kan observeras via teleskop på jorden och ge oss kunskap om den kemiska sammansättningen hos kometer ("ISON-Proposal" 2013).

Insikter om kometer är intressanta då de kan öka förståelsen inom ett större astronomiskt sammanhang, nämligen kunskapen om hur solsystemet bildades. I sin ungdom var solsystemet kaotiskt och planeterna bombarderades av mindre kroppar, vilkas sammansättning har påverkat förhållandena på varje planet. De kometer som passerar nära solen idag har inte förändrats sedan den här tiden, och genom att undersöka deras kemiska sammansättning kan vi dra slutsatser om varför planeterna ser ut som de gör (de Pater & Lissauer 2010).

Kometen C/2013 R1 (Lovejoy) upptäcktes i september 2013. Några månader efter upptäckten hade den överträffat förväntningarna gällande dess ljusstyrka, vilket förmodligen betyder en hög produktions-takt (engelskt uttryck: *production rate*). Produktionstakten är definierad som mängden gas förångad per tidsenhet. En grupp forskare vid Onsala rymdobservatorium beslutade att observera kometen och använde ett av radioteleskopen på observatoriet för att observera emission från molekylän vätecyanid (HCN) i Lovejoys koma ("Lovejoy-Proposal" 2013). Molekylen är intressant att studera då det finns många obesvarade frågor om kemin för HCN i kometer.

När en komet har observerats måste en viss behandling av rådata ske för att informationen skall bli användbar. Produktionstakten är viktig att beräkna då den kan användas för att få reda på mer om flera olika egenskaper hos en komet. Till exempel kan slutsatser dras angående den kemiska sammansättningen i kärnan och den totala produktions-takten kan relateras till kärnans totala massa. Utifrån variationer i produktions-takten beroende på avståndet från solen kan analyser göras om hur kometen fysiskt är uppbyggd, till exempel om den är kompakt eller porös, om isen finns på ytan eller under lager av stoft. Slutligen kan informationen om produktions-takt användas för att bedöma hur många gånger kometen har passerat nära solen.

1.1 Syfte

Projektets syfte är att beräkna produktions-takten av HCN för kometen Lovejoy. Detta skall göras utifrån mätdata från observationer utförda vid Onsala rymdobservatorium. Dessutom skall resultatet jämföras med publicerade observationer från andra teleskop vid olika tidpunkter.

¹Astronomisk enhet, en längdenhet som används inom astronomi, $1 \text{ AU} = 149\,597\,870 \text{ km} \approx$ avståndet från solen till jorden (Nordling & Österman 2010).

1.2 Avgränsningar

Projektet omfattar analys av endast en molekyl på en komet, utifrån mätdata från sammanlagt tolv dagars observationer. Underlaget för de jämförande studierna består, utöver de beräknade resultaten, av publicerad data från andra teleskop och tidpunkter.

Slutligen är en viktig avgränsning mängden teori. Det finns oändliga möjligheter att gå djupt in på flera relaterade områden, men då projektet har en begränsad omfattning kommer teorin ligga på en detaljnivå som är relevant med avseende på projektets syfte och storlek.

1.3 Metod

Genomförandet av det här kandidatarbetet består huvudsakligen av två moment; litteraturstudier och databehandling. Databehandlingen krävs för att det slutliga resultatet som anger produktionstakt för HCN ska kunna analyseras och jämföras med liknande studier av samma komet. Litteraturstudien å sin sida är nödvändig för att få förståelse om kometer och varför dess enskilda komponenter studeras; teorin är viktig för att kunna sätta in resultatet i ett sammanhang och förstå dess betydelse.

Initialt utfördes litteraturstudier för att få en grundläggande förståelse för projektets centrala teoridelar: kometer, radioastronomi och kvantmekaniska rotationsövergångar. Ett studiebesök på Onsala rymdobservatorium genomfördes för att få en ökad förståelse för arbetets innebörd och den radioastronomiska tekniken som används vid datainsamling.

När nödvändiga litteraturstudier genomförts påbörjades databehandlingen. Den information som fanns tillgänglig var insamlad rådata från Onsala rymdobservatorium. Hela databehandlingen, från tillgänglig rådata till beräknade produktionstakter, är beskriven i detalj i kapitel 3. För att reducera rådatan och göra den funktionell användes datareduceringsprogrammet *xs*. Vidare nyttjades *xs* även till att bestämma flera nödvändiga parametrar för att kunna beräkna produktionstakten av HCN. Produktionstakten beräknades med ett färdigt program (*mom*) skrivet i programspråket C++. För att bestämma vissa inparametrar till programmet användes mjukvaran *MATLAB* för matematiska beräkningar och den astronomiska datan om kometen Lovejoy som använts har erhållits från JPL², en forskningsinstitution som tillhandahåller astronomisk data, till exempel efemerider. Efemerider är data som redovisar olika astronomiska objekts positioner och rörelser som funktion av tiden.

I projektets slutskede återgick arbetsmetoden till litteraturstudier. Huvudsyftet var då att hitta publicerade artiklar om Lovejoy för att kunna jämföra de beräknade produktionstakterna med astronomers resultat.

1.4 Rapportstruktur

I kapitel 2 presenteras den bakomliggande teorin till det här kandidatarbetet. Metoden som har använts presenteras i kapitel 3, resultatet i kapitel 4 och i kapitel 5 finns diskussionen. Eftersom många av de facktermer som använts i denna rapport saknar vedertagna svenska motsvarigheter har de översatts och en fullständig lista av dessa återfinns i bilaga A. De spektra som erhållits men ej redovisas i kapitel 4 står att finna i bilaga B. Bilaga C.1 och C.2 innehåller de ursprungliga proposalerna för observation av kometerna C/2012 S1 (ISON) och C/2013 R1 (Lovejoy) på Onsala rymdobservatorium.

²JPL är en förkortning för Jet Propulsion Laboratory. Tillgänglig från <http://ssd.jpl.nasa.gov/horizons.cgi>.

Kapitel 2

Teori

Teorin för det här projektet består främst av tre stora områden: radioastronomi, kometer och kvantfysik. Först presenteras radioastronomi i avsnitt 2.1 för en allmän förståelse vad radioastronomi innebär. Sedan riktas teorin in på kometer i avsnitt 2.2 och en kvantfysikalisk förklaring till vad som observeras ges i avsnitt 2.3. I slutet av teorikapitlet beskrivs strålningstransport i avsnitt 2.4 och Hasermodellen i avsnitt 2.5 innan slutligen det som finns känt om kometen Lovejoy beskrivs specifikt i avsnitt 2.6.

2.1 Radioastronomi

Radioastronomi är det forskningsområde inom astronomi som använder sig av radiovågor. Radiovågor är elektromagnetisk strålning och består av de längsta våglängderna, från 1 mm upp till cirka 1000 km (Boström & Börjesson 2015). Omvandling till frekvensrummet sker enkelt via

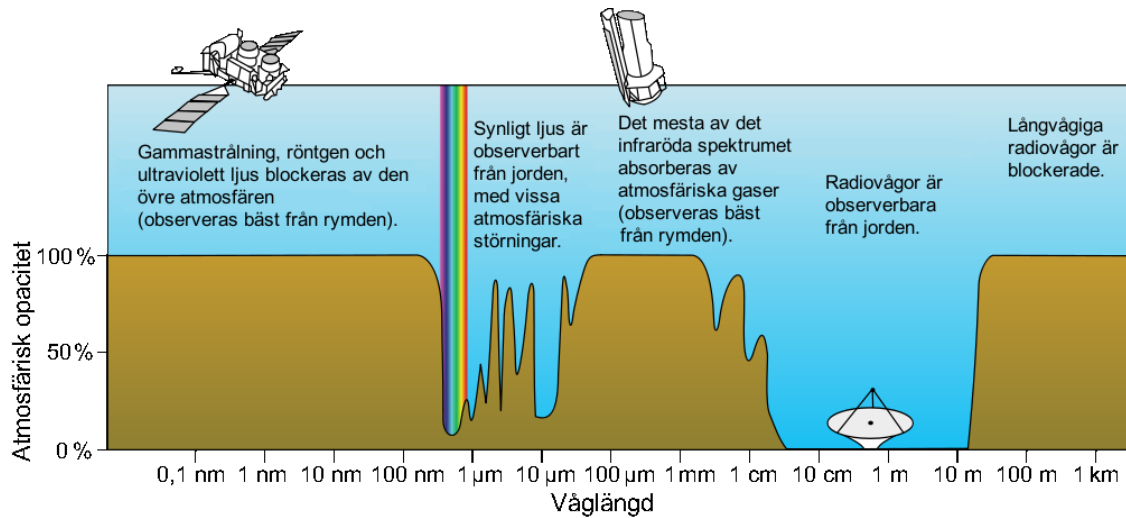
$$f = \frac{c}{\lambda}, \quad (2.1)$$

där $c = 2,998 \cdot 10^8$ m/s är ljushastigheten och λ är radiostrålningens våglängd. Ekvation (2.1) ger således att radiovågor behandlar frekvenser mellan 300 Hz och 300 GHz. Atmosfärens påverkan gör dock att de längsta våglängderna inte kan studeras inom radioastronomi, vilket förklaras senare. De våglängder som studeras inom radioastronomi är därför ungefär 1 mm till 20 m, vilket svarar mot frekvensintervallet 15 MHz - 300 GHz (Olofsson 2015).

För att förstå varför just radiovågor är intressanta ur ett astronomiskt perspektiv krävs en kortfattad förklaring av astronomi som forskningsområde. Nästan all kunskap inom astronomi som mänskligheten idag besitter härstammar från observationer av elektromagnetisk strålning och bara en mycket liten del kommer från informationsbärande material. Exempel på sådana material är meteoriter som träffat jordens yta och partiklar från kosmisk strålning, som består av bland annat atomkärnor och subatomära partiklar (Hüttemeister et al. 2009).

Det råder inga tvivel om att just observationer är en nyckel till ny och förbättrad kunskap inom astronomi. En stor restriktion för observationer från jorden är atmosfären. I flera århundraden har mänskligheten använt sig av observationer inom det optiska våglängdsintervallet för astronomisk forskning. Det är uppenbart att atmosfären är transparent för det synliga ljuset, annars skulle vi människor inte kunna se någonting av rymden. Dagens situation ser annorlunda ut med möjligheter att göra observationer från rymden utan påverkan från atmosfären. Att skicka upp teleskop till rymden är dock kostsamt och många av dagens observationer görs därför från jordens yta och atmosfärens begränsningar kvarstår.

Om hela det elektromagnetiska spektrumet studeras är atmosfären bara transparent för en liten del av det, vilket visas i figur 2.1. Atmosfären blockerar nästan all kortvågig strålning: gammastrålning, röntgenstrålning och stora delar av det ultravioletta ljuset når inte fram till jordens yta. För längre våglängder än synligt ljus gäller även att atmosfären blockerar mycket infrarött ljus och mikrovågor. Dessutom emitterar atmosfären strålning inom detta område, vilket försvårar observationer ytterligare. Radiovågor med vissa våglängder däremot passerar genom atmosfären och kan, precis som synligt ljus, observeras från jorden. De radiovågor som inte passerar genom atmosfären, och därmed inte kan studeras från jorden,



Figur 2.1: Atmosfärens opacitet visas som funktion av våglängden för elektromagnetisk strålning från rymden. I figuren anges opaciteten i hur stor andel av strålningen som blockeras av jordens atmosfär. Översatt av Alexander Levinsson från Wikimedia Commons (2008).

är de med våglängder längre än ungefär 20 m. Dessa passerar inte genom jonosfären, som är den yttersta delen i atmosfären. Anledningen till detta är att jonosfären består av fria elektroner som vid låga frekvenser svänger med radiovågorna. Elektronerna kolliderar sedan med neutrala partiklar i jonosfärens lägre skikt, vilket medför energiförluster för radiovågorna som därmed dämpas och på så sätt är atmosfären inte transparent för långvågiga radiovågor. Gränsen för vilka våglängder som passerar respektive blockeras på grund av detta fenomen beror på densiteten av fria elektroner i jonosfären, vilken beror på solaktiviteten, och varierar således (Boström 2015).

Ur ett historiskt perspektiv är användningen av radioastronomi relativt ny. Första gången en radiokälla från rymden observerades och studerades var år 1931 när fysikern Karl Jansky identifierade att hans hemmabygda radioantenn fängade upp en okänd radiovåg med en våglängd på cirka 14,6 m. Inledningsvis var den misstänkta radiokällan solen, men några månaders studier av denna okända radiosignal resulterade i att Jansky kunde konstatera att signalen härstammade från Vintergatan. Upptäckten ansågs fascinerande på sin tid men trots det dröjde det sex år tills nästa milstolpe inom området ägde rum (Ghigo 2008b).

Radioingenjören Grote Reber var en av dem som följde upp Janskys upptäckt genom att år 1937 konstruera ett drygt 9,5 m stort radioteleskop i sin trädgård. Med detta teleskop observerade han på nattetid radiovågor med olika våglängder. Inledningsvis identifierades inga radiosignaler vid längre våglängder, men på tredje försöket, när istället en kortare våglängd på 1,87 m studerades, lyckades Reber. Hans arbete resulterade därefter i radioastronomiska publikationer (Ghigo 2008a). Under andra världskriget förbättrades radiomottagarna mycket i och med att radartechniken utvecklades. Detta ledde till att radioastronomi utvecklades ordentligt efter krigets slut och idag fortsätter denna utveckling kontinuerligt (Hüttemeister et al. 2009).

För molekyler, som detta projekt är baserat på, förekommer tre typer av energiovergångar: elektronisk, vibration samt rotation. Dessa är termiska övergångar, som innebär att källan kan approximeras med en svartkropp. Elektronisk övergång sker när elektroner hoppar mellan energinivåer och energiskillnaden motsvarar fotoner med optiska våglängder. Vibrationsövergångar emitterar fotoner främst i det infraröda området medan energiskillnader vid rotationsövergångar motsvarar fotoner med våglängder i intervallet $100 \mu\text{m}$ -10 m. Detta innebär att radioastronomi lämpar sig för att studera rotationsövergångar för molekyler (Hüttemeister et al. 2009). Dessa övergångar beskrivs mer detaljerat i avsnitt 2.3.1.

Svårigheter med att studera molekylära rotationsövergångar är att fotonerna har mycket låg energi och att signalerna är svaga. Det som radioteleskop observerar är helt enkelt en mycket svag rotationsignal mot en starkare bakgrund av brus. Bruset kommer från kosmisk bakgrundsstrålning, atmosfären och även

teleskopet självt. För att kunna detektera rotationssignaler krävs därför att bruset kan subtraheras från den observerade signalen, vilket är svårt att göra fullkomligt. Det resulterar i att de insamlade signalerna måste medelvärdesbildas över en längre tidsperiod för att rotationsövergångar ska bli urskiljbara. Ytterligare en svårighet är att förekomsten av vissa molekyler i atmosfären gör att dessa inte kan studeras med teleskop på jorden, eftersom signalerna från rymden är svagare än de från atmosfären.

För ett mått på hur svaga radiosignaler är nämns slutligen att de mäts i enheten Jansky (Jy), uppkallad efter Karl Jansky som var den första som studerade en radiokälla. Det gäller att

$$1 \text{ Jy} = 10^{-26} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{Hz}}. \quad (2.2)$$

2.1.1 Signalmottagning

Radioteleskop består av en signalmottagande antenn följt av ett avancerat mottagarsystem vars uppgift är att göra de insamlade signalerna användbara för tolkningar och forskning.

Antenner

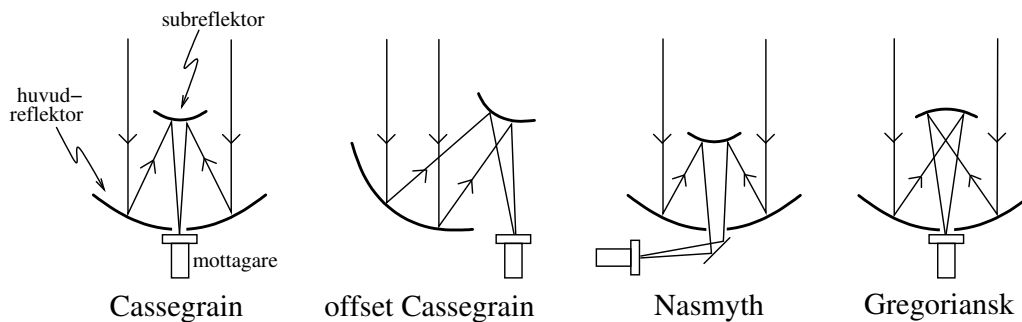
En antenn är en anordning som är avsedd att antingen ta emot eller emittera elektromagnetisk strålning. Radioantennerna är mycket vanliga och har flera tillämpningsområden också i det vardagliga livet. Antenner förekommer bland annat i radioapparater i form av en enkel metallstav och i TV-mottagare där antennen ofta är parabolformad med en tillhörande mottagare.

Den enklaste antenntypen är en dipolantenn. En dipolantenn består av två elektriskt ledande metallstavar av samma längd monterade i samma plan med en tillhörande fot som oftast är en koaxialkabel. För att uppnå maximal effekt ska dipolantennens totala längd vara halva den observerade våglängden. Antennteorin är dock mer avancerad än så. I praktiken ska en dipolantenn vara lite kortare än halva våglängden på grund av att impedansen, som är det elektriska motståndet för växelströmmen, beror både på metallstavens längd och diameter (Swollow 2011). Vid denna längd gäller att imaginärdelen av impedansen är noll. För maximal effekt gäller därmed att dipolantennens totala längd är

$$l_{\text{tot}} = K(\lambda, d) \cdot \frac{\lambda}{2} \quad \text{och} \quad K(\lambda, d) \lesssim 1, \quad (2.3)$$

där λ är den observerade våglängden, d är metallstavarnas diameter och K är en funktion som korrigerar för antennens impedans.

Den vanligaste antenntypen för radioteleskop är parabolformade antenner. De fungerar som reflektorer och koncentrerar de inkommande signalerna till en mindre mottagarantenn. Oftast används system med multipla reflektorer så att antennen och mottagarsystemet kan placeras på bättre positioner. Om bara en reflektor används kommer signalerna att koncentreras till ett område rakt ovanför parabolskivan, många meter upp i luften. Med multipla reflektorer kan signalerna istället koncentreras till ett mer lättillgängligt område i närheten av parabolskivan. Flera andra fördelar finns med multipla reflektorer, till exempel möjlighet att minska brusnivån. En vanlig anordning med multipla reflektorer är en parabolisk huvudreflektor som koncentrerar signalerna till en mindre och lättare hyperbolisk subreflektor som reflekterar signalerna tillbaka mot en öppning i huvudreflektorn där en mottagarantenn finns. Flera olika geometrier används för system med multipla reflektorer och fyra av dessa presenteras nedan samt visas i figur 2.2.



Figur 2.2: Schematisk bild över fyra möjliga antenntyper. De mottagna signalerna visas som räta linjer och dess strålgångar är utritade för samtliga konfigurationer. Författarens egen bild.

En Cassegrainantenn är tillverkad med en konvex subreflektor som är placerad före de konvergerande strålarnas primärfokus. Den konvexa subreflektorn reflekterar signalerna ner mot huvudreflektorns minimipunkt där strålarnas sekundära fokus hamnar. Det innebär också att mottagarsystemet är placerat där. En annan användbar geometri är offset Cassegrain, som är uppbyggd på samma sätt med en konvex subreflektor. Skillnaden är att huvudreflektorn är vinklad och subreflektorn kan därmed placeras avsides så att den inte blockerar de infallande strålarna. Det innebär också att mottagarsystemet placeras bredvid huvudreflektorn.

En Nasmythantenn är en antenntyp som också liknar en Cassegrainantenn. Skillnaden är subreflektorns placering och kurvatur som orsakar att strålarnas sekundärfokus hamnar nedanför huvudreflektorn. Med en plan spegel placerad under huvudreflektorn fokuseras signalen till ett horisontalplan. Fördelen med Nasmythdesignen är att signalmottagarens position förblir horisontell samtidigt som reflektorsystemet roterar i olika riktningar.

En Gregoriansk antenn består av en subreflektor som är konkav. Subreflektorn är placerad bakom de infallande strålarnas primärfokus så att strålarna är divergerande när de når den. Subreflektorn reflekterar strålarna så de återigen blir konvergerande med ett sekundärt fokus vid huvudreflektorns minimipunkt, där också mottagarsystemet placeras (Hüttemeister et al. 2009).

Antenndiagram

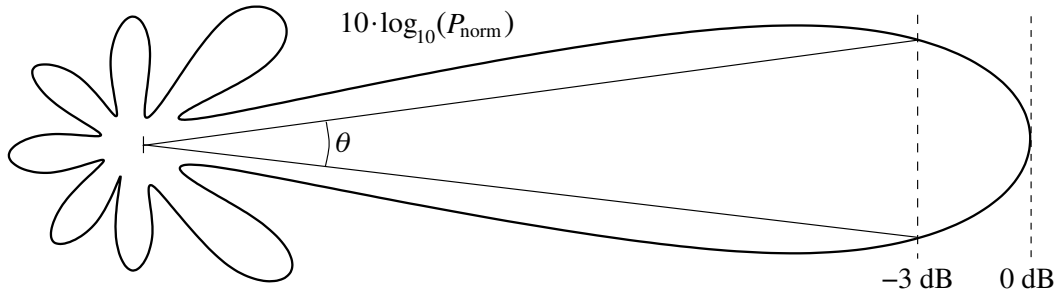
En isotrop antenn emitterar eller tar emot signaler med samma effekt i alla riktningar. De antenner som används i radioteleskop är, precis som önskat, långt från isotropa. Det optimala för dessa antenner vore om all mottagen signal kommer från det område där den observerade radiokällan befinner sig. Sådana antenner existerar dock inte och därför är det väsentligt att tala om så kallade antenndiagram, vilka beskriver mottagningsintensiteten som en funktion av vinkeln från antenntyngans normal.

Vanligtvis tillämpas en normaliserad effektfunktion för att beskriva ett antenndiagram:

$$P_{\text{norm}}(\theta, \varphi) = \frac{1}{P_{\text{max}}} P(\theta, \varphi) \quad (2.4)$$

så att $P_{\text{norm}} \leq 1$ för alla θ, φ . För de flesta radioantennerna gäller att effektfunktionen P_{norm} antar avsevärt större värden för ett visst område jämfört med resterande delen av observationsfären. Detta område kallas huvudloben och i området med lägre mottagningseffekt finns mindre sidolobor (Hüttemeister et al. 2009). Observera att effektfunktionen avser de områden som antennen kan ta emot radiovågor ifrån, inte själva intensiteten på de radiovågor som samlas in. En tvådimensionell schematisk bild över ett typiskt antenndiagram för ett radioteleskop visas i figur 2.3.

I figur 2.3 visas också antenndiagrammets halvvärdesbredd, som är en ofta använd storhet i dessa sammanhang. Halvvärdesbredden är huvudlobens totala bredd där dess effektfunktion P_{norm} har minskat till halva maximivärdet. Från halvvärdesbredden kan också vinkelupplösningen θ definieras. Observera att vinkelupplösningen θ är en storhet och skiljer sig från den sfäriska koordinaten θ som är angiven i



Figur 2.3: En schematisk bild över ett antenndiagram. Den stora huvudloben visas tillsammans med mindre sidolobber, där sidolobberna närmast huvudloben tenderar att vara större än de andra. Vinkelupplösningen θ visas också tillsammans med halvvärdesbredden, som är den streckade linjen vid -3 dB. Observera att skalan är logaritmisk, vilket innebär att huvudloben är betydligt större än sidolobberna i en linjär skala. Författarnas egen bild.

effektfunktionen. Vinkelupplösningen är vinkeln som halvvärdesbredden spänner upp mätt från antennen och det är inte möjligt att urskilja mindre detaljer än så. För radioteleskop gäller att

$$\theta = a \frac{\lambda}{D}, \quad (2.5)$$

där $a \approx 1,2$ är en konstant, λ den observerade våglängden och D är huvudreflektorns diameter. Eftersom våglängderna som studeras är relativt långa krävs det stora teleskop för att kunna observera mindre detaljer, vilket är förklaringen till att det finns radioteleskop med diametrar över 100 m. Ett sätt att undkomma problemet med stora teleskop är att samköra flera mindre teleskop, vilket kallas interferometri. Med interferometri förbättras vinkelupplösningen till den grad att de verkliga teleskopen fungerar som punkter i ett virtuellt teleskop som är lika stort som hela området de verkliga teleskopen är utbredda över. Metoden är mycket användbar och tillämpas på flera håll världen över, men detta arbete behandlar inte interferometri i fortsättningen.

Ett användbart begrepp som används i samband med antenndiagram är rymdvinkel, som är ett mått på hur stor utsträckning ett objekt upplevs ha för en viss observatör. Rymdvinkeln betecknas Ω och är alltså beroende av avståndet mellan objektet och observatören. Storheten anges i den dimensionslösa SI-enheten steradian (sr) och kan beräknas enligt

$$\Omega = 4\pi \frac{A_{\text{objekt},r}}{A_{\text{sfer},r}} = \frac{A_{\text{objekt},r}}{r^2}, \quad (2.6)$$

där $A_{\text{objekt},r}$ är arean på objektet som befinner sig på ett avstånd r från observatören och $A_{\text{sfer},r}$ är arean på en sfär med radien r centrerad vid observatören. Detta innebär att hela sfären upptar rymdvinkeln 4π sr.

Som tidigare nämnts är det önskvärt att en så stor andel som möjligt av de mottagna radiovågorna härstammar från huvudloben, där objektet som observeras befinner sig. Om en stor andel av den mottagna strålningen kommer från sidolobber kan det vara svårt att bestämma radiokällans position och dessutom ökar risken för oönskade radiosignaler, till exempel markreflektioner eller interferens mellan närbelägna teleskop (Josefsson 2015). På grund av sidolobberna är det till exempel förbjudet att ha mobiltelefoner påslagna i närheten av radioteleskop. För att få ett mått på huvudlobens storlek i förhållande till sidolobberna studeras deras respektive rymdvinklar. Rymdvinkeln för hela antennen är definierad enligt

$$\Omega_A = \iint_{4\pi} P_{\text{norm}}(\theta, \varphi) d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} P_{\text{norm}}(\theta, \varphi) \sin(\theta) d\theta d\varphi, \quad (2.7)$$

där P_{norm} är definierad i ekvation (2.4) och differentialen $d\Omega = \sin(\theta) d\theta d\varphi$ uppkommer eftersom sfäriska koordinater tillämpas. På samma sätt definieras rymdvinkeln för antennens huvudlob:

$$\Omega_{\text{HL}} = \iint_{\text{huvudlob}} P_{\text{norm}}(\theta, \varphi) d\Omega. \quad (2.8)$$

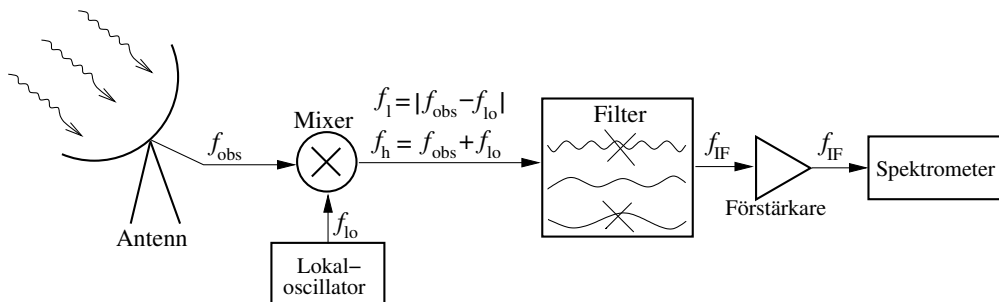
Med dessa två rymdvinklar är det användbart att definiera huvudlobseffektiviteten som ett mått på hur stor andel av den mottagna effekten som kommer från huvudloben. Huvudlobseffektiviteten betecknas η_{HL} och är definierad enligt

$$\eta_{\text{HL}} := \frac{\Omega_{\text{HL}}}{\Omega_{\text{A}}}. \quad (2.9)$$

Huvudlobseffektiviteten för ett visst teleskop beror både på den aktuella mottagningsfrekvensen och elevationen¹ objektet observeras på.

Heterodynprincipen

Signalerna från antennen når ett mottagarsystem som bygger på heterodynprincipen. En schematisk bild över ett sådant system visas i figur 2.4 nedan.



Figur 2.4: En schematisk bild över hur insamlade radiovågor behandlas. Den observerade signalen mixas med signalen från en lokaloscillator. Resultatet blir att två nya frekvenser bildas som sedan når ett filter som släpper igenom frekvensen f_{IF} . Signalen förstärks sedan innan den slutligen detekteras med en spektrometer. Författarnas egen bild.

Den inkommande signalen når först en mixer som bygger på heterodynprincipen. Eventuellt kan det förekomma en förstärkare innan mixern beroende på vilka de aktuella frekvenserna är. Heterodynprincipen innebär att det i mixern blandas två inkommande signaler: den observerade signalen från antennen och en signal från en lokaloscillator. En lokaloscillator är en frekvensgenerator som har kontrollerbar frekvens och ingår i mottagarsystemet. Att mixern blandar två signaler innebär att insignalerna multipliceras med varandra för att skapa utsignalen. Multiplicering av två sinussignaler resulterar i följande trigonometriska identitet:

$$\sin(\alpha) \sin(\beta) = \frac{1}{2} [\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)]. \quad (2.10)$$

En observerad signal med en specifik frekvens f_{obs} kan beskrivas enligt $V_{\text{obs}}(t) = A_{\text{obs}} \sin(2\pi f_{\text{obs}} t)$. Om denna blandas i mixern med en signal från lokaloscillatoren som är $V_{\text{lo}}(t) = A_{\text{lo}} \sin(2\pi f_{\text{lo}} t + \phi)$, där ϕ är en godtycklig initial fasförskjutning relativt den observerade signalen, så kommer den resulterande utsignalen att bli

$$V_{\text{obs}} V_{\text{lo}} = \frac{A_{\text{obs}} A_{\text{lo}}}{2} [\cos [2\pi(f_{\text{obs}} - f_{\text{lo}})t - \phi] - \cos [2\pi(f_{\text{obs}} + f_{\text{lo}})t + \phi]]. \quad (2.11)$$

Huvudsyftet med heterodynprincipen är att mixerens utsignal består av två nya signaler med respektive frekvenser $f_{\text{h}} = f_{\text{obs}} + f_{\text{lo}}$ och $f_{\text{l}} = |f_{\text{obs}} - f_{\text{lo}}|$. Dessa två signaler fortsätter sedan mot ett bandpassfilter som släpper igenom en skillnadfrekvens, f_{IF} . Om f_{obs} är den frekvens som ska studeras bestäms lokaloscillatorns

¹Koordinat i horisontens koordinatsystem, som används bland annat inom astronomi. I horisontens koordinatsystem är azimut den horisontella vinkeln mellan ett objekt och en observatör (vanligtvis med utgångspunkt från sydpunkten) och elevation är objektets höjd på himlen sett från observatören (i intervallet 0-90°).

frekvens så att $f_i = f_{IF}$. Signalen som passerar genom filtret förstärks sedan innan den slutligen når en spektrometer. En spektrometer är utrustad med flera kanalmottagare som var och en samlar in data för en specifik frekvens. Om dessa kanaler läggs ihop erhålls ett frekvensspektrum över den insamlade datan. Varje mottagarkanal tar emot data inom ett litet frekvensband och ju smalare frekvensbanden är desto högre upplösning får spektrumet.

Syftet med att ha ett system som bygger på heterodynprincipen är främst att blanda ner den högfrekventa observerade signalen till en betydligt lägre frekvens. Lägre frekvenser är lättare att detektera och arbeta med samtidigt som det är svårt att bygga högfrekvenselectronik. Dessutom behålls den observerade signalens fas i ett sådant mottagarsystem.

Ytterligare en fördel med heterodynsystemet är att utrustningen som följer efter mixern kan optimeras för en viss konstant frekvens f_{IF} , oavsett värdet på frekvensen f_{obs} . Det åstadkoms genom att alltid välja f_{lo} så att $f_{IF} = |f_{obs} - f_{lo}|$. Det gäller att $f_{IF} \ll f_{obs}$ men samtidigt inte för låg eftersom en högupplöst frekvensstruktur ska bibehållas. En högupplöst spektrometer krävs för att kunna urskilja emissionstoppar från exempelvis molekylära rotationsövergångar.

En svårighet med systemet är att frekvensen f_{IF} kan uppstå från två observerade frekvenser: $f_{obs,1} = f_{lo} + f_{IF}$ och $f_{obs,2} = f_{lo} - f_{IF}$. Dessa ger upphov till de så kallade övre och undre sidbanden. Med detta i åtanke är det viktigt att det oönskade sidbandet som passerar genom filtret inte har några emissionstoppar. Om det skulle förekomma sådana emissionstoppar blir resultatet att felaktiga toppar uppkommer i spektrumet när frekvenserna efter filterpassagen tolkas tillbaka till de ursprungliga frekvenserna. Problemet kan dock begränsas genom att filtrera bort aktuella frekvenser genom sidbandsseparation. Vid sidbandsseparation blir uppbyggnaden av mixersystemet mer avancerat och behandlas inte i detta arbete.

