

分子線データの扱い方(1) TiO

1. 基礎データ

■ Kurucz/ molecules/tio

以下のようなファイル構成

Index of /molecules/tio

Icon	Name	Last modified	Size	Description
[DIR]	Parent Directory		-	
[TXT]	eschw46. asc	13-Apr-2011 14:29	8. 5M	
[TXT]	eschw47. asc	13-Apr-2011 14:30	8. 5M	
[TXT]	eschw48. asc	13-Apr-2011 14:30	8. 5M	
[TXT]	eschw49. asc	13-Apr-2011 14:30	8. 5M	
[TXT]	eschw50. asc	13-Apr-2011 14:30	8. 5M	
[]	eschwbin. com	13-Apr-2011 14:30	329	
[]	eschwbin. for	13-Apr-2011 14:30	796	
[]	rschwenk. for	13-Apr-2011 14:30	7. 1K	
[]	rtiobinasc. com	13-Apr-2011 14:30	166	
[]	rtiobinasc. for	13-Apr-2011 14:30	534	
[]	rtiobincard. com	13-Apr-2011 14:30	208	
[]	rtiobincard. for	13-Apr-2011 14:30	1. 8K	
[TXT]	schwenke. readme	13-Apr-2011 14:30	2. 5K	
[]	tioberkeley. dat	13-Apr-2011 14:30	1. 9M	
[]	tiopart. com	13-Apr-2011 14:30	145	
[]	tiopart. dat	13-Apr-2011 14:30	39K	
[]	tiopart. for	13-Apr-2011 14:30	515	
[TXT]	tioschwenke. asc	13-Apr-2011 14:30	1. 7G	
[]	tioschwenke. bin	13-Apr-2011 14:34	576M	
[CMP]	tioschwenke. idasc-gz	13-Apr-2011 14:42	678M	
[]	tioschwenkepartfn. dat	13-Apr-2011 14:44	38K	
[TXT]	tiototo. asc	06-Feb-2020 13:10	8. 4G	
[]	tiototo. bin	06-Feb-2020 13:25	2. 4G	
[TXT]	tiototoair. asc	06-Feb-2020 13:17	8. 4G	

このように各種あって困る。atlas12 で使うのが tioschwenke. bin なので、これを基本にしよう。

■TiO 元データ : tioschwenke.bin/ tioschwenke.asc – Kurucz の HP から 590MB、37,744,499 行

340.0136	-4.627	23.0	4228.699	24.0	33630.848822X04p1	C19m1	48
340.0136	-4.627	23.0	4228.699	24.0	33630.848822X04m1	C19p1	48
340.0655	-4.610	24.0	4253.442	25.0	33651.116822X04m1	C19p1	48
340.0655	-4.610	24.0	4253.442	25.0	33651.116822X04p1	C19m1	48
340.0916	-4.616	25.0	4379.694	26.0	33775.091822X04p2	C19m2	48
340.0916	-4.616	25.0	4379.694	26.0	33775.091822X04m2	C19p2	48

・元データ schw46.asc.txt/-- schw50.asc.txt

5つの同位元素についての Schwenke のエネルギー・レベルのデータ

11838.95605	0E00p1	1	2.331E+05
12755.66932	0E01p1	2	2.191E+05
13661.77927	0E02p1	3	2.082E+05
14557.29432	0E03p1	4	1.985E+05
15442.21410	0E04p1	5	1.889E+05

・元データ tioschwenkepartfn.dat

分配関数らしい。内容不明

T	46TiO	47TiO	48TiO	49TiO	50TiO
10	28.829	28.970	29.107	29.240	29.369
20	54.866	55.151	55.425	55.692	55.950
30	81.572	82.002	82.417	82.821	83.212
40	110.039	110.625	111.190	111.741	112.273
50	141.079	141.834	142.564	143.273	143.960

・Kurucz CDROM No. 24: TiO linelist from Schwenke (1998)

This CD contains the TiO linelist described by David W. Schwenke in Faraday Discussion, 109, pp 321-334, 1998.

Transitions among the states X, a, E, d, A, g, b, B, D, h, C, c, and f are computed up through V 19 and J 300 for isotopomers 46Ti16O, 47Ti16O, 48Ti16O, 49Ti16O, and 50Ti16O.

I have edited the data into one large file SCHWENKE.BIN containing lines packed 16 bytes per line and 8000 bytes per block as was done for my old TiO file on CDROM 15.

The linelist was edited down to fit on one CD.

There are 37,744,499 lines in one 576MB file.

