

ESTUDIO DE LOS ELEMENTOS TIPO HIERRO EN EL FILAMENTO DE ESTRONCIO EN η CARINAE

por
MARIELA MARTINEZ

Tesis de Grado presentada
como requisito para optar al título de Licenciado en Física

Universidad de Los Andes
ULA
Facultad de Ciencias

MÃ©rida
Septiembre, 2007.

**RESUMEN DE LA TESIS DE GRADO PRESENTADA PARA OPTAR
AL TÍTULO DE LICENCIADO EN FÍSICA**

**ESTUDIO DE LOS ELEMENTOS TIPO HIERRO EN EL
FILAMENTO DE ESTRONCIO EN η CARINAE**

por

Mariela Martínez

Facultad de Ciencias
Universidad de Los Andes
ULA

Mérida, Septiembre 2007.

Dr. Manuel Bautista
Tutor de la Tesis de Grado

Realizamos una revisión profunda acerca de la importancia del estudio de los elementos tipo hierro tanto en aplicaciones tecnológicas como en la astronomía. Investigamos la naturaleza del espectro de emisión de algunos iones del grupo hierro (tales como; Sc II, V II, Ti II, Cr II, Mn II, Fe II y Co II) observados en el filamento de estroncio encontrado en el llamado Homunculo que rodea a η Carinae. Construimos modelos atómicos para los iones Sc II y Cr II, y modelamos su espectro. Con los espectros teórico y observado investigamos las condiciones físicas del filamento, así como los mecanismos de excitación de las líneas observadas. Utilizamos los cocientes de intensidades de las líneas para diagnosticar la temperatura, densidad electrónica y la intensidad del campo de radiación. Una vez conocidos los parámetros físicos, calculamos las abundancias de los elementos en la nebulosa.

A mi Madre y mis hermanas Leysi y Marisela.

Agradecimientos

A mi tutor Manuel Bautista por haberme encaminado en esta área de la Astronomía.
A la Universidad de Los Andes y en especial a los profesores del Centro de Física Fundamental (CFF).

Al Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC), Laboratorio de Física Computacional, Centro de Física.

Al Centro de Investigaciones De Astronomía (CIDA) y en especial al grupo de investigadores; Carlos Abad, Angel Bongiovanni, Cesar Briceño, Gustavo Bruzual, Gladys Magris y Kathy Vivas a quienes debo gran parte de mi formación académica.

A María Avendaño por su gran amistad.

A Irving Rondón por su valioso e incondicional apoyo.

Agradezco especialmente a las siguientes personas por el apoyo prestado. En orden alfabético cito: Cindy Valerie, Clara Rojas, Claudio Mendoza, Jorge Troconis, Jose Manuel Ramirez.

Agradezco infinitamente:

A mis tías, Aracelis, Zonia y Yonelly por su inigualable amor y apoyo durante el desarrollo de mi carrera.

A mi abuela por sus oraciones.

A mis primos, Leonardo Enrique, Eduardo Enrique, Leonela, Diana, Dayana, Dania, Freddy, Luis Enrique, Michael (Cheo) y Andrea por ser parte de mi inspiración.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Objetivos	2
1.2. Átomos 3d: Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co y Ni.	2
1.2.1. Sistemas Multielectrónicos	3
1.2.2. Métodos numéricos y teóricos.	4
1.2.3. Efectos de correlación	4
1.3. Excitación 3p	4
1.3.1. Los elementos tempranos (Sc, Ti, V)	5
1.3.2. El Cromo (Cr) y el Manganeso (Mn)	6
1.3.3. Los elementos tardíos (Fe, Co, Ni y Cu)	6
1.4. Aplicaciones del estudio de los elementos del grupo hierro	8
2. Procesos de excitación del escandio y el cromo.	9
2.1. Gas ionizado por colisión	9
2.1.1. Equilibrio termodinámico	9
2.1.2. Los coeficientes de Einstein	10
2.1.3. Excitación	11
2.1.4. Excitación colisional	11
2.2. Bombeo de fotones	12
2.3. Líneas permitidas y prohibidas	14
2.3.1. Extinción interestelar	17
2.3.2. Diagnosticos de los parámetros físicos	18
2.3.3. Abundancia de los elementos en una nebulosa	20

3. Espectros del escandio y el cromo.	21
3.1. Datos Teóricos	21
3.2. Probabilidades de la transición $A_{ij}(s^{-1})$ para el escandio ionizado. . .	23
3.3. Probabilidades de transición $A_{ij}(s^{-1})$ para el cromo ionizado.	25
4. Telescopio Espacial Hubble.	30
4.1. Espectroscopía con el <i>Space Telescope Imaging Spectrograph</i>	31
4.2. Detectores	32
4.2.1. Primera Observación de η Carinae con el STIS.	33
5. η Carinae.	34
5.1. Aspectos generales de la estrella	35
5.2. El ciclo espectral de 5,52 años	35
5.2.1. El sistema binario de η Carinae	36
5.3. El viento estelar	39
5.4. El filamento de estroncio	40
6. Diagnósticos espectrales y abundancias.	43
6.1. Diagnósticos del [Sc II]	43
6.1.1. Diagnósticos del [Cr II]	44
6.2. Abundancia del escandio en el filamento de estroncio	46
7. Conclusiones	48

Índice de figuras

1.1. Espectro experimental de los metales 3d en la región de excitaciones 3p-3d. Cu [12], Sc [13], Cr [14], Fe, Co y Ni [15]	5
2.1. Sistema cuántico de dos niveles, ilustrando el proceso de absorción (izquierda) y emisión (derecha).	10
2.2. Modelo de tres niveles del Ni II, para ilustrar la emisión de [Ni II] λ 7378, debido a excitación por fluorescencia del nivel $a\ ^2F_{7/2}$	13
2.3. Diagrama de niveles de energía de los terminos mas bajos del [O II] y el [N II]. Las líneas de emisión en la región óptica son indicadas por lineas cortadas y las líneas solidas, en el infrarojo y ultarvioleta. . . .	18
3.1. Probabilidades de transición del <i>escandio</i> . <i>Superior</i> : Comparación de las probabilidades de transición A_{ij} del presente con Kurucz. <i>Inferior</i> :Comparación de las probabilidades de transición A_{ij} del presente con NIST	24
3.2. Comparación entre las probabilidades de transición del <i>escandio</i> A^v y A^l en s^{-1} del presente, con las probabilidades de transición A (s^{-1}) de Kurucz.	25
3.3. Comparación entre los valores gf^v y gf^l del escandio.	25
3.4. Probabilidades de transición del <i>cromo</i> . <i>Superior</i> : Comparación de las probabilidades de transición A_{ij} del presente con Kurucz. <i>Inferior</i> :Comparación de las probabilidades de transición A_{ij} del presente con NIST.	26
3.5. Comparación entre los logaritmos de los valores A s^{-1} del cromo del presente, con los reportados por Nilsson, [36], la línea recta muestra el ajuste por mínimos cuadrados.	26

3.6.	Comparación entre los logaritmos de los valores gf^l y gf^v del cromo.	26
5.1.	La imagen de η Carinae tomada con la cámara <i>Wide Field Planetary Camera 2</i> (WFPC2) del Telescopio Espacial Hubble en el año 1994, muestra el gran <i>Homúnculo</i> en la dirección Sur-Este y el pequeño <i>Homúnculo</i> en la dirección Nor-Oeste. Estos lóbulos forman parte del material eyectado por la estrella durante la <i>Gran Erupción</i>	35
5.2.	Curva histórica de la variabilidad de la magnitud visual de η Carinae construida por el grupo de estrellas masivas del Observatorio Astronómico de La Plata, Argentina.	35
5.3.	<i>Curva Superior</i> : Flujo en la banda H en unidades de 10^{-14} ergs cm^{-2} s^{-1} \AA^{-1} , [41]. <i>Curva inferior</i> : Ancho equivalente de la línea He I $\lambda 10830$; los triángulos y fechas en la parte superior son las épocas predichas de mínima excitación y en el eje de las abcisas la coordenada es el Día Juliano (DJ), [42]	37
5.4.	<i>Panel superior</i> : Órbita y velocidad orbital V_{orb} de la estrella secundaria de masa M_2 respecto al sistema en reposo de la estrella primaria de masa M_1 . V_r y V_θ son la velocidad radial y tangencial respectivamente de V_{orb} y a es el semi-eje mayor. <i>Panel inferior</i> : Geometría del flujo cercano al punto de <i>estancamiento</i> . La región de contacto es la superficie donde los dos vientos estelares se encuentran. Las direcciones de la velocidad en el panel inferior son las mismas que en el panel superior [46].	39
5.5.	Observaciones hechas sobre el <i>filamento de estroncio</i> , [49].	41
5.6.	El pequeño <i>Homunculo</i> envuelve el <i>filamento de estroncio</i> , que se puede observar encerrado en el cuadro. La posición II del espectrógrafo indica el lugar donde se identificó el [SrII] en emisión y la posición I indica la orientación del espectrógrafo que pasa cerca de la estrella, la cual es marcada por una cruz [53].	42

Índice de cuadros

3.1. Configuración del archivo que contiene los niveles de energía del ion escandio.	22
3.2. Configuración del archivo que contiene las <i>probabilidades de la transición</i> del íon escandio.	23
3.3. Logaritmos de las probabilidades de la transición del <i>escandio</i> , tomados de NIST, Kurucz y del presente.	27
3.4. Comparación entre las probabilidades de la transición del presente y las reportadas por Nilsson [36].	28
5.1. Comparación entre los eventos predichos [42], y los observados.	37
5.2. Fechas de las observaciones hechas del <i>filamento de estroncio</i> bajo los programas del <i>Telescopio Espacial Hubble</i> y los rangos espectrales cubiertos [49].	40
6.1. Intensidades de las líneas prohibidas del Escandio y el Cromo medidas en Noviembre del 2001 y Diciembre del 2002, respectivamente. Las unidades de la intensidad son $10^{-13} \text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{arcsec}^{-2}$	45
6.2. Comparación entre las intensidades de línea prohibidas teóricas y, las observadas en Dic02 del espectro del escandio (Sc II). Las intensidades de las líneas son relativas a la intensidad de I($\lambda 8349, 57$). El espectro teórico fué calculado para $w = 1 \times 10^{-10}$ y $w = 5 \times 10^{-10}$, ambos con $T_e = 6000K$, and $N_e = 10^7 \text{ cm}^{-3}$	45

6.3. Comparación entre las intensidades teóricas y las intensidades medidas de las líneas prohibidas, del espectro del cromo (Cr II) observado en Nov01. Las intensidades de las líneas son relativas a la intensidad de la línea I($[\lambda 8231, 93]$). El espectro teórico fue calculado para $w = 10^{-10}$, $N_e = 10^6, 10^7, 10^8 \text{ cm}^{-3}$ y $w = 5 \times 10^{-10}$, $N_e = 10^6, 10^7, 10^8 \text{ cm}^{-3}$, ambos con $T = 6000K$	46
--	----

Capítulo 1

Introducción

η Carinae es la estrella más luminosa en nuestro sector de la Galaxia a una distancia de aproximadamente 2,3 Kpc del Sol, su luminosidad es de $5 \times 10^6 L_{\odot}$, su temperatura de ≈ 25.000 K y su masa $\gtrsim 100 M_{\odot}$, [1].

Esta estrella es conocida por haber sobrevivido a una gran erupción, la cual hizo a η Carinae una estrella de primera magnitud, convirtiendola en una de las estrellas más brillantes de la Vía Láctea durante aproximadamente 20 años. La gran erupción en el año 1840, fue conocida cuando el astrónomo John Herschel, reportó su observación de la estrella en 1847, durante su visita a Ciudad del Cabo, en Sudáfrica.

Otra erupción ocurrió en el año 1890, aunque esta no fue tan grande como la primera. Durante estas erupciones, varias masas solares del material estelar fueron expulsadas desde la estrella, este material puede ser visto hoy día alrededor de la estrella en una forma aparente de gran y pequeño *Homúnculo*¹, [1].

No existen imágenes de η Carinae reportados durante los años 1900 y 1940, y estos son necesarios para conocer observacionalmente la evolución de la estrella. A partir de los años 1950 Gaviola y Thackeray [2], [3], reportaron observaciones del *Homúnculo*, las cuales sirvieron para hacer los primeros estudios acerca de la estrella y su nebulosa circundante.

Entre los años 1968 y 1972 Westphal y Neugebauer, [4], hicieron las primeras observaciones en infrarrojo y, encontraron que la luz visible de η Carinae es mayormente oscurecida por polvo.

¹Del latín Homuncŭlus que significa Hombre.

En los años 1980, a través del análisis de los datos tomados con el satélite *International Ultraviolet Explorer* (IUE), se encontró que η Carinae es bastante rica en nitrógeno y menos rica en helio, tal composición ubica a esta estrella en un estado bastante evolucionado, [5].

Después del año 1992 y hasta el presente, datos observacionales provistos por el Telescopio Espacial Hubble han revelado nuevos aspectos de η Carinae, [39].

Uno de los aspectos más importantes, es que η Carinae presenta un período de variabilidad de 5,52 años en la alta excitación nebular, en las líneas de emisión estelar y en la nebulosa que la rodea, conocido como el ciclo espectroscópico, [1].

En el presente trabajo, estudiamos los mecanismos de excitación, las condiciones físicas y abundancias en una región del pequeño *Homúnculo* conocida como el *filamento de estroncio*.

1.1. Objetivos

En el presente trabajo nos proponemos:

1. Realizar una revisión del interés científico de los iones de elementos tipo hierro (Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co y Ni).
2. Estudiar las incertidumbres asociadas a los datos atómicos.
3. Estudiar el espectro de emisión del Sc II y el Cr II: los mecanismos de excitación de las líneas de emisión y el uso de estos espectros en diagnósticos de condiciones físicas, tales como; densidad electrónica, temperatura y campo de radiación.
4. Calcular las abundancias de estos elementos en el filamento de estroncio en η Carinae.

1.2. Átomos 3d: Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co y Ni.

Los átomos *Escandio* (Sc), *Titanio* (Ti), *Vanadio* (V), *Cromo* (Cr), *Manganeso* (Mn), *Hierro* (Fe), *Cobalto* (Co), *Níquel* (Ni) y *Cobre* (Cu) (en orden creciente del

número atómico en la tabla periódica) conforman el llamado grupo hierro o metales de transición 3d de la tabla periódica.

El *escandio* con su configuración electrónica $[Ar]3d^14s^2$, presenta en su subcapa 3d sólo un electrón con el cual podríamos decir, comienza el llenado de la subcapa 3d, haciendo del Sc el primero de los metales de transición 3d, mientras que el Cu con su configuración electrónica $[Ar]3d^{10}4s^1$, ha llenado completamente la subcapa 3d llevándolo a ser el último de los metales de transición 3d en la tabla periódica.

Los átomos 3d se caracterizan por presentar propiedades químicas y potenciales de ionización bastante similares.

Los electrones de valencia de la capa 3d son los responsables de las excelentes propiedades magnéticas y electrónicas de los metales de transición 3d y sus compuestos, [6].

1.2.1. Sistemas Multielectrónicos

En general, el Hamiltoniano de un sistema multi-electrónico como el de los metales de transición 3d, puede ser escrito como

$$H = \sum_i (H_{c,i} + H_{Nucl,i} + H_{SO,i}) + \sum_{k \neq i} H_{Coul,ik}, \quad (1.1)$$

donde $H_{c,i}$ contiene el operador de energía cinética referente al electrón i , $H_{Nucl,i}$ se refiere a la interacción coulombiana del electrón i con el núcleo y el operador *Spin – Orbita* $H_{SO,i}$ da razón de las contribuciones relativistas de los electrones i .