2.1.2 Observationsteknik och signalbehandling

I det här avsnittet studeras observationstekniker och hur mottagna signaler behandlas. Som tidigare nämnts är brus en viktig aspekt vid radioastronomiska observationer och vissa metoder tillämpas för att minimera brusnivån. I slutet av avsnittet beskrivs hur data presenteras i radioastronomins värld.

Brus

En stor nackdel och svårighet med radioastronomi är att det är mycket svaga signaler som observeras. Det innebär att signalmottagarsystemet är bruskänsligt och det är viktigt att minimera brusnivån så att radiosignalerna kan urskiljas. Bruset som observeras härstammar från kosmisk bakgrundsstrålning, atmosfären och teleskopet. I teleskopet avges brus från både icke-elektroniska objekt, såsom antennen och speglar, och elektroniska komponenter, till exempel förstärkare och kablar.

En viktig faktor gällande bruset är atmosfären. Även om atmosfärens ständiga brusnivå går att minimera kan det förekomma andra, tillfälliga störningar som exempelvis nederbörd eller en molnpassage framför teleskopets huvudlob. Dessa störningar kan teleskopet inte ta hänsyn till på samma sätt som den ständiga brusnivån och data som samlas in under sämre väderförhållanden riskerar att ha alldeles för hög brusnivå för att kunna vara användbar.

Ett centralt begrepp inom brusteori är termiskt brus. Termiskt brus uppstår på grund av elektroners termiska rörelser i resistorer. Elektronernas rörelser beskrivs av en stokastisk process och medelvärdet av strömmarna de ger upphov till är noll. Medelvärden av effekten, som kan beskrivas av det kvadratiske medelvärdet av strömmarna, är däremot nollskild och detta är orsaken till termiskt brus (Hüttemeister et al. 2009). Termiskt brus är frekvensoberoende och sträcker sig över ett brett frekvensområde. Därför kallas det också vitt brus, som en analogi till vitt ljus som innehåller samtliga frekvenser inom synligt ljus. Effekten för termiskt brus är

$$P = k_B T B, \quad (2.12)$$

där $k_B \approx 1,381 \cdot 10^{-23}$ J/K är Boltzmanns konstant, T är temperaturen i kelvin och B är bandbredden vilken bruset är uppmätt inom. Inom radioastronomi tillämpas begreppet brustemperatur. Brustemperaturen är den temperatur som insatt i ekvation (2.12) ger lika mycket brus som den aktuella bruskällan. Till exempel har den kosmiska bakgrundsstrålningen brustemperaturen 3 K (Einarsson 2015).

Termiskt brus har stor betydelse i signalmottagarsystemet. Vid temperaturer i storleksordningen 300 K är det termiska bruset alldeles för stort, så de svaga radiosignalerna kan inte urskiljas och observationer blir resultatlösa. För att minimera termiskt brus hålls mottagarsystemet nedkyllt med flytande helium, som har en temperatur så låg som 4,2 K.

Förutom mottagarsystemet och kosmisk bakgrundsstrålning kan också den observerade källan bidra till termiskt brus. Ytterligare en bruskälla är marken. Jorden kan approximeras med en svartkropp på cirka 300 K som emitterar värmestrålning med en liten andel radiovågor. Från marken kan också oönskade reflektioner bidra till ökad brusnivå, varför det är fördelaktigt att använda ett multipelt reflektorsystem så att mottagarantennen inte har sin öppning riktad ner mot marken utan istället upp mot den kalla rymden (Hüttemeister et al. 2009).

Det gäller att alla bidrag till brusnivån som nämnts ovan är additiva (Hüttemeister et al. 2009). Som ett kvalitetsmått på den insamlade datan används storheten systemtemperatur, som beskriver den totala brustemperaturen för den data som samlats in. Systemtemperaturen betecknas T_{sys} och i ett system med N icke-korrelerade bruskällor med respektive brustemperatur T_i gäller att

$$T_{\text{sys}} = \sum_{i=1}^N T_i, \quad (2.13)$$

där hela mottagarsystemet ses som en svart låda med en sammanlagd brustemperatur. Att studera brusbidragen för varje komponent i ett mottagarsystem är mer avancerat och beror på dess förstärkare, vilket inte behandlas vidare i rapporten. Typiska värden på systemtemperaturer för insamlade data är i storleksordningen några hundra kelvin. För mycket brusiga data kan T_{sys} uppnå tusentals kelvin. Nya, moderna mottagare kan dock ha systemtemperaturer på endast några tiotal kelvin.

När data från observationer läggs samman och medelvärdesbildas minskar brusnivån. Teoretiskt gäller att det stokastiska bruset B förhåller sig till observationstiden t_{obs} enligt

$$B \propto \frac{1}{\sqrt{t_{\text{obs}}}}. \quad (2.14)$$

Med bruset i ekvation (2.14) avses bruset som har väntevärdet noll. De metoder som tillämpas för att erhålla spektra med brus som har väntevärdet noll beskrivs under den kommande rubriken.

Observationsväxling för brusreducering

I radioastronomi tillämpas metoder med olika sorters observationsväxlingar (engelskt uttryck: *switching*). Syftet med observationsväxlingar är att minimera systematisk påverkan från mottagarsystemet genom att göra referensmätningar. En referensmätning innebär att källan inte observeras, utan bara den närliggande miljön. De spektra som skapas är sedan differensspektra, som är uppbyggda av signalspektra minus referensspektra. Om den systematiska påverkan från mottagarsystemet i signalspektrum och referensspektrum är likadant, vilket kan antas, kommer den försvinna i det skapade differensspektrumet och då återstår sedan den observerade svaga signalen från källan, precis som önskat.

I det ideala fallet har referensspektrumet exakt samma form som signalspektrumet. En vanlig företeelse vid spektrallinjeobservationer är dock att referensmätningarna inte kompenseras för fullständigt, vilket resulterar i att differensspektrumet får en så kallad baslinje (Johansson 2014). Om referensspektrumet har samma form som signalspektrumet blir baslinjen platt men när inte referensmätningen kompenseras fullständigt får baslinjen ofta ett ickelinjärt utseende. Om amplituderna på baslinjens variationer är större än signalens amplitud blir spektrallinjer dolda, förutsatt att de inte är betydligt smalare än baslinjens variationer. För att kunna påvisa spektrallinjerna måste därför baslinjen subtraheras från differensspektrumet. En förutsättning för att spektrallinjer ska framträda när detta görs är att observationsväxlingar sker hastigare än systemets brusvariationer, så att bruset verkligen är subtraherat i ett differensspektrum. Brusvariationer sker framförallt på grund av atmosfären men orsakas också av teleskopet eftersom bruset därifrån beror på den omgivande temperaturen.

Det förekommer tre olika observationsväxlingar som var och en har sina fördelar och nackdelar:

- Frekvensväxling
- Huvudlobsväxling (engelskt uttryck: *beam switching*)
- Positionsväxling

Frekvensväxling innebär att mottagarnas inställda frekvensvärden alterneras mellan två givna värden och därmed skapas två spektra. De observerade frekvenserna är oförändrade, vilket innebär att de två spektra som bildas är likadana till utseendet med skilljer sig i frekvens. Frekvensskillnaden mellan dem kallas frekvenskast. Frekvensväxlingar under observationer sker flera gånger per sekund. När frekvensväxlingar används är det viktigt att frekvenskastet är tillräckligt stort så att spektrallinjerna särskiljs från varandra helt och hållet. Samtidigt måste frekvenskastet vara tillräckligt litet så att alla spektrallinjer ryms inom systemets frekvensintervall.

De två spektra som skapats subtraheras och det resulterande spektrumet blir ett spektrum bestående av positiva spektrallinjer förskjutna med halva frekvenskastet i ena riktningen och negativa speglingar av dessa förskjutna med halva frekvenskastet i den motsatta riktningen. Fördelen med frekvensväxlingar är att det är tidseffektivt eftersom källan observeras hela tiden. Nackdelen är att metoden inte lämpar sig för breda linjer eller spektra som innehåller väldigt många spektrallinjer. Dessutom blir baslinjerna dåliga eftersom bruset varierar med frekvensen. Den subtraktion som görs är mellan två brusspektra som är förskjutna gentemot varandra och resultatet blir en baslinje. Ju större frekvenskastet är desto sämre baslinjer erhålls.

Huvudlobsväxling innebär att observationen växlar mellan källan och ett område precis bredvid källan, det vill säga huvudlobens riktning ändras. Under växlingarna är antennen statisk och den observerade positionen varierar med exempelvis en dynamisk spegelkonstruktion. Två spektra erhålls där det ena innehåller spektrallinjer medan det andra enbart består av brus. Dessa subtraheras från varandra och därmed minskar brusnivån. Huvudlobsväxling ger bra baslinjer och lämpar sig för bredare och svagare spektrallinjer. Nackdelen är att metoden är tidskrävande eftersom källan bara observeras halva den totala observationstiden.

Positionsväxling innebär, precis som för huvudlobsväxling, att observationen växlar mellan källan och ett område bredvid den. Det stora skillnaden är att antennen förflyttar sig, vilket ger långsamma positionsväxlingar i storleksordningen någon cykel per minut. Fördelen med metoden är att källor med stor rymdvinkel eller mycket komplexa spektra kan studeras. Nackdelarna är att det är tidskrävande och att kvalitén på baslinjerna beror på atmosfärens stabilitet under observationsperioden (Johansson 2014).

Dopplereffekten

Arbetet behandlar en komet som emitterar radiosignaler med vissa givna frekvenser. Då kometen och det observerande teleskopet på jorden rör sig i förhållande till varandra sker en frekvensförskjutning av radiosignalerna på grund av dopplereffekten, vilket teleskopets mottagarsystem måste ta hänsyn till. Teleskopen tar hänsyn till frekvensförskjutningen genom att konstant ha koll på objektets efemerid i förhållande till teleskopet. Förutom kometens bana påverkar också jordens omlopps bana och rotation den frekvensförskjutning som uppstår.

Ett fotonemitterande objekt med hastighet v relativt en observatör betraktas. Situationen studeras utifrån observatörens inertialsystem, det vill säga jorden eftersom observatören är ett radioteleskop. Det observerade objektet rör sig därmed med den momentana hastigheten v i det givna inertialsystemet. Den radiella hastigheten bort från observatören betecknas v_r .

Antag att objektet emitterar pulser, det vill säga elektromagnetisk strålning, med en våglängd λ_0 och frekvens f_0 . Frekvensen f_0 kan relateras till en tid Δt mellan två närliggande toppar i signalens vågrörelse. Under tiden Δt mellan två toppar har avståndet till objektet ökat med sträckan $v_r \Delta t$. Det innebär en längre transportsträcka för ljuset vilket medför längre våglängd och lägre frekvens.

Den förlängda våglängden $\lambda = \lambda_0 + v_r \Delta t$. Detta relaterar till en lägre frekvens enligt

$$\frac{c}{f} = \frac{c}{f_0} + \frac{v_r}{f_0} \implies f = f_0 \left(\frac{1}{1 + \frac{v_r}{c}} \right). \quad (2.15)$$

Vid låga hastigheter lämpar sig approximationen

$$f = f_0 \left(\frac{1}{1 + \frac{v_r}{c}} \right) \underset{\frac{v_r}{c} \ll 1}{\approx} f_0 \left(1 - \frac{v_r}{c} \right) \quad (2.16)$$

för ett linjärt samband mellan den mottagna frekvensen och den radiella hastigheten.

Notera slutligen att ingen hänsyn tagits till eventuella accelerationer mellan observatören och objektet. Observationsperioderna för varje framtaget spektrum är i storleksordningen sekunder, vilket är kort tid i jämförelse med tidsskalor för himlakroppars efemerider. Himlakroppens hastighet vid varje framtaget spektrum antas därför vara konstant och en eventuell acceleration är försumbar.

Presentation av insamlad data

Radioteleskop skapar spektra från insamlade data med tidsintervall i storleksordningen 30 sekunder till några minuter. Eftersom radiosignaler är mycket svaga kommer inget tydligt spektrum att uppstå från en sådan kort tidsperiod med insamlad data. För att kunna erhålla tydliga spektrallinjer medelvärdesbildas därför flera spektra över närliggande tidsintervall.

Radioastronomiska spektra presenteras vanligtvis med följande storheter:

$$\begin{cases} \text{x-axel: hastighet} & (\text{enhet: km/s}) \\ \text{y-axel: intensitet} & (\text{enhet: kelvin}) \end{cases} \quad (2.17)$$

Att intensiteten mäts i kelvin och att hastighet visas på x-axeln, istället för till exempel frekvens eller våglängd, är ovanligt men något som tillämpas inom radioastronomi.

Orsaken till att hastighet används på x-axeln är att det relaterar molekylernas lokala rörelser vid kometen. En referensfrekvens f väljs och där sätts att hastigheten är noll. Referensfrekvensen kan exempelvis vara en teoretisk spektrallinje och sedan kan molekylernas lokala rörelser bestämmas genom att studera bredden på den observerade spektrallinjen, som uppkommer på grund av dopplereffekten. Om låga hastigheter - ur en relativistisk synvinkel - antas kan den observerade frekvensen f skrivas enligt högerledet i ekvation (2.16). Lokalt kring frekvensen f kan då en frekvensförändring skrivas

$$\Delta f = -\frac{\Delta v_r}{c} f_0. \quad (2.18)$$

På detta sätt relaterar en lokal hastighetsförändring till en lokal frekvensförändring från en referensfrekvens f . Värden på x-axeln bestäms således som

$$\Delta v_r = -c \frac{\Delta f}{f_0}, \quad (2.19)$$

där minustecknet gör att en hastighetsökning presenteras åt motsatt håll på x-axeln gentemot en frekvensökning.

Intensiteten relaterar till temperatur genom antagandet att den observerade signalen härstammar från en svartkropp. Plancks lag för en svartkropp ger att intensiteten är proportionell mot temperaturen enligt

$$I(T) \propto \frac{1}{e^{\frac{hf}{k_B T}} - 1}, \quad (2.20)$$

där h är Plancks konstant, f är frekvensen, k_B är Boltzmanns konstant och T är temperaturen i kelvin (Weisstein 2015a). Inom radioastronomi är frekvensen låg och Rayleigh-Jeans approximation $hf \ll k_B T$ kan tillämpas (Weisstein 2015b). Taylorutveckling av högerledet i (2.20) ger

$$I(T) \propto \frac{1}{e^{\frac{hf}{k_B T}} - 1} = \frac{1}{1 + \frac{hf}{k_B T} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{hf}{k_B T}\right)^2\right) - 1} \approx \frac{k_B T}{hf}, \quad (2.21)$$

vilket visar hur temperaturen relaterar till intensiteten.

2.1.3 Observationstid

Det finns flera anledningar till att forskare vill ha mycket observationstid vid teleskopen. Längre observationstid innebär att fler intressanta objekt eller molekyler kan studeras. Ytterligare en anledning är att ju längre observationen är desto mer data samlas in, vilket också ökar sannolikheten för att bra data erhålls. Anledningen till det är att vid dåligt väder kan signalerna bli svagare och brusigare med högre systemtemperaturer. När medelvärdesbildning av insamlad data sker minskar dessutom bruset med ökad observationstid.

Begränsningen av antalet teleskop gör att forskare inte kan gå till ett teleskop och börja observera när de vill. Teleskopen har ofta fullspäckade scheman med ansökningssystem för att få observationstid. Många teleskop är öppna för ansökningar från forskare över hela världen medan vissa teleskop är specialfall som används enbart till unika projekt.

Ansökningar om observationstid kallas proposaler. Proposaler ska innehålla vad som ska observeras, varför det är intressant att observera just det, hur lång observationstid som efterfrågas samt vilken observationsmetod som ska tillämpas. Med observationsmetod åsyftas till exempel vilka frekvenser som är aktuella och vilken typ av växlingsmetod som är tänkt att appliceras. Proposaler behandlas ett fåtal gånger per år, vilket innebär att det ofta krävs mycket planering och förstudier innan observationer kan äga rum. Expertgrupper vid respektive observatorium läser och betygsätter sedan proposalerna och de med högst betyg tilldelas observationstid (Lerner 2012). Två exempel på proposaler finns tillgängliga i bilaga C. Dessa är aktuella för observationerna av Lovejoy, där själva Lovejoy-proposalen är en utökning av en tidigare proposal gällande kometen C/2012 S1 (ISON). Proposalen för Lovejoy är speciell i och med att kometen upptäcktes i ett sent skede. När oförutsägbara objekt upptäcks kan deras ansökningar genomgå en snabbbehandling om det inte finns tid för den normala ansökningsprocessen. Det var precis det som skedde när Lovejoy upptäcktes och sedan observerades med relativt kort varsel.

2.1.4 Onsala rymdobservatorium

Onsala rymdobservatorium grundades 1949 av Olof Rydbeck och är beläget vid Onsala 45 km söder om Göteborg. Vård för anläggningen är institutionen för Rymd- och geovetenskap på Chalmers Tekniska Högskola. Observatoriet bedriver idag forskning inom både radioastronomi och geovetenskap ("Onsala rymdobservatorium" 2013).

Den radioastronomiska delen av observatoriet omfattar tre större radioteleskop som används för forskning, ett antal mindre teleskop för undervisning samt medverkan i flera internationella projekt. De tre radioteleskopen är följande: två parabolantennor med diametrar på 20 m respektive 25 m och Sveriges LOFAR²-station ("Radioastronomisk utrustning" 2015). LOFAR består av många små, ihopkopplade stationära antenner och stationen vid Onsala är en av totalt 48 i det pågående europeiska LOFAR-projektet. Syftet med LOFAR är att samköra stationerna och med interferometri bygga världens största radioteleskop som kan studera långa våglängder inom intervallet 1,25-10 m (Lerner 2012).

25-metersteleskopet är det äldre av de två parabolformade teleskopen och var det första stora teleskopet vid observatoriet. Det byggdes på 1960-talet och används för våglängder på 5-40 cm (Lerner 2012).

20-metersteleskopet är det teleskop som använts för att samla in den data från kometen Lovejoy som det här arbetet är baserat på. Teleskopet byggdes i mitten på 1970-talet och används för att observera våglängder inom intervallet 0,3-14 cm. Till skillnad från 25-metersteleskopet är detta teleskop inneslutet i en radom. En radom är ett klotformat skal vars uppgift är att skydda teleskopet från väder, vilket ger bättre precision som är nödvändigt när kortare våglängder observeras (Lerner 2012). Radomen är konstruerad för att släppa igenom radiovågor. För våglängden 3 mm, vid vilken radomen är optimerad, är transmittansen cirka 95%. En bild på teleskopet visas i figur 2.5.

Teleskopet består av en Cassegrainantenn, som mer precist mäter 20,1 m i diameter. Teleskopet, mottagarsystemet och de andra tillhörande instrumenten kontrolleras med datorer i ett närliggande kontrollrum. För detta ändamål används det grafiska programmet Pegasus som modifierats för att fungera optimalt för anläggningen. Teleskopets inställningar är gjorda så att det automatiskt korregerar för dopplereffekten som

²LOFAR är en förkortning av Low Frequency Array.

uppstår mellan teleskopet och det observerade objektet. Teleskopets precision då det riktas mot observationsobjekten ges av en noggrannhet på $3''^3$ i azimut och elevation. För de aktuella HCN-frekvenserna gäller för teleskopet att halvvärdesbredden är $44''$ och huvudlobseffektiviteten $\eta_{HL} = 0,53$ vid elevationen 54° (Johansson 2014).

Teleskopet erbjuder flera typer av observationsväxlingar. När Lovejoy observerades användes frekvensväxling och typiska frekvenskast för teleskopet är 5-10 MHz. Växling mellan frekvenser sker med hastigheten 5 Hz. Datan sparas undan i 30-sekundersintervall där varje intervall ger upphov till ett spektrum. Alla framtagna spektra behöver bearbetas och det finns ett flertal program för datareducering. Exempel på sådana program är xs och DRP⁴, som båda är utvecklade vid Onsala rymdobservatorium, samt CLASS⁵ som är ett välkänt internationellt program (Johansson 2014).

Den geografiska placeringen av Onsala rymdobservatorium är inte ideal för alla typer av observationer av universum. Läget på västkusten precis bredvid havet innebär att det ofta är mycket dåliga väderförhållanden med mycket regn och moln i atmosfären. För observationer av relativt oföränderliga objekt spelar inte väderförhållandena så stor roll. Dessa objekt är möjliga att observera under mycket lång tid vilket ger mätdata som ändå håller god kvalitet. För observationer av kometer är det däremot viktigare att datan innehåller så lite brus som möjligt redan från början, eftersom de inte kan observeras under lika lång tid. Observationer av kometer förekommer ändå på Onsala rymdobservatorium men det är studier av avlägsna interstellära gasmoln och galaxer som är observatoriets huvudfokus (Lerner 2012).



Figur 2.5: 20-meterteleskopet vid Onsala rymdobservatorium (Hammargren 2006).

³Enheten $''$ är bågsekunder. $1'' = \frac{1}{3600}^\circ$.

⁴DRP är en förkortning av Data Reduction Package.

⁵CLASS är en förkortning av Continuum and Line Analysis Single-dish Software.

2.2 Kometer

För att förklara vad en komet är och för att förstå vad som särskiljer dem från andra himlakroppar är det lämpligt att börja med att se på hur vårt solsystem bildades. Därefter följer en beskrivning av kometer som främst fokuserar på den kemiska sammansättningen och kemiska reaktioner.

2.2.1 Solsystemets bildande och uppbyggnad

Stjärnor föds ur interstellära gasmoln som på grund av gravitationen börjar dra ihop sig, bli tätare och rotera snabbare runt sin egen axel. Tryck och temperatur ökar i centrum och så småningom börjar kärnreaktioner där väteatomer slås ihop till helium (de Pater & Lissauer 2010). När solen bildades för ungefär 4,6 miljarder år sedan var universum nästan 10 miljarder år gammalt och många stjärnor hade både levt och dött dessförinnan. I dessa stjärnor producerades tyngre grundämnen, vilka nu återfanns i gasmolnet i den begynnande solens omgivning. På grund av rotationen plattades gasen och stoftet ut kring solen, i vad som kallas för en protoplanetär skiva. I denna roterande skiva fanns både fasta partiklar och gas. I takt med att solens temperatur steg förångades de små ispartiklarna i de inre delarna av skivan och kvar blev mest sten och grus. Dessa bildade större och större kroppar som kolliderade med varandra tills de fyra inre stenplaneterna och dess månar var i stort sett allt som fanns kvar. Längre ut fanns mer materia, och planeterna som bildades där ser helt annorlunda ut jämfört med stenplaneterna. Dessa planeter kallas gasplaneterna och är mycket större och tyngre än stenplaneterna (Lagerkvist & Olofsson 2003). Den största av gasplaneterna, Jupiter, har så stor gravitation att den påverkar mycket av det som sker i solsystemet. Mindre kroppar som kommer i närheten kan få sina banor rubbade. De kan antingen fångas in som månar kring någon av gasplaneterna, ändra riktning eller slungas iväg ut i rymden (Crovisier 2001). Mellan de inre och yttre planeterna finns en skiva av materia som aldrig kunde slås samman till en större planet. Dessa kroppar utgör vad som kallas för Asteriodbältet och det är troligen gravitationspåverkan från Jupiter som har gjort att det fortfarande ligger utspritt. Även utanför Neptunus har många småplaneter och mindre kroppar blivit kvar. Detta område delas upp i två delar: Edgeworth-Kuiperbältet och Oorts moln (Lagerkvist & Olofsson 2003).

Edgeworth-Kuiperbältet är ganska olikt asteroidbältet mellan Mars och Jupiter. Det sträcker sig över ett mycket större område mellan 30 och 55 AU från solen och det finns många fler kroppar där. Det finns också många skillnader mellan hur kropparna i de båda områdena ser ut. I Edgeworth-Kuiperbältet finns det större kroppar och förutom sten består de av olika frysta ämnen, främst vattenis (Stern 2003).

Oorts moln är inte ett bälte i skivan utan ett sfäriskt moln runt hela solsystemet. Vi vet inte exakt hur långt ut det fortsätter men det skulle kunna vara upp till två ljusår bort från solen och innehålla 10^{12} kroppar. Precis som i Edgeworth-Kuiperbältet består de av is, sten och grus (Stern 2003; Rehderer 2011).

2.2.2 Klassificering av kometer

Om någon av kropparna i Edgeworth-Kuiperbältet eller Oorts moln får sin bana störd kan den börja falla in mot solsystemets centrum på en mycket avlång, excentrisk bana och klassificeras som en komet då den observeras vara omgiven av ett gasmoln. Kometer klassificeras traditionellt sett efter hur deras omloppsbana ser ut. Oorts moln ger upphov till kometer som tar lång tid på sig att färdas in till solen och tillbaka igen. Dessa så kallade långperiodiska kometer har en period på mer än 200 år och det är inte ovanligt med betydligt längre omloppstider än så. Ungefär en tredjedel av alla långperiodiska kometer har en period på nästan en miljon år (Murdin 2001). Omloppsbana för en komet kan emellertid ändras och det är inte helt säkert att en komet som är långperiodisk idag började sitt liv i Oorts moln, den kan ha kommit från Edgeworth-Kuiperbältet och slungats iväg ut om den till exempel passerade nära Jupiter. Samma sak gäller för de kometer som är kortperiodiska, det vill säga har en period på mindre än 200 år. Omloppstiden tyder på att de kommer från Edgeworth-Kuiperbältet, men det kan vara andra händelser i kometens historia som orsakat den nuvarande banan (de Pater & Lissauer 2010).

På senare år har det upptäckts att distinktionen mellan asteroider och kometer inte är helt tydlig. Det har visat sig att en del kroppar som befinner sig i asteroidbältet inte enbart består av grus utan även is som förångas under en del av omloppsbana (Jewitt 2011). Dessa kroppar kallas för Asteriodbältskometer

eller aktiva asteroider och har en period på ungefär 3-6 år (de Pater & Lissauer 2010; Lerner 2012). De aktiva asteroidernas banor har en mycket lägre excentricitet än det som traditionellt kallas kometer. Under hela omloppsbanan befinner de sig på ett avstånd mellan 2 och 4 AU (Murdin 2002). De avger gas i några veckor eller månader då de är som närmast solen (de Pater & Lissauer 2010).

Nomenklatur

Sedan 1995 består kometers namn av två delar. Den ena är upptäckarens eller upptäckarnas namn och den andra delen är en siffer- och bokstavskombination som är entydig för varje enskild komet. Den för studien aktuella kometen C/2013 R1 (Lovejoy) har alltså fått sitt namn efter en observatör vid namn Lovejoy, upptäcktsåret är 2013, R betecknar vilken halvmånad på året kometen upptäcktes och ettan betyder att det var den första kometen som upptäcktes under den perioden. Att namnet börjar med C/ betyder att kometen är långperiodisk. Kortperiodiska kometer har namn som börjar med P/. D/ ingår i beteckningen för kometer som förintats på något sätt, till exempel att kärnan fallit sönder i småbitar eller att den kolliderat med en planet (de Pater & Lissauer 2010).

2.2.3 Kometers uppbyggnad

En komet består av en kärna med en så kallad koma runt sig, ett moln av gas likt en atmosfär, samt en eller flera utsträckta svansar av gas och damm. Koman och svansarna uppstår då värme från solen får is på ytan att sublimera (Crovisier 2001). Kärnan, som är en mycket liten kropp i rymden, är svår att undersöka via observationer från jorden. Det som traditionellt sett observerats i kometer är därför gasen i koman och svansarna. Sammansättningen i koman skiljer sig dock från kärnan av två anledningar: kemiska reaktioner i koman och fraktionerad sublimering. De många ämnena i kärnan har olika flyktighet vilket leder till att de olika faserna, is och gas, kommer att ha olika sammansättning vid sublimering. De flyktiga ämnena är således representerade i högre grad i koman än vad de är i kärnan (Crovisier & Bockelee-Morvan 1999). Det saknas fortfarande mycket kunskap om hur reaktionsmönstret ser ut för ämnena i koman. För en del molekyler har det kunnat fastställas huruvida de existerar i kärnan eller inte, men det är fortfarande oklart för många. Detsamma gäller för vilka olika kemiska reaktioner som sker och vilka molekyler som reagerar till vad (Mumma & Charnley 2011). För att kunna undersöka kärnan närmare har rymdsonder sänts upp till kometer för att ta prover (Schulz et al. 2015).

Kärnan

Storleken på kärnan varierar mellan 1 km upp till över 40 km för de allra största kometerna. De är för små för att gravitationen ska forma dem sfäriska så kometer kan ha alla möjliga former. Kärnans massa minskar i takt med att allt mer is förångas och även genom att grus förvinner från kometen då det rycks med av gasen. Kometer är mycket ömtåliga; splittringar av kärnan har observerats då kometer kommit nära andra större kroppar och även till synes utan anledning (Crovisier 2001). Gruspartiklar från kometen 67P/Churyumov-Gerasimenko har nyligen studerats av instrument ombord på rymdsonden ROSETTA och de har funnit att de isfria gruspartiklarna har en porositet på över 50 %. Kärnans bulkdensitet är cirka 470 kg/m^3 , att jämföras med jordens bulkdensitet på 5515 kg/m^3 (de Pater & Lissauer 2010; Schulz et al. 2015; Fulle et al. 2015; Sierks et al. 2015).

Svansar

Gas och damm som sveps iväg från kometen bildar svansar i olika riktningar bort från solen. Dammet som består av partiklar av olika storlek påverkas av gravitation och strålningstryck och formar en lätt böjd svans som ser gul ut vid observation på grund av att dammpartiklarna reflekterar solljus (Crovisier 2001).

Molekyljonerna som finns i koman bildar en annan svans. Den är linjerad med solens magnetfält och växelverkar med solvinden vilket gör att jonsvansen är blåtonad och oftast riktad rakt bort från solen. Jonsvansen har ofta en lite annan riktning än dammsvansen. En tredje typ av svans är natriumsvansen. Den är också rak men skild från jonsvansen. Huruvida natriumet kommer från sönderdelade gasmolekyler eller från gruset är ännu inte känt (Crovisier 2001).

Kemisk sammansättning

Vatten utgör den dominerande delen, ungefär 80%, av isen och gasen i koman och därför jämförs produktionstakten av andra molekyler ofta med den för vatten. Mängden av ett ämne i förhållande till vatten kallas för dess blandningsförhållande (engelskt uttryck: *mixing ratio*) (Crovisier 2001).

Vattenis börjar förångas kring kometen ungefär vid avståndet 3 AU från solen, men gasutbrott kan även förekomma längre bort då mer flyktiga ämnen förångas (Crovisier 2001). Det finns många olika molekyler i kometer; enkla kolväten som alkaner och alkoholer, en uppsjö av ämnen som innehåller kväve och svavel samt mer komplicerade molekyler som aminosyran glycin (Mumma & Charnley 2011). Blandningsförhållandet för de flesta molekyler är dock mycket lågt, typiskt mindre än 1 %. Två molekyler som finns i större mängder på en del kometer är kolmonoxid, CO, och koldioxid, CO₂. Deras blandningsförhållanden ligger på 0,2 % till 24 % för kolmonoxid och 0,3 % till 30 % för koldioxid. Kometer med blandningsförhållanden av kolmonoxid eller koldioxid på över 10 % kallas för kolmonoxid- respektive koldioxidrika kometer (Mumma & Charnley 2011; Paganini et al. 2012).

Vätecyanid (HCN) i kometer

HCN har observerats i närmare 40 kometer sedan 1985 då det detekterades på en komet första gången (Crovisier & Bockelee-Morvan 1999; Mumma & Charnley 2011). Precis som på jorden är isotoperna ¹H, ¹²C och ¹⁴N vanligare än de tyngre varianterna ²H, ¹³C och ¹⁵N. I kometerna 17P/Holmes och C/1995 O1(Hale-Bopp) har förhållandena mellan respektive isotoppar mätts för HCN och den lättare av de respektive isotoperna är ungefär 100-400 gånger vanligare för alla tre atomslagen (Mumma & Charnley 2011).

Blandningsförhållandet för HCN ligger ganska konstant på runt 0,1%, vilket gör att mätningar av produktionstakten av HCN är användbara även för att uppskatta hur mycket vatten som förångas från en specifik komet (Mumma & Charnley 2011).

Diskussionerna om vad som ger upphov till HCN i kometkoman har gått fram och tillbaka de senaste åren. Frågan gäller huruvida HCN existerar som fast ämne i isen på kärnan, ett så kallat primärämne (engelskt uttryck: *primary volatile/parent volatile*), eller om det bildas först genom gasfasreaktioner i koman och alltså är ett produktämne (engelskt uttryck: *product volatile/daughter volatile*). Det är även möjligt att HCN förekommer som en blandning av ett primärämne och ett produktämne, det vill säga att det både frigörs från isen genom sublimering och bildas i koman av andra molekyler genom kemiska reaktioner (Mumma & Charnley 2011; Ziurys et al. 1999; Mumma et al. 2014).