Each record has wavelength, log gf, the lower energy (in whole cm⁻¹), and indices for the lower and the upper energy levels.

この CD には、Faraday Discussion、109、321 ~ 334 ページ、1998 年に David W. Schwenke によって説明された TiO

ラインリストが含まれています。

状態 X、a、E、d、A、g、b、B、D、h、C、c、f 間の遷移は、アイソトプマー 46Ti16O、47Ti16O、48Ti16O、49Ti16O、および 50Ti16O。

CDROM 15 にある古い TiO ファイルの場合と同様に、データを 1 つの大きなファイル SCHWENKE.BIN に編集しました。このファイルには、1 行あたり 16 バイト、ブロックあたり 8000 バイトが詰め込まれた行が含まれています。

ラインリストは 1 枚の CD に収まるように編集されました。

1 つの 576MB ファイルには 37,744,499 行があります。

各レコードには、波長、log gf、下位エネルギー (cm⁻¹ 単位)、および下位および上位エネルギー レベルのインデックスが含まれていません。

There are 269300 eigenvalues for each isotope.

These are listed in ASCII files ESCHW46.ASC, ESCHW47.ASC, ESCHW48.ASC, ESCHW49.ASC, and ESCHW50.ASC with the J and the strongest eigenvector component label for each level.

Schwenke's parities 1 and 2 are labelled p and m standing for plus and minus.

There are no observed energies.

I will eventually put in FTS laboratory energies where they exist.

The program ESCHWENK.FOR is run by the user to merge the energy files into one binary file ESCHWENK.BIN.

各同位体には 269300 の固有値があります。

これらは、ASCII ファイル ESCHW46.ASC、ESCHW47.ASC、ESCHW48.ASC、ESCHW49.ASC、および ESCHW50.ASC にリストされ、各レベルの J および最強の固有ベクトル コンポーネント ラベルが付けられます。

シュヴェンケのパリティ 1 と 2 には、プラスとマイナスを表す p と m というラベルが付いています。

観測されたエネルギーはありません。

私は最終的には、FTS の研究室が存在する場所にそのエネルギーを投入するつもりです。

プログラム ESCHWENK.FOR は、エネルギー ファイルを 1 つのバイナリ ファイル ESCHWENK.BIN にマージするためにユーザーによって実行されます。

The data in file SCHWENKE.BIN are sufficient for computing opacities.

They can be used with my spectrum synthesis program SYNTHÉ, distribution function program DFSYNTHÉ, or opacity sampling model atmosphere program ATLAS12.

The program RSCHWENK.FOR reads SCHWENKE.BIN and ESCHWENK.BIN and regenerates all the information for each line for detailed line identification in SYNTHÉ.

RSCHWENK.FOR can be used as a guide for programming other applications.

The file SCHWENKE.BIN is packed in Digital byte order.

On other computers it may be necessary to do byte rotation to read the integers.

That coding is included in RSCHWENK.FOR.

ファイル SCHWENKE.BIN 内のデータは、不透明度を計算するのに十分です。

これらは、スペクトル合成プログラム SYNTHÉ、分布関数プログラム DFSYNTHÉ、または不透明度サンプリング モデル大気プログラム ATLAS12 で使用できます。

プログラム RSCHWENK.FOR は、SCHWENKE.BIN と ESCHWENK.BIN を読み取り、SYNTHÉ で詳細な行を識別するために各行のすべての情報を再生成します。

RSCHWENK.FOR は、他のアプリケーションをプログラミングするためのガイドとして使用できます。

ファイル SCHWENKE.BIN はデジタル バイト オーダーでパックされています。

他のコンピュータでは、整数を読み取るためにバイト ローテーションを行う必要がある場合があります。

そのコーディングは RSCHWENK.FOR に含まれています。

A program for computing the partition function and the resulting table is also included.

分配関数とその結果のテーブルを計算するプログラムも含まれています。

Under VMS the mount command to read the ASCII files is

```
$MOUNT/MEDIA=CDROM/UNDEFINED_FAT=(STREAM_CR:132) (cdreader): CDROM24 CDROM24
```

The mount command to read SCHWENKE.BIN is

```
$MOUNT/MEDIA=CDROM/UNDEFINED_FAT=(FIXED:NONE:16) (cdreader): CDROM24 CDROM24
```

I thank Dr. Schwenke for sending me the TiO data on 8mm tape. His email address is schwenke@pegasus.arc.nasa.gov.