La ecuación de Schrödinger (1.1), se hace irresoluble analíticamente debido al término, $(r_i - r_k)^{-1}$ presente en el Hamiltoniano de las interacciones coulombianas del electrón i con los otros electrones en el núcleo, $\sum_{k \neq i} H_{Coul,ik} = \sum_{k \neq i} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_i - r_k}$. Por lo tanto, se deben utilizar métodos numéricos para resolver el sistema. Por otro lado, para poder obtener una buena descripción de los sistemas multielectrónicos como los metales de transición 3d, fuertes correlaciones entre un gran número de estados tienen que ser tomados en cuenta, [6].

1.2.2. Métodos numéricos y teóricos.

En general, la aproximación básica para la descripción de átomos multi-electrónicos es la aproximación de campo medio basado sobre el modelo de partícula independiente, en esta aproximación se asume que todas las partículas se están moviendo en el campo generado por todas las otras partículas, este concepto es usado en el método Hartree-Fock (HF) para el cálculo de las funciones de onda en el modelo de partícula independiente, [7].

Otros métodos basados sobre el caracter de muchos cuerpos, tales como; la teoría de perturbaciones de muchos cuerpos y métodos de multi-configuración describen los efectos de correlación entre los estados del sistema de todos los átomos. Sin embargo, esta aproximación funciona mejor en átomos de capa cerrada (átomos con sus orbitales llenos), ya que el número de términos que deben ser incluidos para el modelamiento de los átomos de capa abierta (con vacancias en sus orbitales) suele ser muy grande.

Un método bastante usado para el calculo de los procesos de fotoionización y excitación por colisiones electrónicas, es la teoría *R-matrix* [8]. Por ejemplo, cálculos hechos con este método han sido usados en el proyecto *IRON PROJECT* [9] para calcular secciones eficaces para el análisis de plasmas y datos astrofísicos [10].

1.2.3. Efectos de correlación

Los efectos de correlación son descritos en términos de la interacción de la configuración (IC), la cual es introducida por las integrales generalizadas de Slater[11]. Para cualquier proceso de colisión los procesos de correlación deben ser tomados en cuenta para el estado base, el estado final y para posibles estados intermedios.

1.3. Excitación 3p

En la Figura 1.1, se muestra el espectro experimental de los elementos 3d. Del Mn al Ni los espectros son dominados por fuertes anchos de resonancia, frecuentemente llamada la 'Gran resonancia' de los elementos 3d, estos son debidos a excitaciones $3p \rightarrow 3d$, para el Cu esta resonancia se pierde y el espectro muestra sólo

débiles modulaciones debido a que la capa 3d se encuentra completamente llena, los espectros del Cr y el Mn son bastante diferentes, el espectro del Mn es similar al espectro de los elementos mas pesados porque presenta anchos de resonancia pero también presenta alguna estructura fina que no es observada en los elementos del Fe al Cu, en el espectro del Cr se presentan pronunciadas excitaciones de Rydberg que pueden ser vistas en el espectro de la Figura 1.1, como las tres líneas puntiagudas alrededor de 40 eV. Estas son debidas a excitaciones $3p \rightarrow 4s$ las cuales son solo posibles para el Cr como un resultado de su naturaleza de subcapa 4s semi-llena.

Los elementos del llamado grupo hierro son divididos en tres grupos según sus características y posición en la tabla periódica. Así tenemos; a los elementos tempranos formados por *Escandio Titanio* y *Vanadio* y, los tardíos formados por *Hierro, Cobalto, Niquel* y *Cobre*. El *Cromo* y el *Manganeso* forman un grupo intermedio, [12].

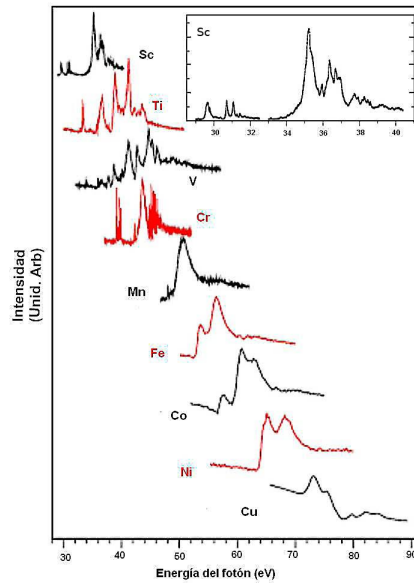


Figura 1.1: Espectro experimental de los metales 3d en la región de excitaciones 3p-3d. Cu [12], Sc [13], Cr [14], Fe, Co y Ni [15]

1.3.1. Los elementos tempranos (Sc, Ti, V)

1. El Sc con el estado base $4s^2 3d^2 D$ es el mas simple de los elementos 3d.

2. El estado base del Sc puede ser descrito por el spin de los electrones 3p y 3d como $(\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow)_{3p} \uparrow_{3d}$; los electrones con spin-arriba \uparrow y spin-abajo \downarrow pueden ser excitados en los orbitales desocupados 3d resultando en un singlete 1L y un triplete 3L , esta excitación también es posible para el Ti y el V pero con la capa 3d un poco más llena.
3. La dominante resonancia del Sc alrededor de 34-38 eV observada en el parte superior y a la derecha de la Figura 1.1 es debida a la fuerte interacción de la configuración de $3p^5 3d^2 4p^2$ y $3p^5 3d 4s^2 4d$ con $3p^5 3d^2 4s^2$ [16], estas interacciones vienen de la cercana degeneración de los orbitales 3d y 4s, la cual es más pronunciada para los elementos 3d tempranos que los tardíos.
4. El espectro del Ti y el V es similar al del Sc, aunque los cálculos son mas difíciles de realizar para los primeros, debido al incremento de electrones en la capa 3d, [17].
5. El V es probablemente el átomo mas complejo, por lo tanto los datos teóricos pueden dar sólo una descripción cualitativa del espectro de foto-absorción $3p \rightarrow 3d$.

1.3.2. El Cromo (Cr) y el Manganeso (Mn)

1. El Cr y el Mn son los átomos mejor investigados teórica y experimentalmente en la fase de gas, [18].
2. Estudios de iones libres de Cr y Mn han sido reportados en [18] y, experimentos de foto-ionización de átomos de Cr excitados por laser han sido realizados, [19].
3. En el estado base del Cr $3d^5 4s^1 S_3$ todos los orbitales $3d\uparrow$ están ocupados, así los electrones 3p pueden ser excitados solo en los orbitales $3d\downarrow$.

1.3.3. Los elementos tardíos (Fe, Co, Ni y Cu)

1. El espectro de foto-absorción de los elementos tardíos son todos bastante similares, todos presentan algun ancho de resonancia con muy poca estructura fina y sin ninguna excitación Rydberg.

2. El spin de los electrones 3p y 3d en el estado base son dados por $(\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow)_{3p}(\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow)_{3d}$, en contraste a los elementos tempranos sólo los electrones con spin hacia abajo $\downarrow 3p$ pueden ser excitados en los orbitales desocupados 3d, porque los orbitales $3d\uparrow$ están completamente llenos.
3. En contraste a los elementos tempranos con su fuerte *interacción de configuración*, los elementos tardíos pueden ser descritos con una *simple interacción de configuración*; en calculos con una *simple interacción de configuración* sólo las configuraciones $3p^6 3d^6 4s^2$ y $3p^5 3d^7 4s^2$ tienen que ser incluidas para el estado inicial e intermedio respectivamente, mientras que para calculos con *interacción de configuración* las configuraciones $3d^6 4s^2$, $3d^7 4s$ y $3d^8$ para el estado base y $3p^5 3d^7 4s^2$, $3p^5 3d^8 4s$ y $3p^5 3d^9$ para el estado final deben ser usadas, esto es debido a que la capa 3d de estos elementos se encuentra casi completamente llena.

En todos los elementos del grupo hierro, los diferentes mecanismos de excitación, así como el decaimiento espontáneo, están gobernados por el gran solapamiento de las funciones de onda 3p y 3d, por lo tanto para un análisis cuantitativo es necesario tomar en cuenta que los acoplamientos de la subcapa 3d tienen un gran número de estados discretos que pueden interactuar, con un correspondiente gran número de estados del continuo.

En particular, para los elementos tempranos donde los orbitales 3d y 4s están degenerados en energía, debe ser tomada en cuenta una fuerte interacción de la configuración.

Para este trabajo, los datos atómicos como probabilidades de transición y niveles de energía de los sistemas *escandio* y *cromo* simplemente ionizados (Sc II, Cr II), fueron calculados por Bautista utilizando el código de estructura atómica AUTOSTRUCTURE [20], [21]. Este código esta basado en el potencial central de Thomas-Fermi-Dirac. La representación de un sistema tan complejo como por ejemplo el Sc II, requiere que muchas configuraciones sean tomadas en cuenta, por lo tanto estas deben ser seleccionadas cuidadosamente tomando en cuenta todas las configuraciones fuertemente acopladas, sin exceder los recursos computacionales disponibles.

1.4. Aplicaciones del estudio de los elementos del grupo hierro

Con el fin de mostrar una de las grandes razones por la cual es importante el estudio de los elementos del grupo hierro, en el presente trabajo se dedica esta pequeña sección a discutir un poco la gran aplicabilidad que presentan estos elementos en la industria.

Las propiedades magnéticas de los metales de transición 3d son las responsables de que estos elementos sean muy utilizados en las tecnologías de almacenamiento de datos. El descubrimiento de la *Gran Resistencia Magnética* (GRM) de estos elementos, la cual puede ser explicada mediante el acoplamiento magnético en películas ultra delgadas de materiales ferromagnéticos y anti-ferromagnéticos como el Cr y el Mn, es el punto clave en el desarrollo de los modernos cabezales de lectura, necesarios para el almacenamiento en los discos duros de la alta densidad de datos generados hoy día, [22].

Desde alrededor de los años 1930 varios grupos alrededor del mundo han trabajado en la investigación

Capítulo 2

Procesos de excitación del escandio y el cromo.

2.1. Gas ionizado por colisión

2.1.1. Equilibrio termodinámico

Es frecuente relacionar $n_j(X^{(r)})$ o simplemente n_j , la densidad de partículas de átomos del elemento X , r -veces ionizado y en un estado j particular, a su valor en equilibrio termodinámico. Si entonces consideramos un elemento X el cual es r -veces ionizado, las poblaciones de dos niveles en el mismo ion o átomo son dadas por la ecuación de *Boltzmann*

$$\frac{n_j(X^{(r)})}{n_k(X^{(r)})} = \frac{g_{rj}}{g_{rk}} e^{-(E_{rj}-E_{rk})/kT}, \quad (2.1)$$

donde E_{rj} y g_{rj} son la energía y peso estadístico, del nivel j en el estado de ionización r , respectivamente.

Si ahora sumamos sobre todo el índice k en el denominador de (2.1), obtenemos la fracción de átomos del elemento $X^{(r)}$ que son excitados al nivel j

$$\frac{n_j(X^{(r)})}{n(X^{(r)})} = \frac{g_{rj}}{f_r} e^{-E_{rj}/kT}, \quad (2.2)$$

con $f_r = \sum_k g_{rk} e^{-E_{rk}/kT}$.

Mientras que la distribución de átomos del elemento X sobre los diferentes estados de ionización en equilibrio termodinámico, es dada por la ecuación de *Saha*

$$\frac{n(X^{(r+1)n_e})}{n(X^{(r)})} = 2 \frac{g_{r+1,1}}{g_{r,1}} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\Phi_r/kT}, \quad (2.3)$$

donde el sub-índice 1 identifica al nivel base, n_e es la densidad electrónica, g es el peso estadístico, m_e es la masa de electrón, $k = 8,617 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$ es la constante de *Boltzmann*, T es la temperatura (en grados Kelvins), $h = 4,136 \times 10^{15} \text{ eVs}$ es la constante de *Planck* y $\Phi_r = E_{r+1,1} - E_{r,1}$ es la energía requerida para ionizar el ion $X^{(r)}$ desde el nivel base, [24].

2.1.2. Los coeficientes de Einstein

La ley de *Kirchoff*

$$j_\nu = k_\nu B_\nu(T), \quad (2.4)$$

donde $B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$, es la función de radiación de Planck. Relaciona los procesos de emisión y absorción para un gas en equilibrio termodinámico. Los coeficientes de Einstein se derivan de manera sencilla para un sistema cuántico con dos niveles de energía: un nivel inferior de energía E_1 y peso estadístico g_1 y uno superior con energía E_2 y peso estadístico g_2 , [24].

Las transiciones del nivel inferior al superior ocurren mediante la absorción de un fotón de energía $h\nu = E_2 - E_1$, y las transiciones del nivel superior al inferior ocurren mediante la emisión de un fotón de la misma energía, Figura 2.1. Los procesos que se da en este sistema son:

Figura 2.1: Sistema cuántico de dos niveles, ilustrando el proceso de absorción (izquierda) y emisión (derecha).

1. **Emisión espontanea:** es caracterizada por el coeficiente A_{21} , que mide la probabilidad de dicha transición por unidad de tiempo (A tiene unidades de s^{-1}).
2. **Absorción:** depende del flujo incidente de radiación, dado por J_ν (en unidades de $\text{erg cm}^{-2} s^{-1} (\text{Hz})^{-1}$) si la absorción es isotrópica. La diferencia de energías entre los dos niveles no está plenamente definida debido al principio de incertidumbre, $\Delta E \Delta t \geq \hbar$, siendo Δt una combinación de los tiempos de vida de cada

nivel. Por ello se emplea una función $\phi(\nu)$ que describe la probabilidad de absorber fotones de una frecuencia dada, $\phi(\nu)$ es una función normalizada con un máximo pronunciado en ν_0 y de ancho $\Delta E/\hbar$. La probabilidad de la transición por absorción, queda en términos del coeficiente B_{12} como $B_{12}J$ donde

$$J = \int_0^\infty J_\nu \phi_\nu d\nu. \quad (2.5)$$

3. **Emisión estimulada:** depende del flujo incidente de radiación de forma análoga al proceso de absorción, por lo que la probabilidad de la transición queda expresada en términos de un coeficiente de la misma forma, $B_{21}J$.

2.1.3. Excitación

Consideremos nuevamente que n_j es la densidad de partículas en el nivel j , caracterizado por todos los estados cuánticos g_j , con más o menos la misma energía E_j . Bajo condiciones estables, n_j es invariante en el tiempo y el número de transiciones (por segundo por cm^3) entre un nivel superior j y un nivel inferior k es igual al número de transiciones entre un nivel inferior k y el superior j por lo tanto, se denota a $(R_{jk})_Y$ como la probabilidad por unidad de tiempo de que una partícula en el nivel j experimente una transición al nivel k como un resultado del proceso Y . Entonces, la llamada ecuación del equilibrio estadístico vendrá dada por

$$\frac{dn_j}{dt} = -n_j \sum_Y \sum_k (R_{jk})_Y + \sum_Y \sum_k n_k \times (R_{kj})_Y = 0, \quad (2.6)$$

donde la suma es extendida sobre todos los procesos Y y sobre todos los otros niveles k .

Pero la forma específica de (2.6) depende del tipo de excitación, desexcitación, ionización y recombinación que este siendo considerada, [24].