Det finns en mindre stabil isomer till HCN som heter väteisocyanid, HNC. De båda isomererna visas med en schematisk molekylskiss i figur 2.6. HNC har också detekterats i kometer och den har med större säkerhet klassats som ett produktämne. Vad HNC är en produkt av är dock långt ifrån fastställt. Observationer har visat att kvoten [HNC/HCN] ökar när kometer närmar sig solen och det finns olika teorier om varför. Ett alternativ är så kallad termisk nedbrytning av grus, det vill säga att partiklarna som bildar HNC frigörs från stenmaterialet i kometen. Detta sker endast vid höga temperaturer och skulle således förklara den ökande andelen HNC när kometen närmar sig solen. Vad som talar mot detta är detektioner av HNC på avstånd där termisk nedbrytning inte skulle vara tillräckligt effektiv för att orsaka de mängder som observerades. Även här finns det en möjlighet att verkligheten är en kombination av de olika reaktionsmekanismerna och det kan även se olika ut i olika kometer beroende på övriga egenskaper som till exempel täthet av partiklar i koman (Cottin & Fray 2008; Crovisier & Bockelee-Morvan 1999; Mumma & Charnley 2011).



Figur 2.6: Schematisk molekylskiss över isomererna HCN och HNC.

förångning Det är mycket som är okänt angående de kemiska processerna för HCN i kometers koma, men något som anses fastställt är att HCN sönderdelas till CN genom fotodissociation. På de flesta kometer finns det tillräckligt mycket HCN för att det skulle kunna vara den enda källan till CN, men en del avviker från detta. Av de många observationer som gjorts ser det ut som att HCN skulle kunna vara den enda källan till CN på avstånd från solen större än 3 AU, men att det åtminstone för en del kometer måste finnas en annan förklaring på kortare avstånd. Det skulle till exempel kunna vara reaktioner från ämnen som förväntas finnas i kometer men som ännu ej har detekterats eller termisk nedbrytning av sten och gruspartiklar. Även vad det gäller isotopförhållandet mellan CN och HCN finns det resultat som visar att de är lika och andra resultat som visar att de skiljer sig åt, vilket skulle betyda att allt CN inte kan ha bildats från HCN (Cottin & Fray 2008; Fray et al. 2005; Mumma & Charnley 2011).

Fotodissociation

Fotodissociation är namnet på den företeelse som innebär att en molekyl bryts sönder av fotoner. Det är en av de mest elementära kemiska reaktionerna (Bucher & Lehmann 1998). Flera olika kemiska reaktioner förekommer i kometers komor men fotodissociation är troligtvis en av de viktigare.

Fotodissociation innebär att en molekyl absorberar en foton och hamnar i ett exciterat tillstånd och sedan dissocierar. Ett typfall för hur detta går till visas nedan:



där ABC är en godtycklig molekyl, AB och C är godtyckliga dottermolekyler, joner eller atomer och hf är energin för en foton av frekvensen f . Eftersom spontan emission av en foton så att molekylerna återgår till grundtillståndet är relativt långsam så hinner de ofta dissociera. Fotodissociationshastigheten k beror på fotonens våglängd λ och fotonernas frekvenser f kopplas till energin som krävs för att bryta bindningen E_B enligt

$$E_B = N_A hc / \lambda = N_A hf , \qquad (2.23)$$

där N_A är Avogadros tal. Ekvation (2.23) är definierad i Rehder (2010). E_B är den teoretiskt minsta energin som krävs för att dissociera molekylerna. Fotonerna som faktiskt bryter bindningar har högre energi än så eftersom energin inte bara används till att bryta bindningen utan också till att excitera de bildade molekylfragmenten med avseende på rotationstillstånd, vibrationstillstånd, elektroniska tillstånd och translationsstillstånd (Lewis 2004). Att använda dissociationsenergin, det vill säga bildningsentalpin ΔH_f vid 0 K, som en fingervisning för när dissociation sker skulle alltså ge felaktiga resultat, även om den är användbar för att avgöra om fotodissociation kan orsakas av fotoner av en specifik våglängd. Det är fotonens våglängd som är avgörande för vilka tillstånd molekylfragmenten hamnar i (van Dishoeck & Visser 2011).

Även andra typer av fotokemiska reaktioner kan ske i koman, exempelvis strålningsassociation (engelskt uttryck: *radiative association*) som innebär sammanslagning av en molekyl och en elektron som bildar en negativt laddad jon och emitterar en foton. En annan fotokemisk reaktion är fotojonisation, där en foton slår ut en elektron från en molekyl eller atom och en positivt laddad jon bildas.

Fotoner från solen med tillräcklig energi att jonisera gaserna i kometkoma är generellt mindre vanliga än de som dissocierar dem eftersom dissociationsenergin ofta är lägre än joniseringsenergin (Lewis 2004). För att exemplifiera gäller för HCN att dissociationsenergin är cirka 132 kJ/mol och joniseringsenergin cirka 13,6 eV \approx 1310 kJ/mol (NIST 2015a,b). Således är fotodissociation en viktigare process för nedbrytning av polyatomära molekyler i kometkoma än vad fotojonisering är (Lewis 2004).

En faktor som har inverkan på hur mycket fotodissociation som sker är solens aktivitet då mer solaktivitet innebär att fler fotoner sänds ut och en större andel av de tillgängliga molekylerna dissocieras. Detta beror dels på att fler fotoner med rätt energimängd för att dissociera dessa molekyler finns tillgängliga och dels på att ökad solaktivitet gör att mer av isen i kometens kärna sublimerar och på så sätt frigör fler molekyler.

2.2.4 Kometers rotation

Kometer har precis som andra himlakroppar en rotation kring sin egen axel. Rotationen och förångningen av ämnen från en komet är två fenomen som båda påverkar varandra (Jewitt 1998). Kometer verkar ha en heterogen fördelning av ämnen. Detta har upptäckts dels från observationer av kometen, till exempel på Hartley 2 där aktiviteten och sammansättningen varierar mellan olika zoner på kometen (Mumma & Charnley 2011), dels från studier av kärnan på 67P/Churyumov-Gerasimenko som har delats in i en mängd olika geologiska regioner (Sierks et al. 2015).

En aktiv zon på en komet är ett område varifrån extra mycket is sublimerar då det området är vänt mot solen. Det kan vara ett isigt område som inte är skyddat av lika mycket grus och sten och därför är mer exponerat. Detta kan leda till en periodiskt varierande produktionstakt, men det är inte säkert att periodicitet uppkommer enbart för att en komet har aktiva zoner (Mumma & Charnley 2011). Det finns kometer som saknar regelbunden rotation och istället rör sig på ett närmast kaotiskt sätt (Crovisier 2001). Variationer i produktionstakten behöver heller inte vara en del i ett kontinuerligt periodiskt mönster utan kan vara tillfälliga gasutbrott (Mumma & Charnley 2011). En assymetrisk utströmning av gas verkar som raketmotorer och påverkar i sin tur hur kometen roterar (Jewitt 1998).

En roterande kropp har en kritisk hastighet där rotationen börjar ge upphov till inre spänningar i kroppen. Beroende på hur rigid och hårt sammanhållen kroppen är kan den antingen stå emot spänningarna eller falla sönder i bitar (Weidenschilling 1981). För de flesta kometer där rotationsperioden bestämts är den längre än sex timmar men underlaget består av ett ganska litet antal kometer (Mumma & Charnley 2011). Mer omfattande studier har gjorts av rotationstider för asteroider och deras rotationstider ligger oftast på mer än två timmar (Chang et al. 2014). I studier som gjorts av hundratals små asteroider har ingen roterat så snabbt att det skulle innebära spänningar på kärnan (Harris 1996). Små kroppar roterar snabbare än större, men vid en diameter på <10 km upphör det här mönstret bland asteroider. De roterar inte snabbare trots att de är mindre, vilket skulle kunna tyda på att kärnan är så löst sammanhållen att den skulle falla isär vid snabbare rotation (Harris 1996). Att göra liknande statistiska studier för kometers rotation är svårare då de flesta kometer oftast befinner sig för långt bort från jorden för att kunna observeras.

2.2.5 Kunskapen om kometer i ett vidare sammanhang

Istället för att enbart klassificera kometer efter deras omloppsbanor börjar astronomer intressera sig mer och mer för den kemiska sammansättningen och om det finns grupper av kometer med gemensamt ursprung som har liknande sammansättning. En sådan kategorisering skulle kunna avslöja hur och var kometerna bildades och ge mer insikt i hur bildandet av solsystem går till. Kunskap om sammansättningen hos kometer skulle också ge ledtrådar om i vilken utsträckning de har bidragit med vatten till jordens oceaner. För att kunna gruppera kometer efter deras kemiska sammansättning krävs dock att en stor mängd kometer undersöks noggrant (Mumma & Charnley 2011).

Kopplingar till det interstellära mediet

All materia i solsystemet kommer från de ämnen som fanns i det gasmoln där solen bildades. Mycket har påverkat de molekyler som fanns då och idag ser kemin annorlunda ut. Genom att undersöka kemiska skillnader och likheter mellan kometer och interstellära gasmoln kan vi få kunskap om processen som förändrade ett gasmoln till en protoplanetär skiva som sedan blev ett solsystem. De reservoarer av kometer som finns idag: Edgeworth-Kuiperbältet, Oorts moln och till viss del asteroidbältet, kan ha varit födelseplatser där de respektive kometerna har befunnit sig sedan dess. På grund av olika förhållanden på de olika platserna i solsystemet, till exempel olika temperatur, borde det finnas tydliga skillnader mellan

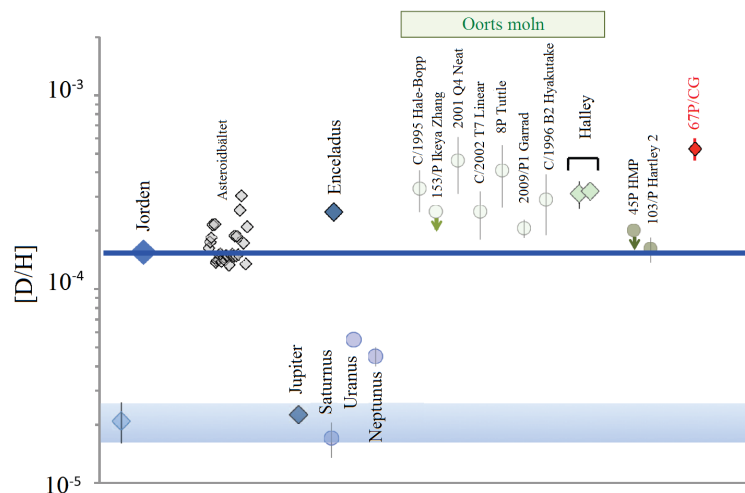
de kometer som bildats i Edgeworth-Kuiperbältet och Oorts moln. En annan teori är att kometerna inte bildades där de befinner sig idag utan att de blivit störda och omblandade i ett senare skede och kometer som bildats i Edgeworth-Kuiperbältet skickats ut till Oorts moln. Det finns även teorier som föreslår att en stor del av kometerna kan ha bildats utanför vårt solsystem och senare fångats in. Dessa kometer borde i så fall uppvisa tydliga spår av sitt förflutna i ett annat solsystem. Något som indikerar skilda ursprung är att en del kometer uppvisar kemi som tyder på att de har bildats i närheten av solen vid högre temperaturer och andra visar istället likheter med kemin i det interstellära mediet (Mumma & Charnley 2011).

Leverans av vatten till jorden

Den tidiga jorden var mycket varm och hade troligen inget vatten. Om så var fallet måste det ha levererats till jorden utifrån (Marty 2011). Att det skulle komma från kometer har varit en teori eftersom jorden bombarderades av himlakroppar efter dess bildande och kometer innehåller mycket vatten. För att ta reda på vattnets ursprung jämförs kvoten mellan isotoperna deuterium (^2H , i fortsättningen D) och vanligt väte (^1H , i fortsättningen H) i vattenmolekylerna. Om jordens vatten kommer från kometer så bör kvoten $[\text{D}/\text{H}]$ i vattnet på jorden avspegla det genomsnittliga isotopförhållandet i kometer.

De första mätningarna av isotopförhållanden i väteatomerna i vatten gjordes på sex kometer från Oorts moln. Det visade sig att de har ungefär dubbelt så stor andel deuterium som vattnet på jorden. Med denna sammansättning kan inte mer än 10% av jordens vatten ha kommit från kometer, resten måste ha kommit från asteroider. År 2010 bestämdes isotopförhållandet för väte i kometen 103P/Hartley 2 som kommer från Edgeworth-Kuiperbältet. Hartley 2 har ett isotopförhållande som bara är marginellt högre än det i vattnet på jorden, vilket öppnar för möjligheten att kometer trots allt har kunnat vara av större betydelse för jordens vattentillförsel (Hartogh et al. 2011). Efter den här upptäckten har antalet kometer från Oorts moln vars sammansättning undersökts fördubblats, och de visar fortfarande en högre andel deuterium. Det senaste resultatet om isotopsammansättning kommer från rymdsonden ROSETTA som funnit att 67P/Churyomv-Gerasimenko, från Edgeworth-Kuiperbältet, har ungefär tre gånger högre isotopförhållande än på jorden, vilket även är högre än hos de flesta av kometerna från Oorts moln. Resultaten, som illustreras i figur 2.7, tyder på att isotopsammansättningen i kometer från Edgeworth-Kuiperbältet har stor spridning, vilket i så fall ger stöd åt teorin att kometer därifrån har bildats på olika platser (Altwegg et al. 2015).

En förutsättning för att dessa jämförelser ska vara relevanta är dock att det finns kännedom om hur isotopsammansättningen för en viss komet har utvecklats över tid. Isotopsammansättningen i vattnet på jorden förändras inte, men det kan den göra på kometer. Eftersom vattenmolekyler som innehåller deuterium är tyngre kommer en fraktionerad sublimering ske så att en högre andel deuterium blir kvar på kometen. På så sätt kan kvoten $[\text{D}/\text{H}]$ öka varje gång kometen passerar solen (Altwegg et al. 2015).



Figur 2.7: Kvoten $[\text{D}/\text{H}]$ för ett antal himlakroppar i solsystemet. Den blå linjen visar isotopförhållandet på jorden. Översatt och modifierad av Elin Tegehall från Altwegg et al. (2015).

2.3 Kvantfysiken bakom strålningsemission

Kvantfysikens grundprincip är att vissa fysikaliska storheter enbart kan anta diskreta värden. Detta område inom den moderna fysiken tillämpas på ytterst småskaliga system, till exempel en atom eller en molekyl. En vanlig storhet i kvantmekaniska sammanhang är systemets energi som antar diskreta värden. Två exempel på enkla kvantsystem är en endimensionell harmonisk oscillator och väteatomen, där det sistnämnda består av en proton och en elektron. Energinivåerna för en harmonisk oscillator är

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.24)$$

där $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1,055 \cdot 10^{-34}$ Js, ω är vinkelfrekvensen och n är systemets huvudkvanttal (Joachain & Bransden 2003). Energinivåerna i en väteatom kan approximeras till

$$E_n \approx -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.25)$$

där huvudkvanttalet n betecknar vilket atomskal elektronen befinner sig i enligt Bohrs atommodell (Henningson 2014).

Den energinivå med lägst energi kallas systemets grundtillstånd och de övriga energinivåerna är exciterade tillstånd. Ett system hoppar mellan olika energinivåer genom absorption eller emission av fotoner. Energin för en foton ges av

$$E = hf \quad (2.26)$$

där h är Plancks konstant och f fotonens frekvens. Vid en övergång mellan två energinivåer är hela energiskillnaden koncentrerad till en foton och därför karaktäriseras olika övergångar av absorption eller emission av fotoner med unika frekvenser.

2.3.1 Energiövergångar för molekyler

För molekyler förekommer tre typer av kvantmekaniska övergångar:

- Elektroniska övergångar
- Vibrationsövergångar
- Rotationsövergångar

Elektroniska övergångar beskrivs, precis som för atomer, med huvudkvanttalet n . Samma princip gäller som för atomära elektroniska övergångar, det vill säga elektroner hoppar mellan olika energinivåer som approximativt kan förklaras som atomskal. Energiskillnaden i elektroniska övergångar är i storleksordningen några eV. Skillnaden i molekylära elektroniska övergångar är att systemet är betydligt mer avancerat. Energinivåerna går inte att lösa exakt med schrödingerekvationen utan kräver approximationer eller experiment för att bestämmas.

Vibration- och rotationsövergångar existerar inte för enskilda atomer utan är unikt för molekyler. Att en molekyl vibrerar beskrivs med linjär harmonisk rörelse. Betrakta ett diatomiskt system med respektive massor m_1 och m_2 och kraftkonstant k mellan atomerna. Genom att approximera respektive atom till punktmassor kan schrödingerekvationen skrivas upp enligt

$$\left[-\frac{\hbar}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{2}k(R - R_0)^2 \right] \Psi_v = E_v \Psi_v, \quad (2.27)$$

där den första termen i Hamiltonianen beskriver systemets kinetiska energi och den andra termen den potentiella energin. Den potentiella energin är alltså samma som för en harmonisk oscillator, där R_0 är systemets jämviktsläge och R avståndet mellan atomerna. Observera att systemets massa μ är den reducerade massan, definierad enligt

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} . \quad (2.28)$$

Lösningen till schrödingerekvationen ovan ger energiegenvärdena

$$E_v = \hbar\omega_0 \left(v + \frac{1}{2} \right), \quad v = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.29)$$

där $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ och v är vibrationskvanttalet (Joachain & Bransden 2003). Ekvation (2.29) ger således att vibrationsenerginivåerna är ekvidistanta. Övergångsregeln som gäller för vibrationsövergångar är $\Delta v = \pm 1$ och övergångar är i storleksordningen 10^{-2} eV, vilket svarar mot frekvenser i det infraröda området (Vojvodic 2006). Om ett system med fler än två atomer studeras fungerar principen med vibrationer på samma sätt, men matematiken blir mer avancerad och behandlas inte i detta arbete.

Även för rotationer betraktas ett diatomiskt system. I klassisk fysik beskrivs rörelsemängden som

$$\mathbf{L} = \mathbf{I}\boldsymbol{\omega} , \quad (2.30)$$

där \mathbf{I} är tröghetstensorn och $\boldsymbol{\omega}$ är vinkelhastighetsvektorn. Samtidigt är rotationsenergin E_{rot} definierad enligt

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} I \omega^2 , \quad (2.31)$$

där $I = \mu R^2$ är tröghetsmomentets storlek där μ som den reducerade massan och R är avståndet mellan atomerna. Det innebär att rotationsenergin kan skrivas

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \frac{|\mathbf{L}|^2}{I} . \quad (2.32)$$

Kvantmekaniskt gäller att totala rörelsemängdsmomentet

$$|\mathbf{L}| = \sqrt{J(J+1)} \hbar . \quad (2.33)$$

Insättning i ekvation (2.32) ger att den kvantmekaniska beskrivningen av rotationsenergin skrivs

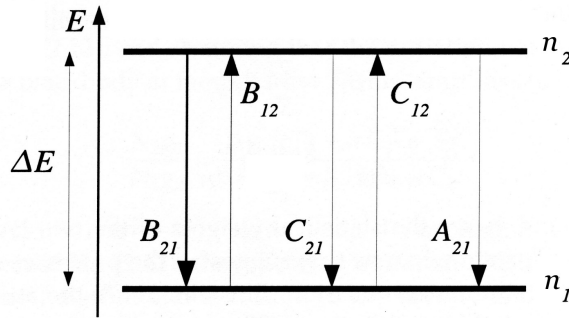
$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) = hB_0 J(J+1) , \quad J = 0, 1, 2, 3, \dots , \quad (2.34)$$

där $B_0 = \frac{\hbar}{4\pi I}$ är en stel rotor-konstant, som bygger på approximationen att en molekyl inte förvrängs när den roterar. Rotationsövergångar beskrivs av urvalsregeln $\Delta J = \pm 1$ och är i storleksordningen $10^{-4} - 10^{-3}$ eV (Vojvodic 2006). För icke linjära molekyler finns ytterligare en kvanttal, K , som är projektionen av rörelsemängdsmomentet J längs molekylens symmetriaxel. Eftersom K är projektionen av J gäller att $K \leq J$. Speciellt är $K = 0$ för linjära molekyler (Bernath 2015).

Som tidigare nämnts gäller att energiskillnaden i rotationsövergångar motsvarar fotoner med radiofrekvenser, varför dessa kan detekteras med radioteleskop på jorden.

2.3.2 Tvånivåsystem

Energien i en atom eller en molekyl kan förenklat ses som ett tvånivåsystem med ett exciterat tillstånd och ett grundtillstånd. Systemet kan befinna sig i någon av de två nivåerna samt exciteras och deexciteras då energi tas upp eller avges i form av fotoner. Skillnaden i energi mellan nivå 1 och 2 betecknas ΔE . Figur 2.8 visar ett tvånivåsystem schematiskt.



Figur 2.8: Schematisk bild över hur ett tvånivåsystem och övergångarna som kan ske mellan de två nivåerna ser ut. De två nivåerna representerar två olika tillstånd systemet kan befinna sig i. Bilden kommer från Wirström (2006).

Emissionen kan ske på tre olika sätt; spontant, orsakat av yttre strålning eller på grund av kollisioner. Spontan emission innebär att en foton efter en viss tid spontant avges och systemet deexciterar till grundtillståndet (Corney 1977). Måttet på sannolikheten för spontan emission betecknas A_{21} och har enheten s^{-1} . Övergången mellan de två nivåerna kan även ske på grund av att molekylerna eller atomerna kolliderar med andra partiklar (Mangum & Shirley 2015). Måttet på sannolikheten för att en övergång skall ske på grund av kollisioner betecknas C_{21} och C_{12} med enheten $cm^3 s^{-1}$. Måttet på sannolikheten för emission stimulerad av yttre strålning betecknas B_{21} och måttet för sannolikheten för absorption av yttre strålning betecknas B_{12} . Både B_{21} och B_{12} har enheten $W^{-1} m^2 Hz s^{-1}$. A_{21} , B_{21} samt B_{12} kallas Einsteinkoefficienter (Mangum & Shirley 2015; Chandrasekhar 1950).

När systemet är i jämvikt skall processerna som gör att övergångar sker uppåt och nedåt vara balanserade, vilket är formulerat enligt

$$n_1(J_f B_{12} + m C_{12}) = n_2(J_f B_{21} + m C_{21} + A_{21}), \quad (2.35)$$

där n_1 respektive n_2 är populationen av partiklar i respektive nivå, m är tätheten av partiklar som kolliderar och J_f är den genomsnittliga intensiteten av det yttre strålningsfältet, som har enheten $W m^{-2} Hz^{-1}$ (Wirström 2006).

Om systemet dessutom befinner sig i någon form av termisk jämvikt så relateras populationerna i de två nivåerna enligt Boltzmannfördelningen vid temperaturen T , vilket ges från Mangum & Shirley (2015) enligt

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{-\frac{hf}{k_B T}}, \quad (2.36)$$

där k_B är Boltzmanns konstant, h är Plancks konstant, f är frekvensen samt g_2 och g_1 är faktorerna för olika degenererade tillstånd för de två energinivåerna.

Det är vanligt att anta så kallad lokal termodynamisk jämvikt (LTE) som innebär att i varje punkt av ett gasmoln finns det en lokal temperatur sådan att Kirchoffs lag för termisk strålning är uppfylld (Chandrasekhar 1950). Detta formuleras som

$$\epsilon_f = \kappa_f J_f, \quad (2.37)$$

där ϵ_f är emissionskoefficienten för frekvensen f , κ_f är absorptionskoefficienten för frekvensen f och J_f är som tidigare den genomsnittliga intensiteten av det yttre strålningsfältet. För att gasmolnet i en punkt skall befinna sig i lokal termodynamisk jämvikt (LTE) krävs det också att J_f i ekvation (2.37) är svartkroppsstrålning som är definierad enligt Plancks lag,

$$B_f(T) = \frac{2hf^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{hf}{k_B T}} - 1}. \quad (2.38)$$

De tre Einsteinkoefficienterna A_{21} , B_{21} och B_{12} kan således, efter insättning i ekvationerna ovan, kopplas samman enligt (Chandrasekhar 1950; Mangum & Shirley 2015):

$$B_{12} = \frac{g_2}{g_1} B_{21} \quad A_{21} = \frac{2hf^3}{c^2} B_{21} . \quad (2.39)$$

Både Plancks lag, ekvation (2.38), och populationsrelationen, ekvation (2.36), utvärderas vid excitationstemperaturen T_{ex} . Excitationstemperaturen definieras av att utvärdera ekvation (2.36) vid $T = T_{ex}$ (Mangum & Shirley 2015). Vid LTE är $T_{ex} = T_K$, där T_K är den kinetiska gastemperaturen (Wirström 2006).

2.3.3 Atomär finstruktur och hyperfinstruktur

Hittills har atomära energinivåer enbart beskrivits med kvanttalet n , som betecknar vilket atomsskal en elektron befinner sig i. Att bara betrakta kvanttalet n är en förenkling av atomens energinivåer. I verkligheten är varje energinivå n uppsplittrad i olika kvantmekaniska energinivåer som beror på atomens andra kvanttal. Uppsplittning av energinivåerna n kallas finstruktur och uppsplittningen av finstrukturen kallas i sin tur hyperfinstruktur. Det gäller att energiuppsplittningen är mycket mindre för hyperfinstruktur jämfört med finstruktur. För att diskutera fin- och hyperfinstruktur är kunskap om elektronernas kvanttal i atomer nödvändiga. Dessa grundläggande kvanttal med tillhörande villkor visas i tabell 2.1 nedan. Det azimutala kvanttalet brukar istället för siffran betecknas med en bokstav när dess tillstånd anges: $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ svarar mot $l = s, p, d, f, g, \dots$.

Tre andra kvanttal som används för att beskriva fin- och hyperfinstruktur är en elektrons totala rörelsemängdsmoment $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, storleken på dessa $j = 1/2, 3/2, \dots, n - 1/2$ samt det totala magnetiska kvanttalet $m_j = m_l + m_s$. Dessutom gäller villkoret $m_j = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$ (Joachain & Bransden 2003). För övergångsregler gäller $\Delta j = 0, \pm 1$ men inte $0 - 0$. Observera att de stora, fetmarkerade kvanttalen symboliserar operatorer och vektorer medan de vanliga beteckningarna symboliserar kvanttals storlek. Ett exempel på detta är $\mathbf{J}^2 = j(j + 1)\hbar^2$.

Tabell 2.1: De grundläggande kvanttalen för en elektron i en atom.

Beteckning	Namn	Villkor
n	Huvudkvanttal	$n = 1, 2, 3, \dots$
l	Azimutala kvanttalet	$l = 0, 1, \dots, n - 1$
m	Magnetiska kvanttalet	$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$
s	Spinnkvanttalet	$s = \pm 1/2$

Finstruktur

Betrakta en atom som endast innehåller en elektron. För flerlektronssystem är principen densamma men uträkningarna blir mycket mer avancerade. Den Hamiltonian som används för att beräkna energinivåerna för kvanttalet n tar hänsyn till elektronens klassiska kinetiska energi och Coulombpotentialen som uppstår mellan den negativt laddade elektronen och den positivt laddade kärnan:

$$H_0 = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} . \quad (2.40)$$

Tre korrigeringar till Hamiltonianen görs för att kunna förklara finstrukturen. Dessa kan betraktas som störningar till den ursprungliga Hamiltonianen och den uppsplittning som sker beräknas med kvantmekanisk störningsteori. Den nya Hamiltonianen skrivs

$$H = H_0 + H'_1 + H'_2 + H'_3 , \quad (2.41)$$

där H'_i är korrigeringar till den ursprungliga Hamiltonianen H_0 . Den första korrigeringen H'_1 är för relativistiska effekter på den kinetiska energin. Den andra korrigeringen H'_2 gäller den potentiella energin och påverkar bara när azimutala kvantalet $l = 0$.

Den tredje korrigeringen H'_3 är spinn-bankopplingen. Den uppstår på grund av att när en elektron rör sig runt en atomkärna, eller tvärtom ifall situationen betraktas från elektronens inertialsystem, genereras ett magnetfält. Denna banrörelse bestäms utifrån kvantalet \mathbf{L} och det genererade magnetfältet interagerar med elektronens spinn, som beskrivs av \mathbf{S} . Därav namnet spinn-bankoppling och det gäller att $H'_3 \propto \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$.

Om korrigeringarna löses med störningsteori erhålls nya energinivåer som beror på kvanttalen n och j :

$$E_{n,j} = E_n \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right], \quad (2.42)$$

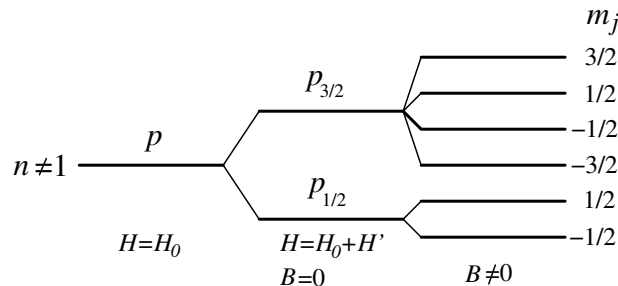
där E_n är energinivåerna från H_0 , Z är atomnumret, $\alpha \approx 1/137$ är finstrukturkonstanten och n respektive j är kvanttalen som definierats tidigare (Joachain & Bransden 2003). Resultatet är alltså att beloppet av energinivåerna ökar. Uppsplittningen är störst för låga n och skalar dessutom enligt Z^2 .

Zeemaneffekten

Ytterligare uppsplittning av finstrukturen sker om atomen befinner sig i ett magnetfält. Fenomenet kallas Zeemaneffekten och beror på elektronernas magnetiska kvanttal m_j . Hur stor uppsplittningen blir beror på hur starkt magnetfältet är och därför kategoriseras inte Zeemaneffekten som finstruktur eller hyperfinstruktur. I fallet med ett relativt svagt magnetfält⁶ blir energiuppsplittningen

$$\Delta E_{m_j} = g\mu_B B m_j, \quad (2.43)$$

där $g = 1 + \frac{j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)}{2j(j+1)}$ är Landé-faktorn, μ_B är Bohrmagnetonen, B är magnetfältets styrka och m_j det magnetiska kvantalet. En schematisk bild över energinivåuppsplittning på grund av finstruktur och Zeemaneffekten visas i figur 2.9.



Figur 2.9: Schematisk bild över energinivåuppsplittning genom finstruktur och Zeemaneffekten. Situationen betraktas för $l=1$, vilket betecknas med tillståndet p . Först visas energinivån utan finstrukturen, det vill säga $H = H_0$. När finstrukturkorrigeringen tillämpas splittras energinivån upp i två nivåer, $j = 1/2$ och $j = 3/2$. Den givna Hamiltonianen är $H_0 + H'$, där $H' = H'_1 + H'_2 + H'_3$. Om ett magnetfält appliceras på systemet splittras energinivåerna upp ytterligare med avseende på det magnetiska kvantalet m_j , vilket är Zeemaneffekten. Det applicerade magnetfältet i situationen är svagt. Författarnas egen bild.

⁶Ett magnetfält kan i det här sammanhanget betraktas som svagt om $B < Z^4$, där B är magnetfältets styrka i tesla och Z är atomnumret. Det krävs alltså mycket starka magnetfält för att det inte ska betraktas som svagt.

Hyperfinstruktur

Tidigare, i finstrukturen, har atomkärnan approximerats som en punktladdning med oändlig massa. Dessa approximationer fungerar vanligtvis bra eftersom kärnan är mycket tyngre än elektronerna, som dessutom befinner sig på ett långt avstånd från kärnan i förhållande till dess storlek. Men för att komma ännu närmare verkligheten tas atomkärnans utbredning och ändliga massa i beaktning, vilket orsakar uppsplittning i energinivåer som kallas hyperfinstruktur. Den fysikaliska förklaringen är magnetisk växelverkan och uppsplittningen är mycket mindre än energiuppsplittningarna i finstrukturen.

Den magnetiska växelverkan som ger upphov till energisplittningen sker mellan en elektron och atomkärnan. Uppsplittningen kommer från att kärnans magnetiska moment interagerar med magnetfältet som elektronerna ger upphov till. Det kvanttal i elektronen som ger upphov till ett magnetfält är det totala rörelsemängdsmomentet \mathbf{J} . På samma sätt har även kärnan ett totalt rörelsemängdsmoment som betecknas \mathbf{I} . Storleken på kärns핀net \mathbf{I} ges av $|\mathbf{I}| = \sqrt{I(I+1)}\hbar$ och det gäller att $I = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2},$ och så vidare. Kärns핀net är konstant i övergångar förutsatt att nukleonsammansställningen inte förändras eller att kärnan exciteras.

