

Samenvatting

Context

Nauwkeurige gegevens van atomaire spectrale lijnen zijn fundamentele parameters in de astrofysica. Synthetische spectrum berekeningen zijn van cruciaal belang voor de ontwikkeling van complexe modellen van de atmosferen van sterren en planeten, en om hun interne structuur en evolutie te kunnen onderzoeken, beschrijven en verklaren in relatie tot hun omgeving. De fouten en onzekerheden aangenomen voor deze fundamentele atomaire gegevens kunnen zich systematisch verspreiden doorheen alle domeinen van de astrofysica, van de vorming van sterren en planeten tot de studie van grootschalige galactische evolutie. Het is erg moeilijk om nauwkeurige fundamentele atomaire gegevens die van astrofysisch belang zijn te verkrijgen enkel uit laboratoriummetingen. Zo bestaan er maar een beperkt aantal databanken die deze belangrijke atomaire data aanbieden. Ze zijn vaak complementair in plaats van redundant en kunnen onvolledige of onnauwkeurige informatie verschaffen. Belangrijke kwaliteitsbeoordelingen van de verstrekte atomaire data zijn schaars (en meestal afwezig), wat een controle van de geldigheid van de resultaten die voortvloeien uit hun toepassing nog erg bemoeilijkt.

Methodologie

Het hoofddoel van het BRASS project was de kwaliteit van beschikbare atomaire gegevens noodzakelijk voor astrofysisch onderzoek op hun juistheid te gaan beoordelen. In het bijzonder vormen deze fundamentele gegevens van atomaire lijnovergangen belangrijke parameters in studies van de kwantitatieve spectroscopie van sterren. De nadruk werd gelegd op de ontwikkeling en toepassing van nieuwe methoden voor het verwijderen en verminderen van systematische fouten in atomaire data aangeboden in de literatuur en in de meest omvangrijke openbare databanken. Daartoe werden zeer hoogwaardige sterrenspectra waargenomen en in detail vergeleken met geavanceerde theoretische sterrenspectra.

Het doel van BRASS was om de grootste systematische en homogene kwaliteitsbeoordeling van fundamentele atomaire gegevens te realiseren over een groot bereik van spectrale golflengten en voor zeer diverse atomen en ionen. Daarvoor hebben we bijzonder hoogwaardige sterrenspectra waargenomen met moderne hoge-resolutie spectrografen en geanalyseerd samen met zorgvuldig uitgekozen atomaire gegevens nodig voor het nauwkeurig berekenen van theoretische sterrenspectra. De waargenomen en theoretische spectra werden in detail met elkaar vergeleken, spectrale lijn voor lijn, om de geldigheid en kwaliteit van de beschikbare atomaire invoerdata te kunnen beoordelen. De theoretische spectra werden berekend met behulp van geavanceerde codes voor het transport van straling waarvoor moderne modellen van steratmosferen van het K, G, F, A, & B type werden gebruikt.

Een ander belangrijk doel van BRASS was om ook een openbaar dynamisch dataplatform te ontwikkelen met gestandaardiseerde representaties van de aangeboden data die snelle online interactie met gebruikers toelaat. Dit werd mogelijk gemaakt door middel van geïntegreerde (hyper-gelinkte) data, gecombineerd met geavanceerde technologieën voor

grafische dataweergave die tevens krachtige nieuwe functionaliteiten biedt voor spectroscopisch onderzoek.

Om deze doelstellingen te bereiken werden de volgende vragen onderzocht:

- (1) Kunnen fundamentele atomaire gegevens noodzakelijk voor astrofysisch spectroscopisch onderzoek, maar die echter verspreid zitten over een grote verscheidenheid van online databanken en in de wetenschappelijke literatuur, samengebracht worden in één openbare databank? Welke methoden zijn nodig om deze data uniform te maken? Dit doel werd bereikt met het ontwikkelen van twee methoden voor het rangschikken van atoomdata volgens de traditionele kruiscontrole methode op basis van lijngolf lengten, en een meer geavanceerde nieuwe aanpak die ook rekening houdt met overige beschikbare informatie omtrent de atomaire elektronenconfiguraties.
- (2) Kunnen de gecombineerde atomaire lijndata in de databanken en literatuur beoordeeld worden op hun kwaliteit waar ze hoofzakelijk volgen uit metingen in laboratoria en/of geproduceerd worden met berekeningen van de atoomstructuur en de overgangswaarschijnlijkheden van de lijnen? Hun beperkte nauwkeurigheid is inherent aan deze traditionele productiemethoden. Dit doel werd bereikt met het opmeten van nieuwe atomaire lijngegevens die we grondig getest hebben door het onderling vergelijken van theoretische en waargenomen sterrenspectra. We hebben uitgebreide kwaliteitsbeoordelingen gedaan van geselecteerde atomaire data met behulp van voortuitstrevende berekeningen van het stralingstransport voor sterrenspectra die nauwkeurig vergeleken werden met hoge-resolutie Mercator-HERMES- en KPNO-FTS-spectra van FGK-type sterren waargenomen met zeer hoge signaal-op-ruis verhoudingen.
- (3) Kunnen de resultaten van onze kwaliteitsanalyses van geteste atomaire gegevens op een gebruikersvriendelijke wijze openbaar worden aangeboden? Dit doel werd bereikt met het ontwikkelen van een modern dataplatform dat deze resultaten aanbiedt samen met alle invoergegevens. De gevalideerde datasets worden in combinatie met de waargenomen en theoretische sterrenspectra interactief aangeboden via brass.sdf.org. De combinatie van atomaire lijndata met hoogwaardige sterrenspectra is een nieuwe evolutie voor de ontwikkeling van een moderne spectraal-atomaire databank die een universele referentie levert aan het hedendaags spectroscopisch onderzoek.