2.1.4. Excitación colisional

El medio interestelar está muy lejos de encontrarse en equilibrio termodinámico, y por lo tanto las poblaciones de los niveles de energía atómicos y moleculares no corresponden a sus valores en equilibrio termodinámico, el cual es necesario para simplificar el análisis de las diferentes transiciones que ocurren entre estos niveles.

Sin embargo, en presencia de excitación colisional, las condiciones en el medio interestelar (temperatura y densidad electrónica) son aproximadas a las condiciones que existirían, si éste se encontrara en equilibrio termodinámico.

La tasa de excitación o desexcitación por colisión con electrones $(R_{jk})_{col/n_e}$, es definida como C_{jk} , mientras que la tasa para procesos radiativos $(R_{jk})_{fot}$ es definida en términos de los tres coeficientes de Einstein. La ecuación (2.6), da para excitación colisional

$$n_j \left[\sum_k (n_e C_{jk} + B_{jk} U_\nu) + \sum_{k < j} A_{jk} \right] = \sum_k n_k (n_e C_{kj} + B_{kj} U_\nu) + \sum_{k > j} n_k A_{kj}, \quad (2.7)$$

donde U_ν , la densidad de energía del campo de radiación (en unidades de $\text{erg cm}^{-3} (\text{Hz})^{-1}$), esta relacionada con la intensidad de la radiación I_ν , por

$$U_\nu = \frac{1}{c} \int I_\nu dw, \quad (2.8)$$

donde la integral es extendida sobre el ángulo solido w . Esta es la energía por unidad de volumen y rango espectral contenida en el campo de radiación, en unidades de $\text{erg cm}^{-3} \text{ Hz}^{-1}$. Si nosotros asumimos que el campo de radiación es la *radiación de un cuerpo negro* en la temperatura T_R , diluido por un factor w , la ecuacion (2.8) y la función de radiación de Planck $B_\nu(T)$, dan como resultado

$$\frac{c^3 U_\nu}{8\pi h \nu^3} = \frac{w}{e^{(h\nu/kT_R)-1}}, \quad (2.9)$$

con w el llamado factor de dilución, [24].

2.2. Bombeo de fotones

Con la absorción de un fotón, un electrón en un átomo alcanza un nivel exitado, el cual usualmente abandona para regresar en decaimientos sucesivos en "cascada" a través de una variedad de estados, a niveles que no podrían ser poblados por transiciones radiativas ascendentes, desde el estado base.

Esta excitación indirecta de los niveles de capa interna por la absorción de fotones es conocida como, *bombeo de fotones* (*photon pumping*). En esta situación todos los

niveles de energía relevantes pueden ser divididos en dos grupos: los niveles superiores y los niveles inferiores. Los niveles superiores son aquellos desde los cuales las transiciones radiativas descienden a un nivel más bajo, pero este proceso ocurre tan rápido que la fracción de partículas en los niveles superiores es despreciable. Bajo estas condiciones, solo los valores de n_j para los niveles más bajos necesitan ser considerados en la ecuación (2.6), y los niveles superiores pueden ser tratados como canales, por los cuales una partícula inicialmente en el estado j del grupo mas bajo puede ser excitada a otro nivel k del mismo grupo, a través de la absorción de un fotón en el nivel j , seguido por decaimiento radiativo en "cascada" al nivel k , [24].

Un modelo que toma en cuenta, excitación colisional y por fluorescencia de los iones [Ni II] y [Fe II] es dado en [25] y [26]. En este modelo se considera fluorescencia, asumiendo que los iones pueden ser excitados por procesos de bombeo de fotones o desexcitación por emisión inducida. Entonces, el coeficiente R_{ij} para estos procesos es

$$R_{ij} = C_{ij} + A_{ij} + U_\nu B_{ij} \quad (E_i > E_j), \quad (2.10)$$

o

$$R_{ij} = C_{ij} + U_\nu B_{ij} \quad (E_i < E_j), \quad (2.11)$$

donde C_{ij} es la tasa de excitación o desexcitación colisional, A_{ij} es la tasa de decaimiento espontáneo, B_{ij} es el coeficiente de absorción de Einstein y U_ν es la densidad de radiación.

El modelo de tres niveles del Ni II de la Figura 2.2, supone excitación por fluorescencia del nivel $a^2F_{7/2}$ que da cuenta de la línea $\lambda 7378$, producida por una transición prohibida desde el estado base del ion $a^2D_{5/2}$ (nivel 1) al estado excitado $z^2D_{5/2}^0$ (nivel 3), seguido por decaimiento espontaneo al nivel $a^2F_{7/2}$ (nivel 2).

Figura 2.2: Modelo de tres niveles del Ni II, para ilustrar la emisión de [Ni II] $\lambda 7378$, debido a excitación por fluorescencia del nivel $a^2F_{7/2}$.

2.3. Líneas permitidas y prohibidas

Los conceptos de líneas permitidas y prohibidas surgen de considerar la interacción de un átomo con una onda electromagnética. En esta interacción, los campos y potenciales asociados con la onda electromagnética vienen dados por el vector potencial $\vec{A}(\vec{r}, t)$, el campo eléctrico $\vec{E}(\vec{r}, t)$ y el campo magnético $\vec{B}(\vec{r}, t)$ tal que;

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = A_0 e^{i(ky - wt)} \hat{e}_z + A_0^* e^{-i(ky - wt)} \hat{e}_z, \quad (2.12)$$

donde A_0 es una constante compleja y k es el modulo del vector de la onda electromagnética de frecuencia w . Los campos eléctrico y magnético, vienen dados por

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{r}, t), \quad (2.13)$$

y

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t). \quad (2.14)$$

Resolviendo las ecuaciones (2.13), (2.14) y escogiendo

$$iwA_0 = \frac{\varepsilon}{2} \quad (2.15a)$$

$$ikA_0 = \frac{\beta}{2} \quad (2.15b)$$

tal que ε y β sean cantidades reales, es decir;

$$\frac{\varepsilon}{\beta} = \frac{w}{k} = c,$$

tendremos

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \varepsilon \cos(ky - wt) \hat{e}_z, \quad (2.16)$$

y

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \beta \cos(ky - wt) \hat{e}_x. \quad (2.17)$$

Las cuales definen el vector de Poynting \vec{S} , asociado con esta onda electromagnética

$$\vec{S} \propto \vec{E} \times \vec{B}. \quad (2.18)$$

CAPÍTULO 2. PROCESOS DE EXCITACIÓN DEL ESCANDIO Y EL CROMO.15

Esta onda interactúa con un electrón atómico (de masa m y carga q) situado a una distancia r desde un origen 0, y ligado a este punto por un potencial central $V(\vec{R})$ (creado por el núcleo atómico el cual, se asume como fijo). Cuyo Hamiltoniano mecánico-cuántico es:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}[\hat{P} - q\hat{A}(\hat{R}, t)]^2 + V(\hat{R}) - \frac{q}{m}\hat{S} \cdot \hat{B}(\hat{R}, t), \quad (2.19)$$

donde \hat{P} es el operador momento del electrón, $\hat{S} \cdot \hat{B}$ representa la interacción del momento magnético de spin del electrón con el campo magnético oscilante y $\hat{A}(\hat{R}, t)$ y $\hat{B}(\hat{R}, t)$ son los operadores obtenidos de remplazar en las ecuaciones clásicas (2.12) y (2.14), x, y, z por los observables X, Y, Z . Resolviendo la ecuación (2.19) se tiene que:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{R}) - \frac{q}{m}\hat{P} \cdot \hat{A}(\hat{R}, t) - \frac{q}{m}\hat{S} \cdot \hat{B}(\hat{R}, t) + \frac{q^2}{2m}[\hat{A}(\hat{R}, t)]^2. \quad (2.20)$$

De las relaciones (2.15a) y (2.15b), vemos que en la ecuación (2.20), A_0^2 es mucho más pequeño que A_0 y por lo tanto, es posible despreciar el último término, y nos queda que

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{R}) \quad (2.21)$$

$$\widehat{W}(t) = \widehat{W}_I(t) + \widehat{W}_{II}(t), \quad (2.22)$$

donde

$$\widehat{W}_I(t) = -\frac{q}{m}\hat{P} \cdot \hat{A}(\hat{R}, t) \quad (2.23)$$

$$\widehat{W}_{II}(t) = -\frac{q}{m}\hat{S} \cdot \hat{B}(\hat{R}, t). \quad (2.24)$$

Desarrollando la ecuación (2.23) se encuentra que

$$\widehat{W}_{DE}(t) = \frac{q\varepsilon}{mw}\hat{P}_z \sin(wt), \quad (2.25)$$

donde se ha definido $\widehat{W}_I(t) = \widehat{W}_{DE}(t)$. Esta ecuación corresponde al Hamiltoniano del *dipolo eléctrico*.

Las transiciones de *dipolo eléctrico* (también llamadas *transiciones permitidas*) son las más intensas, y la mayoría de las líneas emitidas en el óptico por átomos corresponden a este tipo de transición. Los elementos de matriz del Hamiltoniano del *dipolo*

CAPÍTULO 2. PROCESOS DE EXCITACIÓN DEL ESCANDIO Y EL CROMO.16
eléctrico, son tales que

$$\langle \varphi_f | \widehat{W}_{DE} | \varphi_i \rangle = iq \frac{w_{fi}}{w} \varepsilon \sin(wt) \langle \varphi_f | \widehat{Z} | \varphi_i \rangle, \quad (2.26)$$

donde $|\varphi_i\rangle$ y $|\varphi_f\rangle$, los estados inicial y final, son autoestados de \widehat{H} .

Las reglas de selección son determinadas a partir de (2.26), cuya solución en armónicos esféricos, da las reglas de selección: $\Delta J=0, \pm 1$; $\Delta l=\pm 1$ y $\Delta m_J=0, \pm 1$. Entonces, el operador \widehat{W}_{DE} es un operador impar y sólo puede conectar estados de diferente paridad.

Si ahora escribimos (2.22) como:

$$\widehat{W}(t) = \widehat{W}_I(t) + \widehat{W}_{II}(t) = \widehat{W}_{DE}(t) + [\widehat{W}_I(t) - \widehat{W}_{DE}(t)] + \widehat{W}_{II}(t), \quad (2.27)$$

encontramos que,

$$\widehat{W}_I(t) - \widehat{W}_{DE}(t) = -\frac{q}{2m} \widehat{L}_x \beta \cos(wt) - \frac{q}{2m} \beta \cos(wt) [\widehat{Y} \widehat{P}_z + \widehat{Z} \widehat{P}_y], \quad (2.28)$$

y

$$\widehat{W}_{II}(t) = -\frac{q}{m} \widehat{S}_x \beta \cos(wt), \quad (2.29)$$

sumando las ecuaciones (2.28) y (2.29) y reagrupando términos, nos queda que

$$\widehat{W}_{DM} = -\frac{q}{2m} (\widehat{L}_x + 2\widehat{S}_x) \beta \cos(wt) \quad (2.30)$$

y

$$\widehat{W}_{QE} = -\frac{q}{2m} (\widehat{Y} \widehat{P}_z + \widehat{Z} \widehat{P}_y) \beta \cos(wt), \quad (2.31)$$

donde \widehat{W}_{DM} y \widehat{W}_{QE} son el Hamiltoniano de *dipolo magnético* y de *cuadrupolo eléctrico*, respectivamente.

Las transiciones de *dipolo magnético* representan la interacción del momento magnético total del electrón con el campo magnético oscilante de la onda. Las reglas de selección para esta transición son: $\Delta l=0$; $\Delta J=\pm 1, 0$ y $\Delta m_J=\pm 1, 0$. Igual que en el caso del *dipolo eléctrico*, aquí las reglas de selección son derivadas de los respectivos elementos de matriz. Las transiciones de *cuadrupolo eléctrico* rigen la interacción del momento cuadrupolar eléctrico del átomo con el gradiente de campo

eléctrico de la onda incidente. Las reglas de selección son: $\Delta l=0, \pm 2$ y $\Delta m=0, \pm 1, \pm 2$.

A diferencia del operador \widehat{W}_{DE} , los operadores W_{DM} y W_{QE} son operadores pares y por lo tanto sólo pueden conectar estados de la misma paridad, lo cual produce las llamadas *transiciones prohibidas*, [27].

Hasta aquí hemos hablado de la parte teórica y mecánico-cuántica que rige el estudio de nuestro trabajo, ahora dedicaremos una subsección a la parte clásica e íntimamente relacionadas con los datos observacionales disponibles para este trabajo.

2.3.1. Extinción interestelar

La extinción interestelar se refiere a la reducción en la cantidad de luz que proviene de una fuente brillante (estrella) cuando esta pasa a través del polvo interestelar, y es dada por

$$I_{\lambda} = I_{\lambda_0} e^{-\tau_{\lambda}}, \quad (2.32)$$

donde I_{λ_0} es la intensidad que veríamos en ausencia del polvo interestelar, I_{λ} es la intensidad afectada por el polvo y τ_{λ} es la profundidad óptica en la longitud de onda observada. La cual viene dada por

$$\tau_{\lambda} = \frac{1}{1,086} A_{\lambda}, \quad (2.33)$$

donde A_{λ} es la magnitud de extinción en la respectiva longitud de onda. Para este trabajo se usó la curva de extinción interestelar calculada en [28], para el óptico y cercano infrarrojo, cuyo rango espectral en micrómetros está entre $0,3 \mu m^{-1} \leq x \leq 1,1 \mu m^{-1}$, con $x \equiv 1/\lambda$. Aunque probablemente la curva de extinción sea otra dada la abundancia de silicatos en el filamento de estroncio pero, esta curva es difícil de encontrar debido a la alta dispersión ultravioleta en las líneas, es por eso que escogemos una curva de extinción estandar.

La ley de extinción interestelar usada es

$$\langle A_{\lambda}/A(V) \rangle = a(x) + \frac{b(x)}{R_V}, \quad (2.34)$$

con extinción general $R_V=3,1$. En el presente trabajo, usamos una magnitud de extinción visual $A_V=2,1\pm0,9$ calculada a partir de dos transiciones de [Ni II] bien conocidas, provenientes del mismo nivel superior, [29]. En la ecuación (2.34), las cantidades $a(x)$ y $b(x)$ son polinomios, que vienen dados en terminos de $y = (x - 1, 82)$.

2.3.2. Diagnosticos de los parámetros físicos

En general, la temperatura en una nebulosa puede ser determinada a partir de las mediciones de un par particular de líneas de emisión, las cuales deben ser emitidas por un ion desde dos niveles con energías de excitación considerablemente diferentes. Mientras que la densidad puede ser determinada a partir de otro par de líneas emitidas por un ion desde dos niveles con aproximadamente la misma energía pero con diferentes probabilidades de la transición.

Sin embargo, bajo condiciones de excitación colisional y por fluorescencia, el diagnostico espectral se hace más difícil, ya que la mayoría de las líneas se hacen simultaneamente sensibles a la temperatura, densidad electrónica y factor de dilución. Por lo tanto, para poder obtener resultados confiables, todas las líneas deben ser estudiadas, [30].

Figura 2.3: Diagrama de niveles de energía de los terminos mas bajos del [O II] y el [N II]. Las líneas de emisión en la región óptica son indicadas por lineas cortadas y las líneas solidas, en el infrarojo y ultravioleta.

Como un ejemplo para explicar el diagnóstico de la temperatura en la forma clásica, consideremos los iones [O III] y [N II], cuyas líneas de emisión provienen de dos niveles superiores con energías de excitación diferentes.