Kärns핀net bestäms utifrån antalet protoner och antalet neutroner i kärnan var för sig. Protoner och neutroner är fermioner med energinivåer enligt en skalmodell i kärnan, som kan liknas vid elektronernas energinivåer i en atom. Eftersom protonen och neutronen är olika partiklar har de skalmodeller fristående från varandra. Ett jämnt antal protoner eller neutroner parar ihop sig så att kärns핀nets bidrag för den partikeln neutraliseras och blir noll. I fallet där både antalet protoner och antalet neutroner är jämnt blir alltså kärnans spinn $I = 0$. Vid ett udda antal av endera nukleonsort gäller att $I \neq 0$. Alla nukleoner förutom valensnukleonerna parar ihop sig och ger inget bidrag till kärns핀net. Den sista, som har den högsta energin i den nukleära skalmodellen, ger ett bidrag till kärns핀net som beror på partikelns kvantiserade rörelsemängdsmoment. I fallet med både ett udda antal protoner och ett udda antal neutroner i kärnan kan kärnans totala spinn inte förutsägas exakt. Däremot gäller att kärnans spinn ligger i intervallet $|j_p - j_n|$ till $(j_p + j_n)$, där j_p och j_n är nukleonernas rörelsemängdskvanttal motsvarande de j som definierats för elektroner (Martin 2009).

Kärns핀net brukar anges tillsammans med sin paritet $\pi = +$ eller $-$ och betecknas I^π . Pariteten beskriver om kärnans vågfunktion förändras vid rumslig reflektion. Positiv paritet innebär att vågfunktionen inte förändras vid rumslig reflektion, och vice versa.

Ett användbart kvanttal i samband med atomär hyperfinstruktur är atomens totala rörelsemängdsmoment $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$. Precis som för andra kvanttal kan egenenergierna för kvanttallet \mathbf{F} skrivas $|F| = \sqrt{F(F+1)}\hbar$, där $F = |J - I|, |J - I| + 1, \dots, J + I - 1, J + I$. De övergångsregler som gäller för kvanttallet är $\Delta F = 0, \pm 1$ men inte $0 - 0$.

2.3.4 Hyperfinstruktur för HCN med rotationsövergång $J = 1 - 0$

HCN är en linjär molekyl som vanligtvis består av isotoperna ^1H , ^{12}C och ^{14}N . Väteatomens kärns핀net bestäms av den enda nukleonen och är i grundtillståndet $I_{\text{H}} = \frac{1}{2}^+$. Kolatomen har ett jämnt antal av både protoner och neutroner, vilket ger kärns핀net $I_{\text{C}} = 0^+$. Kväveatomen har ett udda antal protoner och ett udda antal neutroner, vilket gör att bidrag till kärns핀net sker från både en proton och en neutron. Kärns핀net för ^{14}N är bestämt till $I_{\text{N}} = 1^+$ (Martin 2009).

Det gäller att den hyperfinstruktur som ger störst bidrag till energiuppsplittningar kommer från ^{14}N . Den fysikaliska processen som ger störst bidrag till uppsplittningen är att kärnan i ^{14}N producerar ett elektriskt kvadrupolmoment. Storleken på kvadrupolmomentet beror på hur stor avvikelse från sfärisk symmetri som kärnans laddning har. Det elektriska kvadrupolmomentet interagerar med det negativa elektriska fältet från elektronerna i atomen och en hyperfinstruktur uppstår (Ahrens et al. 2002).

Kärns핀net i ^{14}N kan också betraktas som en mikroskopisk magnet. Denna magnet har ett magnetiskt moment som interagerar med magnetfältet som uppstår på grund av att de negativt laddade elektronerna roterar kring en positivt laddad kärna. Detta bidrar också till hyperfinstrukturen (Ahrens et al. 2002).

Teoretiskt förekommer det även en hyperfinstrukturuppsplittning som orsakas av kärns핀net $I_{\text{H}} = \frac{1}{2}^+$ för ^1H . Denna uppsplittning sker på grund av magnetisk koppling mellan kärns핀nen i ^{14}N och ^1H . Dock är energiuppsplittningen för liten för kunna detekteras och därför gäller att den detekterbara hyperfinstrukturen

enbart orsakas av ^{14}N -atomen i HCN (Ahrens et al. 2002).

När enbart ^{14}N -atomen betraktas förenklas situationen och energiuppsplittringen med tillhörande kvanttal kan studeras. De observerade radiofrekvenserna täcker enbart in rotationsövergången $J = 1 - 0$ och därför behöver inte andra övergångar betraktas. Kärnans spinn är konstant $I_{\text{N}} = 1^+$ och därför fås att möjliga värden på kvantalet F före rotationsövergången är

$$F_{\text{före}} = |J - I|, |J - I| + 1, \dots, J + I - 1, J + I = \left\{ J = 1, I = 1 \right\} = 0, 1, 2. \quad (2.44)$$

Möjliga värden på F efter rotationsövergången är

$$F_{\text{efter}} = \left\{ J = 0, I = 1 \right\} = 1. \quad (2.45)$$

Med den tidigare definierade övergångsregeln $\Delta F = 0, \pm 1$ är det klart att hyperfinstrukturen ger upphov till att rotationsövergången $J = 1 - 0$ splittras i tre olika övergångar som beror på den övre nivåns totala rörelsemängdsmoment F . Dessa tre övergångar har energiskillnader som svarar mot mikrovågsstrålning runt 88,6 GHz. Frekvenserna är uppmätta i laboratorium och presenteras i tabell 2.2 nedan. I fortsättningen av denna rapport kommer övergångarna att betecknas $F = 1 - 1$, $F = 2 - 1$ respektive $F = 0 - 1$.

Tabell 2.2: De tre rotationsövergångarna för HCN med $J = 1 - 0$. Respektive övergångs relativa intensitet visas också (JPL 2015).

Frekvens [MHz]	Osäkerhet [MHz]	Kvanttal J	Kvanttal F	Relativ intensitet
88630,416	0,001	1 - 0	1 - 1	3
88631,847	0,001	1 - 0	2 - 1	5
88633,936	0,001	1 - 0	0 - 1	1

2.4 Strålningstransport

Strålningstransport handlar om hur energi färdas i form av elektromagnetisk strålning. Hur detta sker och hur strålningen interagerar med media beskrivs i ekvationen för strålningstransport (2.46).

2.4.1 Ekvationen för strålningsintensitet

Strålningsintensiteten I_f [$\text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{Hz}^{-1}$] är strålningen från en yta för frekvensen f . Strålningsintensiteten varierar inte med transportsträckan, utan enbart då strålning emitteras eller absorberas (Draine 2011; Hüttemeister et al. 2009; Chandrasekhar 1950). Interaktion med media kan även orsaka spridning av strålning, något som här bortses från (Mangum & Shirley 2015). Hur strålningen påverkas av emission och absorption beskrivs av ekvationen för strålningstransport:

$$\frac{dI_f}{ds} = -\kappa_f I_f + \epsilon_f, \quad (2.46)$$

där κ_f är absorptivitetskoefficienten vid frekvensen f , ϵ_f emissivitetskoefficienten vid samma frekvens och s är siktlinjen längs vilken strålningen utsätts för interaktion. Eftersom det är svårt att veta avståndet s brukar det bytas ut mot variabeln optiskt djup τ_f , som är definierad enligt (Mangum & Shirley 2015; Draine 2011)

$$d\tau_f := \kappa_f ds. \quad (2.47)$$

Den optiska djupet är ett mått på hur mycket material som absorberar elektromagnetisk strålning vid en viss frekvens f . En ny parameter, källfunktionen S_f (engelskt uttryck: *source function*), definieras enligt $S_f = \frac{\epsilon_f}{\kappa_f}$. Ekvationen för strålningstransport kan nu omformuleras till

$$\frac{1}{\kappa_f} \frac{dI_f}{ds} = \frac{dI_f}{d\tau_f} = S_f - I_f. \quad (2.48)$$

Den generella lösningen till differentialekvationen ovan kan skrivas som

$$I_f(\tau_f) = I_f(0)e^{-\tau_f} + \int_0^{\tau_f} e^{-(\tau_f-\tau')} S_f d\tau' . \quad (2.49)$$

Om strålningen kan antas vara i termodynamisk jämvikt med mediumet genom vilket den sprider sig (se avsnitt 2.3.2) så kan källfunktionen S_f antas vara densamma som Plancks lag, utvärderad vid excitationstemperaturen T_{ex} och lösningen till ekvation (2.48) blir då likadan som ekvation (2.49) såtillvida att källfunktionen byts ut mot Plancks lag $B_f(T_{ex})$, ekvation (2.38) (Draine 2011). Antas utöver detta att excitationstemperaturen är konstant så förenklas ekvation (2.49) till följande:

$$I_f = I_f(0)e^{-\tau_f} + B_f(T_{ex})(1 - e^{-\tau_f}) \quad (2.50)$$

(Draine 2011). Rayleigh-Jeans approximation som gäller vid $hf \ll k_B T$ gör att Plancks lag kan förenklas till (Hüttemeister et al. 2009)

$$B_f(T_{ex}) = \frac{2f^2 k_B T_{ex}}{c^2} . \quad (2.51)$$

Då Rayleigh-Jeans approximation gäller kan strålningsintensiteten I_f uttryckas som att vara proportionell mot en strålningstemperatur (engelskt uttryck: *brightness temperature*) T_B och ekvation (2.50) kan uttryckas i termer av strålningstemperaturen,

$$T_B = T_{bg}e^{-\tau} + T_{ex}(1 - e^{-\tau}) , \quad (2.52)$$

där T_{bg} är bakgrundens strålningstemperatur.

2.4.2 Härledning av uttryck för kolumntäthet

Kolumntäthet (engelskt uttryck: *column density*) är ett mått på antalet molekyler per enhetsarea längs med siktlinjen och har enheten cm^{-2} (Mangum & Shirley 2015). Den används för att beräkna andra fysiska egenskaper hos kometkomet, till exempel produktionstakt. Uttrycket för kolumntätheten av molekyler som befinner sig i den övre energinivån 2 betecknas med N_2 och definieras enligt

$$N_2 = \int n_2 ds , \quad (2.53)$$

där n_2 är populationen av molekyler i energinivå 2 (se avsnitt 2.3.2). Genom att använda definitionen av optisk täthet i ekvation (2.47), sammankopplingen mellan de två populationsnivåerna i ekvation (2.36), Einsteins A-koefficient A_{21} , definitionen av kolumntätheten från ekvation (2.53) samt definitionen av absorptionskoefficienten κ_f erhålls följande uttryck för κ_f :

$$\kappa_f = \frac{c^2}{8\pi f^2} \frac{g_2}{g_1} A_{21} \left(1 - \frac{g_1 n_2}{g_2 n_1}\right) \phi_f , \quad (2.54)$$

där g_1 och g_2 är de degenererade tillstånden för energinivå 1 respektive 2 (se avsnitt 2.3.2) och ϕ_f spektrallinjeprofilen (engelskt uttryck: *spectral line function*). Om allt detta kombineras och Rayleigh-Jeans approximation har antagits så erhålls ett samband mellan den optiska djupet τ_f och kolumntätheten N_2 enligt

$$N_2 = \frac{8\pi k_B f T_{ex}}{hc^2 A_{21}} \int \tau_f df , \quad (2.55)$$

där $\int \tau_f df$ är det integrerade optiska djupet, k_B Boltzmanns konstant och c är ljushastigheten. Notera att integralen har tagits över linjeprofilen så att $\int \phi_f = 1$.

Om mediet där kolumntätheten beräknas är optiskt tunt, det vill säga $\tau_f \ll 1$, samt bakgrundsstrålningen $I(0)$ antas vara 0, ger ekvation (2.52) att strålningstemperaturen som mäts upp vid en viss frekvens, T_B , är proportionell mot τ_f och därmed mot kolumntätheten enligt ekvation (2.55). Om källan antas uppta hela huvudloben går det även att sätta T_B till T_A^* , där T_A^* är den korrigerade antenntemperaturen (Draine 2011;

Ulich & Haas 1976). Dessa är kopplade enligt $T_B = \frac{T_A^*}{\eta_{HL}} = T_{ex}\tau_f$. Uttrycket för kolumntätheten blir nu istället

$$N_2 = \frac{8\pi k_B f^2}{hc^3 A_{21} \eta_{HL}} \int T_A^*(f) dv . \quad (2.56)$$

Den totala kolumntätheten N_{tot} är kolumntäthet av partiklar som befinner sig i alla möjliga energinivåer längs med siktlinjen och är den kolumntätheten som är intressant (Mangum & Shirley 2015). Förutsatt att temperaturen (T_{ex}) är konstant för alla energinivåer, vilket gäller vid lokalt termisk jämvikt (LTE), så relateras N_{tot} till N_2 enligt

$$\frac{N_{tot}}{N_2} = \frac{Q_{rot}(T_{ex})}{g_2} e^{\frac{E_2}{k_B T_{ex}}} , \quad (2.57)$$

där $Q_{rot}(T)$ är rotationspartitionsfunktionen som beskriver fördelningen av populationen i de olika energinivåerna (Mangum & Shirley 2015). Partitionsfunktionen definieras enligt

$$Q_{rot}(T_{ex}) = \sum g_J g_K g_I e^{-\frac{E_J}{k_B T_{ex}}} , \quad (2.58)$$

där g_J , g_K och g_I är de degenererade tillstånden för kvanttal J , K och I (se avsnitt 2.3.1). Produkten av g_J , g_K och g_I ger det totala antalet degenererade tillstånd för en energinivå. Om molekylerna som skall utvärderas är linjär sätts de degenererade tillstånden för kvanttal J , K och I enligt Mangum & Shirley (2015) till

$$g_J = 2J + 1 \quad g_K = 1 \quad g_I = 1 . \quad (2.59)$$

Om molekylerna kan approximeras till en stel rotor, alltså exempelvis är linjär, kan energin E_J förenklas till

$$E_J = hB_0 J(J + 1) . \quad (2.60)$$

Då energin E_J antagits vara konstant erhålls ett värde av B_0 som är konstanten för en stel rotor (Mangum & Shirley 2015).

Efter insättning av ekvation (2.59) och (2.60) i uttrycket för rotationspartitionsfunktionen Q_{rot} i ekvation (2.58) och en Taylorutveckling av Q_{rot} erhålls en approximation av Q_{rot} som gäller för linjära molekyler som visas nedan,

$$Q_{rot}(T_{ex}) = \frac{k_B T_{ex}}{hB_0} . \quad (2.61)$$

2.5 Hasermodellen

För att beräkna produktionstakten utifrån observationsdata behövs en modell för hur gasen från kometen strömmar. Hasermodellen är en enkel men populär modell som utvecklades 1957 och fortfarande används flitigt bland kometforskare (de Pater & Lissauer 2010). Den grundar sig på några enkla approximationer och antaganden kring kometer och vad som händer med gasen då den lämnar kometens yta (Cochran 1985). Det finns förstås många olika versioner av Hasermodellen som ligger på olika detaljnivå. Följande beskrivning gäller för den version av modellen som tillämpas i mom, det program som används i det här projektet och som också har använts av bland annat Gicquel et al. (2014) och Milam et al. (2004).

Det första antagandet är att förångningen sker med sfärisk symmetri. Partiklarna som förångas och lämnar kometrytan rör sig med konstant hastighet i raka banor radiellt utåt. De fortsätter sina banor tills de fotodissocierar. Modellen tar ingen hänsyn till vad som händer med dottermolekylerna efter fotodissociationen.

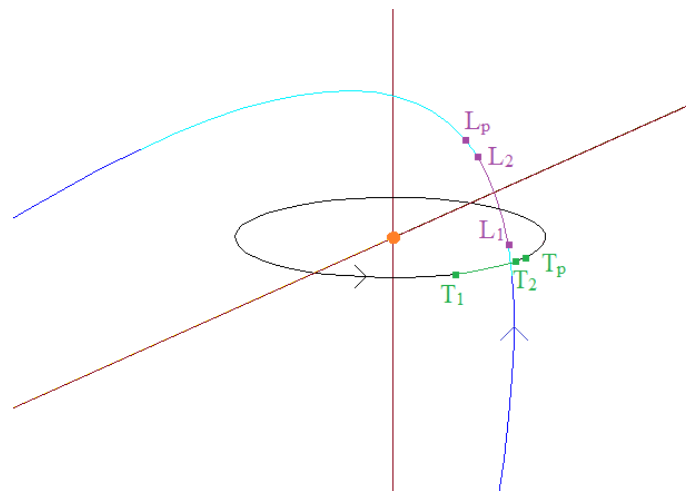
Då gasen från kometen strömmar åt olika håll relativt kärnan och observatören kommer den också att frekvensförskjutas åt olika håll. Under Hasermodellens förutsättningar med sfärisk symmetri skulle lika mycket gas röra sig mot respektive bort från observatören och linjerna i ett frekvensspektrum skulle därför ha symmetriska dubbeltoppar (de Pater & Lissauer 2010). I verkliga spektrum från kometer kan dubbeltoppar ofta urskiljas, men det är inte alltid de är symmetriska. Ett spektrum där topparna är olika stora visar alltså på ett inhomogent flöde kring kometen. Om den blåförskjutna toppen är högst betyder det att mer gas rör sig mot observatören än vad som rör sig bortåt (de Pater & Lissauer 2010).

2.6 Kometen C/2013 R1 Lovejoy

Kometen Lovejoy upptäcktes av Terry Lovejoy den 7 september 2013 då den befann sig på avståndet 1,98 AU från solen. Att döma av hur banan ser ut är det inte första gången Lovejoy passerar de inre delarna av solsystemet, men då den har en omloppstid på cirka 7000 år har den inte observerats tidigare (Agúndez et al. 2014; Biver et al. 2014).

2.6.1 Omloppsbana

Lovejoy är en långperiodisk komet med en mycket avlång bana och en excentricitet på 0,998. Det plan som jordens omloppsbana ligger i kallas ekliptikan och Lovejoys bana har en inklinering, det vill säga lutning mot ekliptikan, på $64,04^\circ$ (Paganini et al. 2014). Lovejoy nådde sitt perihelium, den punkt i omloppsbanan som är närmast solen, den 22 december 2013 på ett avstånd av 0,812 AU från solen (Paganini et al. 2014). En illustration av Lovejoys och jordens banor och hur de båda himlakropparna förhöll sig till varandra och solen under observationerna finns i figur 2.10.



Figur 2.10: Lovejoys och jordens omloppsbana. Koordinataxlar visas i rött, där den ena ligger i ekliptikan och den andra är normal mot ekliptikan. Solen ligger i origo. Jordens omloppsbana visas i svart, den är förhållandevis rund och centrerad kring solen. Lovejoys omloppsbana visas i blått och är mycket större än jordens, den del av banan som ligger över ekliptikan visas som ljusblå. Mellan den första och den sista observationsdagen rörde sig Lovejoy mellan de markerade punkterna L_1 och L_2 medan jorden rörde sig mellan punkterna T_1 och T_2 . Punkterna L_p och T_p visar Lovejoys och jordens position då Lovejoy nådde perihelium. Figuren är omarbetad utifrån originalbilder från JPL.

2.6.2 Kemisk sammansättning

Sammansättningen i Lovejoy är naturligtvis inte helt kartlagd i nuläget men ett flertal olika molekyler är påträffade i kometen. Bland annat så har kolmonoxid (CO) ett blandningsförhållande på cirka 10 %. Kolmonoxidrika kometer är i sig inget ovanligt men det är mer sällan påträffat bland kometer från Oort's moln, det vill säga långperiodiska kometer som Lovejoy (Paganini et al. 2014). Andra molekyler som

detekterats på Lovejoy i mycket mindre mängder är metan (CH_4), etan (C_2H_6), metanol (CH_3OH), ammoniak (NH_3), väteisocyanid (HNC), acetonitril (CH_3CN), formaldehyd (CH_2O), kolmonosulfid (CS) och vätesulfid (H_2S) (Paganini et al. 2014; Biver et al. 2014).

Kvoten $[\text{HNC}/\text{HCN}]$ har mätts vid ett enstaka tillfälle på Lovejoy så det finns ännu ingen publicerad information om hur den varierar. Den uppmätta kvoten stämmer dock väl överens med värden för andra kometer på samma avstånd från solen. Det gör det troligt att kvoten $[\text{HNC}/\text{HCN}]$ följer samma variationsmönster och ökar då kometen närmar sig solen (se avsnitt 2.2.3).

2.6.3 Produktionstakt av HCN

Det var inte enbart vid Onsala rymdobservatorium som Lovejoy observerades hösten 2013. Från en del andra observationer finns resultat redan publicerade. Tabell 1 visar en sammanställning över produktions-takter av HCN och vatten som tre andra forskargrupper kommit fram till. Dessa observationer har utförts av Paganini et al. med teleskopet Near InfraRed SPECTrometer vid Keckobservatoriet på Mauna Kea, Hawaii och Biver et al. respektive Agúndez et al. med 30-metersteleskopet vid Institut de radioastronomie millimétrique (IRAM) i Sierra Nevada, Spanien ("Institut de Radioastronomie Millimétrique" 2015).

Två av forskargrupperna, (Agúndez et al. 2014; Biver et al. 2014), har observerat emission från rotationsövergången $J = 3 - 2$ för HCN. Övergången $J = 3 - 2$ svarar mot en frekvens på 265,9 GHz, vilket ger en våglängd på 1,13 mm som ligger på gränsen mot infrarött ljus. Paganini et al. har observerat kortare infraröda våglängder i storleksordningen $3 \mu\text{m}$.

Paganini et al. har beräknat värden på T_{rot} för sina observationsdagar samt tagit fram sambandet

$$T_{rot} = T_{1AU} \cdot R_h^{-2,0 \pm 0,2}, \quad (2.62)$$

där $T_{1AU} = 93 \pm 3 \text{ K}$ och R_h är avståndet från solen. Agúndez et al. har publicerat värden för T_K . De har använt en icke-LTE excitationsmodell. Om ekvation (2.62) används fås att för 1,06 AU är $T_{rot} = 83 \text{ K}$, vilket skiljer sig ganska mycket från Agúndez värde på 1,06 AU som är $T_K = 60 \text{ K}$.

Tabell 2.3: Publicerade resultat för produktions-takter Q av HCN och vatten i kometen Lovejoy från observationer av tre olika forskargrupper. ^(a) Procentuellt fel för Q_{HCN} . ^(b) Blandningsförhållande, % HCN i förhållande till vatten.

Datum	$Q_{\text{HCN}} (10^{26} \text{ s}^{-1})$	% ^(a)	$Q_{\text{vatten}} (10^{26} \text{ s}^{-1})$	$B^{(b)}$	Referens
22 okt	$0,59 \pm 0,12$	20,3	$185,4 \pm 19,2$	$0,32 \pm 0,07$	(Paganini et al. 2014)
25 okt	$0,68 \pm 0,06$	8,8	$231,8 \pm 33,1$	$0,29 \pm 0,05$	(Paganini et al. 2014)
27 okt	$0,36 \pm 0,10$	27,8	$155,6 \pm 24,9$	$0,23 \pm 0,07$	(Paganini et al. 2014)
29 okt	$0,47 \pm 0,06$	12,8	$145,0 \pm 40,9$	$0,32 \pm 0,10$	(Paganini et al. 2014)
7 nov	$0,87 \pm 0,07$	8,0	$367,9 \pm 25,8$	$0,24 \pm 0,03$	(Paganini et al. 2014)
8-12 nov	$0,74 \pm 0,01$	1,4	500	0,15	(Biver et al. 2014)
13 nov	0,6	-	-	-	(Agúndez et al. 2014)
16 nov	0,61	-	-	-	(Agúndez et al. 2014)
27 nov - 1 dec	$1,27 \pm 0,01$	0,8	800	0,16	(Biver et al. 2014)
9 - 16 dec	$1,80 \pm 0,01$	0,5	1100	0,16	(Biver et al. 2014)

Kapitel 3

Databehandling

I detta kapitel presenteras de databehandlingssteg och beräkningar som genomförts för att erhålla värden på produktionstakten. Det inledande steget är datareducering, vars syfte är att reducera det brus som finns i rådatan. Datareduceringen består av ett antal olika moment som genomförts för var och en av observationsdagarna. Nästa steg är att integrera intensiteten från signalerna från HCN och använda den för att beräkna kolumntätheten. Från kolumntätheten och ett antal övriga parametrar som bestäms på olika sätt beräknas slutligen produktionstakten.

Till reduceringen av observationsdatan används programmet `xs` som är skrivet av Per Bergman och tillgängligt via Onsala rymdobservatoriums hemsida (Bergman 2013). Programmet `xs` används fram till och med det att den integrerade intensiteten erhålls. Produktionstakten beräknas med programmet `mom`, utvecklat av Stefanie Milam, som baseras på Hasermodellen (se avsnitt 2.5).

De datum då HCN observerades på Lovejoy och som ligger till grund för detta kandidatarbete, är följande: 16, 22, 23, 24, 28, 29, 30 november samt 1, 2, 13, 14, 15 december 2013.

3.1 Datareducering

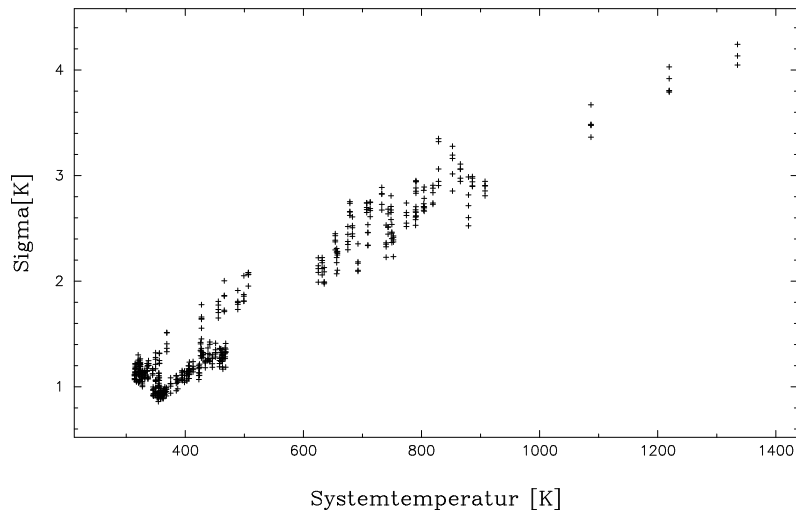
Då det i princip är omöjligt att utläsa någon information alls ur ett enskilt spektrum läggs flera spektra samman för att signalen från HCN skall framträda (se avsnitt 2.1). För att få så tydliga spektra som möjligt är det alltså av yttersta vikt att tillräckligt mycket data läggs ihop, det vill säga att medelvärdesbilda över ett tillräckligt långt tidsintervall. Vad det gäller de flesta andra objekt i universum, till exempel interstellära moln, som inte förändras så mycket från dag till dag är inte detta ett problem. För kometer är det dock annorlunda i och med att produktionstakten kan variera över mycket korta tidsintervall (Sekanina 1981; Jewitt 1998; Mumma & Charnley 2011). Om medelvärdesbildningen sker över för långa tidsperioder går den eventuella informationen om tidsvariationer förlorad. Om för lite data läggs ihop går det emellertid inte att utläsa något och resultatet blir osäkert. Denna avvägning har sett olika ut för olika observationsdagar beroende på datans kvalitet.

3.1.1 Urval av data

Ett första steg innan datareduceringen påbörjas är att göra ett urval av den tillgängliga datan. Först måste den kontrolleras för att se att datan har tillräckligt hög kvalitet, det vill säga inte innehåller för mycket brus. De spektra som har en systemtemperatur, se avsnitt 2.1.2, på över 1000 K har uteslutits från beräkningarna.

En ytterligare kontroll är att jämföra hur systemtemperaturen förhåller sig till σ , ett värde på hur mycket brus ett spektrum innehåller. Dessa storheter bör ha ett ungefärligt linjärt beroende och de data som ger upphov till en punkt som tydligt avviker från detta beroende tas bort från urvalet. I figur 3.1 visas en jämförelse mellan systemtemperaturen och σ och deras linjära samband syns. De datum då det erhöles en stor mängd spektra, flera hundratals, kan delas upp i kortare tidslånga sekvenser som även reduceras separat förutsatt att datan håller hög kvalitet.

2013–12–13

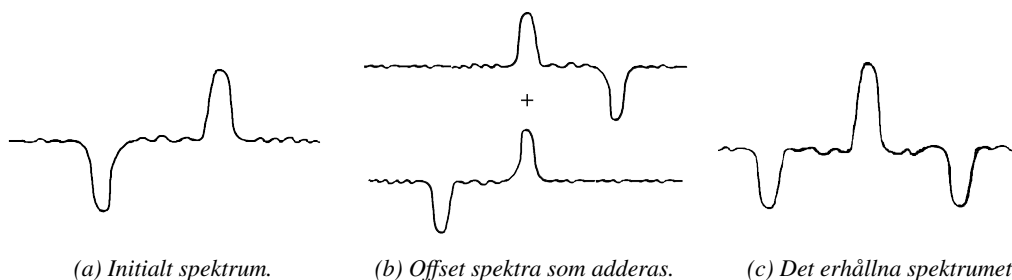


Figur 3.1: Systemtemperatur och brusnivå σ för spektra från en av observationsdagarna. Varje spektrum motsvarar 30 sekunder med insamlad data och visas som ett kryss i figuren. De tre kolumner av mätpunkter längst till höger är exempel på sådana som utesluts från beräkningarna eftersom de har för hög systemtemperatur.

3.1.2 Vikning av spektra

Observationerna som ligger till grund för detta kandidatarbete har gjorts med frekvensväxling (se avsnitt 2.1). Frekvensväxlingen skedde med frekvensen 5 Hz (Johansson 2014). Data samlas in under 30 sekunders intervall och läggs ihop till ett spektrum (Johansson 2014). För att den erhållna mätdata från observation utförd med frekvensväxling skall bli analyserbar krävs ett extra reduktionssteg, en vikning av spektra, som inte är nödvändigt i observationer som tillämpar huvudlobs- eller positionsväxling.

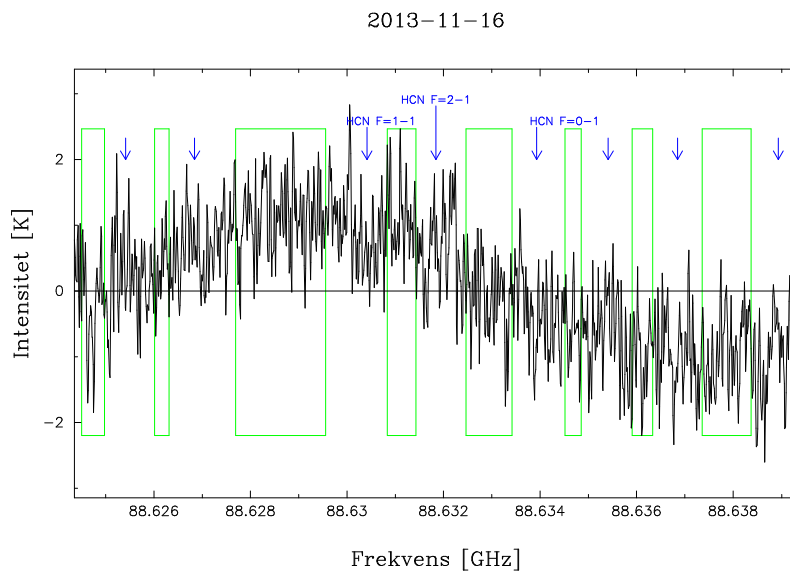
Spektra viks med samma frekvens som frekvenskastet som användes vid observationen. En schematisk framställning över hur vikningen går till visas i figur 3.2. Efter att spektra har vikts kommer det att få negativa motsvarigheter, speglingar, av linjerna med samma frekvenskast som användes vid vikningen. I vårt specifika fall var frekvenskastet 5 MHz. Speglingarna innebär att det spektrum som erhålls innehåller förväntade, negativa motsvarigheter till de ordinarie spektrallinjerna och det är viktigt att ta hänsyn till dessa så de inte tolkas som brus (Matthews & Jenness 1997).



Figur 3.2: Schematiska bilder över hur vikning av spektra går till. (a) Det spektrum som tas fram i teleskopet består av en negativ spegling av de insamlade signalerna förskjutet med halva frekvenskastet åt vänster och de insamlade signalerna förskjutet med halva frekvenskastet åt höger. (b) I xs skapas två spektra utifrån det som tas fram i teleskopet, båda med halva den ursprungliga intensiteten. Det ena är en negativ variant förskjutet med en offset lika stor som halva frekvenskastet åt höger och det andra har samma form som det ursprungliga och är förskjutet med en offset på halva frekvenskastet åt vänster. (c) Det resulterande spektrumet, som består av sammanslagningen av två offsetspektra. Negativa speglingar uppstår med en offset lika stor som halva frekvenskastet. Författarnas egen bild.

3.1.3 Baslinjeanpassning

För att kunna jämföra emissionslinjen från HCN mot bruset och urskilja toppar och dalar i spektrumet önskas en jämn nollnivå. För att kompensera för icke-konstanta baslinjer som uppstår vid subtraktionen av referensspektra (se avsnitt 2.1.2) anpassas därför ett polynom med hjälp av minsta kvadratmetoden som sedan subtraheras. Vid polynomanpassningen är det viktigt att kurvan som skall subtraheras bara följer baslinjen i bruset och inte eventuella toppar som kommer från HCN, då även dessa i så fall skulle försvinna vid subtraktionen. Därför anpassas baslinjen endast till data inom de frekvensintervall där vi inte förväntar oss någon emissionslinje eller spegling från HCN. Detta genomförs med så kallade baslinjebboxar som placeras i frekvensintervallen mellan emissionslinjerna och deras speglingar, se figur 3.3.