Robert Kurucz

19 January 1999

■ TiO 元データ : tiototo.bin/tiototo.asc

内容不明

333.2375	-7.609	65.0	5271.745	66.0	35271.724	822X03e	C19e	50	717	29999.996
333.2375	-7.609	65.0	5271.745	66.0	35271.724	822X03f	C19f	50	717	29999.996
333.2377	-7.844	81.0	10085.004	80.0	40084.981	822X07e	C26e	50	704	29999.977
333.2377	-7.844	81.0	10085.004	80.0	40084.981	822X07f	C26f	50	704	29999.977
333.2378	-7.976	78.0	12556.088	79.0	42556.059	822X10f	C29f	50	749	29999.971

■ TiO 元データ : tioberkeley.dat

内容不明

TiO linelist from John G. Phillips

University of California, Berkeley

system 1	alpha	C-X
2	beta	c-a
3	gamma	A-X
4	gamma	B-X
5	delta	b-a
6	1Sig-1Sig	e-d

intensity

WL (Ang)	A	F	cm-1	system	band	branch	J
4113.696	44	0	24302.18	6	0,0	R	6
4113.696	44	0	24302.18	6	0,0	R	7

```
4113.696 44 0 24302.18 6 0,0 R 8
4113.696 44 0 24302.18 6 0,0 R 9
```

2. 使い方

■ Krmgf-tio.for

tioschwenke.asc は長すぎて扱いにくい。1 つになっているので保管、移動は楽なのだが。

竹田さんの readmgf.for を少し改造。TiO は受け付けないので、TiO の下記のデータを追加（どこから持ってきたのか？）

```
c -k- 2023.5.3.-----
c based on Dr. Kurucz's RMOLEC.FOR in his CD-ROM 18
c This program reads molecular line data from the ORIGINAL files
c contained in ASCLINES directory in KURUCZ CD-ROM 18
c and write them out to a file in an appropriate format

C TiO
  NELION=366
  FUDGE=0.00
  ISO1=16
  ISO2=46
  X1=0.
  X2=-1.101
```

これで次のように spshow にかかると形にできた

```
WRITE (10, 222) CODE, WL*10., EXPOT, GFLOG, GAMMAR, GAMMAS, GAMMAW, ISO
222 FORMAT (F9. 2, F10. 3, F8. 3, F8. 3, 3F7. 2, I4)
```

■ まとめる - tio-select.for

tioschwenke.asc は長すぎて扱いにくい。1 つになっているので保管、移動は楽なのだが。

たとえば、5995A から 5996A までの 1 A 幅に 9586 本が登録。これをまともに採用すると spshow でせいぜい 1A 幅しかとれず、観測との比較などは覚束ない。

そこで、何らかの平均的な操作が必要とされる。また、これだけの数があると分解能 1 万のスペクトルでは全領域にすき間なく TiO 線が入って来て、連続部と見えてしまう。

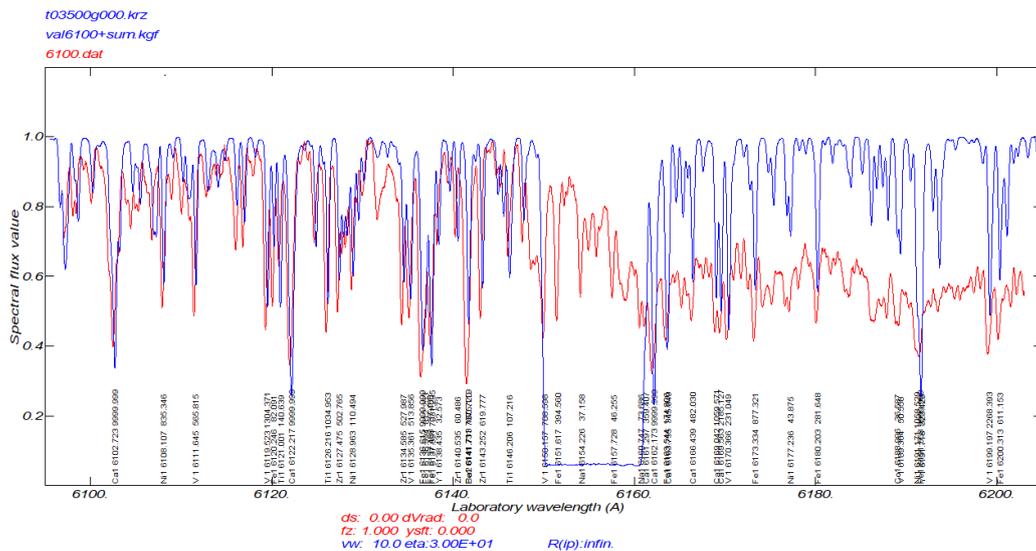
```
c -k- 2023.5.4.-----
c 領域内で最も励起ポテンシャルの低いものを代表とする。
c 励起ポテンシャルの平均化より良いが強くなりすぎるのが欠点。
c spshow 用に切り分けたファイルでも十分大きく、せいぜい 1 A 幅しかとれない！
c 同じにたくさんあるのが大きな要因。そこで、励起ポテンシャルは平均的な
c 値とし、gf 値は和として同じ波長データをまとめてしまう。
```