En el diagrama de niveles de energía Figura 2.3, se puede ver que la línea $\lambda 4363$ del [O III] proviene del nivel superior 1S , mientras que las líneas $\lambda 4959$ y $\lambda 5007$ provienen de un nivel mas bajo 1D . Cada emisión de un fotón en $\lambda 4363$ resulta en la población del nivel 1D , la cual es seguida por la emisión de un fotón en $\lambda 4959$ o en $\lambda 5007$, [30].

CAPÍTULO 2. PROCESOS DE EXCITACIÓN DEL ESCANDIO Y EL CROMO.19

El cociente de las líneas de emisión para el [O III] es dado por

$$\frac{I_{\lambda 4959} + I_{\lambda 5007}}{I_{\lambda 4363}} = \frac{\Omega(^3P, ^1D)}{\Omega(^3P, ^1S)} \frac{(A_{1S, ^1D} + A_{1S, ^3P})}{A_{1S, ^1D}} \frac{\bar{\nu}(^3P, ^1D)}{\nu(^1S, ^1D)} e^{\Delta E/kT}, \quad (2.35)$$

donde,

$$\bar{\nu}(^3P, ^1D) = \frac{A_{3P_2, ^1D_2} \nu(\lambda 5007) + A_{3P_1, ^1D_2} \nu(\lambda 4959)}{A_{3P_2, ^1D_2} + A_{3P_1, ^1D_2}}, \quad (2.36)$$

y Ω es conocido como la fuerza de la colisión, el cual es una función que depende de la velocidad del electrón o (energía), y ΔE es la diferencia de energía entre los niveles 1D_2 y 1S_0 .

La solución numérica de la ecuación (2.35) es

$$\frac{I_{\lambda 4959} + I_{\lambda 5007}}{I_{\lambda 4363}} = \frac{8,32 e^{(3,29 \times 10^4/T)}}{1 + 4,5 \times 10^{-4} \frac{n_e}{T^{1/2}}}, \quad (2.37)$$

y para el [N II]

$$\frac{I_{\lambda 6548} + I_{\lambda 6583}}{I_{\lambda 5755}} = \frac{7,53 e^{(2,50 \times 10^4/T)}}{1 + 2,7 \times 10^{-3} \frac{n_e}{T^{1/2}}}, \quad (2.38)$$

las cuales claramente dependen de la temperatura T, en ambas ecuaciones la densidad electrónica n_e debe ser conocida.

Un buen ejemplo de líneas que pueden ser usadas para diagnosticar la *densidad electrónica* son, $\lambda 3729$ y $\lambda 3726$ del [O II] y $\lambda 6716$ y $\lambda 6731$ del [S II]. Cuyos cocientes de línea dependen de las poblaciones de los niveles superiores y de las respectivas probabilidades de la transición. Por ejemplo, para el [O II] tendremos

$$\frac{I_{\lambda 3729}}{I_{\lambda 3726}} = \frac{n_{2D_{5/2}}}{n_{2D_{3/2}}} \frac{A_{\lambda 3729}}{A_{\lambda 3726}}, \quad (2.39)$$

y para el [S II],

$$\frac{I_{\lambda 6731}}{I_{\lambda 6716}} = \frac{n_{2D_{3/2}}}{n_{2D_{5/2}}} \frac{A_{\lambda 6731}}{A_{\lambda 6716}}. \quad (2.40)$$

La solución completa de las ecuaciones del equilibrio estadístico (2.6), la cual toma en cuenta todas las transiciones, incluyendo excitación a los niveles 2P con subsecuentes decaimientos en cascada, da la variación explícita de los cocientes de

intensidad del [O II] y del [S II] con la densidad electrónica. Por otro lado, bajo condiciones de excitación por fluorescencia, los coeficientes de emisión de las líneas, no solo dependen de la temperatura y la densidad electrónica, sino también de la intensidad del campo de radiación.

2.3.3. Abundancia de los elementos en una nebulosa

Las abundancias de los iones observados en una nebulosa, pueden ser determinadas de las mediciones de las intensidades de sus líneas de emisión.

Las intensidades de estas líneas, dependen de la temperatura y de la densidad electrónica, mediante la ecuación

$$I_{\lambda} = \int N_{\chi} N_e \epsilon_{\lambda}(T) ds, \quad (2.41)$$

donde la integral es sobre la línea de visión a través de la nebulosa, $\epsilon_{\lambda}(T)$ es la emisividad de la línea y depende de la temperatura T, N_{χ} y N_e son las densidades del ion responsables de la emisión y la densidad electrónica, respectivamente.

Capítulo 3

Espectros del escandio y el cromo.

3.1. Datos Teóricos

Para el análisis del espectro del [Sc II] se utilizó un modelo que incluyó 30 niveles, mientras que para el [Cr II], se utilizó un modelo con 163 niveles, donde ambos incluyeron excitación colisional y por fluorescencia.

Modelamos el espectro del [Cr II] y del [Sc II] utilizando el código *specf* en *fortran* [31]. Los datos atómicos necesarios, y en particular las probabilidades de la transición o valores A_{ij} en (s^{-1}) fueron calculados por Bautista, [32]. Para calcular el espectro de estos dos sistemas, utilizamos un archivo con *niveles de energía* y uno con *probabilidades de la transición*, los datos necesarios para construir los archivos para el escandio fueron tomados inicialmente de la base de datos de espectros atómicos en el *National Institute of Standards and Technology* (NIST) [33].

Cada uno de estos archivos comienza con una cabecera que consiste de **seis enteros**: el tipo de dato, el tipo de tasa, una bandera, el número de reales, de enteros y de caracteres en el archivo. El tipo de dato se refiere, a la fórmula que será usada para calcular la tasa. Mientras que el tipo de tasa se refiere a los procesos físicos a los cuales los datos en el archivo son relevantes, tal configuración fué desarrollada en [34].

Entonces, el archivo para los *niveles de energía* tiene la configuración de la Tabla 3.1. En esta tabla, el tipo de dato y tipo de tasa son 6 y 13, respectivamente, 0 es la bandera e indica que cada línea del archivo finaliza con el signo % (cuando la bandera

es 1, indica que la línea es continuación de la siguiente), 4 indica el número de reales, 6 el número de enteros y 5 o 3 el número de caracteres que varía según la configuración electrónica. La columna **7** tiene las energías (en electrón-voltios), de los niveles de la columna **15** (ordenadas por termino), la columna **8** contiene el momento angular total ($2J + 1$), la columna **9** es la energía de ionización, la columna **10** es el valor n de la configuración electrónica, la columna **11** contiene el momento de spin ($2S + 1$), la columna **12** es el momento angular L , la columna **13** es el número atómico Z , la columna **14** representa los niveles de energía, la columna **15** el índice escogido para identificar el ion y la columna **16** la configuración electrónica.

Niveles de energía del Sc II:

6	13	0	4	6	5	0.000000E+00	3.	0.12800E+02	4	3	2	21	1	415	3d.4s	%
6	13	0	4	6	5	0.008396E+00	5.	0.12800E+02	4	3	2	21	2	415	3d.4s	%
6	13	0	4	6	5	0.022039E+00	7.	0.12800E+02	4	3	2	21	3	415	3d.4s	%
6	13	0	4	6	5	0.315038E+00	5.	0.12800E+02	4	1	2	21	4	415	3d.4s	%
6	13	0	4	6	3	0.595480E+00	5.	0.12800E+02	3	3	3	21	5	415	3d2	%
6	13	0	4	6									415.....		%
6	13	0	4	6									415.....		%
6	13	0	4	6									415.....		%
6	13	0	4	6	5	6.907824E+00	3.	0.12800E+02	4	1	1	21	30	415	4s.4p	%

Cuadro 3.1: Configuración del archivo que contiene los niveles de energía del ion escandio.

La Tabla 3.2 muestra, el archivo para las *probabilidades de la transición*, el cual es identificado por el número 50 de la primera columna. El tipo de tasa dado por la columna **2**, corresponde a una transición *límite-libre* (las columnas **3**, **4**, **5** y **6** son como las descritas arriba), la columna **7** es la longitud de onda en *Angström*, la columna **8** son los valores gf (g es el peso estadístico y f la fuerza del oscilador, que están relacionados con las probabilidades de la transición), la columna **9** es la probabilidad de la transición (en s^{-1}), correspondiente a la transición del nivel superior (columna **11**) al nivel inferior (columna **10**), las columnas **12** y **13** son el número atómico Z , y el índice del ión, respectivamente.

Probabilidades de la transición del Sc II:

50 4 0 3 4 1	0.188060E+04	0.79E+00	0.500000E+09	4 30 21 415	%
50 4 0 3 4 1	0.223291E+04	0.17E+00	0.780000E+08	8 30 21 415	%
50 4 0 3 4 1	0.227311E+04	0.18E+01	0.770000E+09	9 30 21 415	%
50 4 0 3 4 1	0.324416E+04	0.10E-01	0.220000E+07	1 25 21 415	%
50 4 0 3 4 1	0.325131E+04	0.11E-01	0.230000E+07	2 25 21 415	%

Cuadro 3.2: Configuración del archivo que contiene las *probabilidades de la transición* del ión escandio.

3.2. Probabilidades de la transición $A_{ij}(s^{-1})$ para el escandio ionizado.

Hemos comparado las probabilidades de la transición calculadas en el presente trabajo de las líneas permitidas del escandio, con las reportadas en la base de datos atómicos de NIST, y con los reportados en base de datos de Kurucz [35].

En la parte superior de la Figura 3.1, mostramos el logaritmo de los valores A_{ij} calculados para los primeros treinta niveles contra el logaritmo de los valores A_{ij} de Kurucz y, en la parte inferior mostramos la comparación con las probabilidades de la transición reportadas por NIST.

En la grafica *inferior*, se observa una tendencia lineal con los valores reportados por NIST, excepto en los cuatro puntos que se alejan fuertemente del resto. Estos cuatro puntos corresponden a valores muy altos de la probabilidad de la transición reportados por NIST, Tabla 3.3. Tales valores resultan incoherentes, dado que para las transiciones permitidas los valores A_{ij} son del orden de $10^8 s^{-1}$, probablemente estos altos valores en la probabilidad de la transición de estas líneas, se deban a un error en la base de datos o a un error en la mediciones.

Por otro lado, la comparación entre las probabilidades de la transición del presente y las reportadas por Kurucz se ajustan bastante bien. En este caso las probabilidades de las transiciones **(1-23)**, **(2-23)**, **(2-24)** y **(3-24)** tienen valores consistentes con la teoría y están tanto en Kurucz como en el presente alrededor del mismo orden.

Sin embargo, cierta dispersión esta presente en ambas comparaciones, las cuales probablemente se deban a mezclas de los niveles.

También comparamos para los mismos treinta niveles, los valores A^v (la probabilidad de transición en el sistema de velocidad) y A^l (la probabilidad de transición en el sistema longitud de onda) con los valores de la probabilidades de Kurucz, Figura 3.2.

Los valores A^v y A^l se relacionan mediante la expresión

$$A^v = A^l \frac{gf^v}{gf^l}. \quad (3.1)$$

La correlación observada entre los valores A del presente y Kurucz, muestran un buen ajuste de los datos calculados.

Una buena determinación de las probabilidades de la transición, resulta de gran importancia para el modelamiento del sistema escandio o de cualquier otro sistema, ya que los cocientes de intensidades de las líneas dependen de estos valores, como se ve en las ecuaciones 2.37, 2.38, 2.39 y 2.40 del Capítulo 2.

También graficamos gf^v contra gf^l para todos los niveles calculados, Figura 3.3. Los cuales son equivalentes a los valores A^l y A^v . De esta gráfica vemos que los valores gf o A calculados en el sistema longitud de onda se corresponden bastante bien con aquellos calculados en el sistema velocidad.

Hasta hoy día, muy pocos datos experimentales de las probabilidades de la transición o tiempos de vida existen para el ion escandio, lo cual dificulta la verificación de los datos teóricos. Sin embargo, nuestros datos y los de Kurucz resultan en general bien comparados con los datos disponibles en la base de datos NIST, la cual contiene datos medidos experimentalmente.

Figura 3.1: Probabilidades de transición del *escandio*. *Superior*: Comparación de las probabilidades de transición A_{ij} del presente con Kurucz. *Inferior*: Comparación de las probabilidades de transición A_{ij} del presente con NIST .

Figura 3.2: Comparación entre las probabilidades de transición del *escandio* A^v y A^l en s^{-1} del presente, con las probabilidades de transición A (s^{-1}) de Kurucz.

Figura 3.3: Comparación entre los valores gf^v y gf^l del escandio.

3.3. Probabilidades de transición $A_{ij}(s^{-1})$ para el cromo ionizado.

Estudiamos las incertidumbres asociadas a las probabilidades de la transición calculadas para el cromo como en el caso del escandio, aquí también comparamos los valores A_{ij} del cromo con los reportados en NIST y con los reportados por Kurucz, Figura 3.4.

En las comparaciones tanto con NIST como con Kurucz se observa una alta dispersión en los puntos de las gráficas, lo que nos indica que una alta incertidumbre está presente en el cálculo de estos valores.

Por lo tanto, comparamos los valores A_{ij} con los datos experimentales de las probabilidades de la transición del cromo reportados en [36], Tabla 3.4. Estos datos experimentales fueron obtenidos, a partir de mediciones del *Branching fraction*¹ (BF) con espectroscopía por transformada de fourier y mediciones del tiempo de vida para el nivel superior (τ_i) como

$$A_{ik} = \frac{(BF)_{ik}}{\tau_i}.$$

Las incertidumbres en estas probabilidades de transición, dependen de las incertidumbres en las intensidades y tiempos de vida medidos, [36].

Los datos teóricos ajustan bastante bien con los datos experimentales, Figura 3.5. La recta que mejor ajusta los puntos fue calculada usando mínimos cuadrados, mostrando una pendiente de $\sim 1,04$ y una baja dispersión en los puntos. Sólo en la parte inferior de la recta se observan puntos un poco más dispersos, posiblemente causados por mezclas en las líneas. Adicionalmente, graficamos el logaritmo de gf^l

¹Se refiere a la fracción de partículas que decaen de un nivel superior por algun mecanismo.

contra el logaritmo gf^v para todos los niveles calculados Figura 3.6, cuya relación es dada por la ecuación (3.1).

Figura 3.4: Probabilidades de transición del *cromo*. *Superior*: Comparación de las probabilidades de transición A_{ij} del presente con Kurucz. *Inferior*: Comparación de las probabilidades de transición A_{ij} del presente con NIST.

Figura 3.5: Comparación entre los logaritmos de los valores $A \text{ s}^{-1}$ del cromo del presente, con los reportados por Nilsson, [36], la línea recta muestra el ajuste por mínimos cuadrados.

Figura 3.6: Comparación entre los logaritmos de los valores gf^l y gf^v del cromo.