Figur 3.3: Spektrum med baslinjebboxar. I spektrumet är rotationsövergångarna för HCN utmarkerade samt de frekvenser där negativa speglingar, som härstammar från vikningen, dyker upp markerade.

Den exakta bredden på linjerna är inte känd innan reduceringen genomförts, och det är inte trivialt hur nära inpå det är acceptabelt att lägga baslinjebboxarna. För stora säkerhetsmarginaler är inte heller bra då det leder till en baslinjeanpassning som följer kurvan sämre. Efter några försök erhålles en uppfattning om hur breda emissionslinjerna är och baslinjeanpassningen kan förbättras.

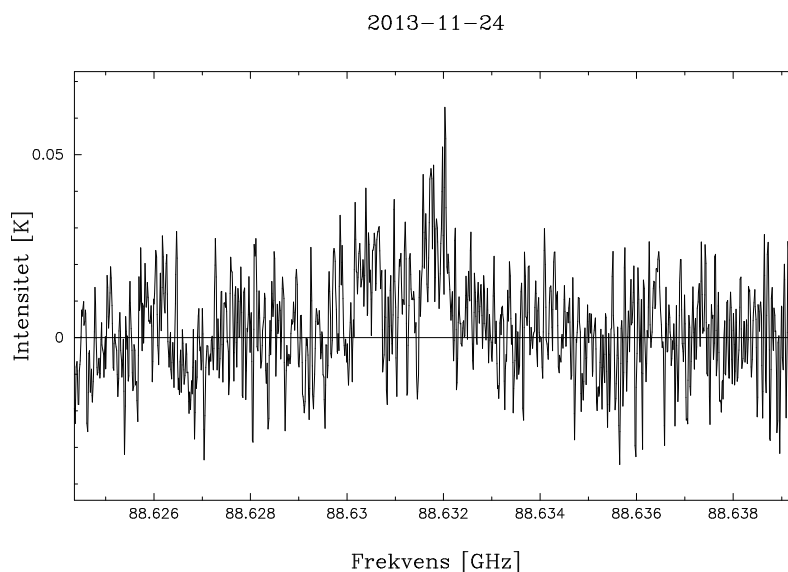
Baslinjeanpassning kan göras med polynom av olika grad och vilken polynomordning som är lämplig är även det en avvägningsfråga. En låg polynomordning ger en grövre anpassning och är säker på så sätt att den inte kommer följa små strukturer i spektrat och riskerar därmed inte att varken subtrahera bort linjer från HCN eller introducera toppar som egentligen inte finns. Nackdelen med en anpassning med låg polynomordning är att baslinjen inte alltid blir helt rak. Om det finns kvar en puckel i baslinjen där emissionslinjen från HCN ligger kan den toppen se större ut än vad den egentligen är, vilket leder till en överskattning av intensiteten. Ett polynom av ordning två har antingen en topp eller dal i mitten och då linjen som sökes också ligger ungefär i mitten skulle ett andragspolynom obönhörligen introducera en puckel. Den lägsta polynomordningen som har använts är därför tre och polynom av udda ordning är att föredra även för högre ordningar av samma skäl. Vid reducering av datan har det för varje tidsintervall först provats att använda ett polynom av ordning tre och därefter ökat till fem eller sju om baslinjens form bedömts som icke tillfredsställande. Generellt sett har en högre polynomordning behövts användas för observationsintervall med lägre kvalitet. För val av polynomordning för respektive spektrum se bilaga B.1.

3.1.4 Medelvärdesbildning

Medelvärdesbildning innebär att medelvärdet av intensiteten hos flera spektra beräknas frekvensvis och får bilda ett nytt, medelvärdesbildat spektrum. Det är först i det medelvärdesbildade spektrumet som några strukturer syns och en bedömning av reduceringen kan göras (se avsnitt 2.1.2). Att medelvärdesbilda spektrum finns som en inbyggd funktion i datareduceringsprogrammet `xs` och förutom att välja viktning görs inga specifika inställningar. Vi har valt att använda en viktning med avseende på systemtemperatur så att spektra med mer brus skall ge ett förhållandesvis mindre avtryck. Viktningen efter systemtemperatur sker i `xs` enligt

$$\frac{1}{T_{\text{sys}}^2} \quad (3.1)$$

Ett exempel på hur ett medelvärdesbildat spektrum ser ut visas i figur 3.4.



Figur 3.4: Ett medelvärdesbildat spektrum.

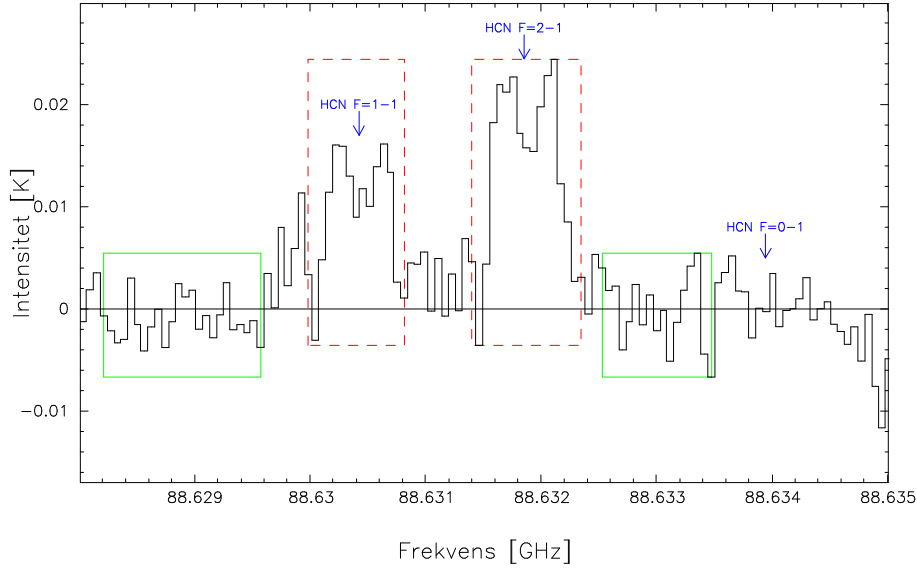
3.2 Integrerad intensitet

Nästa steg efter datareduceringen är att integrera intensiteten. Datareduceringen med medelvärdesbildning ger en bra bild över den insamlade datan med tillhörande HCN-emission. För att få ett mått på HCN-signalens totala storlek integreras intensiteten över emissionstopparna.

För att beräkna de integrerade intensiteterna från de medelvärdesbildade spektra som var resultatet av datareduceringen ovan användes programmet `xs`. Integreringen genomfördes genom att placera några baslinjboxar över områden som saknar emissionslinjer samt placera momentboxar över områden med HCN-signaler. Momentboxarna placerades så att deras bredd motsvarade emissionslinjernas totala bredd. Baslinjboxarna användes för att få ett mått på brusnivån för respektive spektrum. I figur 3.5 visar strukturen som användes i `xs` för att integrera intensiteten. Funktionen med momentboxar i `xs` är helt och hållet skapad för att integrera intensiteten över de frekvensintervall de är placerade över, och resultatet av integreringen visas omgående när dessa boxar har skapats. Eftersom signalen för HCN-emissionen $F = 0 - 1$ är svag och också svår detekterad utelämnades den toppen i flertalet integreringar.

Metoden som används för att beräkna den integrerade intensiteten I_{int} skrivs matematiskt som

$$I_{\text{int}} = \sum_{i=1}^n \int_{f_i - \frac{\Gamma_i}{2}}^{f_i + \frac{\Gamma_i}{2}} T_A^*(f) df, \quad (3.2)$$



Figur 3.5: Metoden för att integrera intensiteten i xs . De röda, streckade rektanglarna är momentboxar. I xs beräknas intensiteten automatiskt över utplacerade momentboxar. I detta exempel är den svaga övergången $F=0-1$ utelämnad ur integreringen. Två gröna baslinjebboxar är placerade över brusets för att erhålla en korrekt brusnivå, vilket behövs för att bestämma felmarginalen på den integrerade intensiteten.

där $n = 2$ eller 3 beroende på om den svaga toppen är inkluderad eller ej, f_i är emissionslinjernas respektive centerfrekvens, Γ_i definieras som respektive emissionslinjes totala bredd och $T_A^*(f)$ är den medelvärdesbildade detekterade radiosignalen från kometen. Observera att f_i i ekvation (3.2) inte nödvändigtvis är exakt samma frekvenser som i tabell 2.2, beroende på om emissionslinjerna är symmetriska eller ej.

Den integrerade intensiteten presenterades i xs på formen

$$I_{\text{int}} = I_0 \pm \sigma_I, \quad (3.3)$$

där I_0 är den beräknade integrerade intensiteten över momentboxarna och σ_I är den integrerade intensitetens felmarginal på grund av signalens brus, vilken bestäms från baslinjebboxarna. Felmarginalen angavs utifrån brusnivån som uppmättes från baslinjebboxarna och var beroende av hur stort intervall integreringen skedde över. Det gäller att

$$\sigma_I = \sqrt{n} \sigma_k dV, \quad (3.4)$$

där n är antalet kanaler integreringen skedde över, σ_k är kanalernas brusnivå som beräknas från baslinjebboxarna och dV är kanalernas bredd i km/s (personlig kommunikation, Per Bergman, 19 april 2015).

En viktig aspekt av de integrerade intensiteterna var att avgöra om resultatet hade tillräckligt hög kvalitet. För att göra detta studeras signal-brusförhållandet (engelskt uttryck: *signal-to-noise ratio*) hädanefter förkortat SNR. SNR är kvoten mellan signalens effekt och brusets effekt. För detta arbete väljs definitionen

$$\text{SNR} := \frac{I_0}{\sigma_I}. \quad (3.5)$$

Det gäller att den integrerade intensiteten följer en sannolikhetsfördelning. Mer precist gäller att den integrerade intensiteten i xs är baserad på en normalfördelning. En normalfördelning beskrivs av täthetsfunktionen

$$f(x) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2}, \quad -\infty < x < \infty. \quad (3.6)$$

För det specifika fallet i detta projekt identifieras $\sigma = \sigma_I$, $\mu = I_0$ samt $x = I_{\text{int}}$. Att den integrerade intensiteten antar en normalfördelning med parametrarna ovan kan skrivas $I_{\text{int}} \sim N(I_0, \sigma_I)$. Den sannolikhet som används för att bestämma ett minimikrav på SNR är sannolikheten att I_{int} är större än noll, vilket skrivs $P(0 < I_{\text{int}})$. En normalfördelnings täthetsfunktion saknar en analytisk primitiv funktion och kan därför inte integreras med analytiska metoder. För att beräkna den sökta sannolikheten måste därför en omskrivning ske av täthetsfunktionen så att den följer en standardiserad normalfördelning, det vill säga $Z_{\text{int}} \sim N(0, 1)$, där Z_{int} betecknar att den stokastiska variabeln är standardiserad.

Med en standardiserad normalfördelning kan sannolikheter beräknas med den tabellerade fördelningsfunktionen

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^x f(z) dz \quad (3.7)$$

enligt

$$P(Z < x) = \Phi(x), \quad (3.8)$$

där Z är den standardiserade stokastiska variabeln och x är ett godtyckligt tal som är aktuellt för sannolikhetsberäkningen. Översättningen från en stokastisk variabel $X \sim N(\mu, \sigma)$ till den standardiserade variabeln $Z \sim N(0, 1)$ sker via

$$Z = \frac{X - \mu}{\sigma}. \quad (3.9)$$

Sannolikheten att HCN finns i den mottagna datan med ett visst SNR kan nu beräknas enligt

$$\begin{aligned} P(0 < I_{\text{int}}) &= P\left(\frac{0 - \mu}{\sigma} < \frac{I_{\text{int}} - \mu}{\sigma}\right) \\ &= P\left(\frac{0 - I_0}{\sigma_I} < \frac{I_{\text{int}} - I_0}{\sigma_I}\right) \\ &= P(-\text{SNR} < Z_{\text{int}}) \\ &= 1 - \Phi(-\text{SNR}) \\ &= \Phi(\text{SNR}), \end{aligned}$$

där den sista likheten fås genom fördelningsfunktionens symmetri, det vill säga $\Phi(x) = 1 - \Phi(-x)$ (Rice 2007).

Från detta bestämdes villkoret att $\text{SNR} > 3$ för att datan skulle klassificeras som tillräckligt bra. I gränsen $\text{SNR} = 3$ gäller att

$$P(0 < I_{\text{int}}) = \Phi(3) = 0,9987,$$

vilket visar att sannolikheten att HCN-signaler förekommer i den insamlade datan är mycket stor om vårt SNR-villkor är uppfyllt.

3.3 Kolumntäthet

Från den uppmätta integrerade intensiteten kan kolumntätheten, det vill säga medelantalet HCN-molekyler per ytenhet inom huvudloben, bestämmas. Nedan visas beräkningsgången för hur kolumntätheten tagits fram. Den sökta kolumntätheten betecknas N_{rot} och beräkningarna har utförts i MATLAB.

Uttrycket för kolumntätheten av HCN i den övre energinivån 2 under antagandet att koman befinner sig i LTE (lokal termodynamisk jämvikt, se definition i 2.3.2), är optiskt tunn och att Rayleigh-Jeans approximation gäller är definierad som:

$$N_2 = \frac{8\pi k_B f T_{\text{ex}}}{hc^2 A_{21}} \int \tau_f df = \frac{8\pi k_B f^2}{hc^3 A_{21} \eta_{\text{HL}}} \int T_A^*(f) dv. \quad (3.10)$$

Härledningen av detta uttryck återfinns i avsnitt 2.4. Den integrerade intensiteten som observerats är $T_B = \frac{T_A}{\eta_{\text{HL}}} = T_{\text{ex}} \tau_f$ (se avsnitt 2.4.2).

Den totala kolumntätheten N_{tot} är relaterad till kolumntätheten i den övre energinivån enligt

$$\frac{N_{tot}}{N_2} = \frac{Q_{rot}(T_{ex})}{g_2} e^{\frac{E_2}{k_B T_{ex}}} . \quad (3.11)$$

Energien E_2 kan, under antagandet att HCN är en stel rotor, förenklas till

$$E_J = hB_0 J(J+1) . \quad (3.12)$$

Då energin E_2 antas vara konstant erhålls ett värde av B_0 , konstanten för en stel rotor (Mangum & Shirley 2015). Värdet av energin för HCN med $J=1$ har hämtats från databasen LAMBDA (2010). B_0 sätts sedan in i uttrycket för Q_{rot} , som är definierad i ekvation (2.61).

Några olika värden används för excitationstemperaturen T_{ex} . Antingen är T_{ex} satt som en konstant och då har ett nedre värde på 70 K och ett övre på 150 K valts. Dessa värden är valda baserat på resultat funna av Paganini et al. (2014). Det andra alternativet är att anta att T_{ex} varierar enligt

$$T_{rot} = T_{1AU} \cdot R_h^{-2.0 \pm 0.2} , \quad (3.13)$$

där $T_{1AU} = 93 \pm 3$ K och R_h är avståndet från solen. Det är värt att notera att Paganini et al. (2014) använder T_{rot} istället för T_{ex} . Dessa temperaturer är ekvivalenta då LTE gäller.

Det slutgiltiga uttrycket för den totala kolumntätheten inom den observerade huvudloben blir således

$$N_{tot} = \frac{N_2 Q_{rot}(T_{ex})}{\eta_{HL} g_2 10^{-4}} e^{E_2/T_{ex}} , \quad (3.14)$$

där η_{HL} är huvudlobseffektiviteten för teleskopet som observationerna utförts med. Huvudlobseffektiviteten varierar med frekvens och elevation men här används ett konstant medelvärde.

3.4 Produktionstakt

Produktionstakten är ett mått på hur snabbt en viss molekyl förångas från en kometens kärna till dess koma, i enheten antal molekyler per sekund. Våra beräkningar utgår från programmet `mom`. Programmet bygger på Hasermodellen (se avsnitt 2.5) och använder sig av en Monte Carlo-simulering för att modellera utflödet av gas från kometkärnan. De inparametrar som behövs för att köra programmet är:

- Antal molekyler som ska modelleras: värdet 10^6 rekommenderat av Stefanie Milam. I projektet har 10^7 molekyler modellerats då inga begränsningar fanns angående beräkningstid och ett högre antal inte skadar.
- Molekylernas medellivslängd: medelvärdet av den tid det tar för en HCN-molekyl att fotodissociera från att den förångas. Beräknas separat, se avsnitt 3.4.1 nedan.
- Molekylernas hastighet: HCN-molekylernas konstanta radiella hastighet. Beräknas separat, se avsnitt 3.4.2 nedan.
- Kometens ytstorlek (engelskt uttryck: "*image dimension at the comet*"). Värdet 10^6 används, vilket är rekommenderat av Stefanie Milam.
- Observerad kolumntäthet: Kolumntätheten som beräknades i föregående steg.
- Teleskophuvudlobens halvvärdesbredd på kometens avstånd. Relevant eftersom det är över denna area som medelvärdet för kolumntätheten bestäms från observerad data, se avsnitt 3.4.3.
- Modelleringstiden: värdet 2-3 gånger medellivslängden rekommenderat av Stefanie Milam. I det här projektet används värdet 3 gånger medellivslängden.
- Ett frö för en slumpgenerator.

Tre av parametrarna beskrivs mer detaljerat nedan.

3.4.1 Molekylernas medellivslängd

Medellivslängden för HCN-molekylerna definieras enligt

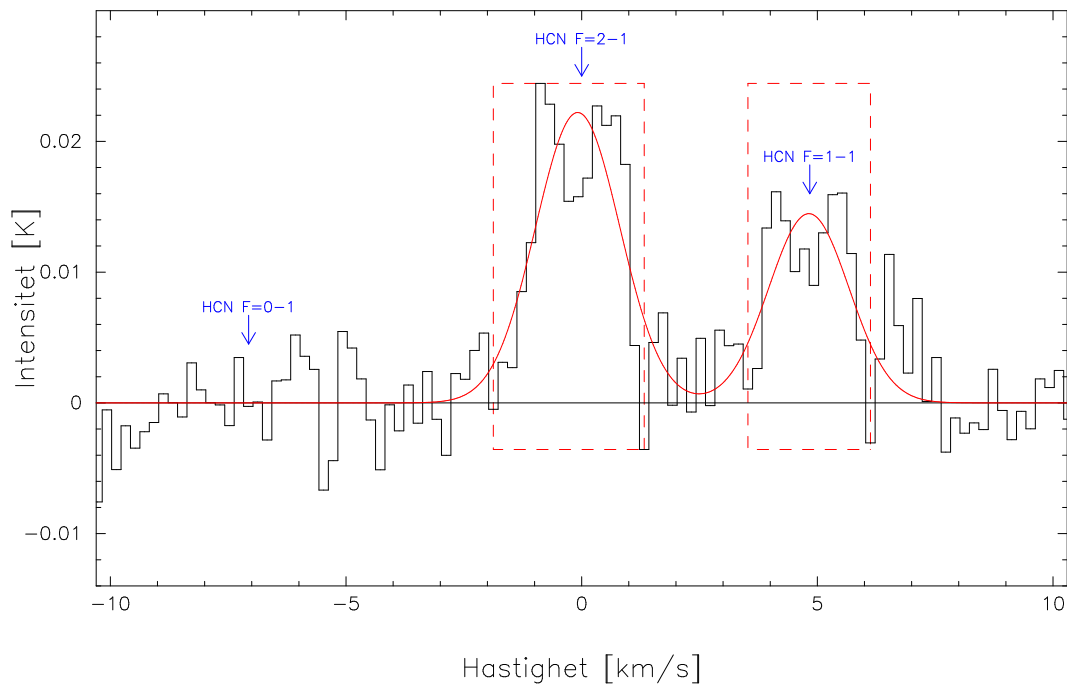
$$\text{Medellivslängden} = \frac{1}{k}, \quad (3.15)$$

där k är dissociationshastigheten i s^{-1} . Den enda dissociationen som vi har tagit hänsyn till är fotodissociationen, det vill säga att molekylerna bryts sönder av fotoner (se avsnitt 2.2.3), (Rehder 2010). Fotodissociationshastigheten som används är hämtad från Crovisier (1994) och är på $1,5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$. I Crovisier (1994) är fotodissociationshastigheterna utvärderade för avståndet 1 AU till solen och vid solfläcksminimum. Vi har tagit hänsyn till solavståndet och viktat fotodissociationshastigheten efter Lovejoys bana kring solen. De aktuella avstånden mellan solen och Lovejoy är hämtade från JPL (NASA 2015). Vi har dock inte tagit hänsyn till att solaktiviteten inte var minimal under observationerna. Enligt data från NOAA (2015) var solaktiviteten i november-december 2013 låg men inte minimal, vilket innebär att den borde påverka fotodissociationen något.

3.4.2 Molekylernas hastighet

En av inparametrarna till programmet mom är molekylernas hastighet. Som tidigare nämnts tar teleskopet hänsyn till dopplereffekten som uppkommer på grund av kometens relativa hastighet gentemot jorden. Molekylernas hastighet relativt kometen tar teleskopet inte hänsyn till. Följden av molekylernas olika inbördes hastigheter blir att de observerade emissionslinjerna blir breddade och får en dubbeltopp (se avsnitt 2.5). Breddningen av linjerna användes för att approximera molekylernas hastighet.

Den approximation som tillämpades var att halva halvvärdesbredden på emissionslinjerna utgör ett bra mått på molekylernas hastighet. Storleken på halva halvvärdesbredden bestämdes med en inbyggd funktion i xs som utgår från en grafisk ansats till kurvans form som startvärde och minsta-kvadrat-anpassar en gaussisk linje inom intervallet som ges av en momentbox, se figur 3.6. I xs presenterades sedan gaussanpassningarnas centrumfrekvens, halvvärdesbredd samt topparnas amplitud.



Figur 3.6: Den röda kurvan är en gaussanpassning av två emissionstoppar i xs. Gaussanpassningen sker över det område momentboxarna placeras över. I xs anges sedan gaussanpassningarnas centrumfrekvens, halvvärdesbredd samt topparnas amplitud.

Emissionslinjernas form är därför helt avgörande för approximationen av molekylernas hastighet. För att erhålla ett så korrekt värde som möjligt på hastigheten användes en medelvärdesbildning över alla observationsdagar för att maximera kontrasten mellan bruset och emissionstopparna. Den svaga emissionslinjen $F = 0 - 1$ visade sig vara alldeles för svag för att kunna skapa en rimlig gaussisk kurvanpassning. De framtagna hastigheterna för de två starkare emissionslinjerna $F = 1 - 1$ och $F = 2 - 1$ användes sedan för att ta fram ett medelvärde över molekylernas hastighet som användes till samtliga beräkningar av produktionsstakten.

3.4.3 Teleskophuvudlobens halvvärdesbredd på kometens avstånd

Denna parameter beräknades separat och användes som inparameter till mom. Halvvärdesbredden vid kometens avstånd bestäms med hjälp av teleskopets givna vinkelupplösning $\theta = 44''$ och kometens avstånd till jorden R_t . Ur teleskopets antenndiagram, se figur 2.3, erhålls det trigonometriska sambandet

$$\text{halvvärdesbredden} = 2R_t \tan\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (3.16)$$

vilket ger att halvvärdesbredden varierar direkt proportionellt med kometens avstånd. Notera att det är inom denna halvvärdesbredd som kolumntätheten beräknas från den integrerade intensiteten.

Kapitel 4

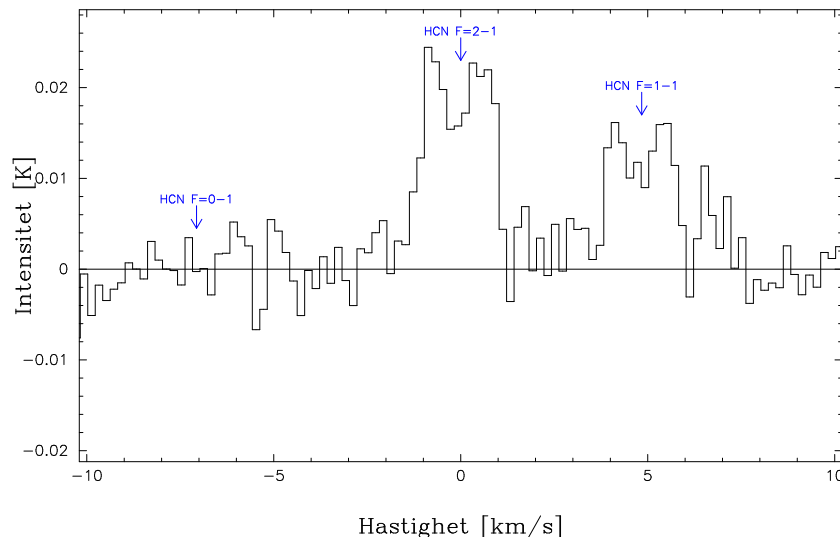
Resultat

Här presenteras de resultat som uppnåtts inom projektet. HCN har detekteras från medelvärdesbildningen över alla observationsdagar samt för sju av de enskilda observationdagarna. För den 24 november kunde HCN detekteras för de fyra tidsintervall som observationsdagen delades upp i. Fem av de enskilda observationsdagarna gav dock ingen säker detektion.

Delresultaten som består av de integrerade intensiteterna och kolumntätheterna presenteras i tabeller. Produktionstakterna, som är det slutgiltiga målet med projektet, presenteras nedan i både tabeller och figurer.

4.1 Framtagna emissionsspektra

Vid medelvärdesbildning över samtliga observationsdagar detekteras de två HCN-övergångarna $F = 1 - 1$ och $F = 2 - 1$ tydligt och med förväntade relativa intensiteter. Däremot finns ingen antydning till detektion av den svagare övergången $F = 0 - 1$. Den karaktäristiska dubbeltoppen kan också urskiljas för alla dessa observationsdagar, mer eller mindre tydligt. Den medelvärdesbildade datan över alla observationsdagar visas i figur 4.1 nedan. Resterande framtagna spektra för enskilda observationsdagar där HCN detekteras återfinns i bilaga B.2. Hur många spektra à 30 sekunder som medelvärdesbildats samt vilken polynomgrad baslinjeanpassningarna gjordes med för respektive dagar anges i bilaga B.1.



Figur 4.1: Medelvärdesbildning över samtliga observationsdagar. De två rotationsövergångarna $F=2-1$ och $F=1-1$ detekteras med förväntad relativ intensitet. En tydlig uppdelning av emissionlinjerna syns för de båda topparna, men ingen markant avvikelser från en symmetrisk profil. Rotationsövergången $F=0-1$ har en teoretisk lägre intensitet och påträffas inte i den insamlade datan. Spektret har en upplösning, det vill säga kanalbredd, på 0,20 km/s.

För sju av tolv dagar detekterades HCN, men emissionstopparna är inte lika framstående som vid medelvärdesbildningen över alla dagar. De integrerade intensiteterna och beräknade kolumntätheterna för dagarna som HCN detekterades visas i den övre delen i tabell 4.1. I samtliga fall är SNR-värdet större än vårt SNR-villkor 3. För medelvärdesbildningen över samtliga observationsdagar är SNR särskilt stort. Eftersom en stor mängd data medelvärdesbildas minskar bruset, se ekvation (2.14), och ett SNR-värde på 20,9 erhålls. De integrerade intensiteterna varierar mellan cirka 40-110 mK-km/s.

Fem av dagarna detekterades inte HCN i den insamlade datan. Datat för den 28 och 29 november respektive 13 och 14 december har adderats utan att förbättras nämnvärt. Visserligen uppfylls SNR-villkoret för dessa två tvådagarspektra, men de kategoriseras som otillförlitliga eftersom udda tendenser visar sig i dessa spektra, se figurer i bilaga B.4. Beslutet tas därför att inte arbeta vidare med dessa spektra. Noterbart är ändå att de integrerade intensiteterna inte avviker från de dagar när HCN detekterades.

I fallet den 16 november var observationstiden kort, och SNR-villkoret uppfylls inte. Det kan antingen bero på att signalen från HCN var mycket svag den dagen eller att brusnivån i spektrumet är hög. Då signalen från HCN inte framträder i bruset kan vi inte veta hur stor den är men vi vet att den måste vara mindre än $3\sigma_I$ för att inte synas. Vi ansätter därför $I_{\text{övre}} = 3\sigma_I$ och använder det för att beräkna en övre gräns för kolumntäthet och produktionstakt. Alla resultat för den sämre datan står i den nedre delen av tabell 4.1, där också övre gränser på kolumntätheten är beräknad för 16 november.

Kolumntätheterna är beräknade för tre olika excitationstemperaturer T_{ex} . Två fasta temperaturer på 70 K respektive 150 K och en varierande T_{rot} som beror på kometens radiella avstånd till solen. T_{rot} varierar mellan 84-137 K för Lovejoys avstånd till solen under observationsdagarna. Kolumntätheten ökar med ökande excitationstemperatur och beräknade värden i storleksordningen 10^{12} cm^{-2} erhålls.

Tabell 4.1: Övre delen: medelvärdesbildning över de enskilda dagar för vilka HCN har detekterats. Nedre delen: Medelvärdesbildning över de observationsdagar då ingen säker detektion av HCN kunde göras. R_h och R_t betecknar kometens medelavstånd till solen respektive jorden i AU. ^(a)Integrerad intensitet, I_0 , given i mK-km/s samt osäkerheter som visas indirekt i SNR. Kolumntätheten är beräknad för tre olika värden på T_{ex} . För den 16 november är en övre gräns beräknad utifrån värdet på intensiteten $I = 3\sigma_I$.

Datum	R_h	R_t	$I_0^{(a)}$	SNR	T_{rot}	Kolumntäthet N (10^{12} cm^{-2})		
						$T_{ex} = 70 \text{ K}$	$T_{ex} = T_{rot}$	$T_{ex} = 150 \text{ K}$
Alla dagar	0,939	0,586	79	20,9	105	$1,11 \pm 0,05$	$1,65 \pm 0,08$	$2,31 \pm 0,11$
22 nov	0,986	0,404	113	6,6	96	$1,59 \pm 0,24$	$2,13 \pm 0,32$	$3,29 \pm 0,50$
23 nov	0,980	0,409	39	5,1	97	$0,55 \pm 0,11$	$0,75 \pm 0,15$	$1,15 \pm 0,23$
24 nov	0,971	0,415	84	12,0	99	$1,18 \pm 0,10$	$1,63 \pm 0,14$	$2,44 \pm 0,20$
30 nov	0,915	0,483	79	6,2	111	$1,11 \pm 0,18$	$1,72 \pm 0,28$	$2,30 \pm 0,37$
1 dec	0,906	0,499	104	9,5	113	$1,46 \pm 0,16$	$2,31 \pm 0,24$	$3,03 \pm 0,32$
2 dec	0,898	0,514	59	6,1	115	$0,83 \pm 0,14$	$1,33 \pm 0,22$	$1,71 \pm 0,28$
15 dec	0,823	0,763	53	3,5	137	$0,75 \pm 0,21$	$1,42 \pm 0,40$	$1,54 \pm 0,44$
16 nov	1,061	0,405	26	0,7	84	< 1,45	< 1,72	< 3,02
28-29 nov	0,928	0,463	58	4,7	-	-	-	-
13-14 dec	0,829	0,731	68	3,4	-	-	-	-

Den 24 november observerades Lovejoy under en lång tid och dessutom med god kvalitet på datan. Tack vare det kunde datumet delas upp i kortare tidsintervall utan att bryta SNR-villkoret. Totalt delades den 24 november upp i fyra ungefär lika långa tidsintervall. Emissionsspektra för respektive intervall finns i bilaga B.3. Den integrerade intensiteten är nästan dubbelt så stor för två intervall jämfört med de övriga, se tabell 4.2 där även tidsintervallen är specificerade. I tabellen återfinns också beräknade kolumntätheter för respektive tidsintervall. Intensiteterna och kolumntätheterna är i samma storleksordning som medelvärdesbildningarna över hela dagar.

Tabell 4.2: Beräknade kolumntätheter för uppdelning av 24 november. R_h och R_t betecknar kometens medelavstånd till solen respektive jorden i AU. ^(a)Integrerad intensitet, I_0 , given i mK·km/s samt osäkerheter som visas indirekt i SNR. Kolumntätheten är beräknad för tre olika värden på T_{ex} .

Tid (UT)	R_h	R_t	$I_0^{(a)}$	SNR	T_{rot}	Kolumntäthet N (10^{12} cm $^{-2}$)		
						$T_{ex} = 70$ K	$T_{ex} = T_{rot}$	$T_{ex} = 150$ K
04:00-07:30	0,972	0,414	65	4,3	98	$0,92 \pm 0,21$	$1,26 \pm 0,29$	$1,90 \pm 0,44$
07:30-11:00	0,971	0,415	112	8,6	99	$1,57 \pm 0,18$	$2,18 \pm 0,25$	$3,26 \pm 0,38$
11:20-14:30	0,969	0,416	66	3,7	99	$0,92 \pm 0,25$	$1,28 \pm 0,34$	$1,91 \pm 0,51$
14:30-17:40	0,968	0,417	96	4,9	99	$1,35 \pm 0,27$	$1,88 \pm 0,38$	$2,80 \pm 0,57$

4.2 Beräknade produktionstakter av HCN

Beräknade produktionstakter av HCN i kometen Lovejoy är rapportens viktigaste resultat. Utifrån varje värde på kolumntätheterna har en produktionstakt beräknats med tillhörande övre och undre felmarginal. Värdet på molekylernas hastighet som använts i beräkningarna är $1,107 \pm 0,117$ km/s, vilket är medelvärdet av de två halva halvvärdesbredderna.