c さらに、0.05A 内はまとめてしまう。

c -k- -----

という趣旨と内容で作成。

822.00	5895.000	0.017	1.192	0.00	0.00	0.00	46
822.00	5895.050	0.028	1.157	0.00	0.00	0.00	49
822.00	5895.100	0.015	1.238	0.00	0.00	0.00	47
822.00	5895.150	0.032	1.188	0.00	0.00	0.00	47
822.00	5895.200	0.037	1.247	0.00	0.00	0.00	49
822.00	5895.250	0.074	1.286	0.00	0.00	0.00	46
822.00	5895.300	0.015	1.138	0.00	0.00	0.00	46

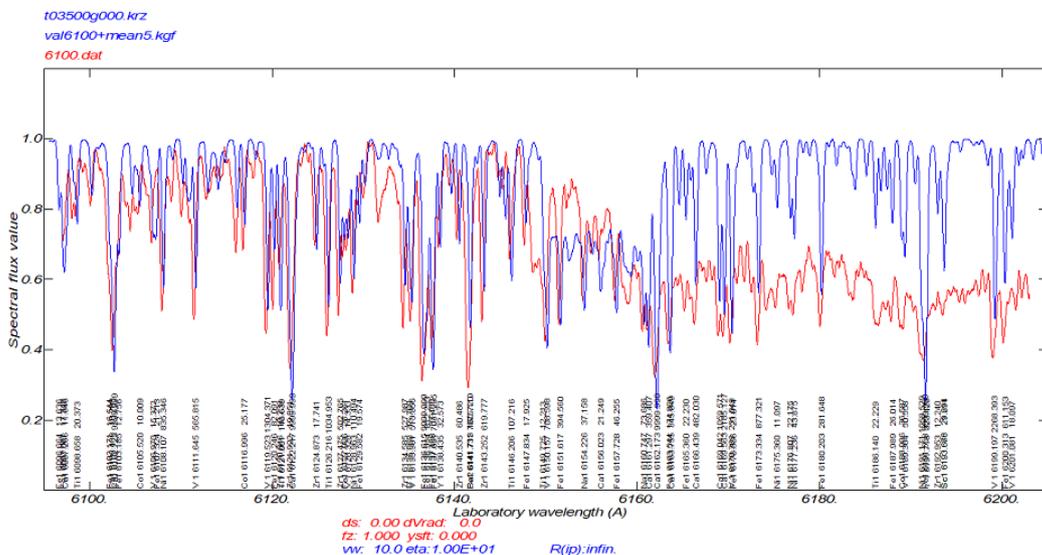


6150-6160A で TiO を 0.05A 毎に合計した。線が密なため連続部のようにになっている。

■ まとめる - tio-mean5.for

上は単純すぎた。そこで、各線について

$$e^{-\chi/kT}$$



をかけて、0.05A 幅に入る線で和を求める。最後はその和 xk から平均 xk を求め、

$$XX = -(\log \bar{xk}) * T/k$$

とし、これをある種の平均的な励起ポテンシャルと見なす。

何となくリアルっぽい様相となっている。

しかし、理論的根拠は薄弱。

上のグラフは 6140-6160Å の間だけで見た。

■成長曲線による等価幅評価 - molcog.for

成長曲線は横軸に $\log(gf\lambda) - \chi\theta$ 、縦軸に $\log(W_\lambda/\lambda)$ をとり、両者を合わせるため縦横にスライドさせ、その移動量が元素量と微小乱流速度に対応するとする。つまり、