Niveles		Configuración		Terminos		λ_{lab}	$\log_{10}[A(s^{-1})]$		
Inferior(<i>i</i>)	Superior(<i>j</i>)	<i>i</i>	<i>j</i>	<i>i</i>	<i>j</i>	Å	NIST	Kurucz	Presente
4	15	3d.4s	3d.4p	1D_2	$^1D_2^0$	4246,82	8,111	8,188	8,161
8	15	$3d^2$	3d.4p	1D_2	$^1D_2^0$	6604,60	6,176	6,004	5,953
1	16	3d.4s	3d.4p	3D_1	$^3F_2^0$	3642,78	8,053	8,182	7,994
2	16	3d.4s	3d.4p	3D_2	$^3F_2^0$	3651,79	7,477	7,400	7,633
3	16	3d.4s	3d.4p	3D_3	$^3F_2^0$	3666,53	6,204	5,707	6,577
2	17	3d.4s	3d.4p	3D_2	$^3F_3^0$	3630,74	8,079	8,199	8,007
3	17	3d.4s	3d.4p	3D_3	$^3F_3^0$	3645,31	7,438	7,155	7,668
3	18	3d.4s	3d.4p	3D_3	$^3F_4^0$	3613,83	8,170	8,274	8,178
1	19	3d.4s	3d.4p	3D_1	$^3D_1^0$	3580,93	8,090	8,170	8,061
2	19	3d.4s	3d.4p	3D_2	$^3D_1^0$	3589,63	7,663	7,707	7,700
5	19	$3d^2$	3d.4p	3F_2	$^3D_1^0$	4325,00	7,633	7,634	7,765
8	19	$3d^2$	3d.4p	1D_2	$^3D_1^0$	5890,00	4,881	4,876	5,292
1	20	3d.4s	3d.4p	3D_1	$^3D_2^0$	3567,70	7,544	7,540	7,694
2	20	3d.4s	3d.4p	3D_2	$^3D_2^0$	3576,34	8,025	8,149	7,928
3	20	3d.4s	3d.4p	3D_3	$^3D_2^0$	3590,47	7,462	7,515	7,513
6	20	$3d^2$	3d.4p	3F_3	$^3D_2^0$	4320,73	7,602	7,593	7,735
2	21	3d.4s	3d.4p	3D_2	$^3D_3^0$	3558,53	7,477	7,476	7,709
3	21	3d.4s	3d.4p	3D_3	$^3D_3^0$	3572,53	8,140	8,262	8,068
7	21	$3d^2$	3d.4p	3F_4	$^3D_3^0$	4314,08	7,613	7,609	7,748
1	22	3d.4s	3d.4p	3D_1	$^3P_0^0$	3361,93	8,068	8,140	8,004
1	23	3d.4s	3d.4p	3D_1	$^3P_1^0$	3361,26	9,531	7,504	7,575
2	23	3d.4s	3d.4p	3D_2	$^3P_1^0$	3368,94	9,919	7,000	7,802
8	23	$3d^2$	3d.4p	1D_2	$^3P_1^0$	5318,35	5,881	5,855	6,196
1	24	3d.4s	3d.4p	3D_1	$^3P_2^0$	3352,05	6,204	6,114	6,421
2	24	3d.4s	3d.4p	3D_2	$^3P_2^0$	3359,68	10,33	7,303	7,428
3	24	3d.4s	3d.4p	3D_3	$^3P_2^0$	3372,15	9,996	8,068	7,889
12	24	$3d^2$	3d.4p	3P_2	$^3P_2^0$	5657,90	7,017	7,121	7,211
1	25	3d.4s	3d.4p	3D_1	$^1P_1^0$	3244,16	6,342	6,334	3,202
2	25	3d.4s	3d.4p	3D_2	$^1P_1^0$	3251,31	6,362	6,522	6,606
4	25	3d.4s	3d.4p	1D_2	$^1P_1^0$	3535,71	7,785	7,920	7,604
8	25	$3d^2$	3d.4p	1D_2	$^1P_1^0$	5031,02	7,544	7,683	7,673
9	25	$4s^2$	3d.4p	1S_0	$^1P_1^0$	5239,81	7,143	7,137	7,223
3	26	3d.4s	3d.4p	3D_3	$^1F_3^0$	3107,37	5,176	5,185	5,965
4	26	3d.4s	3d.4p	1D_2	$^1F_3^0$	3353,72	8,179	8,297	8,120
8	26	$3d^2$	3d.4p	1D_2	$^1F_3^0$	4670,41	7,064	7,270	7,267
13	26	$3d^2$	3d.4p	1G_4	$^1F_3^0$	5526,79	7,519	7,624	7,620
4	30	3d.4s	4s.4p	1D_2	$^1P_1^0$	1880,60	8,699	8,698	8,540
8	30	$3d^2$	4s.4p	1D_2	$^1P_1^0$	2232,91	7,892	7,889	7,714
9	30	$4s^2$	4s.4p	1S_0	$^1P_1^0$	2273,11	8,886	8,893	8,726
14	30	$3d^2$	4s.4p	1S_0	$^1P_1^0$	3359,23	6,892	6,894	7,446

Cuadro 3.3: Logaritmos de las probabilidades de la transición del *escandio*, tomados de NIST, Kurucz y del presente.

Bautista		Nilsson		$A(10^7 s^{-1})$		$\lambda_{air}(\text{\AA})$
Niveles		Configuración				
Inferior	Superior	Inferior	Superior	Bautista	Nilsson	Nilsson
2	75	$4s(^5D)^6D_{1/2}$	$4p(^5D)^6F_{1/2}$	18,85	17,70	2867,645
3	75	$4s(^5D)^6D_{3/2}$		5,39	5,57	2873,479
2	76	$4s(^5D)^6D_{1/2}$	$4p(^5D)^6F_{3/2}$	7,53	7,24	2860,934
3	76	$4s(^5D)^6D_{3/2}$		13,85	13,60	2866,740
4	76	$4s(^5D)^6D_{5/2}$		2,92	2,95	2876,245
3	77	$4s(^5D)^6D_{3/2}$	$4p(^5D)^6F_{5/2}$	11,63	11,30	2855,670
4	77	$4s(^5D)^6D_{5/2}$		11,38	11,10	2865,102
5	77	$4s(^5D)^6D_{7/2}$		1,41	1,44	2877,973
4	78	$4s(^5D)^6D_{5/2}$	$4p(^5D)^6F_{7/2}$	15,65	15,20	2849,837
5	78	$4s(^5D)^6D_{7/2}$		8,47	8,66	2862,571
6	78	$4s(^5D)^6D_{9/2}$		0,47	0,48	2878,444
5	81	$4s(^5D)^6D_{7/2}$	$4p(^5D)^6F_{9/2}$	20,06	18,90	2843,249
6	81	$4s(^5D)^6D_{9/2}$		4,76	4,87	2858,909
6	82	$4s(^5D)^6D_{9/2}$	$4p(^5D)^6F_{11/2}$	25,13	25,00	2835,629
2	89	$4s(^5D)^6D_{1/2}$	$4p(^5D)^6D_{1/2}$	5,03	4,29	2663,675
3	89	$4s(^5D)^6D_{3/2}$		17,28	14,50	2668,707
7	89	$4s(^5D)^4D_{1/2}$		1,74	2,02	3336,321
8	89	$4s(^5D)^4D_{3/2}$		1,74	2,10	3347,820
2	90	$4s(^5D)^6D_{1/2}$	$4p(^5D)^6D_{3/2}$	7,80	6,24	2658,586
3	90	$4s(^5D)^6D_{3/2}$		0,12	0,56	2663,599
4	90	$4s(^5D)^6D_{5/2}$		13,26	10,90	2671,803
7	90	$4s(^5D)^4D_{1/2}$		0,25	0,30	3328,342
8	90	$4s(^5D)^4D_{3/2}$		1,24	1,58	3339,786
9	90	$4s(^5D)^4D_{5/2}$		2,61	3,17	3358,491
3	88	$4s(^5D)^6D_{3/2}$	$4p(^5D)^6D_{5/2}$	6,33	8,02	2678,789
4	88	$4s(^5D)^6D_{5/2}$		2,18	4,29	2687,087
5	88	$4s(^5D)^6D_{7/2}$		8,18	4,39	2698,405
9	88	$4s(^5D)^4D_{5/2}$		1,00	1,02	3382,675
10	88	$4s(^5D)^4D_{7/2}$		4,90	3,61	3408,757
15	88	$3d^{54}P_{5/2}$		0,83	0,50	3631,461
17	88	$3d^{54}P_{3/2}$		0,35	0,18	3631,671
4	91	$4s(^5D)^6D_{5/2}$	$4p(^5D)^6D_{7/2}$	9,44	9,19	2666,020
5	91	$4s(^5D)^6D_{7/2}$		12,43	11,90	2677,161
6	91	$4s(^5D)^6D_{9/2}$		5,66	5,13	2691,040
5	93	$4s(^5D)^6D_{7/2}$	$4p(^5D)^6D_{9/2}$	5,50	5,28	2663,422
6	93	$4s(^5D)^6D_{9/2}$		21,87	20,90	2677,159
10	93	$4s(^5D)^4D_{7/2}$		0,18	0,15	3353,124
1	84	$3d^{56}S_{5/2}$	$4p(^5D)^6P_{5/2}$	20,20	12,80	2061,575
3	84	$4s(^5D)^6D_{3/2}$		2,79	3,02	2742,032
4	84	$4s(^5D)^6D_{5/2}$		9,25	9,56	2750,727
5	84	$4s(^5D)^6D_{7/2}$		14,87	15,90	2762,589

Cuadro 3.4: Comparación entre las probabilidades de la transición del presente y las reportadas por Nilsson [36].

Cont. Tabla 3.4

Bautista		Nilsson		$A(10^7 s^{-1})$		$\lambda_{air}(\text{\AA})$
Niveles		Configuración				
Inferior	Superior	Inferior	Superior	Bautista	Nilsson	Nilsson
10	84	$4s(^5D)^4D_{7/2}$		0,22	0,31	3511,824
1	85	$3d^{56}S_{5/2}$	$4p(^5D)^6P_{7/2}$	20,76	12,90	2055,596
4	85	$4s(^5D)^6D_{5/2}$		0,88	0,89	2740,094
5	85	$4s(^5D)^6D_{7/2}$		5,50	5,57	2751,864
6	85	$4s(^5D)^6D_{9/2}$		20,91	22,30	2766,531
7	96	$4s(^5D)^4D_{1/2}$	$4p(^5D)^4F_{3/2}$	13,25	13,60	3118,646
8	96	$4s(^5D)^4D_{3/2}$		4,88	5,05	3128,692
11	96	$3d^{54}G_{5/2}$		5,07	4,35	3217,393
8	97	$4s(^5D)^4D_{3/2}$	$4p(^5D)^4F_{5/2}$	14,13	14,60	3120,359
9	97	$4s(^5D)^4D_{5/2}$		4,04	4,36	3136,681
13	97	$3d^{54}G_{7/2}$		4,58	4,19	3209,176
6	99	$4s(^5D)^6D_{9/2}$	$4p(^5D)^4F_{9/2}$	0,44	0,50	2534,333
10	99	$4s(^5D)^4D_{7/2}$		17,90	18,60	3132,053
12	99	$3d^{54}G_{11/2}$		4,88	4,21	3180,693
18	99	$3d^{54}D_{7/2}$		0,10	0,21	3715,172
34	99	$4s(^3F)^4F_{9/2}$		0,18	0,35	4824,127
2	86	$4s(^5D)^6D_{1/2}$	$4p(^5D)^4P_{1/2}$	1,16	1,68	2717,506
3	86	$4s(^5D)^6D_{3/2}$		4,12	6,13	2722,744
7	86	$4s(^5D)^4D_{1/2}$		6,53	5,43	3421,202
8	86	$4s(^5D)^4D_{3/2}$		6,42	5,28	3433,295
17	86	$3d^{54}P_{3/2}$		1,47	1,13	3712,930
2	87	$4s(^5D)^6D_{1/2}$	$4p(^5D)^4P_{3/2}$	4,50	6,24	2698,683
3	87	$4s(^5D)^6D_{3/2}$		0,83	0,93	2703,849
4	87	$4s(^5D)^6D_{5/2}$		2,07	3,61	2712,303
7	87	$4s(^5D)^4D_{1/2}$		0,57	0,58	3391,424
8	87	$4s(^5D)^4D_{3/2}$		3,84	3,12	3403,307
9	87	$4s(^5D)^4D_{5/2}$		7,29	5,37	3422,732
15	87	$3d^{54}P_{5/2}$		0,67	0,38	3677,667
16	87	$3d^{54}P_{1/2}$		0,80	0,39	3677,846
17	87	$3d^{54}P_{3/2}$		0,32	0,19	3677,882
3	92	$4s(^5D)^6D_{3/2}$	$4p(^5D)^4P_{5/2}$	5,67	3,81	2653,578
4	92	$4s(^5D)^6D_{5/2}$		3,36	1,14	2661,721
5	92	$4s(^5D)^6D_{7/2}$		2,50	5,74	2672,826
8	92	$4s(^5D)^4D_{3/2}$		0,14	0,30	3324,047
9	92	$4s(^5D)^4D_{5/2}$		1,87	1,54	3342,576
10	92	$4s(^5D)^4D_{7/2}$		7,62	6,70	3368,041
15	92	$3d^{54}P_{5/2}$		1,31	1,72	3585,287
17	92	$3d^{54}P_{3/2}$		0,51	0,36	3585,492

Capítulo 4

Telescopio Espacial Hubble.

El Telescopio Espacial Hubble fue lanzado al espacio el 24 de Abril de 1990 como un proyecto conjunto de la National Aeronautics and Space Administration (NASA) y de la European Space Agency (ESA), desde entonces se encuentra en órbita alrededor de la Tierra a una altura de 593 km sobre el nivel del mar.

El Hubble posee un espejo principal de 2,4 m de diámetro que refleja la luz a un espejo secundario de 0,3 m, el espejo secundario envía la luz a través de un agujero en el espejo principal al plano focal del telescopio donde se encuentran tres instrumentos científicos; la ACS (Advanced Camera for Surveys), instalada en el telescopio espacial bajo la misión de servicio espacial 3B en Marzo de 2002, esta cámara posee un rango espectral entre 1200 a 10000 Å; la NICMOS (Near Infrared Camera/Multi-Object Spectrometer), es un instrumento dedicado a la observación en el infrarrojo cercano, con un rango espectral entre 0,2 y 2,8 micrones; el STIS (Space Telescope Imaging Spectrograph), es utilizado para medir espectros de alta resolución de fuentes concretas.

En el presente trabajo, dedicamos una pequeña sección al *Space Telescope Imaging Spectrograph* a bordo del telescopio espacial, dado que ha sido gracias a éste equipo que hemos podido obtener espectros de alta resolución para el estudio de la compleja estrella η Carinae.

4.1. Espectroscopía con el *Space Telescope Imaging Spectrograph*

El *Space Telescope Imaging Spectrograph* (STIS) fué instalado en el Telescopio Espacial Hubble durante la segunda misión de revisión del Telescopio Espacial el 14 de Febrero de 1997. El STIS es un espectrógrafo diseñado para reemplazar la primera generación de espectrógrafos del *Telescopio Espacial Hubble* y mejorar la capacidad espectroscópica del Telescopio Espacial.

Cuatro bandas cubren un rango de longitud de ondas de 115 a 1000 nm. El modo en cámara es usado para la adquisición de imágenes y observaciones de campo profundo. El rango entre 115 y 170 nm es cubierto por un detector CsI MAMA (Multi-Anode Michrochannel Array), y el rango entre 165 y 310 nm por un detector Cs₂Te MAMA de 2048×2048 pixeles, los rangos de 305 a 555 nm y 550 a 1000 nm son cubiertos con un CCD de 1024×1024 pixeles, [37].

El *Space Telescope Imaging Spectrograph* incluye:

1. *Imágenes espectrales de baja resolución*: Resolución espectral $R = \lambda / \Delta\lambda$ [FWHM] ~ 500 -1.000; longitud de la hendidura y ancho de la apertura ~ 115 -1000 nm.
2. *Imágenes espectrales de mediana resolución*: Resolución $R \sim 5000$ -10000; longitud de la hendidura ~ 115 -1.000 nm.
3. *Espectroscopía echelle¹ de mediana resolución*: Resolución $R \sim 23000$ -35000; hendidura corta.
4. *Espectroscopía echelle de alta resolución*: Resolución $R \sim 105000$; hendidura corta.