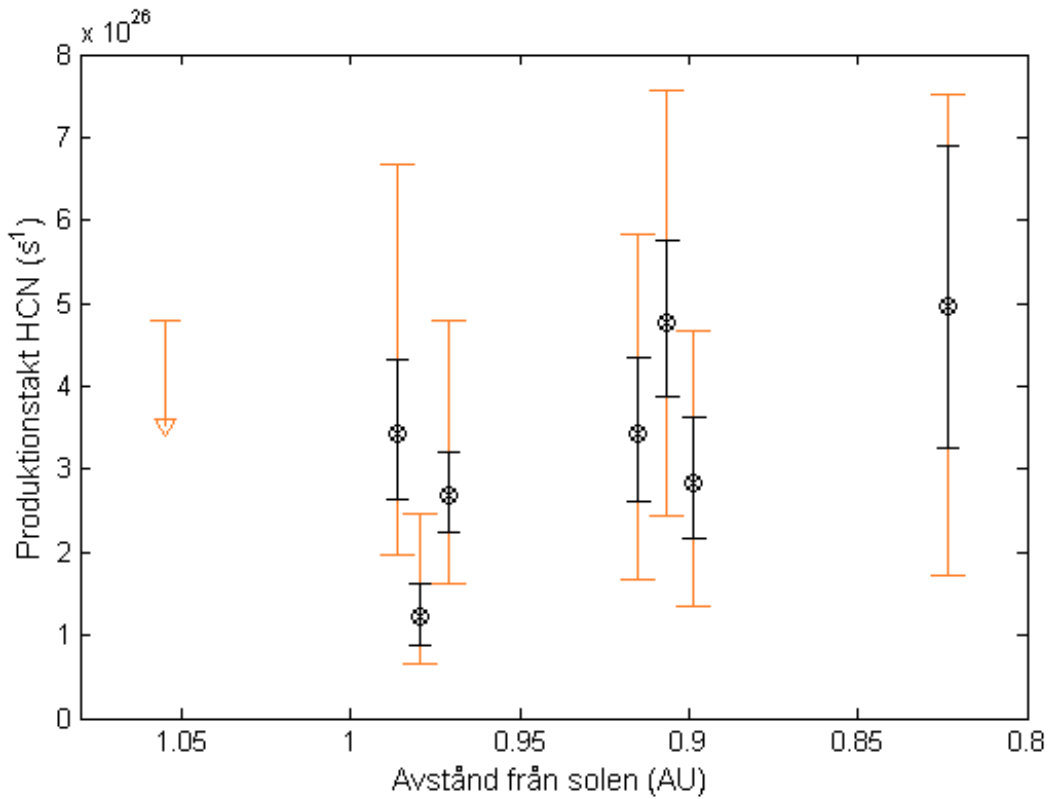
4.2.1 Medelvärdesbildning över enskilda dagar och alla observationsdagar

Från kolumntätheterna i tabell 4.1 beräknas produktionstakterna för de aktuella dagarna. Produktionstakterna anges i tabell 4.3 och är i storleksordningen 10^{26} s $^{-1}$. Precis som för kolumntätheterna beräknas produktionstakterna för tre olika excitationstemperaturer: 70 K, 150 K och $T_{rot}(R_h)$. För ett givet avstånd till solen ökar produktionstakten med ökande kolumntäthet. För den 16 november bestäms en övre gräns på produktionstakten. Denna gräns är i samma storleksordning som de beräknade produktionstakterna för dagar då HCN detekterades.

Produktionstakterna presenteras också grafiskt i figur 4.2. Där sammanförs produktionstakter för de olika excitationstemperaturerna till större felstaplar som ger det intervall produktionstakten befinner sig inom.

Tabell 4.3: Övre delen: produktionstakter för de enskilda observationsdagar då HCN detekterades samt medelvärdet över samtliga observationer. Nedre delen: övre gränser på produktionstakter för den 16 november. Produktionstakterna är angivna enligt följande struktur: Q_{-y}^{+x} , där x är övre felmarginalen och y är nedre felmarginalen. ^(a)Molekylernas medellivslängd (10^5 s) ^(b)Teleskopshuvudlobens halvvärdesbredd projicerad på kometen (km).

Datum	$M^{(a)}$	$S^{(b)}$	Produktionstakt Q (10^{26} s $^{-1}$)		
			$T_{ex} = 70$ K	$T_{ex} = T_{rot}$	$T_{ex} = 150$ K
Alla dagar	0,588	18700	$2,74^{+0,40}_{-0,37}$	$4,05^{+0,58}_{-0,55}$	$5,69^{+0,82}_{-0,77}$
22 nov	0,648	12900	$2,55^{+0,66}_{-0,59}$	$3,43^{+0,89}_{-0,80}$	$5,29^{+1,38}_{-1,23}$
23 nov	0,640	13000	$0,90^{+0,28}_{-0,25}$	$1,23^{+0,38}_{-0,34}$	$1,87^{+0,58}_{-0,51}$
24 nov	0,628	13200	$1,95^{+0,36}_{-0,33}$	$2,70^{+0,50}_{-0,46}$	$4,04^{+0,75}_{-0,69}$
30 nov	0,558	15400	$2,21^{+0,60}_{-0,53}$	$3,43^{+0,92}_{-0,82}$	$4,58^{+1,24}_{-1,10}$
1 dec	0,548	15900	$3,02^{+0,63}_{-0,57}$	$4,77^{+0,99}_{-0,90}$	$6,27^{+1,30}_{-1,18}$
2 dec	0,538	16400	$1,77^{+0,48}_{-0,43}$	$2,85^{+0,78}_{-0,69}$	$3,67^{+1,00}_{-0,89}$
15 dec	0,452	24300	$2,61^{+1,02}_{-0,90}$	$4,96^{+1,94}_{-1,70}$	$5,41^{+2,11}_{-1,86}$
16 nov	0,742	12900	< 2,31	< 2,74	< 4,80



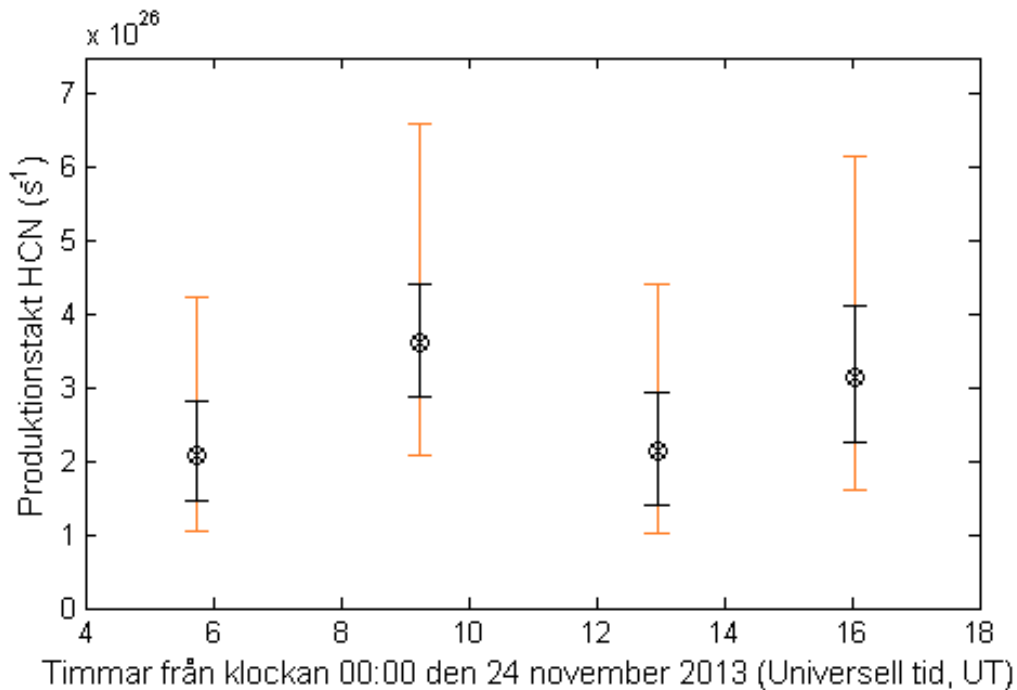
Figur 4.2: De beräknade produktionstakterna som funktion av kometens avstånd från solen. De markerade punkterna är beräknade med $T_{ex}=T_{rot}$ och de mindre felstaplarna är utifrån mätfelet σ_I för samma excitationstemperatur. De orangea, större felstaplarna betecknar felmarginaler för ett större spann på excitationstemperaturen. Den nedre felgränsen är beräknad för $T_{ex}=70$ K och den övre felgränsen är beräknad med $T_{ex}=150$ K. En övre gräns för produktionstakten den 16 november visas som en övre nivå med tillhörande nedåtpil i orange. Den övre gränsen gäller för $T_{ex} = 150$ K.

4.2.2 Medelvärdesbildning över uppdelade tidsintervall den 24 november

Uppdelningen av 24 november medför också att produktionstakten kan beräknas för olika tidsintervall den dagen. Resultatet visas numeriskt i tabell 4.4 och grafiskt i figur 4.3. Produktionstakten är högre för de två tidsintervallen 07:30 - 11:00 och 14:20-17:40 där den överstiger värdet $3 \cdot 10^{26} \text{ s}^{-1}$ för $T_{ex} = T_{rot}$. För de andra två tidsintervallen gäller att produktionstakten är drygt $2 \cdot 10^{26} \text{ s}^{-1}$ för samma excitationstemperatur.

Tabell 4.4: Produktionstakter för uppdelningen av 24 november. R_h och R_i betecknar kometens medelavstånd till solen respektive jorden i AU. Produktionstakterna är angivna enligt följande struktur: Q_{-y}^{+x} , där x är övre felmarginalen och y är nedre felmarginalen. ^(a)Molekylernas medellivslängd (10^5 s) ^(b)Teleskophuvudlobens halvvärdesbredd projicerad på kometen (km).

Tid (UT)	$M^{(a)}$	$S^{(b)}$	Produktionstakt Q (10^{26} s^{-1})		
			$T_{ex} = 70 \text{ K}$	$T_{ex} = T_{rot}$	$T_{ex} = 150 \text{ K}$
04:00-07:30	0,630	13200	$1,51^{+0,52}_{-0,46}$	$2,09^{+0,72}_{-0,63}$	$3,14^{+1,09}_{-0,95}$
07:30-11:00	0,628	13200	$2,61^{+0,58}_{-0,52}$	$3,62^{+0,80}_{-0,72}$	$5,41^{+1,20}_{-1,08}$
11:20-14:20	0,626	13300	$1,53^{+0,59}_{-0,52}$	$2,13^{+0,82}_{-0,72}$	$3,18^{+1,23}_{-1,07}$
14:20-17:40	0,624	13300	$2,25^{+0,71}_{-0,63}$	$3,13^{+0,99}_{-0,87}$	$4,66^{+1,48}_{-1,30}$



Figur 4.3: Produktionstakt för fyra olika tidsintervall under den 24 november. Lovejoy rör sig under hela den aktuella tidsperioden mellan 0,967 AU och 0,973 AU. De markerade punkterna är beräknade med $T_{ex}=T_{rot}$ och de mindre felstaplarna är utifrån mätfelet σ_1 för samma excitationstemperatur. De orangea, större felstaplarna betecknar felmarginaler för olika excitationstemperaturer. Den nedre felgränsen är beräknad för $T_{ex}=70 \text{ K}$ och den övre felgränsen är beräknad med $T_{ex}=150 \text{ K}$.

Kapitel 5

Diskussion

5.1 Trender i resultat

En generell trend under de observationsdagar som analyserats är att produktionstakten ökar då kometen närmar sig solen (se figur 4.2) vilket naturligtvis är ett väntat resultat.

5.1.1 Tendenser till periodisk variation under den 24 november

Resultatet från uppdelningen av den 24 november tycks visa en kort sekvens av ett periodiskt mönster i produktionstakten. Detta leder osökt in på tanken att det skulle kunna vara en följd av att produktionstakten varierar med Lovejoys rotation. För att ha en periodiskt varierande produktionstakt krävs att fördelningen av is på kometen är inhomogen. Detta har bekräftats gälla för andra kometer och det är troligt att samma sak stämmer också för Lovejoy. Perioden för den stuktur som syns i figur 4.3 tyder på en rotationsperiod på ungefär sex timmar, vilket inte är en orimlig tid för en komet (se avsnitt 2.2.4).

I figur 4.3 är de totala felmarginalerna (representerade i orange) emellertid såpass breda att de gott och väl överlappar varandra. Övre och nedre felmarginaler representerar dock mycket olika värden på excitationstemperaturen. Även om det inte är helt säkert vilken excitationstemperatur som stämmer bäst med verkligheten bedömer vi att den inte varierar över ett speciellt stort spann under en så kort tidsperiod som en dag. För att bedöma hur stora intervall produktionstakten kan ligga inom är det därför lämpligast att kolla på mätfelet. De svarta staplarna i figur 4.3 visar felmarginaler beräknade för samma excitationstemperaturer. Excitationstemperaturen skiljer sig alltså något mellan de olika punkterna (se tabell 4.4) men är densamma för det beräknade värdet och felmarginalerna. De svarta staplarna representerar således mätfelet. Även dessa felmarginaler överlappar något och det kan alltså inte helt fastställas att variationen vi ser faktiskt kommer från en varierande produktionstakt.

Teoretiskt sett skulle mer information om inhomogenitet i utströmningen av gas kunna tydas från emissionslinjernas dubbeltoppar. I spektrumet från dessa korta tidsintervall är dock formerna på linjerna alldeles för otydliga för att vara användbara.

Om det ändå skulle vara verkliga fluktuationer i produktionstakten som urskiljs, är det fortfarande oklart vad de beror på. Den sekvens vi ser består endast av två perioder under några timmars tid. Det är alltså omöjligt att konstatera huruvida variationen beror på kometens rotation eller bara är tillfälliga avvikelser.

5.2 Jämförelse med publicerade resultat

I figur 5.1 syns våra resultat tillsammans med publicerade värden från de studier som nämndes i avsnitt 2.6.3. Den trend som innebär att Q ökar när Lovejoy närmar sig solen syns även för de publicerade resultaten. Dessa publicerade resultat följer någorlunda väl de värden vi beräknat, även om våra värden ser ut att ligga på en något högre nivå. En faktor som påverkar produktionstakten är valet av excitationstemperatur. Värdena i figur 5.1 är beräknade med excitationstemperaturer som är extrapolerade från den trendlinje Paganini et al. (2014) har tagit fram. Som syns i figuren sammanfaller inte våra datum med Paganini et al. (2014) och extrapolering bör alltid göras med viss försiktighet. Biver et al. (2014) har publicerat ett

värde på excitationstemperaturen från sina observationer som skiljer sig med ungefär 20 K från tredlinjen av Paganini et al. (2014) (se avsnitt 2.6.3). Som syns i figur 4.2 påverkar valet av excitationstemperatur den beräknade produktionstakten i hög grad, vilket gör att våra beräknade produktionstakter kan ligga i överkant.

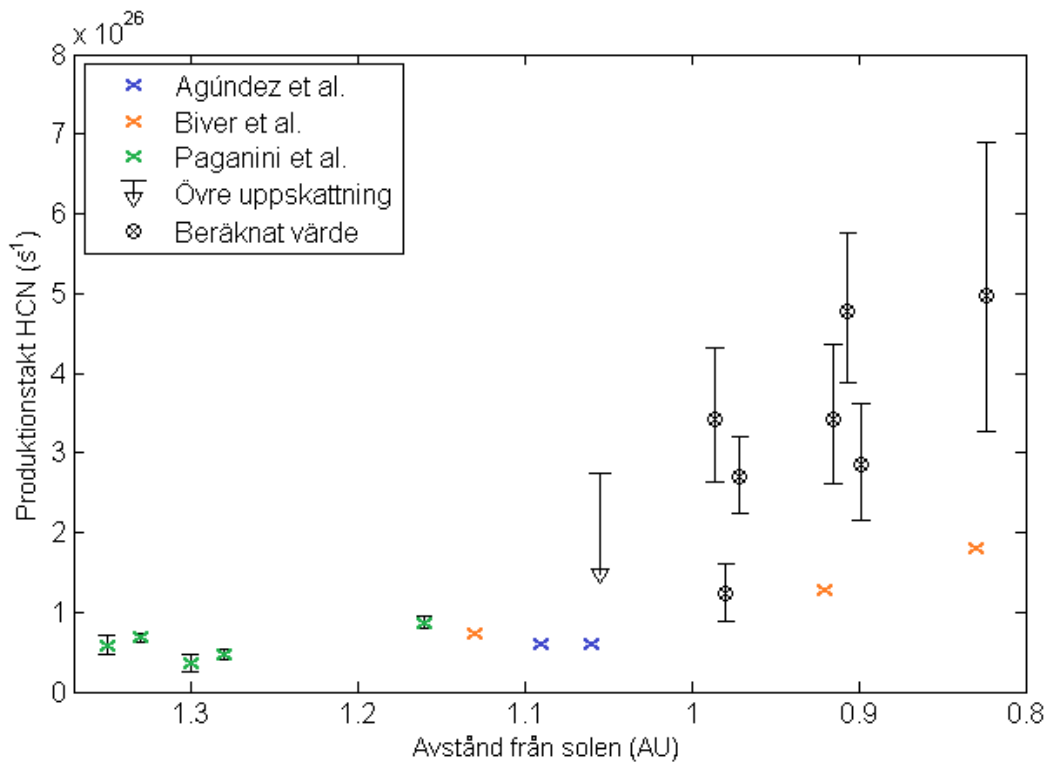
Våra felmarginaler och de från Paganini et al. (2014) visas i figur 5.1. För Biver et al. (2014) är felmarginalerna dock för små för att synas i figuren och Agúndez et al. (2014) har inga felmarginaler publicerade. Felmarginalerna från vår studie är i figuren mycket större än de från Paganini et al. (2014). En trend som också syns är att felmarginalerna ökar för högre värden på produktionstakten. Eftersom storleken skiljer sig en del mellan våra värden och de publicerade värdena bör felet också skilja sig. Det är därför relevant att istället jämföra de procentuella felen. Paganini et al. (2014) har fel som motsvarar mellan 8 % och 28 % av de beräknade värdena (se tabell 2.3). I tabell 5.1 syns de procentuella felen för våra beräkningar. De procentuella felen håller sig på samma nivå som för Paganini et al. (2014) utom för datumet 15 december då de uppgår till 39 %, vilket är ansenligt högre.

Vid jämförelse med Biver et al. (2014), som har procentuella fel på mellan 0,5 % och 1,4 %, inses att det måste finnas bakomliggande orsaker till den stora skillnaden. En förklaring till detta skulle kunna vara att Biver et al. (2014) har observerat Lovejoy med ett större teleskop som mäter 30 m, och eventuellt använt bättre utrustning för signalmottagning. Ytterligare en faktor som påverkar är att Biver et al. (2014) utfört sina observationer från en högt belägen plats med mycket bättre väderförhållanden än vid Onsala rymdobservatorium.

Ytterligare en intressant aspekt som framkommer i tabell 5.1 är hur de procentuella felen förändras i förhållande till varandra mellan kolumntäthet och produktionstakt. Skillnaderna mellan de procentuella felen i kolumntätheten mellan olika dagar är ganska stor för att sedan jämnas ut i produktionstakten. Tydligast är detta för felet i medelvärdesbildningen över alla dagar som är betydligt mindre i kolumntätheten men som närmar sig samma nivå som för de andra dagarna i produktionstakten. En förklaring till detta är att molekylernas radiella hastigheter lokalt kring kometen, som beräknats utifrån linjebredderna (se avsnitt 3.4.2), har en ganska stor felmarginal på cirka 10 % som tas med i beräkningarna. Detta medför att felmarginalerna i produktionstakten ökar väsentligt, vilket vi provat oss till i mom genom att tillämpa programmet både med och utan hastighetens felmarginal.

Tabell 5.1: Procentuella fel för kolumntäthet N och Produktionstakt Q . Värdena baseras på resultaten i tabell 4.1 respektive tabell 4.3

Datum	N (%)	Q (%)
Alla dagar	4,8	14,3
22 nov	15,0	26,1
23 nov	20,0	31,0
24 nov	8,6	18,6
30 nov	16,3	27,1
1 dec	10,4	20,7
2 dec	16,5	27,2
15 dec	28,2	39,0



Figur 5.1: Produktionstakt av HCN mot avstånd från solen. Både publicerade värden från tre olika forskargrupper och projektets beräknade värden är representerade. Agúndez et al. publicerade ej felmarginaler för sina värden, Biver et al. publicerade sina felmarginaler men dessa är för små för att synas i figuren, de finns dock i tabell 2.3. I den här figuren har $T_{ex}=T_{rot}$ använts för de beräknade värdena, och felmarginalerna motsvarar signalens brus, σ_1 . Den observation då endast en övre gräns är beräknad presenteras med en nedåttekande pil.

5.3 Approximationernas validitet

De approximationer som används i de olika beräkningsstegen diskuteras och hur väl de beskriver verkligheten och är användbara utvärderas i följande avsnitt.

5.3.1 Rayleigh-Jeans approximation

I teorin för radioastronomi beskrivs hur Rayleigh-Jeans approximation, $hf \ll k_B T$, används för att relatera intensiteten direkt proportionellt till temperaturen. Först antas att kometen är en svartkropp som följer Plancks strålningslag. Rayleigh-Jeans approximation stämmer väl överens med Plancks strålningslag vid låga frekvenser och det är intressant att se hur bra approximation det är för den aktuella situationen vid Lovejoy. Först studeras olikheten $hf \ll k_B T$. Med frekvensen 88,63 GHz och excitationstemperatur 100 K fås att

$$hf \ll k_B T \sim 0,04254 \ll 1.$$

Den approximation för intensiteten som görs är taylorutvecklingen $e^{\frac{hf}{k_B T}} \approx 1 + \frac{hf}{k_B T}$. Med $\frac{hf}{k_B T} = 0,04254$ svarar taylorutvecklingen mot approximationen $1,04345 \approx 1,04254$. Från detta dras slutsatsen att Rayleigh-Jeans approximation fungerar bra i Lovejoys situation.

Rayleigh-Jeans approximation fungerar som tidigare nämnts mycket bra för låga frekvenser. Den frekvens Lovejoy observerats med svarar mot en våglängd på knappt 3,4 mm. Om istället observationer görs i submm-området bör Rayleigh-Jeans approximation undvikas. En våglängd på 0,5 mm och samma

excitationstemperatur som tidigare svarar mot olikheten $0,29 \ll 1$, vilket visar att Lovejoys observerade våglängder ligger i nedre gränsen för när Rayleigh-Jeans approximation är användbar. Det kan fungera med kortare våglängder men då krävs att temperaturen är betydligt högre än vad som antagits i den här diskussionen.

5.3.2 Optiskt djup

Alla beräkningar som presenteras i kapitel 4 har utförts under antagandet att mediumet genom vilken strålningen passerar, det vill säga kometens koma, är optiskt tunt: $\tau_f \ll 1$. Detta antagande är nödvändigt för att kolumntätheten skall kunna beräknas. Då τ_f närmar sig 1 gäller inte approximationen att kolumntätheten är proportionell mot τ_f längre (se avsnitt 2.4.2), vilket i sin tur innebär att intensiteten inte ökar lika snabbt som kolumntätheten gör.

τ_f kontrollerades genom att det löstes ut ur uttrycket

$$\frac{T_A^*}{\eta_{HL}} = T_{ex} \tau_f$$

och värdet för T_A^* har tagits ur medelvärdesbildningen över alla dagar i figur 4.2 till $\sim 0,02$, η_{HL} är huvudlobseffektiviteten för 20-metersteleskopet på Onsala rymdobservatorium och T_{ex} är satt till dels 70 K och dels 150 K, vilka båda används i beräkning av kolumntäthet. Då erhålls värden på τ_f som ligger på ungefär $0,54 \cdot 10^{-3}$ respektive $0,25 \cdot 10^{-3}$ som båda är $\ll 1$ och antagandet om att koman är optisk tunn antas gälla.

5.3.3 Lokal termodynamisk jämvikt och temperaturer

Lokal termodynamisk jämvikt, LTE, är ett teoretiskt tillstånd som aldrig kan uppfyllas exakt i verkligheten men som är mycket användbart. Koman är ett relativt tätt gasmoln, om man jämför med resten av rymden, vilket innebär att de molekyler som finns där kommer att interagera med varandra genom exempelvis kollisioner. Det är den här interaktionen mellan olika partiklar och molekyler som gör att lokal termodynamisk jämvikt uppnås.

Om antalet molekyler som kan kollidera med varandra är högt, att m i ekvation (2.35) är stort, så går det att approximera excitationstemperaturen T_{ex} till den kinetiska temperaturen T_K och LTE är då uppfyllt (Wirström 2006). Det här betyder samma sak som att om excitationer och deexcitationer orsakade av kollisioner dominerar över samma processer orsakade av strålning så kan T_{ex} sättas att vara detsamma som den kinetiska temperaturen T_K och LTE är uppfyllt (Lyman Spitzer 1978).

Antalet molekyler är ej konstant i koman eftersom komans täthet minskar med ökat avstånd från kärnan. Det här innebär att det finns färre molekyler som kan kollidera med varandra långt ut i koman och där är det möjligt att antagandet av LTE inte stämmer, till skillnad från i koman nära kärnan. Det skall dock tilläggas att det inte nödvändigtvis är en stor andel av HCN-molekylerna som befinner sig så långt från kärnan att LTE inte gäller, då de troligvis har fotodissocierat innan dess.

Vi använder i beräkningarna antagandet att $T_{ex} = T_{rot}$, vilket motiveras med att koman har antagits befinna sig i LTE. Då rotationstemperaturen är en slags excitationstemperatur kan detta antagandet sägas vara giltigt.

5.3.4 Hasermodellens validitet i sammanhanget

Den modell som används för att beräkna produktionstakt utifrån kolumntäthet grundar sig på några enkla antaganden om hur molekylerna i koman rör sig (se avsnitt 2.5). Självklart är det omöjligt att exakt modellera alla molekylers rörelser i ett gasmoln och modellen kommer alltid vara en förenklad version av verkligheten. Hasermodellen antar att varje molekyl lämnar kometens yta med en radiell utgångshastighet och färdas sedan i radiell riktning tills den förstörs genom fotodissociation. Det är uppenbart att molekyler krockar med varandra och ingen molekyl rör sig i en spikrak bana radiellt ut från kometen, men sammantaget är det förmodligen ändå en rimlig beskrivning av förloppet sublimering av inert material från en kropp. Den stora okunskapen och de tvivel som finns om kemin i kometers komor

ställer dock till problem. Något som är fundamentalt i Hasermodellen är antagandet om att den aktuella molekylerna helt och hållet är ett primärämne. Som nämnts i avsnitt 2.2.3 finns det fortfarande osäkerheter huruvida detta gäller för HCN. Varken alternativet att HCN helt och hållet är ett produktämne eller att det delvis är ett produktämne kan uteslutas. Om detta antagandet inte gäller betyder det att inte bara våra resultat innehåller brister, utan även alla de publicerade värden på produktionstakter av HCN som beräknats med Hasermodellen.

5.4 Parametrar till mom

Av de inparametrar som används i mom är det flera som vi inte beräknar själva. Det finns några som vi endast fått ett rekommenderat värde på från Stefanie Milam. Till exempel antalet modellerade molekyler rekommenderades att sättas till 10^6 , för att det ska bli en tillräckligt bra approximation samtidigt som det inte ska ta för lång tid att köra simuleringen. Vi använde själva 10^7 istället för en högre noggrannhet, vilket dock bara resulterade i en förändring på ett par procent. En annan parameter som påverkar resultatet lite är värdet på slumpgenerator-fröet. Användandet av olika värden på detta gav inte heller en större förändring än på ett par procent.

Molekylernas hastighet approximeras till halva halvvärdesbredden på emissionslinjerna. Bredden på emissionslinjerna uppkommer på grund av molekylernas hastighet relativt kometen, vilket orsakar en dopplerrörelseförskjutning. Halvvärdesbredden bestäms genom gaussanpassning i x_s till 2,296 respektive 2,133 km/s för de två detekterade övergångarna och därför finns en viss osäkerhet i inparametern som används i mom. Det värde som användes som halva halvvärdesbredden var medelvärdet av halvvärdesbredderna dividerat med två.

Slutligen diskuteras inparametern molekylernas medellivslängd. Medellivslängden beräknades med hjälp av den fotodissociationshastighet som var uppskattad vid avståndet 1 AU till solen och under förutsättningen att det var solfläckminimum. Det var dock inte solfläcksminimum under tiden som observationerna utfördes, solaktiviteten var högre än så. Detta är något som också påverkar dissociationshastigheten. Molekylernas medellivslängd är troligtvis kortare än vad som använts i beräkningen, vilket borde påverka de erhållna värdena av produktionstakten.

5.5 Databehandling i x_s

Det mest kritiska steget med databehandlingen i x_s är datareduceringen, där insamlad rådata ska reduceras till användbara spektra. Det är inga konstigheter med att filtrera bort spektra med höga systemtemperaturer. Steget där datan viks på grund av observationsmetoden frekvensväxling är även det oproblematiskt. Det kritiska steget är däremot baslinjeanpassningen. För en bra baslinjeanpassning gäller att inga baslinjeboxar får placeras över förväntade spektrallinjer. Dessutom är det viktigt att så många frekvenskanaler som möjligt täcks av baslinjeboxar så att anpassningen blir optimerad. Att baslinjeanpassningen är viktig är för att mycket små variationer i anpassningen har en påverkan på de efterföljande resultaten som är märkbara ända fram till produktionstakten.

Ibland uppstod udda avvikelser i framtagna spektra. I sådana fall gjordes nya försök genom att till exempel ändra baslinjeboxarnas placering eller polynomgraden med vilken baslinjeanpassningen sker. Mest frekvent användes polynomgrad fem, men i vissa fall grad tre eller sju. Den vanligaste oönskade tendensen som uppstod vid baslinjeanpassning var att baslinjerna fick en slags puckel över området där HCN-övergångarna finns. För att inte riskera att något av alla utvalda spektra har en sådan puckel genomfördes samtliga datareduceringar av minst två personer oberoende av varandra. Om de integrerade intensiteterna skiljde sig åt markant för samma datum kunde det tyda på att ena spektrumet hade en sämre baslinje med en slags puckel som gav en betydligt högre integrerad intensitet. I sådana fall fortsatte datareduceringen av samma datum tills minst två personer uppnått liknande integrerade intensiteter och baslinjen bedömdes vara rak och centrerad vid noll.

I de sammanslagna intervallen 28-29 november och 13-14 december uppstod udda avvikelser i form av oönskade spektrallinjer som inte orsakats av HCN. Trots upprepade försök med nya polynomgrader och andra placeringar av baslinjeboxar försvann inte dessa spektrallinjer och därför gick vi inte vidare med

denna data. Framförallt i intervallet 28-29 november ser detektion av HCN tydlig ut och kanske kunde vi bortsett från den oönskade spektrallinjen och beräknat produktionstakt i alla fall. Valet föll dock på att istället uteslutande arbeta med data som bedömdes pålitlig.

Slutligen nämns metoden för att integrera intensiteten. Även om de reducerade spektrumen ser snarlika ut kan intensiteten skilja sig åt mellan dem och integreringens värde varierar ganska mycket för olika observationsdagar. När integreringen sker i xs finns framförallt två felkällor. Den ena är brusnivån som bestäms från baslinjebboxar. Den felmarginalen som uppstår på grund av bruset presenteras i xs (σ_I) och används för att bedöma sannolikheten för HCN-detektion. Den andra felmarginalen är momentboxarnas placering som bestämmer I_0 , som givetvis inte anges i xs . För att undvika att inkludera kanaler med ovanligt högt eller lågt brus, vilket ger upphov till relativt stora förändringar på I_0 , placerades momentboxarna precis över spektrallinjernas bredd. Även detta genomfördes av minst två personer för att minimera risken för felaktiga resultat.

Kapitel 6

Slutsatser

Två rotationsövergångar för HCN $J = 1 - 0$ med hyperfinkvanttalet $F = 2 - 1$ respektive $F = 1 - 1$ detekterades i en majoritet av observationsdagarna. Beräknade produktionstakter är i storleksordningen $3 \cdot 10^{26}$ - $5 \cdot 10^{26} \text{ s}^{-1}$ med ökande värden när Lovejoy närmar sig solen, vilket är logiskt. Det är också samma trend som andra forskargrupper observerat. Noterbart är att de beräknade produktionstakterna är något högre jämfört med de andra forskargruppernas produktionstakter.