Onze gedetailleerde vergelijkingen van lijnovergangsdata (of $\log(gf)$ -waarden) uit verschillende databanken en de literatuur hebben opmerkelijk grote verschillen aangetoond van wel 3 dex of meer. De waarden kunnen in de loop van de tijd, soms binnen enkele jaren, aanzienlijk veranderen. Dit toont het belang aan van een externe beoordeling van hun nauwkeurigheid door vergelijking met de waarden verkregen uit hedendaagse hoogwaardige astrofysische spectroscopische waarnemingen.

Door het combineren van de atoom- en spectroscopische data-analyses in BRASS (d.w.z. met behulp van spectrale lijnenlijsten en hoogwaardige ijkingsspectra) heeft het project een uitgebreide lijst van referentiespectraallijnen samengesteld die geschikt zijn voor de

kwaliteitsbeoordeling van de opgehaalde atomaire data. De resultaten van deze complementaire analysemethoden bepaalden de betrouwbaarheid van de atomaire lijnendata. In het geval de methoden vergelijkbare waarden binnen fouten opleverden, werden de atoomdata als betrouwbaar beschouwd. Zoniet werden ze op basis van één of meer complicerende factoren uitgesloten van verdere analyse.

De doelstellingen van het project werden bereikt door het uitvoeren van een systematische analyse van de geselecteerde spectraallijnen in elke FGK ijkingster. Dit resulteerde in een uiteindelijke lijst van 1091 spectrale lijnen die onderzocht en kwantitatief vergeleken werden tussen de verschillende atomaire databanken en met de waargenomen ijkingsspectra. Een subset van 845 atomaire lijnen werd weerhouden met $\log(gf)$ -waarden die intern consistent zijn met de astrofysische selectiecriteria. De 'astrofysische' waarden werden daarom gebruikt als ijkingwaarden om de kwaliteit te beoordelen ten opzichte van de waarden die uit de databanken en literatuur werden verkregen. Indien deze laatste waarden overeenkwamen met de ijkingwaarden worden ze aanbevolen als betrouwbaar voor modern spectroscopisch onderzoek.

Conclusies

Het BRASS project heeft belangrijke nieuwe resultaten opgeleverd met de ontwikkeling van nieuwe methoden voor de kwaliteitsbeoordeling van atomaire lijnendata die centraal staan in modern spectroscopisch onderzoek in de astrofysica. Dit leverde nauwkeurige resultaten op voor de kwaliteit van atomaire $\log(gf)$ -waarden nodig voor de theoretische modellering van hoge-resolutie sterrenspectra door middel van zeven ijkingsspectra van FGK-type sterren waaronder de zon. Astrofysische $\log(gf)$ -waarden werden opgemeten en berekend voor 1091 zorgvuldig uitgekozen ongemengde spectrale lijnen tussen 420 nm en 680 nm met behulp van twee verschillende methoden. De overeenstemming van beide methoden weerhield 845 lijnen geschikt voor deze kwaliteitsbeoordeling. Een onderzoek naar de gemiddelde $\Delta\log(gf)$ -waarden (verschil tussen literatuur $\log(gf)$ -waarde en BRASS astrofysische waarde) bracht grote verschillen aan het licht voor lijnen van beperkte kwaliteit waarvoor literatuurwaarden worden aangeboden voor $-3 \leq \log(gf) \leq -0.5$.

De BRASS resultaten tonen dat 53% van de lijnen die konden beoordeeld worden op hun kwaliteit ten minste één $\log(gf)$ -waarde in de literatuur hebben overeenkomstig met de astrofysische waarden, terwijl deze waarden voor andere lijnen met meer dan 0,5 dex kunnen afwijken. Slechts 38% van de onderzochte Fe I lijnen heeft een voldoende nauwkeurige literatuurwaarde, tegenover 70%-75% voor andere elementen van de ijzergroep. Het grote percentage aan theoretische Fe I $\log(gf)$ -waarden van lage kwaliteit aangeboden in de literatuur treedt op voor de middel-sterke en zwakke lijnen van atomaire multipletten met onderste energieniveaus boven 4 eV. Dit is het gevolg van de sterke overlap tussen energieniveaus van naburige atomaire overgangen/configuraties en onnauwkeurige of onvolledige energieniveaus. De resultaten toonden ook aan dat de meerderheid van $\Delta\lambda$ -waarden beneden $\pm 0,01 \text{ \AA}$ blijft, vergelijkbaar met de hoge nauwkeurigheid van de golflengteschaal van de HERMES ijkingsspectra.

De gecontroleerde atomaire lijnendata en de waargenomen en theoretische sterrenspectra worden online aangeboden in de openbare BRASS Data Interface (BDI). Gebruikers van de BRASS databank kunnen de Lines en Spectra BDI ondervragen voor het downloaden van

de atoomdata, inclusief met bijbehorende literatuurreferenties, door middel van de interactieve weergave van dynamische plots voor het vergelijken van alle $\log(gf)$ -waarden. De Spectra BDI biedt interactieve hulpmiddelen voor de weergave van de waargenomen en theoretische ijkingspectra, gecombineerd met de identificatie van lijnen en het downloaden van atomaire lijnendata en lijneigenschappen door de gebruiker. De BDI bevat interactieve pagina's met de resultaten van de kwaliteitsbeoordelingen van 1091 onderzochte lijnen. Het biedt ook hulpmiddelen aan voor interactieve metingen van lijnequivalente breedten en uitgebreide hulppagina's en instructievideo's voor zijn gebruikers.