Muchos problemas pueden ser investigados con el *Space Telescope Imaging Spectrograph* del Telescopio Espacial Hubble. Algunos de ellos son: el estudio de la dinámica y la masa de los Nucleos Activos de Galaxias; la evolución de los halos galácticos,

¹Basada sobre los espectrografos *echelle*.

protogalaxias y el medio intergaláctico. La composición, cinemática y procesos físicos en varias fases del medio interestelar; las abundancias y estructuras de las fotósferas estelares y el fenómeno de pérdida de masa. La magnetósfera y química de los planetas mas externos, [38].

En particular, la investigación del medio interestelar por absorción UV en el espectro de estrellas distantes, requiere de una alta resolución espectral y un ancho rango en longitudes de onda para estudiar muchas especies atómicas y moleculares formadas sobre un ancho rango de zonas de ionización. Para la obtención de estos espectros se usa el modo *echelle*.

4.2. Detectores

El *Space Telescope Imaging Spectrograph* usa dos tipos de detectores, MAMA y CCDs, con el fin de optimizar la obtención de espectros con el el espectrógrafo en un rango específico de longitudes de onda.

1. Lejano Ultravioleta (115-170 nm): El detector *FAR ULTRAVIOLET Multi-Anode Michrochannel Array* (FUV MAMA), tiene una eficiencia cuántica de 21 % en 122 nm.
2. Cercano Ultravioleta (165-310 nm): El detector *NEAR ULTRAVIOLET Multi-Anode Michrochannel Array* (NUV MAMA), tiene una eficiencia cuántica de 9,6 % en 250 nm.
3. CCD (Charge-Coupled Device): Scientific Image Technologies (SiTe) CCD, con un formato espacial de $0,05 \times 0,05$ arcseg cubren un campo de visión de $52'' \times 52''$ y operan desde 2000 a 10.300 Å.

El formato espacial de los detectores MAMA es 2048×2048 pixeles de $12,5 \times 12,5$ micrones ($0,0125'' \times 0,0125''$) en el formato de alta resolución, y 1024×1024 pixeles de 25×25 micrones ($0,025'' \times 0,025''$) en el formato de baja resolución, [38].

4.2.1. Primera Observación de η Carinae con el STIS.

El objetivo del primer programa **Cycle 7 η Carinae HST-STIS** para observar η Carinae a finales de 1997 con el *Space Telescope Imaging Spectrograph*, fué obtener un conjunto completo de espectros espacialmente resueltos. Las primeras observaciones fueron realizadas usando una apertura de $52'' \times 0'',1$ con un poder de resolución de 3.800 a 8.200 desde 1.640 Å a 10.400 Å. Una de las principales motivaciones de esta observación fué el evento espectroscópico de 5,52 años predicho, el cual ocurriría a finales de 1997, [39].

Una única órbita fué utilizada el 31 de Diciembre de 1.997 para la observación de este evento.

El Telescopio Espacial Hubble ha sido uno de los telescopios espaciales con mayor contribución científica y, además el creador de las imagenes más sorprendentes del Universo. Ha realizado más de 330.000 observaciones separadas y estudiado más de 25.000 objetos, creando así más de 7,3 terabytes de información, con los cuales se han producido miles de artículos. Hoy día hay aún mucha información que obtener de las imagenes producidas por el Hubble y, en particular de los espectros tomados de η Carinae y su nebulosa circundante.

Capítulo 5

η Carinae.

Entre los años 1600 y 1800 los astrónomos ocasionalmente notaron que η Carinae fluctuaba entre las 2 y 4 magnitudes aparentes, a partir del año 1820 estas variaciones en la magnitud aumentaron, mostrando una gran inestabilidad que resultó en la llamada *Gran erupción* en el año 1830. η Carinae sobrevivió a esta colosal erupción y llegó a ser una de las estrellas mas brillantes del cielo, variando entre las magnitudes +1 y -1 durante aproximadamente 20 años; en el año 1870 la estrella había disminuido su brillo y su magnitud aparente llegando a la magnitud 8. Entre los años 1887 y 1895 ocurrió una pequeña erupción, desde la cual la estrella se ha mantenido un poco más estable, después del año 1900 se hizo fuertemente visible alrededor de la estrella, una nebulosidad conocida como el *Homúnculo*, que es el resultado del material expulsado por la estrella durante los eventos de la erupción, Figura 5.1.

Alrededor del año 1930 la estrella comenzó a aumentar nuevamente su brillo, pero esta vez manteniendo pequeñas oscilaciones en su magnitud visual, la cual esta actualmente alrededor de la sexta magnitud, Figura 5.2.

η Carinae se refiere específicamente a la estrella central o el sistema binario, mientras que el *Homúnculo* significa el material observado a gran escala, el cual esta formado por dos lóbulos bipolares. El término *Weigelt blobs* se usa para referirse al material compacto de suave movimiento cercano a la estrella y, el término *equatorial skirt* para referirse al material a gran escala que se encuentra cerca del medio plano de la configuración bipolar [40], Figura 5.1.

Figura 5.1: La imagen de η Carinae tomada con la cámara *Wide Field Planetary Camera 2* (WFPC2) del Telescopio Espacial Hubble en el año 1994, muestra el gran *Homúnculo* en la dirección Sur-Este y el pequeño *Homúnculo* en la dirección Nor-Oeste. Estos lóbulos forman parte del material eyectado por la estrella durante la *Gran Erupción*.

Figura 5.2: Curva histórica de la variabilidad de la magnitud visual de η Carinae construida por el grupo de estrellas masivas del Observatorio Astronómico de La Plata, Argentina.

5.1. Aspectos generales de la estrella

η Carinae es una estrella que oscila entre dos estados, cambiando su temperatura, luminosidad y espectro. Estos estados son periódicos y son conocidos como los eventos de mínimo y máximo espectroscópico, los cuales pueden ser explicados con un modelo de sistema binario.

El material alrededor de η Carinae presenta una composición química notable producida por el ciclo CNO, donde la mayoría de la composición C+N+O es nitrógeno. La fracción de helio es probablemente $\sim 0,4$, el cual es mayor que el valor normal de $\sim 0,27$. El viento es mas difícil de cuantificar, pero también se muestra bastante rico en nitrógeno pero pobre en carbono y oxígeno. En un modelo binario el denso viento observado pertenece a la estrella, cuya erupción formo el *Homúnculo*, [40].

La tasa de pérdida de masa es aproximadamente del orden de $10^{-3} M_{\odot}$ y, la velocidad promedio del viento es de aproximadamente 500 km s^{-1} aunque, corrientes más rápidas y más lentas deben existir debidas a la asimetría del viento, [40].

5.2. El ciclo espectral de 5,52 años

Entre los años 1989 y 1995 varias observaciones espectroscópicas de η Carinae fueron hechas con el telescopio de 1.6 m del Laboratorio Nacional de Astrofísica (LAN,

Brasil), un episodio de capa¹ fue registrado en gran detalle desde Marzo hasta Noviembre de 1992, durante este período se observó que la línea de He I en 10830 Å desapareció y que las intensidades de las líneas de He I en 5876, 7065 y 6678 Å y la de [Ar III] en 7135 Å disminuyeron considerablemente.

En la curva superior de la Figura 5.3 se muestra una variación continua en la intensidad de la línea de He I, desde el ancho equivalente $W_{eq} = 806$ Å al $W_{eq} = 6$ Å en la curva inferior de la Figura 5.3, las cuales corresponden a variaciones desde aproximadamente 1500 a 15 L_{\odot} sólo en esta línea. La tasa de cambio en el ancho equivalente de la línea de He I es de aproximadamente 60 Å por mes en el intervalo de tiempo de Marzo a Noviembre de 1992, caracterizando la época del mínimo espectroscópico. El mínimo absoluto tuvo lugar el 3 de Junio de 1992 (1992,42). Caracterizado por un valor mínimo del ancho equivalente observado $W_{eq} = 6$. En la Figura 5.3 se observa que el valor máximo del ancho equivalente de la línea de He I decrece de ciclo a ciclo, [42].

Cinco episodios de mínimo espectroscópico ocurrieron en los años 1948, 1965, 1981, 1987 y 1992, caracterizados por la atenuación o desaparición completa de las líneas de alta ionización. Además los tres últimos episodios indican un ciclo de ~ 5 años, Tabla 5.2.

El período propuesto no sólo ajusta muy bien con los episodios de capa registrados, sino que además asigna fases en las cuales no hay episodios de capa pero en las que el espectro de η Carinae exhibe líneas de alta excitación, esto sugiere un escenario binario con ciclos coherentes en el cual una estrella de baja masa orbita a η Carinae a una distancia de $3 \times 10^3 R_{\odot}$ y con un período de 5,52 años, [43].

5.2.1. El sistema binario de η Carinae

Hoy día el escenario de sistema binario con un período de 5,52 años es el más aceptado, [43]. El sistema binario de η Carinae estaría formado por una estrella primaria

¹Se refiere a la desaparición de líneas en el espectro observado.

Figura 5.3: *Curva Superior*: Flujo en la banda H en unidades de 10^{-14} ergs $cm^{-2} s^{-1}$ \AA^{-1} , [41]. *Curva inferior*: Ancho equivalente de la línea He I $\lambda 10830$; los triangulos y fechas en la parte superior son las épocas predichas de mínima excitación y en el eje de las abcisas la coordenada es el Día Juliano (DJ), [42]

Año		Fase	Tipo de evento
predicho	observado	(O-C)	
1827.01	1827.1	0.02	mag=1.0, pico marcado
1838.03	1838.0	-0.01	mag=0.2, pico marcado
1843.55	1843.2	-0.06	mag=-1.0, pico mas alto
1948.30	1948.30	0.00	He I, [NeIII], [FeIII], desaparecen
1964.85	1965.2	0.06	He I, [NeIII], [FeIII], se hacen mas débiles
1975.88	1976.1	0.04	Máximo local fotométrico, banda H
1975.88	1976.3	...	Máximo local fotométrico, banda V
1981.40	1981.49	0.02	[FeIII] desaparece, [NII], [SiIII] se hacen débiles
1981.40	1981.62	...	Máximo local fotométrico, bandas J, H, K, L
1981.40	1981.89	...	Máximo local fotométrico, banda V
1986.91	1987.09	...	Máximo local fotométrico, bandas J, H, K
1986.91	1987.04	0.02	He I $\lambda\lambda 10830, 5876$, muy débiles
1992.42	1992.42	...	[ArIII], [FeIII], He I, desaparecen
1992.42	1992.30	-0.02	Máximo local fotométrico, banda H
1992.42	1992.4	...	Fuerte mínimo en rayos-X
1992.42	1992.49	...	Mínimo del flujo en radio
1997.94	Próximo evento predicho

Cuadro 5.1: Comparación entre los eventos predichos [42], y los observados.

con una masa $M_1 \approx 100 M_\odot$ y una secundaria de masa $M_2 \approx 30 M_\odot$, probablemente del tipo espectral O, el sistema presenta una altísima excentricidad de 0,9 con el semieje mayor $a = 16,64$ UA y la separación orbital en el *periastron* (la distancia mínima de separación entre las estrellas) de $r = 1,66$ UA.

La estrella secundaria presenta una temperatura aproximada efectiva de 40.000 K, una luminosidad de $3 \times 10^5 L_\odot$ y un radio de $11 R_\odot$, las tasas de perdida de masa para la secundaria es de 10^{-5} masas solares por año, [44].

Sin embargo, cálculos recientes de los parámetros físicos de la estralla secundaria encuentran los siguientes resultados: $T_2 \simeq 37.200$ K, $L_2 \simeq 9,3 \times 10^5 L_\odot$, $R_2 \simeq 23,6 R_\odot$

y una tasa de pérdida de masa de $8,5 \times 10^{-6}$ masas solares por año, [45]. Aunque la estrella primaria es más luminosa que la secundaria, esta es mucho más grande y su temperatura es mucho más baja que la secundaria, por lo tanto, es la estrella secundaria la responsable de los fotones altamente ionizantes.

Las teorías basadas en un sistema binario argumentan que la estrella secundaria debió acretar una gran fracción de la masa expulsada por la estrella primaria en la *Gran Erupción*, formando un disco de acreción y dos *jets* [44].

Desde un punto de vista cualitativo el proceso de acreción ocurre porque el viento de la estrella primaria; que tiene una velocidad menor que la velocidad del viento de la estrella secundaria y una alta tasa de pérdida de masa, colisiona con el viento de la estrella secundaria en una región entre las estrellas donde el momento de los flujos está exactamente balanceado, creando un punto de *estancamiento* que se encuentra cerca de la línea que une el centro de las dos estrellas, Figura 5.4. Después del choque, el material de la estrella primaria se enfría muy rápido, es decir; antes de que la masa pueda moverse lejos del punto de *estancamiento* entonces, la presión circundante comprime el gas frío a altas densidades y la presión de radiación del gas supera la fuerza gravitatoria. Sin embargo, puede que este no sea el caso del denso gas cerca del punto de *estancamiento*, ya que la fuerza gravitatoria en este caso podría llegar a hacerse más grande acretando parte del material detrás de una de las estrellas.

Durante la *Gran Erupción* la tasa de pérdida de masa de la estrella primaria fue muy alta y, el punto de estancamiento estuvo dentro del radio de acreción *Bondi-Hoyle* $R_{acc} \simeq 2GM_2/V_1^2$ (G es la constante de gravitación universal, V_1 es la velocidad del viento de la estrella primaria y M_2 la masa de la estrella secundaria) de la estrella secundaria, durante el *Apastron* (máxima distancia de separación entre las estrellas) la estrella secundaria acretó aproximadamente el 50 % de la masa eyectada y un disco de acreción se formó alrededor de la estrella primaria. Cerca del *Periastron*, cortos episodios de acreción ocurrieron posiblemente debido a la eyección de los dos *Jets* producidos por la estrella secundaria [46].

Figura 5.4: *Panel superior*: Órbita y velocidad orbital V_{orb} de la estrella secundaria de masa M_2 respecto al sistema en reposo de la estrella primaria de masa M_1 . V_r y V_θ son la velocidad radial y tangencial respectivamente de V_{orb} y a es el semi-eje mayor. *Panel inferior*: Geometría del flujo cercano al punto de *estancamiento*. La región de contacto es la superficie donde los dos vientos estelares se encuentran. Las direcciones de la velocidad en el panel inferior son las mismas que en el panel superior [46].

5.3. El viento estelar

Un modelo que reproduce muchas de las características observadas en los datos tomados en 1998 fue desarrollado en, [47]. En este modelo, la tasa de pérdida de masa, así como las inhomogeneidades en el viento son importantes.

Los parámetros del modelo son considerablemente diferentes a los de otros modelos de vientos estelares. El espectro modelado, se parece al de η Carinae en un estado de baja excitación, que corresponde al evento de 1997 a 1998. Por ejemplo, durante este evento las líneas de Balmer presentaron fuertes rasgos de absorción P Cyg, la cual no es vista en el estado de alta excitación o "normal", observado después de 1998,9, 1999,1 y 2002,2.

El espectro del viento, es bastante difícil de modelar debido a la aproximación de simetría esférica, la cual resulta ser una pobre aproximación para este objeto. La rotación probablemente causa vientos de baja velocidad cerca del ecuador. Más aún, si una compañera está presente, entonces una simetría axial resulta cuestionable, [48].