Resultatet från uppdelningen av den 24 november, där tendensen är en varierande produktionstakt med en periodtid på cirka sex timmar, är visserligen intressant men på grund av för stora felmarginaler och för kort observationstid kan dock inga slutsatser dras angående dessa variationer. För att säkerställa eventuella variationer krävs längre observationstid med bra datakvalité, så att fler perioder kan detekteras.

Resultatet bygger på flera approximationer: både fysikaliska antaganden såsom att den emitterade gasen är optisk tunn och att Rayleigh-Jeans approximation är giltig, men också modellapproximationer som Hasermodellen. Inget tyder på att de approximationer som använts ger grova fel i beräkningarna så den faktiska produktionstakten bör ligga inom eller i närheten av de beräkande intervallen.

I den här rapporten har produktionstakten för HCN på kometen Lovejoy presenterats. HCN är bara en molekyl bland många på kometen Lovejoy, och Lovejoy är bara en komet utav alla de miljontals som finns i vårt solsystem. Resultatet från den här studien är svårt att koppla till vare sig solsystemets ursprung eller till hur leveransen av ämnen till jorden sett ut. Den förståelse av universum som kunskapen om kometer kan ge oss kommer inte från en enstaka radioobservation av gasen i en komets koma. Men varje observation är ett steg på vägen till att bygga upp en bild av hur populationen av isiga kroppar i solsystemet ser ut. Tillsammans med handledarna för projektet, Eva Wirström och Mikael Lerner, planerar vi att publicera resultaten i en astronomisk forskningstidskrift så att de kan komma till nytta för andra forskargrupper i deras analyser och mer övergripande studier.

Litteraturförteckning

- Fray, N., Bénilan, Y., Cottin, H., Gazeau, M. C., & Crovisier, J. 2005, *Planet. Space Sci.*, 53, 1244
- Agúndez, M., Biver, N., Santos-Sanz, P., Bockelée-Morvan, D., & Moreno, R. 2014, *A&A*, 564, 1
- Ahrens, V., Lewen, F., Takano, S., et al. 2002, *Z. Naturforsch*, 57
- Altwegg, K., Balsiger, H., Bar-Nun, H., et al. 2015, *Science*, 347, 1
- Bergman, P. 2013, *Onsala rymdobservatorium*, Chalmers
- Bernath, P. 2015, *Molecular Spectroscopy and Structure*, Departments of Chemistry and Physics [Internet], hämtad 18 maj 2015. Tillgänglig från: http://www.google.se/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=6&cad=rja&uact=8&ved=0CE4QFjAF&url=http%3A%2F%2Fbernath.uwaterloo.ca%2Fmedia%2Fmolspec_combined.pdf&ei=-EpaVf3uIcnjywOmpoCIBw&usg=AFQjCNFIKXcbooGJtCM05Ryyr8QzSjIfaQ&sig2=N5v1Qt030yBbLITLmAanmw&bvm=bv.93564037,d.bGQ
- Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Debout, V., et al. 2014, *A&A*, 566, 1
- Boström, R. 2015, *Jonosfären*, Nationalencyklopedin [Internet], hämtad 2015-04-05. Tillgänglig från: <http://www.ne.se.proxy.lib.chalmers.se/uppslagsverk/encyklopedi/l%C3%A5ng/jonosf%C3%A4ren>
- Boström, R. & Börjesson, B. 2015, *Radiovågor*, Nationalencyklopedin [Internet], hämtad 2015-04-04. Tillgänglig från: <http://www.ne.se.proxy.lib.chalmers.se/uppslagsverk/encyklopedi/l%C3%A5ng/radiov%C3%A5gor>
- Bucher, C. R. & Lehmann, K. K. 1998, *Chemical Physics Letters*, 294, 173
- Chandrasekhar, S. 1950, *Radiative Transfer* (Oxford University Press)
- Chang, C. K., Ip, W. H., Lin, H. W., et al. 2014, *ApJ*, 788, 1
- Cochran, A. L. 1985, *The Astronomical Journal*, 90, 2609
- Corney, A. 1977, *Atomic and Laser Spectroscopy*, 1st edn. (Oxford University Press), nytryck
- Cottin, H. & Fray, N. 2008, *Space Sci. Rev.*, 138, 179
- Crovisier, J. 1994, *Journal of Geophysical Research: Planets*, 99, 3777
- Crovisier, J. 2001, in *Encyclopedia of astronomy and astrophysics* (Nature Publishing Group), 1–11
- Crovisier, J. & Bockelee-Morvan, D. 1999, *Space Sci. Rev.*
- de Pater, I. & Lissauer, J. J. 2010, *Planetary Sciences*, 2nd edn. (The address: Cambridge University Press)
- Draine, B. T. 2011, *Physics of the Interstellar and Intergalactic Medium*, Princeton Series in Astrophysics (Princeton University Press)

- Einarsson, G. 2015, Brus, Nationalencyklopedin [Internet], hämtad 2015-04-17. Tillgänglig från: <http://www.ne.se.proxy.lib.chalmers.se/uppslagsverk/encyklopedi/l%C3%A5ng/brus>
- Fulle, M., Della Corte, V., Rotundi, A., et al. 2015, ApJ, 802, 1
- Ghigo, F. 2008a, Grote Reber and his Radio Telescope, National Radio Astronomy Observatory [Internet], hämtad 2015-04-04. Tillgänglig från: http://www.nrao.edu/whatisra/hist_reber.shtml
- Ghigo, F. 2008b, Karl Jansky and the Discovery of Cosmic Radio Waves, National Radio Astronomy Observatory [Internet], hämtad 2015-04-05. Tillgänglig från: http://www.nrao.edu/whatisra/hist_jansky.shtml
- Gicquel, A., Milam, S. N., Villanueva, G. L., et al. 2014, ApJ, 794, 1
- Hammargren, R. 2006, 20-m teleskopet, Onsala Space Observatory [elektronisk bild], hämtad 2015-05-13. Tillgänglig från: <https://www.flickr.com/photos/onsala/5345696985/in/album-72157625674127337/>
- Harris, A. W. 1996, Lunar and Planetary Science, 27, 493
- Hartogh, P., Lis, D. C., Bockelée-Morvan, D., et al. 2011, Nature, 478, 218
- Henningson, M. 2014, Börja med kvantfysik (Göteborg, Sverige: Institutionen för fundamental fysik, Chalmers tekniska högskola), 161–165
- Hüttemeister, S., Rohlf, K., & Wilson, T. L. 2009, Tools of Radio Astronomy, 5th edn. (Berlin: Springer)
- Institut de Radioastronomie Millimétrique. 2015, Institut de Radioastronomie Millimétrique [Internet], hämtad 2015-04-07. Tillgänglig från: <http://www.iram-institute.org/EN/30-meter-telescope.php?ContentID=2&rub=2&srub=0&ssrub=0&sssrub%=0>
- Jewitt, D. 1998, Earth, Moon and Planets, 79, 35
- Jewitt, D. 2011, AJ, 5220, 1
- Joachain, C. J. & Bransden, B. H. 2003, Physics of Atoms and Molecules, 2nd edn. (Essex, England: Pearson Education Limited)
- Johansson, L. 2014, The 20-m Telescope Handbook, Onsala rymdobservatorium, Onsala
- Josefsson, L. 2015, Antenn, Nationalencyklopedin [Internet], hämtad 2015-04-15. Tillgänglig från: <http://www.ne.se.proxy.lib.chalmers.se/uppslagsverk/encyklopedi/l%C3%A5ng/antenn>
- JPL. 2015, Molecular Spectroscopy, hämtad 2015-05-11. Tillgänglig från: <http://spec.jpl.nasa.gov/ftp/pub/catalog/catform.html>
- Lagerkvist, C. I. & Olofsson, K. 2003, Astronomi -En bok om universum (Bonnier Utbildning)
- LAMBDA. 2010, Databasen LAMBDA [Internet]
- Lerner, M. 2012, Populärt om astronomi, 3rd edn. (Onsala: Onsala rymdobservatorium)
- Lerner, M. 2013, "Lovejoy-Proposal", Bilaga B.1
- Lewis, J. S. 2004, Physics and Chemistry of the Solar System, 2nd edn., International Geophysics Series No. 87 (Elsevier)
- Lyman Spitzer, J. 1978, Physical Processes of the Interstellar Medium (John Wiley & Sons, Inc.)
- Mangum, J. G. & Shirley, Y. L. 2015, PASP, 127, 266

- Martin, B. R. 2009, Nuclear and Particle Physics, 2nd edn. (West Sussex, England: John Wiley & Sons, Ltd)
- Marty, B. 2011, Earth and Planetary Science Letters, 313, 56
- Matthews, H. & Jenness, T. 1997, Reduction of frequency-switched data, Science and Technology Facilities Council, hämtad 2015-05-18. Tillgänglig från: <http://www.strw.leidenuniv.nl/docs/starlink/sc8.htx/node55.html>
- Milam, S. N., Savage, C., & Ziurys, L. M. 2004, ApJ, 615, 1054
- Mumma, M. J., Bonev, B. P., Charnley, S. B., et al. 2014, 1
- Mumma, M. J. & Charnley, S. B. 2011, ARA&A, 49, 471
- Murdin, P. 2001, in Encyclopedia of astronomy and astrophysics (Nature Publishing Group), 1
- Murdin, P. 2002, in Encyclopedia of astronomy and astrophysics (Nature Publishing Group), 1
- NASA. 2015, Jet Propulsion Laboratory, <http://www.jpl.nasa.gov/> [Internet]
- NIST . 2015a, Hydrogen cyanide, [Internet], hämtad 2015-05-03. Tillgänglig via: <http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C74908&Mask=20>,
- NIST . 2015b, Listing of experimental data for HCN (Hydrogen cyanide), <http://cccbdb.nist.gov/exp2.asp?casno=74908>, hämtad den 3 maj 2015
- NOAA. 2015, Solar Cycle Progression , Space Weather Prediction Center[Internet], hämtad 2015-04-29. Tillgänglig från: <http://www.swpc.noaa.gov/products/solar-cycle-progression>,
- Nordling, C. & Österman, J. 2010, Physics Handbook for Science and Engineering, 8th edn. (Lund, Sverige: Studentlitteratur)
- Olofsson, H. 2015, Radioastronomi, Nationalencyklopedin [Internet], hämtad 2015-04-04. Tillgänglig från: <http://www.ne.se.proxy.lib.chalmers.se/uppslagsverk/encyklopedi/l%C3%A5ng/radioastronomi>
- Onsala rymdobservatorium. 2013, Chalmers tekniska högskola [Internet], hämtad 2015-04-07. Tillgänglig från: <http://www.chalmers.se/sv/centrum/oso/om-oss/Sidor/default.aspx>
- Paganini, L., Mumma, M. J., Villanueva, G. L., et al. 2014, AJ, 791, 1
- Paganini, L., Mumma, M. J., Villanueva, G. L., et al. 2012, AJ, 748, 1
- Radioastronomisk utrustning. 2015, Chalmers tekniska högskola [Internet], hämtad 2015-04-07. Tillgänglig från: <http://www.chalmers.se/sv/centrum/oso/om-oss/forskningsutrustning/Sidor/Radioastronomi.aspx>,
- Rehder, D. 2010, Chemistry in Space - from Interstellar Matter to the Origin of Life (Wiley-VCH)
- Rehderer, D. 2011, Coordination Chemistry Reviews, 255, 2227
- Rice, J. A. 2007, Mathematical Statistics and Data Analysis, 3rd edn. (Belmont, Kalifornien: Brooks/Cole)
- Schulz, R., Hilchenbach, M., Langevin, Y., et al. 2015, Nature, 518, 216
- Sekanina, Z. 1981, Annual Review of Earth and Planetary Sciences, 9, 113
- Sierks, H., Rickman, H., Barbieri, C., et al. 2015, Science, 347, 1
- Stern, A. J. 2003, Nature, 424, 639

- Swollow, P. 2011, Practical VHF/UHF Antennas. The Radio Communication Handbook (Bedford: Radio Society of Great Britain), tillgänglig från: http://www.google.se/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=5&cad=rja&uact=8&ved=0CEYQFjAE&url=http%3A%2F%2Fflipsey.gportal.hu%2Fportal%2Fflipsey%2Fupload%2F2088_1274194047_02956.pdf&ei=bGUqVcLQMsilsAHPpYBY&usg=AFQjCNFz_q158L9MTt5NSKomEXXIMIQnm&sig2=Fg0lQVAKx2f1gQ7ieHVtig&bvm=bv.90491159,d.bGg
- Ulich, B. L. & Haas, R. W. 1976, ApJS, 30, 247
- van Dishoeck, E. F. & Visser, R. 2011, ArXiv e-prints
- Vojvodic, A. 2006, Rotations- och vibrationsrörelse i tvåatomiga molekyler, Chalmers tekniska högskola [Internet], hämtad 2015-05-10. Tillgänglig från: <http://www.google.se/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=1&cad=rja&uact=8&ved=0CCEQFjAA&url=http%3A%2F%2Ffy.chalmers.se%2F-hyldgaar%2FoTillKvantfysik%2FNytt%2FMolecularVibRot.pdf&ei=qmFPVYzeJOPQygOC1ICoDg&usg=AFQjCNFRrqVa0yXt0meqBmZIP9uyxCmS6Q&sig2=7md7xf0jSgpyZkf71W8e3A&bvm=bv.92885102,d.bGQ>
- Weidenschilling, S. J. 1981, Icar, 46, 124
- Weisstein, E. W. 2015a, Planck Law, Wolfram Research [Internet], hämtad 2015-04-26. Tillgänglig från: <http://scienceworld.wolfram.com/physics/PlanckLaw.html>
- Weisstein, E. W. 2015b, Rayleigh-Jeans Law, Wolfram Research [Internet], hämtad 2015-04-26. Tillgänglig från: <http://scienceworld.wolfram.com/physics/Rayleigh-JeansLaw.html>
- Wikimedia Commons. 2008, Atmospheric electromagnetic opacity, hämtad 2015-04-29. Ursprungligen från Nasa. Tillgänglig från: http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Atmospheric_electromagnetic_opacity.svg
- Wirström, E. 2006, Studies in Molecular Astrophysics and Astrobiology, Technical report L - Department of Radio and Space Science, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden, no: 10 (Institutionen för radio- och rymdvetenskap, Radioastronomi och astrofysik, Chalmers tekniska högskola.)
- Wirström, E. 2013, "ISON-Proposal", Bilaga B.2
- Ziurys, L. M., Savage, C., Brewster, M. A., et al. 1999, AJ, 527, 67

Bilaga A

Facktermer

Då många av de områdesspecifika termer som vi använt inte har vedertagna svenska översättningar listar vi här alla sådana termer på engelska med de översättningar som vi har använt.

Svensk översättning	Engelskt uttryck
Blandningsförhållande	Mixing ratio
Huvudlobsväxling	Beam switching
Strålningstemperatur	Brightness temperature
Kolumntäthet	Column density
Kometens ytstorlek	Image dimensions at the comet
Källfunktion	Source function
Observationsväxling	Switching
Primärämne	Primary volatile/parent volatile
Produktionstakt	Production rate
Produktämne	Product volatile/Daughter volatile
Signal-brusförhållande	Signal-to-noise ratio
Spektrallinjeprofil	Spectral line function
Strålningsassociation	Radiative association

Bilaga B

Komplementerande resultat

B.1 Utvald data med integrerade intensiteter

Den data som valdes ut i xs och reducerades finns angiven i tabell B.1 med medelvärdesbildningar över hela dagar och i tabell B.2 med uppdelningen av 24 november. I tabellerna anges detaljer som vilken polynomgrad baslinjeanpassningen gjordes med och antalet spektra som medelvärdesbildades.

Tabell B.1: Specifik tabell över datareducering och integrerade intensiteter för de observationsdagarna. Övre delen: dagar då HCN detekterades. Nedre delen: dåliga dagar, antingen utan HCN-detektion eller med udda tendenser i spektra. ^(a) Den polynomgrad baslinjeanpassningen gjordes med. ^(b) Integrerad intensitet I_0 , angiven i $mK \cdot km/s$. Antalet spektra är antalet 30-sekundersspektra som användes till datareduceringen.

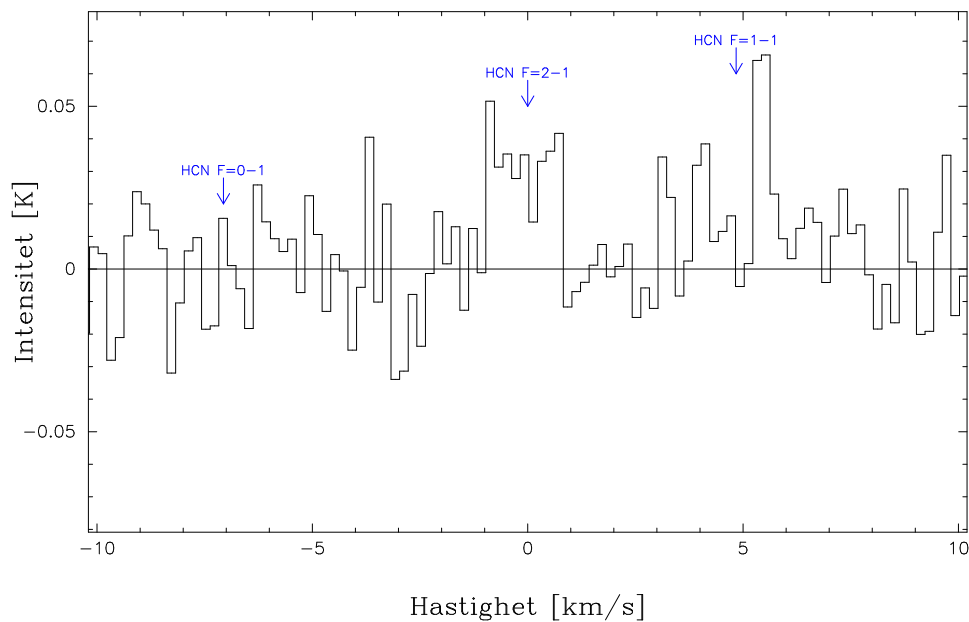
Datum	Polynom ^(a)	Antal spektra	I_0 ^(b)	SNR
Alla dagar	5	8943	79	20,9
22 nov	7	529	113	6,6
23 nov	3	1448	39	5,1
24 nov	5	1353	84	12,0
30 nov	5	876	79	6,2
1 dec	5	885	104	9,5
2 dec	5	1244	59	6,1
15 dec	5	813	68	3,4
16 nov	5	192	26	0,7
28-29 nov	5	847	58	4,7
13-14 dec	7	874	68	3,4

Tabell B.2: Specifik tabell över datareducering och integrerade intensiteter för uppdelningen av 24 november.^(a) Den polynomgrad baslinjeanpassningen gjordes med. ^(a) Polynom är den polynomgrad baslinjeanpassningen gjordes med. ^(b) Integrerad intensitet I_0 , angiven i $mK \cdot km/s$. Antalet spektra är antalet 30-sekundersspektra som användes till datareduceringen.

Tid (UT)	Polynom ^(a)	Antal spektra	I_0 ^(b)	SNR
04:00-07:30	5	275	65	4,3
07:30-11:00	5	270	112	8,6
11:20-14:30	5	242	66	3,7
14:30-17:40	5	248	96	4,9

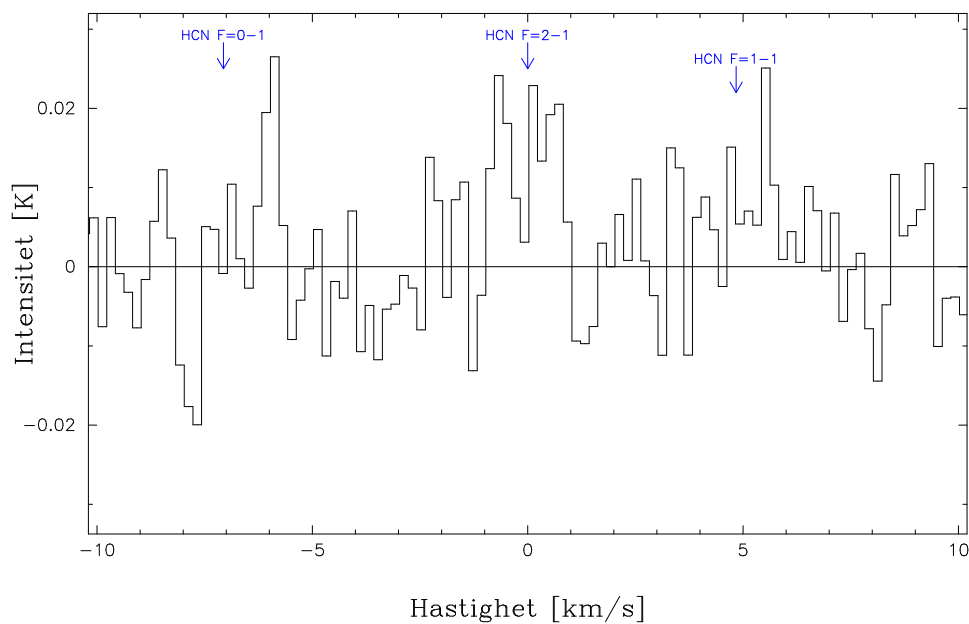
B.2 Spektra över enskilda dagar med detektion av HCN

2013-11-22



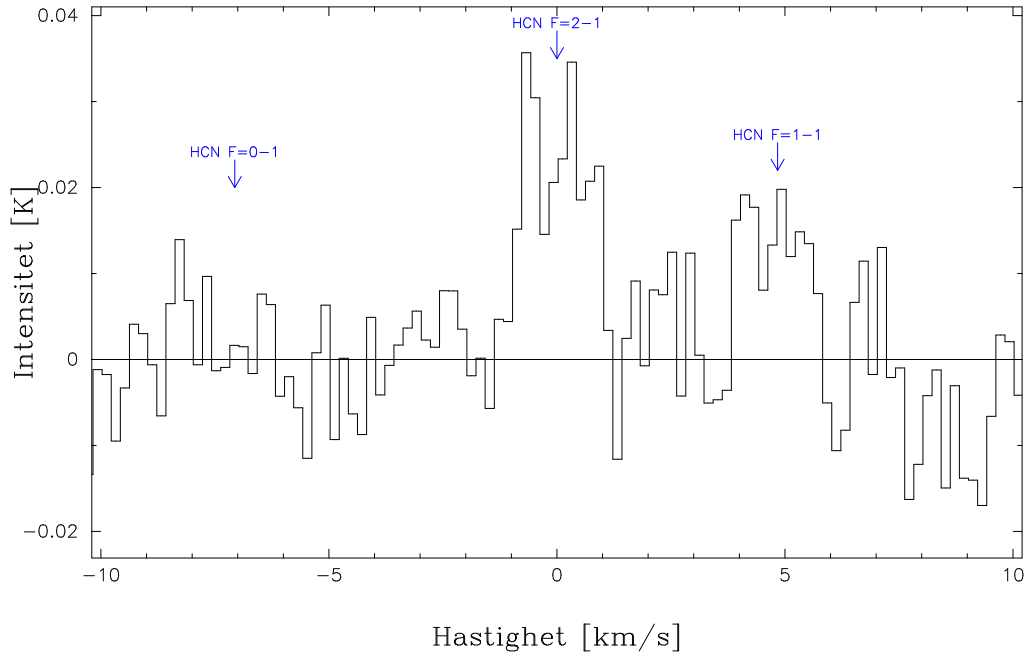
Figur B.1: Spektrum över den 22 november.

2013-11-23



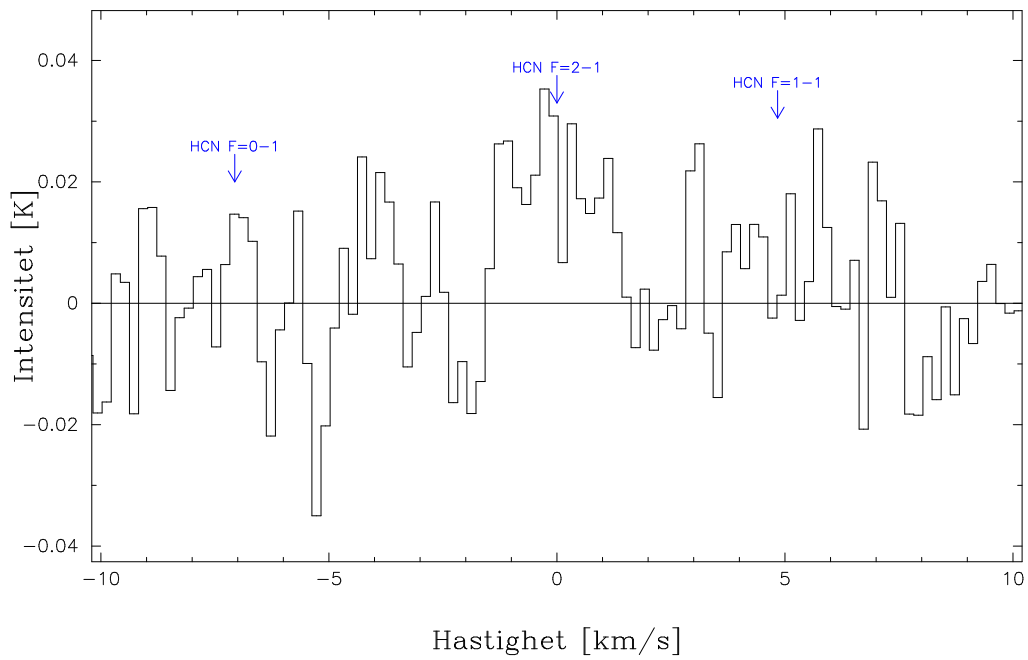
Figur B.2: Spektrum över den 23 november.

2013-11-24



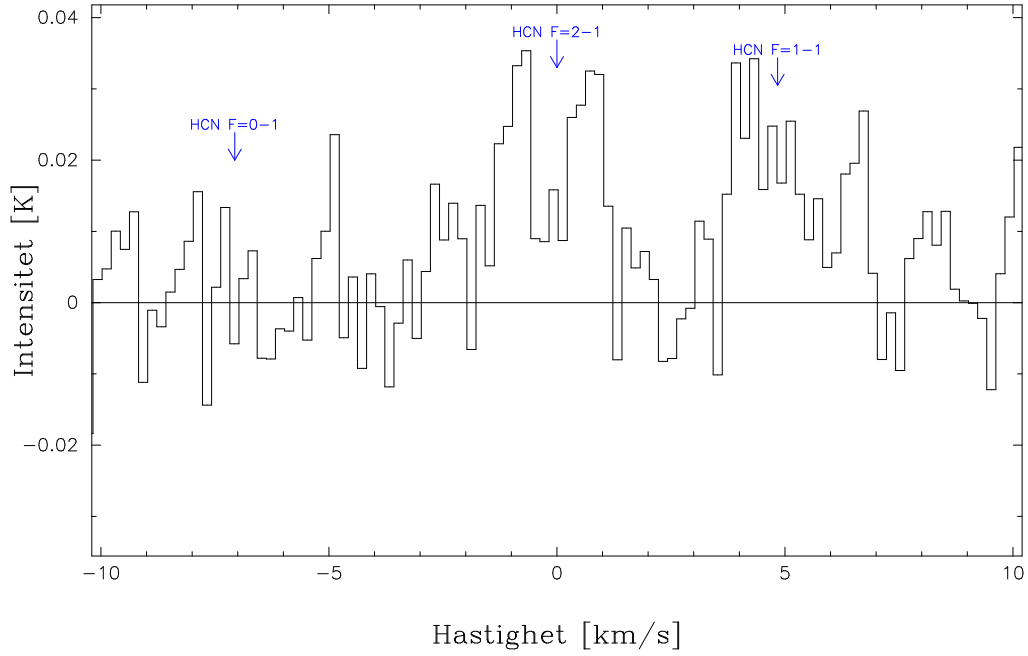
Figur B.3: Spektrum över den 24 november.

2013-11-30



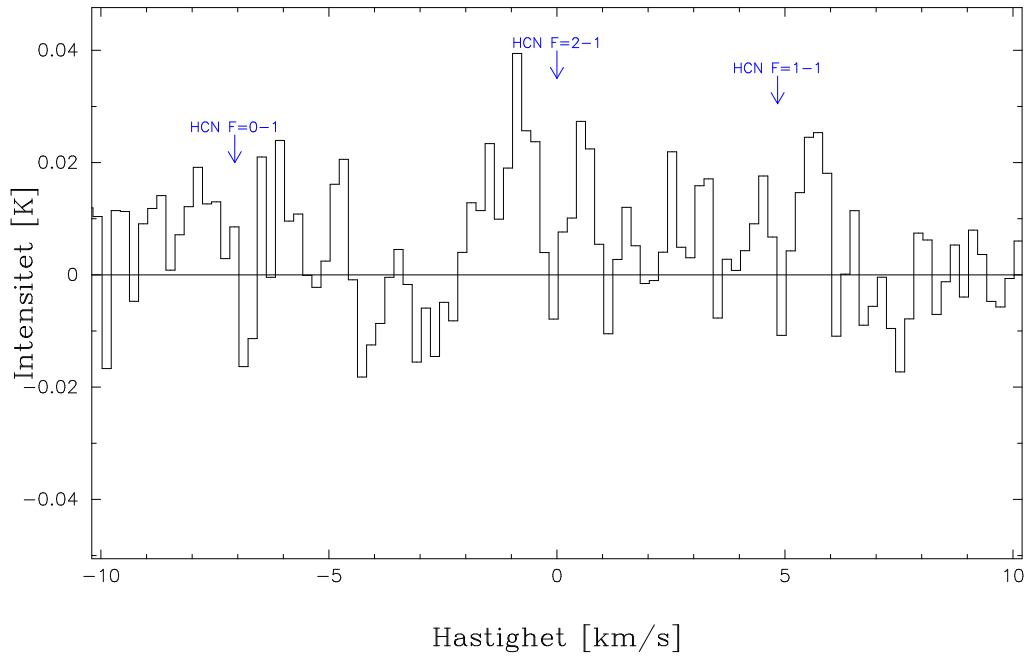
Figur B.4: Spektrum över den 30 november.

2013-12-01



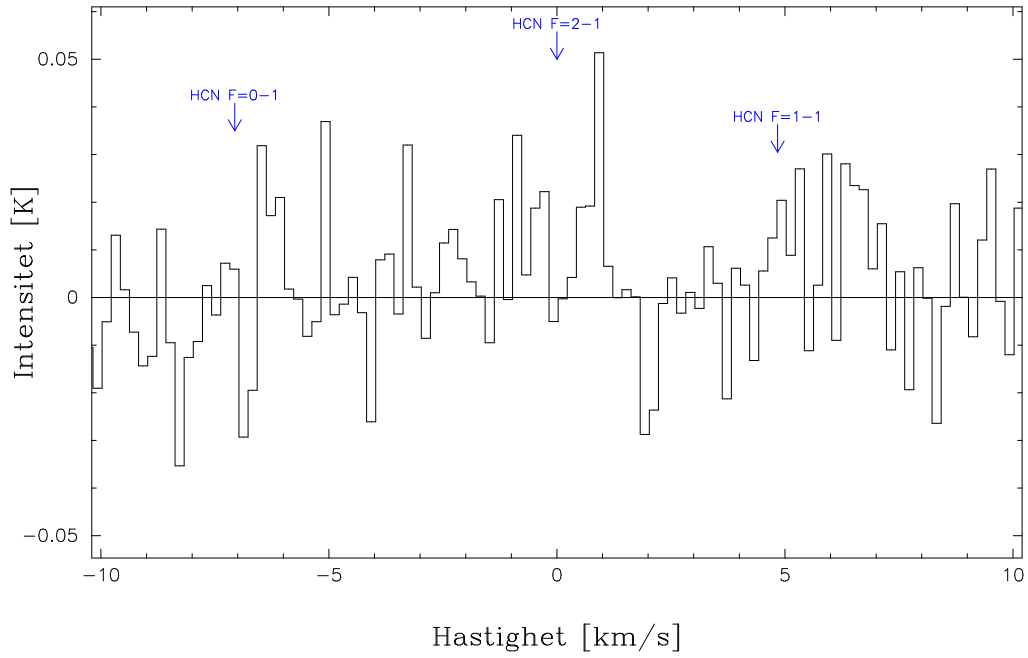
Figur B.5: Spektrum över den 1 december.

2013-12-02



Figur B.6: Spektrum över den 2 december.