$$\log(W_\lambda/\lambda) + \Delta y = \log(gf\lambda) - \chi\theta + \Delta x$$

と書けるとする。

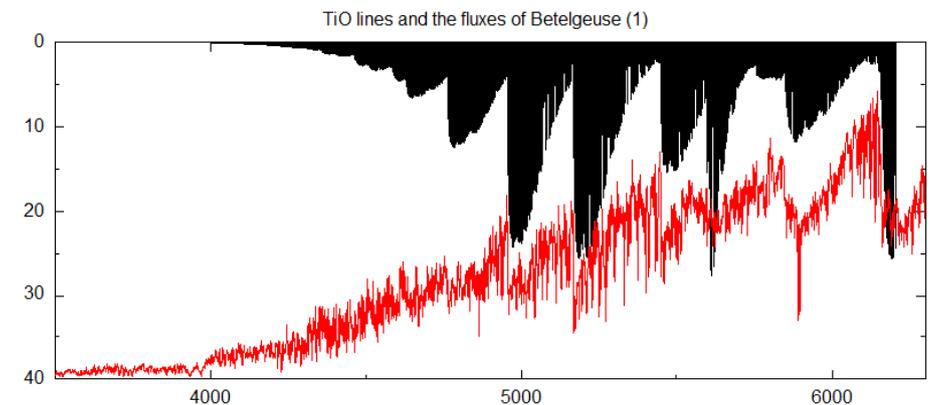
これから、

$$\log W_\lambda = \log(gf) + 2 \log(\lambda) - \chi\theta + (\Delta x - \Delta y)$$

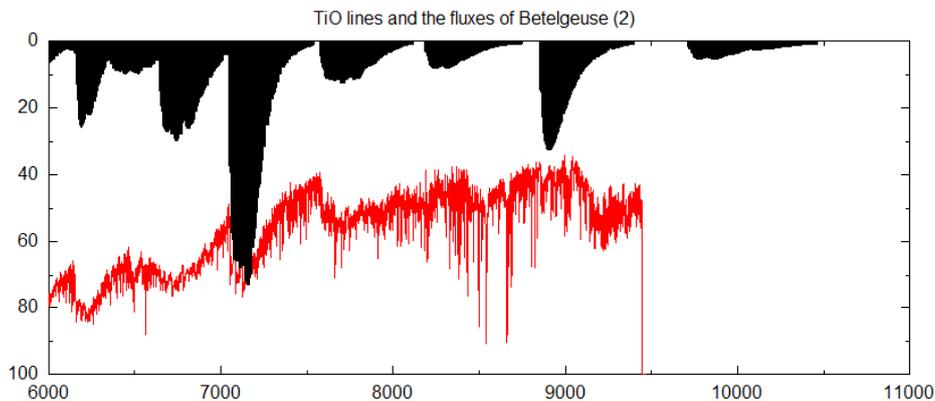
として等価幅 W_λ を評価することができる。

ただし、 $(\Delta x - \Delta y)$ だけの不定性が残る。

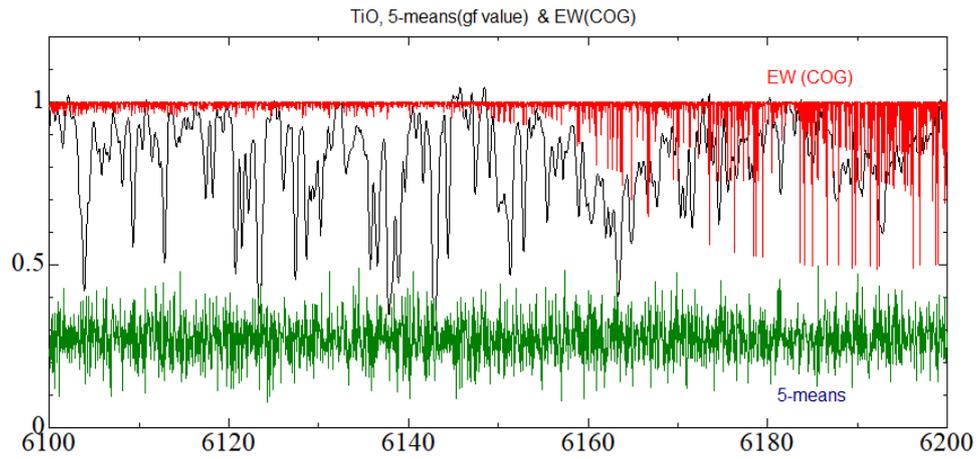
これによって等価幅で線を絞ることができる。



$T_{\text{exe}} = 3500\text{K}$ 、Betelgeuse の大局的な傾向にまずまず対応。8200Å 辺りは良くない。



そして、5-means だけでもデータは極めて多く、当然ながらその強弱を gf 値のみでは判定できない。



緑線は 5-means の gf 値。赤の EW は COG から。