1. Los *Weigelt blobs*: Aproximadamente 20 años atrás el grupo de interferometría Gerd Weigelt resolvió a η Carinae como un sistema de varios objetos. Hoy día este modelo de varios cuerpos, coincide con la teoría de sistema binario en η Carinae, derivado de las observaciones.

Los Weigelt blobs emiten cientos de líneas de Fe III, [Fe II], y especies similares, muchas de ellas excitadas por procesos de fluorescencia. Las densidades del gas en esta región exceden los 10^7 átomos por cm^3 , [48]. Las cuales resultan ser bastante altas comparada a las de un medio interestelar normal.

5.4. El filamento de estroncio

Con el fin de estudiar las variabilidades observadas en la nebulosa circundante a η Carinae, un conjunto de observaciones fueron hechas con el espectrografo del Telescopio Espacial Hubble “Space Telescope Imaging Spectrograph” (STIS) entre el mínimo del ciclo espectroscópico en el año 1998 y el ancho máximo durante los años 1999 y 2000, Tabla 5.2.

A partir de estas observaciones se pudo demostrar que las líneas de más alta ionización desaparecen durante el mínimo espectroscópico y que solo reaparecen cuando el sistema se recupera o alcanza un estado de alta excitación.

También se encontró que en una región al nor-oeste de la estrella y cercano a ella el espectro difería remarcablemente del espectro de otras líneas de emisión en la estructura nebular alrededor de η Carinae y de otras nebulosas, ya que en esa región fueron identificadas dos líneas prohibidas de [Sr II], las cuales no habían sido antes identificadas en ningún plasma nebular. A partir de este descubrimiento esta región del plasma circundante de η Carinae es conocido como el *filamento de estroncio*.

Con el fin de entender la naturaleza del peculiar *filamento de estroncio* un grupo de astrónomos observaron la nebulosa y el filamento en una serie de programas espaciales con el Telescopio Espacial Hubble entre 1999 y 2002, Tabla 5.2 y Figura 5.5.

Fecha	Proyecto del Telescopio Espacial Hubble	Rango espectral Å
21 de Febrero de 1999	8036	6480-7000
13 de Marzo del 2000	8327	2480-9600
21 de Marzo del 2000	8483	4818-7050
17 Abril del 2001	8619	4052-7050
27 de Noviembre del 2001	8619	2480-10135
16 de Diciembre del 2002	9420	1640-3052

Cuadro 5.2: Fechas de las observaciones hechas del *filamento de estroncio* bajo los programas del *Telescopio Espacial Hubble* y los rangos espectrales cubiertos [49].

A partir del estudio de los espectros obtenidos de la nebulosa, se confirmó la identificación de las líneas de [Sr II] y se identificaron dos líneas permitidas de Sr II

Figura 5.5: Observaciones hechas sobre el *filamento de estroncio*, [49].

en 4078 y 4216 Å también fueron identificadas en el filamento las líneas prohibidas [Sc II], [Ti II], [V II], [Cr II], [Mn II], [Fe II] y [Ni II], de las cuales la mayoría no esta presente en las otras regiones de la nebulosa [49].

Las líneas identificadas son clasificadas en tres grupos según la estructura atómica y referencia en la tabla periódica de los elementos:

1. Grupo 1A y 2A: Na I, Mg I, Al II, Ca I, Ca II, Sr II.
2. Grupo 3A-7A: Cl
3. Elementos 3d: Sc-Ni

A partir del estudio de las líneas de [Ca II] del espectro de Noviembre del 2001, se encontro que el *filamento* tiene una extensión espacial de aproximadamente 1".5 a lo largo del eje polar del *Homúnculo* y aproximadamente 2" en la dirección perpendicular al eje polar, Figura 5.6.

También se encontro que el filamento es una zona de baja ionización, dado que en esta región no se observa [N II], cuya energía de ionización es mayor a 14,5 eV. Mientras que este, si esta presente en el lóbulo que contiene al filamento. Por otro lado, se observó [Ni II] tanto en el filamento como en el lóbulo, el cual vive en zonas de ionización entre 7,6 y 18,2 eV. Este rango de ionización apenas solapa, con las zonas de ionización del Sr^+ que es de 5,7 a 11,0 eV y, con las del Ca^+ de 6,1 a 11,9 eV, los cuales son observados solo en el *filamento de estroncio*.

Por lo tanto, la estructura polar deben ser expuesta a radiación por encima de los 12 eV, ya que el Sr II y el [Ca II] están ausentes. Mientras que, el *filamento de estroncio* debe estar protegido de la radiación por encima de los 12 eV.

El hecho de que el *filamento de estroncio* se encuentre cerca del plano ecuatorial, es un factor importante para entender la inusual excitación. η Carinae presenta un campo de radiación asimétrico, con más radiación UV escapando del viento estelar

en las latitudes mas bajas, cerca del ecuador, donde el viento es escaso, al menos durante su estado de alta excitación o "normal", entre los eventos espectroscópicos, [50] y [51]. Además se considera que un disco putativo absorbería todos los fotones ionizantes a lo largo del camino y que solo se transmitirían fotones por debajo de los 12 eV.

En cualquiera de los casos, el *filamento de estroncio* parece ocupar una posición especial relativa a η Carinae, la cual produce tál región de baja ionización.

Figura 5.6: El pequeño *Homunculo* envuelve el *filamento de estroncio*, que se puede observar encerrado en el cuadro. La posición II del espectrógrafo indica el lugar donde se identifico el [SrII] en emisión y la posición I indica la orientación del espectrógrafo que pasa cerca de la estrella, la cual es marcada por una cruz [53].

El espectro de varios de los elementos observados en el filamento de estroncio ha sido utilizado para diagnosticar parámetros físicos tales como; densidad electrónica, temperatura e intensidad del campo de radiación. El primer diagnóstico fue hecho con los cocientes de líneas del Sr II, encontrando que estos son consistentes con un gas que tiene una densidad electrónica de 10^7cm^{-3} [52].

En el presente trabajo utilizamos los cocientes de intensidad de las líneas observadas de [Cr II] y [Sr II] calculadas a partir del espectro tomado en Noviembre del 2001 y Diciembre del 2002, con el *Space Telescope Imaging Spectrograph*, respectivamente. Los cocientes de intensidad de las líneas teóricas fueron calculados, utilizando los datos atómicos calculados por Bautista. Una vez, determinamos las condiciones físicas en el *filamento de estroncio*, nosotros calculamos la abundancia de escandio relativa a la abundancia solar.

Capítulo 6

Diagnósticos espectrales y abundancias.

Para diagnosticar las condiciones físicas (temperatura, densidad electrónica y factor de dilución) en el filamento de estroncio, nosotros utilizamos las intensidades de las líneas de emisión de los espectros del cromo y del escandio, que fueron observados en Noviembre de 2001 y Diciembre de 2002, respectivamente. Las intensidades de las líneas observadas fueron corregidas por extinción interestelar utilizando la ecuación (2.34) descrita en el Capitulo 2. La cual es causada por la presencia de granos de polvo en el filamento de estroncio, Tabla 6.1.

6.1. Diagnósticos del [Sc II]

Los diagnósticos de los parámetros físicos en el *filamento de estroncio* han sido realizados anteriormente por Bautista, utilizando líneas de [Ni II] y [Ti II]. Los valores encontrados fueron: factor de dilución $\log_{10}w = 9,0 \pm 0,5$, temperatura $T = 6000 \pm 1000$ K y una densidad electrónica N_e , alrededor de 10^7 cm^{-3} .

Nosotros graficamos los cocientes de intensidades de las líneas del [Sc II] contra el logaritmo del factor de dilución, Figuras de la **Parte I**. Los cocientes fueron calculados para tres valores de la densidad electrónica, 10^6 , 10^7 y 10^8 cm^{-3} , colocados en arreglos de 3×3 y 2×3 , (*filas* \times *columnas*). Las filas son los cocientes y las columnas corresponden a cada una de las densidades electrónicas. En cada cuadro, se presentan los cocientes calculados para 5000, 6000 y 7000 K, que corresponden

a los colores *rojo*, *verde* y *azul*, respectivamente. Los cocientes de líneas observados son representados por las líneas horizontales en cada cuadro y las líneas de punto y línea corresponden a los errores del cociente observado. Los cocientes calculados en el presente trabajo, dependen de la densidad electrónica, temperatura y factor de dilución de la misma forma descrita en las ecuaciones 2.37, 2.38, 2.39 y 2.40 del Capítulo 2. Con el conocimiento de los resultados anteriormente diagnósticados y por inspección de estos cocientes nosotros encontramos que, el valor de la temperatura corresponde a aproximadamente a 6000 K , el cual es consistente para un valor del factor de dilución alrededor de 10×10^{-9} . También graficamos cocientes que involucran líneas (permitidas) del ultravioleta-ultravioleta, óptico-ultravioleta y óptico-óptico, $(\lambda\lambda 3630, 72 + 3613, 64/3353, 58)$, $(3572, 34 + 3613, 64/4246, 49)$ y $(\lambda\lambda 4374, 35 + 5657, 74/4314, 07)$ que se muestran en la **Parte I** del presente trabajo. Estos cocientes presentan mayor incertidumbre en las intensidades de las líneas medidas debido a las mezclas que ellas presentan con otras líneas del espectro. Sin embargo, nosotros inspeccionamos estos cocientes y observamos que ellos dan una densidad electrónica de aproximadamente $10 \times 10^7\text{ cm}^{-3}$, la cual es consistente con un valor del factor de dilución de alrededor de 10×10^{-10} y, tales valores modelan bastante bien el espectro teórico.

Los valores diagnósticados con las líneas del escandio son consistentes con los obtenidos anteriormente. Las intensidades de las líneas del escandio, fueron calculadas utilizando los valores encontrados del diagnóstico espectral, y comparadas con las observadas, Tabla 6.2. Considerando las incertidumbres presentes en los datos atómicos y la complejidad que presentan los cocientes de líneas para hacer los diagnósticos, los resultados de las intensidades de las líneas teóricas son razonablemente buenas comparada con las observacionales.

6.1.1. Diagnósticos del [Cr II]

El procedimiento seguido para el diagnóstico de los parámetro físicos en el filamento de estroncio, utilizando los cocientes de líneas del cromo, fué el mismo que el descrito para el escandio, Figuras de la **Parte II**. Los cocientes coinciden bastante

Espectro del Cromo				Espectro del Escandio			
λ_{lab}	Conf.	I_{obs}	I_{obs}	λ_{lab}	Conf.	I_{obs}	I_{obs}
Å	i-j			Å	i-j		
8002,28	$a^6S_{5/2}-a^6D_{9/2}$	18,0	57,1	8263,44	$a^3D_1-z^3P_1$	2,00	5,92
8127,53	$a^6S_{5/2}-a^6D_{7/2}$	27,0	82,8	8273,56	$a^3D_2-z^3P_2$	3,00	8,86
8231,93	$a^6S_{5/2}-a^6D_{5/2}$	30,0	90,7	8328,91	$a^3D_2-z^3P_0$	2,00	5,82
8310,77	$a^6S_{5/2}-a^6D_{3/2}$	19,0	55,5	8349,57	$a^3D_3-z^3P_2$	6,00	17,4
8359,94	$a^6S_{5/2}-a^6D_{1/2}$	12,0	34,7				

Cuadro 6.1: Intensidades de las líneas prohibidas del Escandio y el Cromo medidas en Noviembre del 2001 y Diciembre del 2002, respectivamente. Las unidades de la intensidad son $10^{-13} erg cm^{-2} s^{-1} arcsec^{-2}$.

λ	$I(\lambda)/I([\lambda 8349, 57])$		
	Observada	Teórica	
		$w = 1 \times 10^{-10}$	$w = 5 \times 10^{-10}$
8263,44	0,34±0,03	0,52	0,52
8273,56	0,51±0,05	0,66	0,66
8328,91	0,33±0,03	0,38	0,37
8349,57	1,00 ±0,1	1,00	1,00

Cuadro 6.2: Comparación entre las intensidades de línea prohibidas teóricas y, las observadas en Dic02 del espectro del escandio (Sc II). Las intensidades de las líneas son relativas a la intensidad de $I([\lambda 8349, 57])$. El espectro teórico fué calculado para $w = 1 \times 10^{-10}$ y $w = 5 \times 10^{-10}$, ambos con $T_e = 6000 K$, and $N_e = 10^7 cm^{-3}$.

bien con los observados para un rango de densidades de 10^7 y $10^8 cm^{-3}$.

Nosotros encontramos por inspección de estos cocientes, un valor para el logaritmo del factor de dilución alrededor de -10 y una temperatura de $6000 K$.

El hecho de que nosotros hayamos encontrado con estos cocientes, un valor para el factor de dilución mas bajo, se debe a la posición de la rendija del espectrógrafo, escogida en las observaciones de Noviembre del 2001. Esta posición es perpendicular al eje polar, el cual sale de la estrella en la dirección del del pequeño Homúnculo (Figuras 5.5 y 5.6 del Capitulo 1).

Nosotros corregimos por extinción y calculamos las intensidades teóricas de las

λ	$I(\lambda)/I([\lambda 8231, 93])$						
	<i>Obs.</i>	$w = 10^{-10}$			$w = 5 \times 10^{-10}$		
		$10^6 cm^{-3}$	$10^7 cm^{-3}$	$10^8 cm^{-3}$	$10^6 cm^{-3}$	$10^7 cm^{-3}$	$10^8 cm^{-3}$
[8002, 28]	0,63±0,13	1,50	1,40	1,40	1,76	1,50	1,45
[8127, 531]	0,91±0,18	1,25	1,20	1,20	1,36	1,25	1,23
[8231, 93]	1,00±0,20	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
[8310, 77]	0,61±0,12	0,75	0,81	0,81	0,68	0,78	0,81
[8359, 94]	0,38±0,08	0,35	0,38	0,38	0,32	0,37	0,38

Cuadro 6.3: Comparación entre las intensidades teóricas y las intensidades medidas de las líneas prohibidas, del espectro del cromo (Cr II) observado en Nov01. Las intensidades de las líneas son relativas a la intensidad de la línea I($[\lambda 8231, 93]$). El espectro teórico fue calculado para $w = 10^{-10}$, $N_e = 10^6, 10^7, 10^8 cm^{-3}$ y $w = 5 \times 10^{-10}$, $N_e = 10^6, 10^7, 10^8 cm^{-3}$, ambos con $T = 6000K$.

líneas medidas, para dos valores del factor de dilución $w = 10^{-10}$ y $w = 5 \times 10^{-10}$ y los tres valores de la densidad electrónica $10^6, 10^7$ y $10^8 cm^{-3}$, Tabla 6.3. Las correcciones por extinción debidas al polvo en el filamento de estroncio, fueron hechas siguiendo la ley de extinción descrita en la ecuación (2.34) del Capítulo 2.

6.2. Abundancia del escandio en el filamento de estroncio

Una vez determinadas las condiciones físicas en el filamento de estroncio y modelado el espectro del escandio, nosotros calculamos la abundancia relativa de escandio. Dos estados sucesivos de ionización observados, como por ejemplo Sc I y Sc II, junto con sus abundancias relativas pueden ser usadas para construir una curva de ionización empírica dada por, $N(\text{Sc II})/N(\text{Sc I})$ como una función del potencial de ionización.