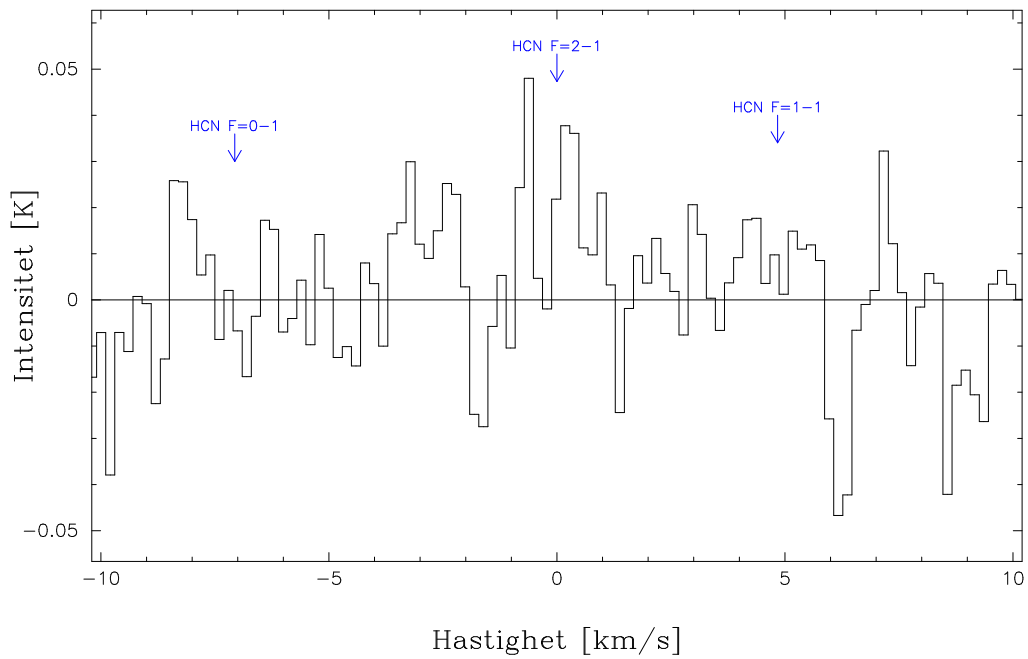
2013-12-15



Figur B.7: Spektrum över den 15 december.

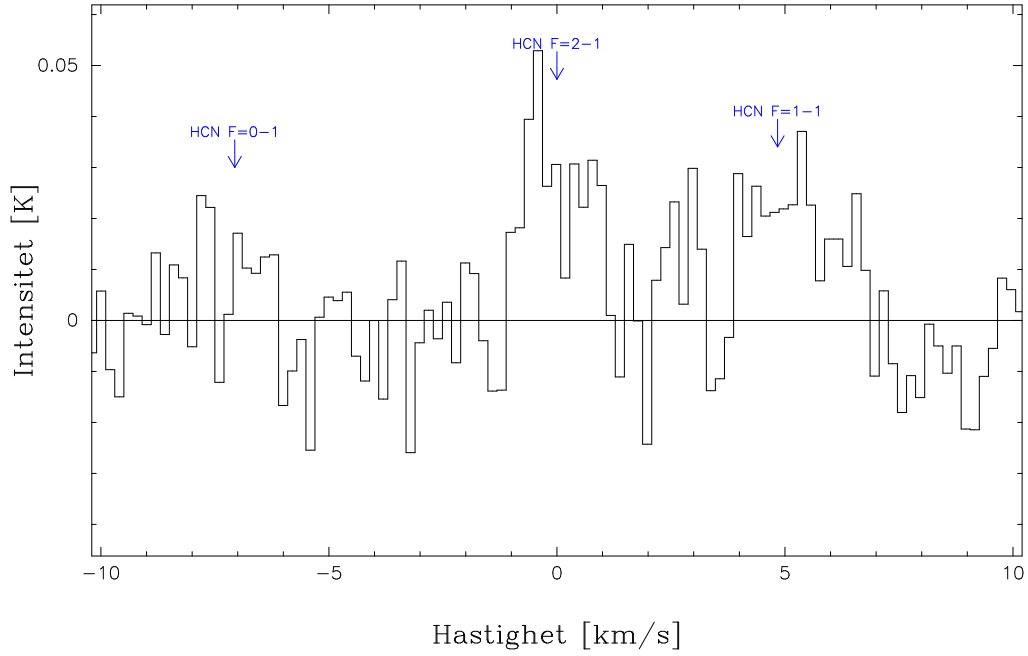
B.3 Spektra över uppdelning av 24 november

2013-11-24 UT: 4-7,5



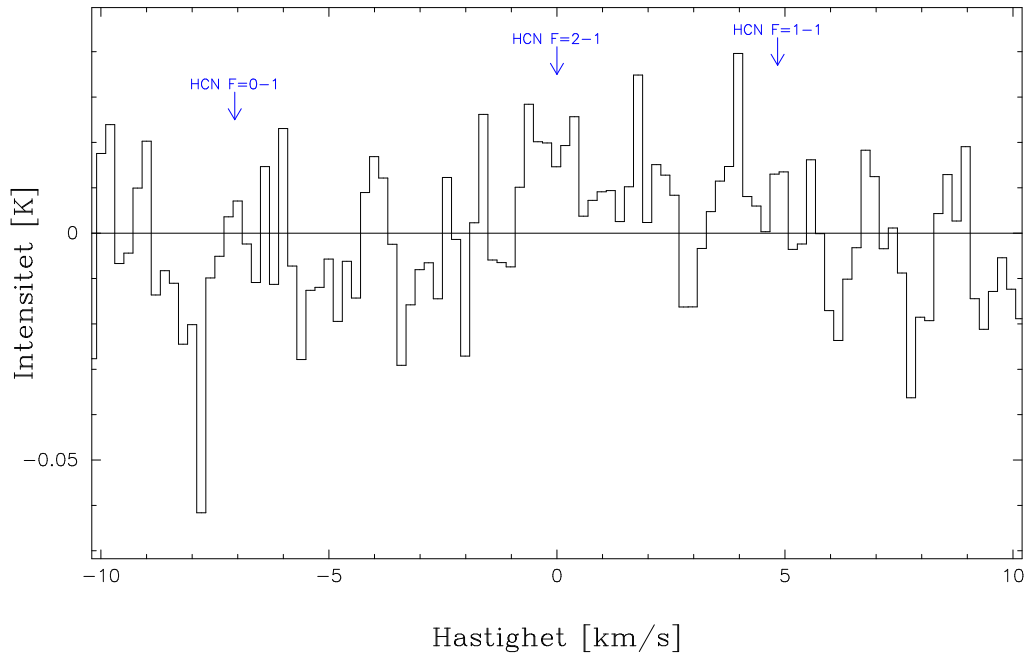
Figur B.8: Spektrum för den första sekvensen 24 november

2013-11-24 UT: 7,5-11



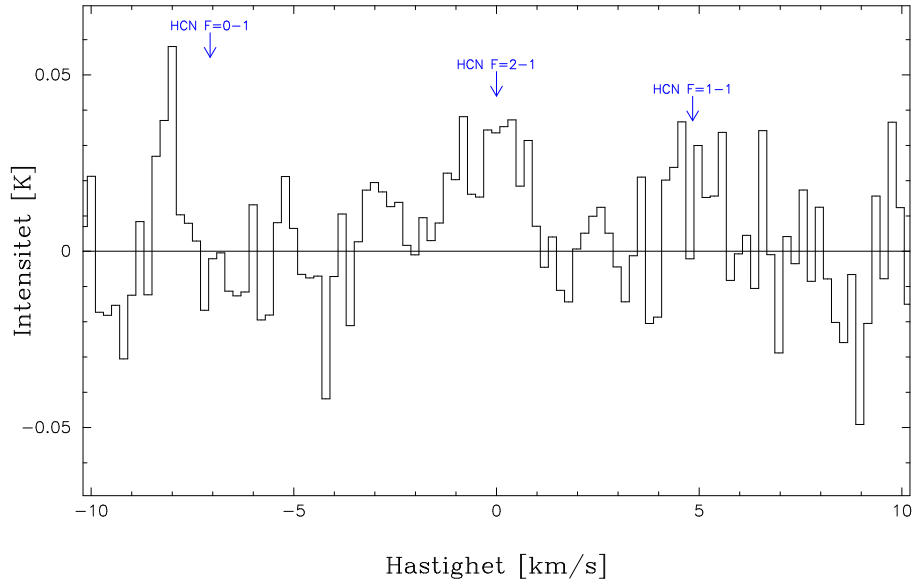
Figur B.9: Spektrum för den andra sekvensen 24 november

2013-11-24 UT: 11,4-14,5



Figur B.10: Spektrum för den tredje sekvensen 24 november

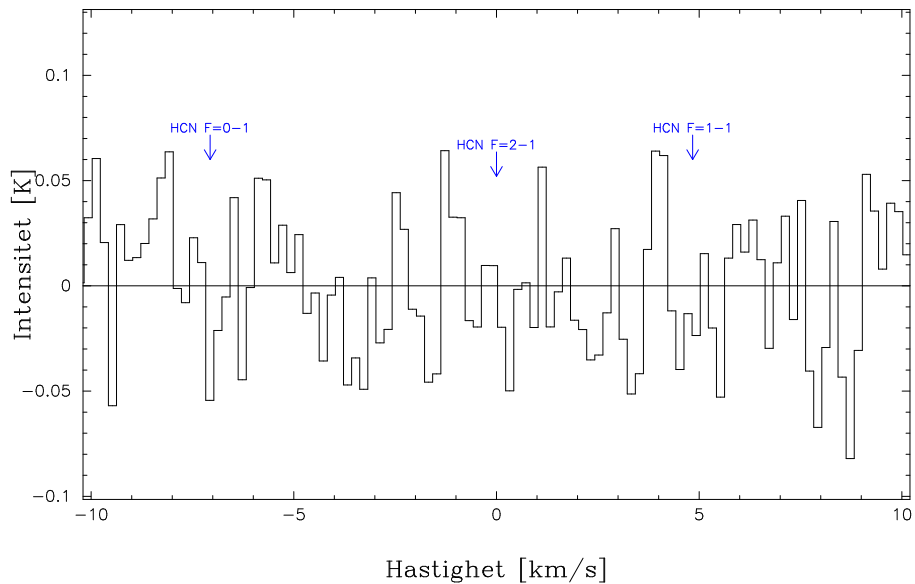
2013-11-24 UT: 14,5-17,6



Figur B.11: Spektrum för den fjärde sekvensen 24 november. Den stora linjen till höger om 0-1-övergången exkluderas ur den integrerade intensiteten.

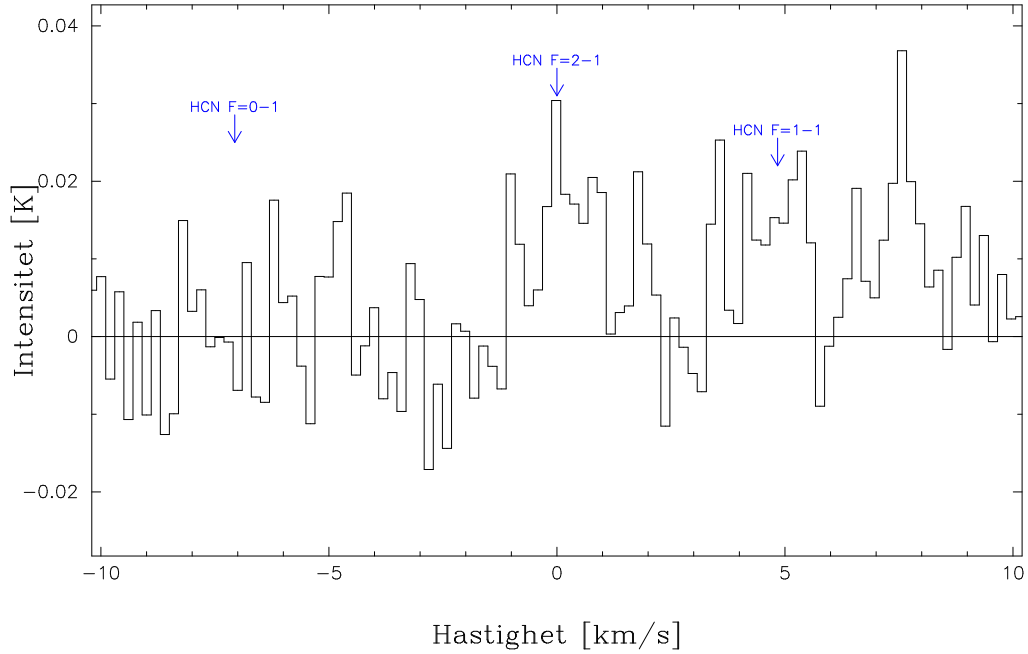
B.4 Spektra över enskilda dagar utan detektion av HCN

2013-11-16



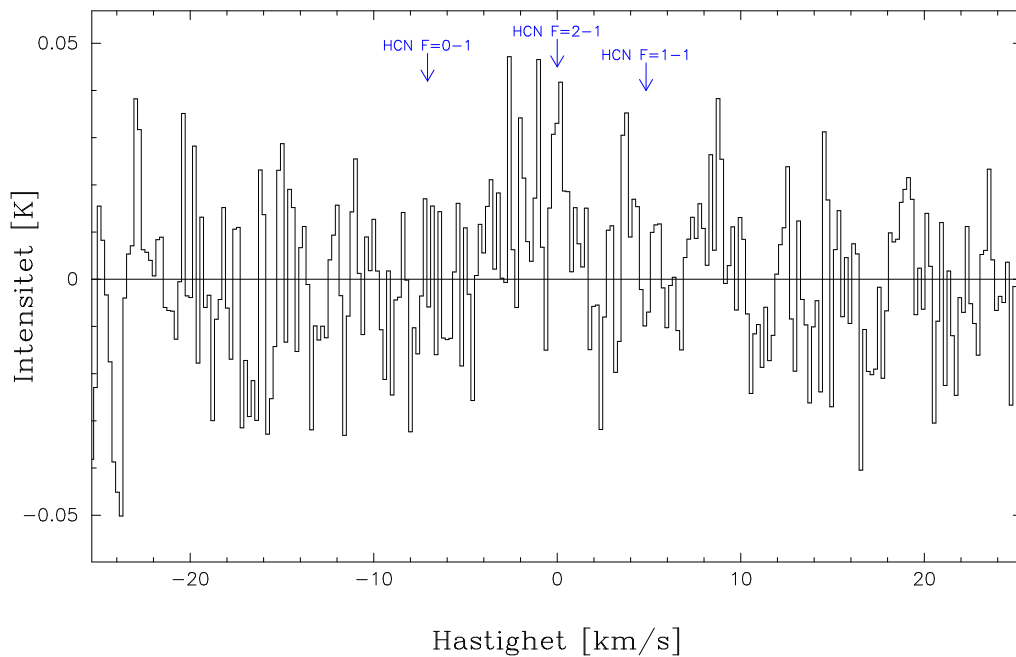
Figur B.12: Den 16 november detekterades inte HCN. SNR-villkoret för den integrerade intensiteten är inte uppfyllt.

2013-11-28 + 2013-11-29



Figur B.13: Sammanslagning av datan från 28 och 29 november. Datan betraktas som otillförlitlig eftersom en stor, oönskad emissionslinje syns till höger om övergången $F=1-1$.

2013-12-13 + 2013-12-14



Figur B.14: Sammanslagning av datan från 13 och 14 december. Datan betraktas som dålig eftersom en stor, negativ emissionslinje vid hastigheten -24 km/s framträder som inte kan förklaras.

Bilaga C

Proposaler

C.1 ISON-proposal

På de kommande sidorna följer proposalen för kometen ISON.



Onsala Proposal

Wirstroem

O2013-1003

Volatiles and dust in Sun-grazing comet C/2012 S1 (ISON)

Semester: Fall 2013

Science Cat.: Solar system

Abstract

Comet C/2012 S1 (ISON) is a sun-grazer that will pass as close as 0.012 A.U. from the Sun, presenting a unique opportunity to study the effects of cometary outgassing and refractory break-up under extreme solar irradiation never experienced by normal comets. The radome of the OSO 20m telescope will allow us to monitor volatiles and molecular dust fragments in the coma of this comet to as close as 0.14 A.U., or 6.5 degrees angular separation, from the Sun.

Telescopes

Telescope	Instruments
OSO20M	1.0cm Receiver (26-36 GHz), 3mm Receiver (85-116 GHz), 1.3cm Receiver (18-26 GHz), 7mm Receiver (36-49 GHz)

Applicants

Name	Affiliation	Email	Country	Pi	Potential observer
Dr Eva Wirstroem	Chalmers University of Technology (Earth and Space Science)	ewirstrom@gmail.com	Sweden		Yes
Professor John Black	Chalmers University of Technology (Dept. Earth & Space Sciences)	John.Black@chalmers.se	Sweden		
PhD Anders Olof Henrik Olofsson	Onsala Space Observatory	henrik.olofsson@chalmers.se	Sweden		
Carina Persson	Chalmers University of Technology	carina.persson@chalmers.se	Sweden		
Hans Olofsson	Onsala Space Observatory (Earth and Space Sciences, Chalmers)	hans.olofsson@chalmers.se	Sweden		
Per Bergman	Onsala Space Observatory	per.bergman@chalmers.se	Sweden		
Anders Winnberg	Chalmers University of Technology (Onsala Space Observatory)	anders.winnberg@chalmers.se	Sweden		

Applicants are continued on the last page

Contact Author

Title Dr
Name Eva Wirstroem
Email ewirstrom@gmail.com
Phone(first) 031-7725527
Phone(second)
Fax

Institute Chalmers University of Technology
Department Earth and Space Science
Address
Zipcode
City
State
Country Sweden

Is this a long term proposal: No

Overall scheduling requirements

Target is a solar system object, thus RA and Dec will be continuously updated using a recent ephemeris file from JPL Horizons.

Observing runs

run	telescope	instrument	time request (minimal)	frequency	weather (pwv)	LST range	comments/constraints
A	OSO20M	3mm Receiver (85-116 GHz)	11h (11h)	88.6318			Centered on HCN (1-0) FSW, 5 MHz throw
B	OSO20M	3mm Receiver (85-116 GHz)	28h (28h)	96.741377			CH3OH (2_k-1_k) quartet centered on the A-line FSW mode w 8 GHz throw.
C	OSO20M	3mm Receiver (85-116 GHz)	8h (2h)	86.846998			Centered on SiO J=2-1, v=0 FSW, 2 MHz throw
D	OSO20M	3mm Receiver (85-116 GHz)	4h (4h)	102.89227			Centered on MgO, J=3-2, v=0 FSW w 2 MHz throw
E	OSO20M	1.0cm Receiver (26-36 GHz)	0h (0h)	34.2986			Centered on MgO J=1-0, v=0
F	OSO20M	1.3cm Receiver (18-26 GHz)	1h (1h)	22.23513			Centered on H2O (6_1,6 - 5_2,3)
G	OSO20M	7mm Receiver (36-49 GHz)	0h (0h)	43.42376			SiO J=1-0, v=0
H	OSO20M	7mm Receiver (36-49 GHz)	0h (0h)	48.37689			CH3OH 1_0,1 - 0_0,0

Targets

Source	RA	Dec	Epoch	Vlsr	Duration	Runs	Comments
C/2012 S1 ISON	13:54:24.14	-14:06:08.9	J2000	-4.6	52	A B C D E F G H	Moving target. Here RA, Dec and V_lsr are given for UT 9:00 on Nov 20

Scientific Rationale

Comets, bodies of molecular ices and crystalline silicate dust, were formed far out from the Sun in the young solar system, and the vast majority have remained there ever since. Their compositions can therefore provide clues to the local conditions at the formation of the Solar System (Mumma & Charnley 2011; Bockelée-Morvan et al. 2004). When a cometary orbit is perturbed though, bringing it within about 3 AU from the Sun, the ices in its nucleus sublimate to form a coma of gaseous volatiles and dust allowing for remote investigations of their composition. Spectroscopic investigations at infra-red (e.g. DiSanti et al. 2013) and radio wavelengths (e.g. Remijan et al. 2008; Biver et al. 2012) have revealed a wide chemical diversity among comets. They also provide natural laboratories to investigate a variety of astrophysical processes.

Comet C/2012 S1 (ISON) is a sun-grazer that will pass as close as 0.012 A.U. from the Sun, reaching perihelion on 2013 Nov 28. This means it will plunge through the inner heliosphere and may therefore have a very unusual and interesting interaction with the inner heliosphere/outer corona. Its orbit (ascending node at 296° and perihelium longitude of 345°) does not take it in between us and the Sun though, so no absorption measurements will be possible. Studies of products released into the cometary coma by this interaction are thus limited to emission line spectroscopy.

For example, the close passage should enhance destruction rates of silicate minerals, and thus provides an opportunity to look for gaseous fragments such as SiO, MgO, and AlO. Molecular fragments of refractory material in comets have not been seen before: if detected, they might reveal how to estimate the breakup of dust. MgO has two unusually strong electronic transitions in the visible (B-X 500 nm) and near-infrared (A-X, 0-0 band at 2.4 micron). This should give pumping rates that remain large compared with the UV photodissociation rate no matter how close to the Sun the comet is, so that a molecule is excited to radiate many times during its lifetime. The J=1-0 and 3-2 transitions of MgO lie near 34.3 and 102.9 GHz, with respective $v=1$ satellites at 34.0 and 101.9 GHz. In addition, SiO has its J=2-1 ($v=0$) transition at 86.8 GHz.

Very high abundances of volatiles should be present in the coma as comet C/2012 S1 approaches perihelion. The water production rate generally scales as $1/r^{1.5}$, where r is the comet's radial distance to the Sun, but the behaviour of this relation is poorly studied at such small r . The passage of S1 will allow us to monitor the production rate and excitation conditions of sublimating volatiles at small r . Spectra of several molecules of interest may be observable with the receivers currently available at the OSO 20 m telescope. The molecules most likely to have detectable lines include HCN, HNC, CH₃OH, CS, and CO (see for example Bockelée-Morvan et al. 2000; Biver et al. 2012). The most abundant large (>5 atoms), organic (containing a C atom) molecule measured in cometary ices is CH₃OH - in a recent review by Mumma & Charnley (2011) it has a measured abundance range relative to H₂O between 0.3% and 4%. The CH₃OH observed in cometary comae is believed to be parent species directly sublimated off the icy core, and the structure of its rotational spectrum makes CH₃OH a favourable temperature probe under LTE conditions.

If the water production rate is high enough, our non-LTE excitation and radiative transfer calculations, which include rotational and vibrational fluorescence, show that the H₂O ($6_{1,6} - 5_{2,3}$) line at 22.2 GHz will be a fairly strong maser close to the Sun.

Since it only happens a couple of times per century that larger cometary bodies like C/2012 S1 pass this close to the Sun, this exceptional encounter will allow studies of cometary outgassing under extreme solar irradiation never experienced by normal comets. The fact that C/2012 S1 is the first sun-grazing comet ever detected far in advance of its perihelion passage offers a unique opportunity to plan a proper observing campaign for this rare event.

Facilities Requested

The radome-enclosed Onsala 20 meter telescope has no Sun avoidance zone, which makes it suitable for observing comets passing at close angular distance from the Sun. The limitation for observing comet C/2012 S1 ISON with this telescope will be the low declination at perihelion: accurate pointing cannot be guaranteed below 15 degrees elevation. Figure 1 shows how the elevation of comet S1 ISON (as seen from OSO) varies around the time of perihelion (left axis) and how its angular distance from the Sun (ie the Sun-OSO-comet angle) changes simultaneously (right axis).

Observing Plan

To study effects of its close interaction with the Sun, it will be most favourable to observe S1 with the 20m telescope after perihelion when it rises rapidly in declination and becomes observable from OSO just two days later, on Nov 30. At that time it is predicted to be extremely productive ($r=0.14$), but still within 7 degrees angular separation from the Sun which makes it hard to observe from many other telescope facilities.

We propose the following observations of comet C/2012 S1 in three different steps (see also Table 1):

1. To monitor the abundance and excitation of CH₃OH through its ($J_K=2_K-1_K$) emission line quartet around 96.7 GHz every other day for a week as the comet is approaching perihelion. If these lines prove too weak, we will instead monitor HCN (1-0) which is the line most likely to be detectable with the 20m. If lines are exceptionally strong, small maps of the HCN emission might be included.

2. To use the first possible shift after perihelion (3 hours on Nov 30) to search for MgO (3-2) emission near 103 GHz.

3. To continue to monitor the abundance of MgO if detected on Nov 30 (otherwise use SiO near 87 GHz as tracer of dust break-up), and to monitor abundance and excitation of CH₃OH or HCN every other day for a week, as before perihelion. During one of the first shifts we will also search for H₂O 22 GHz maser emission.

Note that it is unclear whether S1 will survive its close encounter with the Sun in one piece, but it might still be possible to observe a larger fragment.

If the 3 mm receiver is not available during this unique opportunity to study S1 close to perihelion, we propose to instead use the HEMT receivers to still pursue part of this observing program. MgO (1-0) at 34.3 GHz and SiO (1-0) at 43.4 GHz can be used as dust break-up tracers, while the ground-state transition of CH₃OH ($1_{0,1}-0_{0,0}$) at 48.4 GHz can be used to monitor the sublimation of volatiles. We have added these lines/frequencies to the proposal document, but only entering 0.1 h time requirements.

Scheduling Requirements

With the particular orbit of this cometary target, the observing time constraints are very precise, see also Fig. 1. We ask for time according to Table 1, where we accounted for about one hour start-up time before the target climbs above the 15 degree elevation mark. Included in the table are also the comet's angular separation (S-O-T), and radial distance (r), from the Sun.

Observing Requirements

In order to probe the feasibility of monitoring comet C/2012 S1 in steps 1 and 3, we would like to start on Nov 16 with observing the HCN(1-0) rotational line, which is normally one of the strongest cometary lines in this band. If this is detected we would go on to look for the CH₃OH rotational line quartet at 96.7 GHz. If sufficiently strong to monitor, this set of methanol lines could give both abundance and excitation information simultaneously which is preferred.

A spectral resolution of 100 m/s is desirable since line widths are expected to be narrow, ~ 1 km/s, and dynamics of the outgassing can be traced by studying the line shape. If lines are too weak, smoothing can be used to reduce the resolution. When possible the FSW mode will be used, with a 5 MHz throw in the HCN case, 2 MHz throw for MgO/SiO/CS, and 8 MHz throw for CH₃OH (will not cause overlaps for emission lines this narrow).

In the example of a line 5 times weaker than that observed in Hale-Bopp by the OSO 20m ($T_{A,peak} \sim 0.5$ K, see Biannual Report 1997-1998), we would need a noise limit of 30 mK in order to reach a 3 sigma peak-to-peak SNR. According to the on-line tool for observing time estimates, this noise level is achieved from about 2 hours observing time for HCN (88.63 GHz) and SiO (86.85 GHz), 5 hours for CH₃OH (96.74 GHz), and 6 hours for MgO (102.9 GHz) at 20 degrees elevation.

At 25 kHz resolution and an elevation of 25 deg we will reach a peak SNR of 50 mK at 22 GHz, the frequency of the potential water maser, in about 1 hour observing time. This will be more than enough to determine its presence.

We ask for 52 hours observing time in total (see Table 1), dividing the time between the listed molecules/lines based on the observational results we are getting. Times given in the template are rough estimates.

Students involved

Student	Level	Applicant	Supervisor	Applicant	Expected completion date	Data required
Mr Sarrvesh Seethapuram Sridhar	Master	Yes	Cathy Hourelou	No	2013/12	No

Linked proposal submitted to this TAC: No

Linked proposal submitted to other TACs: No

Relevant previous Allocations: Yes

We were allocated DDT on the Onsala 20m telescope to observe comet C/2011 L4 (PanStarrs) as a pilot study for these observations - project number O2012b-003. 3x8 hours in mid-March resulted in upper limits on HCN and SiO, while additional time in end-March resulted in a long time average tentative detection of HCN at peak antenna temperature of ~10 mK.

Additional remarks

It was not possible to upload all 4 pages of the justification (References, Tables and Figures). The complete justification will be sent by e-mail.

*Observing run info :**Applicants*

Name	Affiliation	Email	Country	Potential observer
Michael Olberg	Onsala Space Observatory	michael.olberg@chalmers.se	Sweden	
Sebastien Muller	Onsala Space Observatory	sebastien.muller@chalmers.se	Sweden	
Mikael Lerner	Onsala Space Observatory	mikael.lerner@chalmers.se	Sweden	
Dr Karl Torstensson	Onsala Space Observatory	karl.torstensson@chalmers.se	Sweden	
Robert Cumming	Onsala Space Observatory	robert.cumming@chalmers.se	Sweden	
Mr Sarrvesh Seethapuram Sridhar	Chalmers University of Technology (Earth and Space Science)	sarrvesh@student.chalmers.se	Sweden	

C.2 Lovejoy-proposal

På de kommande två sidorna följer Lovejoy-proposalen, som är en utökning från ISON-proposalen.

A DDT proposal to monitor HCN(1-0) in comet C/2013 R1 (Lovejoy)

An extension to project O2013a-004

Wirström et al., Volatiles and dust in Sun-grazing comet C/2012 S1 (ISON)

prepared by Mikael Lerner

Goal

To extend project O2013a-004 to monitor a second bright comet, C/2013 R1 (Lovejoy) in the HCN(1-0) transition with the 20m telescope, utilising the facts that this comet is visible for up to 18 hours per day and there are large gaps of unscheduled telescope time that could be used for this project.

Background

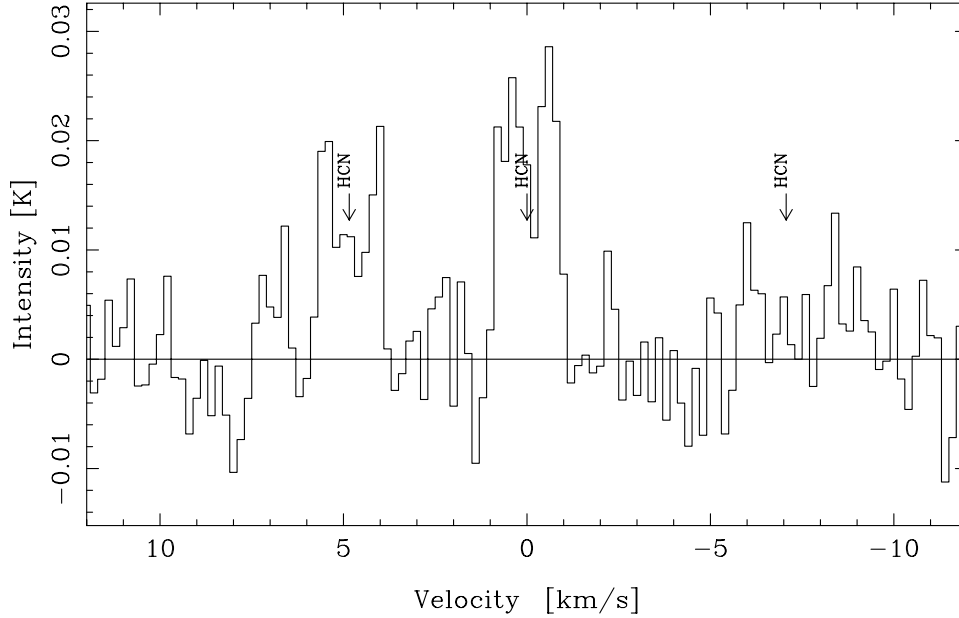
While much attention is devoted to comet C/2012 S1 (ISON), there is another lesser known comet which also is visible to the naked eye in the sky right now: comet C/2013 R1 (Lovejoy). This comet was discovered on 7 September 2013 and has surprised by becoming much brighter than originally expected; it was already in early November four magnitudes brighter than predicted.

Comet C/2013 R1 (Lovejoy) is a longperiodic comet ($P > 6000$ years) which will reach perihelion on 22 December at a distance of 0.81 AU from the Sun. The comet made its closest approach to the Earth at 19 November at 0.40 AU. Observations of OH in the two comets performed at Arecibo Observatory earlier in November, indicated that the production rate was higher in comet Lovejoy despite the comet being farther away from the Sun than comet ISON (E. Howell, priv. com.).

Detection in HCN(1-0)

The fact that the comet ISON observing campaign at the 20m telescope so far only has produced one weak detection of HCN(1-0) raised the question whether the ephemeris tracking capabilities in the telescope software might be flawed. It was thus desirable to try to obtain a detection of another cometary object. Since the 20m telescope was not scheduled during the weekend 23-24 November and comet Lovejoy was available for about 18 hours per day an intent was made to observe this comet. Adding these data together resulted in a clear detection on the 20 mK level as shown on the next page, thus confirming that the ephemeris tracking is working as intended both with respect to position and velocity. However, the successful detection also raises the prospect of getting scientific useful data out of this comet as well.

Source: Lovejoy 13h08m27.14s 42d45'38.3" (J2013.9) Offset:(+0.0",+0.0")
Date:20131124 UT:17h36m07s Az,El:152.6,15.0 Molecule:HCN
NCh=121 RefCh=60 Fref(im)=88631.85(99831.8) MHz Vref=0.00 km/s
BW=7 MHz Freq.res.=59.1 kHz Vel.res.=-0.20000 km/s
Tsys=312.5 K Int. time=29.43 h Scan. no:4872 Vlsr=0.00 km/s
Integr.int.=0.070806(0.005603) K km/s Sigma=0.00487683 K



Proposal

We propose to utilise the 20m telescope when it is available during the following weeks to monitor HCN(1-0) in comet C/2013 R1 (Lovejoy). Observations will be performed in the same way as they have been performed for comet ISON using FSW with a throw of 5 MHz and obtaining ephemerides from JPL.

Comet Lovejoy is up roughly 18 hours per day from midnight to 18:00 UTC. It is currently located roughly at $RA = 14^h30^m, Dec = +41^\circ$.