Nosotros calculamos la abundancia del Sc relativa al Ni a partir de la ecuación (2.41) descrita en el Capítulo 2. El cociente de abundancia del escandio, $N(\text{Sc I})/N(\text{Sc II})$ es aproximadamente igual al cociente de abundancia del Niquel, $N(\text{Ni I})/N(\text{Ni II})$, debido a que sus potenciales de ionización son muy similares. Entonces, nosotros encontramos que $N(\text{Sc I})/N(\text{Ni I}) \approx N(\text{Sc II})/N(\text{Ni II}) \approx 0,05$ en la fase de gas. Este

valor resulta ser significativamente mas alto que el cociente de abundancia solar, el cual es de $\sim 0,0007$. En otras palabras, el cociente de abundancia $N(\text{Sc II})/N(\text{Ni II})$ en la fase de gas, en el filamento de estroncio, es aproximadamente 10 veces mas abundante que el valor solar.

En trabajos anteriores [29], se calculó el cociente de abundancia de titanio relativo al niquel ($N(\text{Ti II})/N(\text{Ni II})$), el cual resulto ser dos ordenes de magnitud más grande que el valor solar. La sobre abundancia observada del titanio y el escandio respecto al niquel son bastante importantes. Sin embargo, tales sobre abundancias son solo representativas de la fase de gas, más que de las abundancias absolutas o totales, ya que bajo las condiciones del filamento de estroncio, aproximadamente el 90 % del Ni esta condensado en granos.

Las temperaturas de condensación dependen de la composición del gas y de la presión, en un gas de composición solar con $C/O = 0,5$, el titanio condensa como *titanato de calcio* (por ejemplo, CaTiO_3) y el escandio condensa en *hibonito* Sc_2O_3 , [54]. Sin embargo, estas condensaciones no ocurren en el filamento de estroncio, dada la ausencia de oxigeno en la fase de gas, por lo tanto el escandio, así como el titanio se encuentran en su fase de gas, mostrandose sobre abundantes.

Capítulo 7

Conclusiones

La importancia que tiene η Carinae y en particular el *filamento de estroncio* para la astronomía, radica principalmente en la complejidad de su espectro. El *filamento de estroncio* muestra una emisión nebular inusual, ya que la mayoría de las líneas de emisión, pertenecen al grupo del hierro y son observadas en un estado neutro o simplemente ionizado. Por otro lado, no se han identificado líneas de hidrogeno, helio, nitrógeno u oxígeno, las cuales caracterizan una región de emisión normal.

Estudiamos el espectro del Sc II observado en Diciembre del 2002 y, el espectro del Cr II observado en Noviembre del 2001, con el espectrógrafo del Telescopio Espacial Hubble “Space Telescope Imaging Spectrograph”.

Los datos atómicos tanto para el ion cromo como para el ion escandio, fueron calculados considerando procesos de excitación colisional y por fluorescencia por Bautista, [32], y fueron utilizados en el presente trabajo para hacer el modelamiento de los espectros del cromo y el escandio.

Se estudiaron las incertidumbres asociadas a los datos atómicos, comparando con fuentes confiables nuestros valores de las probabilidades de la transición. Se encontro, que nuestros datos atómicos se ajustan bastante bien a los datos experimentales publicados.

A partir de los cocientes de intensidad de las líneas del espectro teórico y experimental, diagnosticamos las condiciones físicas en el *filamento de estroncio*.

Los resultados obtenidos, son generalmente consistentes con los calculados anteriormente, utilizando líneas de: [Sr II], Sr II, [Ti II], Ti II, [Ni II] y Ni II.

Los cuales son: para la densidad electrónica $N_e \approx 10^7 \text{ cm}^{-3}$, para la temperatura $T=6000\pm1000 \text{ K}$ y para el factor de dilución $\log_{10} w \approx -10\pm0,5$. En un campo de radiación con temperatura de 35000 K .

Las intensidades de las líneas prohibidas de ambos iones, calculadas con los parámetros físicos diagnosticados, resultaron bastante aproximadas a las intensidades medidas de los espectros observados, las cuales fueron corregidas por extinción interestelar.

El estudio de la emisión de [Sc II] observado, revela una gran sobreabundancia de Sc en la fase de gas respecto al Ni y, relativo a la abundancia solar. El cual resultó ser aproximadamente, 10 veces más abundante que el valor de la abundancia solar. Nosotros estudiamos la química del Sc en un gas procesado por el ciclo CNO y encontramos que el Sc condensa como Sc_2O_3 , pero tal proceso no puede ocurrir en el *filamento de estroncio*, dada la ausencia de oxígeno en esta región.

Esta explicación para el inusual cociente de abundancia $N[\text{Sc II}]/N[\text{Ni II}]$, requiere que grandes cantidades de polvo y moléculas se hayan formado en este material poco tiempo después de la *Gran erupción*, causando que la mayor parte del oxígeno fuera consumido en los procesos de formación de polvo y moléculas.

Mucha información acerca de la evolución del sistema binario de η Carina y de su plasma circundante, puede ser derivada de las observaciones espectroscópicas. Sin embargo, la fiabilidad de la astrofísica inferida dependerá de la certeza de los datos atómicos usados para interpretar los espectros observados. Por lo tanto, mucho trabajo en física atómica es aún necesario.

Varios elementos del grupo hierro están aún por ser estudiados, como lo son por ejemplo el vanadio y el cobalto, con el estudio de estos elementos el filamento de estroncio podrá ser finalmente caracterizado y mucha información acerca de los procesos físicos y químicos presentes en esta región podrán ser entendidos. Por otro lado, es importante seguir trabajando en el mejoramiento de los datos atómicos necesarios para el modelamiento de los espectros, ya que serán las bajas incertidumbres pre-

sentes en estos datos las que nos permitiran hacer un buen estudio de la astrofísica involucrada en el problema.

Hoy día varios grupos como; FERRUM PROJECT en Suecia, uno en la Ohio State University en Estados Unidos y en el Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas en Venezuela, trabajan en el mejoramiento de los datos atómicos.

Bibliografía

- [1] R. Humphreys y K. Davidson, "Conference Introduction", ASP Conference Series, 179, 1999.
- [2] E. Gaviola, "Eta Carinae. I. The Nebulosity", ApJ, 111, 1950.
- [3] A. D. Thackeray, "The spectrum of eta Carinae", 71, 1951.
- [4] J. A. Westphal y G. Neubebauer, "Infrared Observations of Eta Carinae to 20 Microns", ApJ, 156, 1969.
- [5] K. Davidson, R. J. Dufour y N. R. Walborn, "CNO-Cycled material ejected by eta Carinae", IAU, 261, 1984.
- [6] M. Martins, K. Godehusen, T. Richter, P. Wernet and P. Zimmermann, "Open shells and multi-electron interactions: core level photoionization of the 3d metal atoms" , J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys, V.39, 2006.
- [7] M. Blume, R. Watson, "Theory of spin-orbit coupling in atoms. I. Derivation of the Spin-Orbit Coupling Constant", Proc. R. Soc. Lond, 270, 1962.
- [8] P. Burke, A. Hibbert y W. Robb, "Electron scattering by complex atoms", J. Phys. B: At. Mol. Phys, 4, 1971.
- [9] D. Hummer, K. Berrington, W. Eissner, A. Pradhan, H. Saraph y J. Tully, "Atomic data from the IRON project. I: goals and methods", A&A, 279, 1993.
- [10] M. Bautista, "Atomic data from iron project: XIX. Photoionization cross section and oscillator strengths for Ni II", A&A, 137, 1999.
- [11] J. C. Slater, "The theory of complex spectra", Phys. Rev.,V.34, 1929.

- [12] R. Bruhn, B. Sonntag y H. Wolff, "3p excitation of atomic and metallic Fe, Co, Ni y Cu", J. Phys. B: At. Mol. Phys. 12, 1979.
- [13] S. Whitfield, K. Kehoe, R. Wehlitz, M. Krause y C. Caldwell, "Photoelectron spectrometry of atomic scandium in the region of the 3p→3d giant resonance", Phys. Rev. A, 64, 2001.
- [14] K. Godehusen, T. Richter, P. Zimmermann y M. Martins, "Ion charge resolved 3p photoabsorption measurements of atomic Cr", J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 36, 2003.
- [15] H. Feist, M. Feldt, Ch. Gerth, M. Martins, P. Sladeczek, "3p-photoionization resonances of atomic Fe, Co, y Ni studied by the observation of singly and doubly charged photoions", Phys. Rev. A 53, 1996.
- [16] M. Martins, "On the 3p→3d photo excitation of atomic scandium", Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., V.35, 2002.
- [17] B. Sonntag y P. Zimmermann, "XUV spectroscopy of metal atoms", Rep. Prog. Phys., V.55, 1992.
- [18] Th. Dohrmann, A. Von dem Borne, A. Verweyen, B. Sonntag, M. Wedowski, K. Godehusen, P. Zimmermann y V. Dolmatov, "Resonant inner-shell photoelectron spectra of ground-state and laser-excited Cr atoms", J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 29, 1996.
- [19] K. Godehusen, T. Richter, P. Zimmermann y M. Martins, "Ion resolved 3p photoabsorption measurements of atomic Cr", J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 36, 2003.
- [20] N. R. Badnell, "AUTOSTRUCTURE", J. Phys. B, V.19, 1986.
- [21] W. Eissner, M. Jones y H. Nussbaumer, "SUPERSTRUCTURE ", Comput. Phys. Commun., V.8, 1974.
- [22] J. Connerade, M. Martin y M. Mansfield, "Observation of a giant resonance in the 3p absorption spectrum of Mn I", Proc. R. Soc. Lond. A, 350, 1976.

- [23] "Grupo de Química Aplicada, Universidad de Birmingham, Reino Unido", <http://www.aacg.bham.ac.uk/>.
- [24] L. Spitzer, "Physical processes in the interstellar medium", wiley classics library edition published, 1998.
- [25] M. Bautista, P. Jianfang, y K. P. Anil, " Exitaction of [Ni II] and [Fe II] lines in gaseous nebulae", ApJ. 460, 1996.
- [26] L. B. Lucy, "Fluorescent excitation of [Ni II] lines in the spectra of gaseous nebulae", A&A, 294, 1995.
- [27] C. Cohen-Tannoudji, D. Bernard, L. Franck, "Quantum mechanics", Volumen II, 1977.
- [28] J. A. Cardelli, G. C. Clayton, y J. S. Mathis, "The relationship between infrared, optical, and ultraviolet extinction " ApJ, 345, 1989.
- [29] M. Bautista, H. Hartman, T. Gull, N. Smith, K. Lodders, "[Ti III] and [Ni III] emission from the strontium filament of η Carinae ", Mon. Not. R. Astron. S oc, 370, 2006.
- [30] D. E. Osterbrock, "Astrophysics of Gaseous Nebulae", Primera Edición, 1974.
- [31] M. Bautista, T. R. Kallman, "The xstar atomic database", ApJ. 134, 2001.
- [32] M. Bautista, C. Ballance, T. R. Gull, H. Hartman, K. Lodders, M. Martínez y M. Melendez "[Sc II] and [Cr II] emission from the strontium filament of η Carinae", En preparación.
- [33] "National Institute of Standards and Technology (NIST)", <http://www.nist.gov>
- [34] M. Bautista y T. R. Kallman, "Atomic Data and Spectral Processes in XSTAR v.2 ", AAS. 31, 1999.
- [35] "Base de datos atómicos de Kurucz", <http://www.pmp.uni-hannover.de/cgi-bin/ssi/test/kurucz/sekur.html>

- [36] H. Nilsson, G. Ljung, H. Lundberg, K. E. Nielsen, "The FERRUM project: improved experimental oscillator strengths in Cr II", *A&A*, 445, 2006.
- [37] B. E. Woodgate y R. A. Kimble, "Space Teles Imaging Spectrograph (STIS) Capabilities and Future Detector Prospects", *ASP*, 164, 1999.
- [38] B. E. Woodgate, R. A. Kimble, C. W. Bowers, S. Kraemer, M. E. Kaiser, A. C. Danks, J. F. Grady, J. J. Loiacono, M. Brumfield, L. Feiberg, T. R. Gull, S. R. Heap, S. P. Maran, D. Lindler, D. Hood, W. Meyer, C. VanHouten, V. Argabright, S. Franka, R. Bybee, D. Dorn, M. Bottema, R. Woodruff, D. Michika, J. Sullivan, J. Hetlinger, C. Ludtke, R. Stocker, A. Delamere, D. Rose, I. Becker, D. Michika, J. Sullivan, J. Hetlinger, C. Ludtke, R. Stocker, A. Delamere, D. Rose, I. Becker, H. Garner, J. G. Timothy, M. Blouke, C. L. Joseph, G. Harting, R. F. Green, E. B. Jenkins, J. L. Linsky, J. B. Hutchings, H. W. Moos, A. Boggesss, F. Roesler, y D. Weistrop, "The Space Telescope Imaging Spectrograph Desing", *ASP*, 110, 1998.
- [39] T. R. Gull, K. Ishibashi y K. Davidson, "First observation of η Carinae with the Space Telescope Imaging Spectrograph", *ASP Conference Series*, 179, 1999.
- [40] D. Kris, "Basic Parameters of Eta Carinae", *ASP Conference Series*, 179, 1999.
- [41] P. A. Whitelock, M. W. Feast, C. Koen, G. Roberts, y B. S. Carter, "Variability of η Carinae", *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 270, 1994.
- [42] A. Damineli, A. Kaufer, B. Wolf, O. Stahl, Dalton, Lopes, Francisco de Araújo, " η Carinae: Binarity Confirmed", *ApJ*. 528, 2000.
- [43] A. Damineli, "The 5.52 year cycle of Eta Carinae", *ApJ*. 460, 1996.
- [44] N. Soker, "Accretion by the secondary in η Carinae during the spectroscopic event. I. Flow Parameters", *ApJ*. 635, 2005.
- [45] E. Verner, F. Bruhweiler y T. Gull, "The binarity of η Carinae revealed from photoionization modeling of the spectral variability of the weigelt blobs B and D", *ApJ*. 624, 2005.

- [46] N. Soker, "Accretion by the secondary in η Carinae during the spectroscopic event. IV. The disappearance of highly ionized lines", *ApJ*. 661, 2007.
- [47] D. John Hillier, "The central star of η Carinae ", *ASP Conference Series*, 179, 1999.
- [48] D. Kris, Kazunori, T. R. Gull, R. M. Humphreys, *HST/STIS Observations of the star during its recent event*, *ASP Conference Series*, 179, 1999.
- [49] H. Hartman, T. Gull, S. Johansson, N. Smith, and HST Eta Carinae Treasury Project Team, "Identification of emission lines in the low-ionization strontium filament near Eta Carinae", *A&A*, 419, 2004.
- [50] N. Smith, J. A. Morse, N. R. Collins y T. R. Gull, "The purple haze of η Carinae: Binary-induced variability?", *ApJ*. 610, 2004.
- [51] A. M. van Genderen, C. Sterken, W. H. Allen y W. S. G. Walker, "An overview of the photometric events, trends and brightenings of η Cariane", *The. J. of Astron. Data*, 12, 2006.
- [52] M. Bautista, T. Gull, K. Ishibashi, H. Hartman and K. Davidson, "Excitation of Sr II lines in Eta Carinae", *Mon. Not. R. Astron. Soc*, 331, 2002.
- [53] T. Zethson, T. Gull, H. Hartman, S. Johansson, "Sr II and [Sr II] emission in the ejecta of η Carinae", *ApJ*, 122, 2001.
- [54] Katherina Lodders, "Solar system abundances and condensation temperatures of the elements ", *ApJ*, 591, 2003.