



CHALMERS

Från is till gas: metanol runt unga stjärnor

En studie av gas- och isfas med observationer från APEX

From Ice to Gas: Methanol Around Young Stars

A Study of Gas- and Ice-Phase Methanol Using APEX Observations

Medlemmar:

Hood Adam
Lind Molly
Zeitouni Mariam

Handledare:

Wirström Eva
Carl Tadeus

Examinator:

Thomasson Magnus

Kandidatarbete vid Rymd-, geo- och miljövetenskap institutionen
SEEX16 FYP415-VT26-06A

13 maj 2026

Abstract

This candidate thesis investigates the presence of CH₃OH (methanol) in the interstellar medium surrounding six young protostars: IRAS15398, CrAIRS5, CrAIRS7b, HH100IRS, HH46IRS, and ChaINa2. Methanol is a key molecule in astrochemistry as it primarily forms through the hydrogenation of CO (carbon monoxide) on cold dust grains, serving as a precursor to more complex organic molecules. The aim of this study is to determine the gas-phase methanol abundance through the analysis of observational data from the APEX radio telescope and to examine its distribution in relation to previous ice-phase measurements.

The methodology includes spectral line analysis of ten selected rotational transitions within the frequency range of 193–242 GHz. By applying Gaussian fitting to the spectral lines, integrated intensities were calculated and used as the basis for determining column densities and excitation temperatures. The analysis was conducted both under the assumption of local thermodynamic equilibrium (LTE) using rotation diagrams, and through a non-LTE model to account for variations in excitation between different energy levels.

The results contribute to an increased understanding of how physical parameters such as temperature and density influence the transition of methanol from ice mantles to the gas phase. By comparing the abundances in the gas and ice phases, insights are gained into how chemical information is transported from the initial molecular cloud to emerging planetary systems. The study also highlights challenges in spectral line analysis, such as handling overlapping lines and atmospheric effects on measurement data.

Sammandrag

Detta kandidatarbete undersöker förekomsten av CH_3OH (metanol) i den interstellära miljön kring sex unga protostjärnor: IRAS15398, CrAIRS5, CrAIRS7b, HH100IRS, HH46IRS och ChaINa2. Metanol är en nyckelmolekyl inom astrokemi då den huvudsakligen bildas genom hydrogenering av CO (kolmonoxid) på kalla stoftkorn och fungerar som ett förstadium till mer komplexa organiska molekyler. Syftet med studien är att genom analys av observationsdata från radioteleskopet APEX bestämma metanolhalten i gasfas och undersöka dess fördelning i förhållande till tidigare mätningar i isfas.

Metodiken omfattar spektrallinjeanalys av tio utvalda rotationsövergångar inom frekvensintervallen 193–242 GHz. Genom Gaussanpassning av spektrallinjerna har integrerade intensiteter beräknats, vilka utgjort grunden för bestämning av kolumntätheter och excitationstemperaturer. Analysen har genomförts dels under antagande om lokal termodynamisk jämvikt (LTE) med hjälp av rotationsdiagram, och dels med en icke-LTE-modell för att ta hänsyn till variationer i excitation mellan olika energinivåer.

Resultaten bidrar till en ökad förståelse för hur fysiska parametrar såsom temperatur och densitet påverkar övergången av metanol från ismantlar till gasfas. Genom att jämföra gas- och isfasens halter ges insikter i hur kemisk information transporteras från det initiala molekylnolnet till blivande planetsystem. Studien belyser även utmaningar vid spektrallinjeanalys, såsom hantering av överlappande linjer och atmosfärisk påverkan på mätdata.

Innehållsförteckning

1	Inledning	1
1.1	Syfte	1
1.2	Teoretisk bakgrund	1
1.2.1	Stjärnors bildande och kopplingen till interstellär kemi	1
1.2.2	Astrokemisk ämnesbildning och metanol i interstellära mediet	2
1.2.3	Kvantmekaniska övergångsprocesser	3
1.2.4	Spektrallinjeanalys: Gaussanpassning och integrerad intensitet	3
1.2.5	Kolumntäthet	4
1.2.6	Rotationsdiagram: LTE och icke-LTE förhållanden	5
1.2.7	Observationstekniker och datareduktion	6
1.3	Frågeställning	9
1.4	Avgränsningar	9
1.5	Användning av AI-vertyg	10
2	Metod	11
2.1	Förarbete	11
2.2	Integrerad intensitet och rotationsdiagram	12
2.3	Kolumntäthet med LTE-beräkning	12
2.4	Kolumntäthet med icke-LTE-kod	12
3	Resultat	14
3.1	Integrerad intensitet med Gaussanpassningar	14
3.1.1	Hantering av överlappande spektrallinjer	16
3.1.2	Identifiering av en icke-metanol övergång	17
3.2	Rotationsdiagram	18
3.3	Kolumntäthet med LTE och gas/is-förhållandet	19
3.4	Kolumntäthet med icke-LTE	19
4	Diskussion	21
4.1	Tolkning och diskussion av resultat	21
4.1.1	Faktorer som påverkar metanolhalter i gasfas	21
4.1.2	Jämförelse av resultat med och utan LTE	21
4.1.3	Olika parametrars påverkan på gas/is-kvot	21
4.2	Framtida problemställningar och vidare forskning	22
4.3	Felkällor	22
4.3.1	Identifiering och korrigering av överlappande spektrallinjer	22
4.3.2	Begränsad detektion av spektrallinjer i källa 6	22
5	Slutsats	23
6	Källförteckning	24
7	Bilagor	25
7.1	Pythonkod för Gaussanpassning och beräkning av integrerad intensitet	25
7.2	Spektrallinjer med Gaussanpassningar	28
7.3	Tabell för rotationsdiagramdata	40

1 Inledning

1.1 Syfte

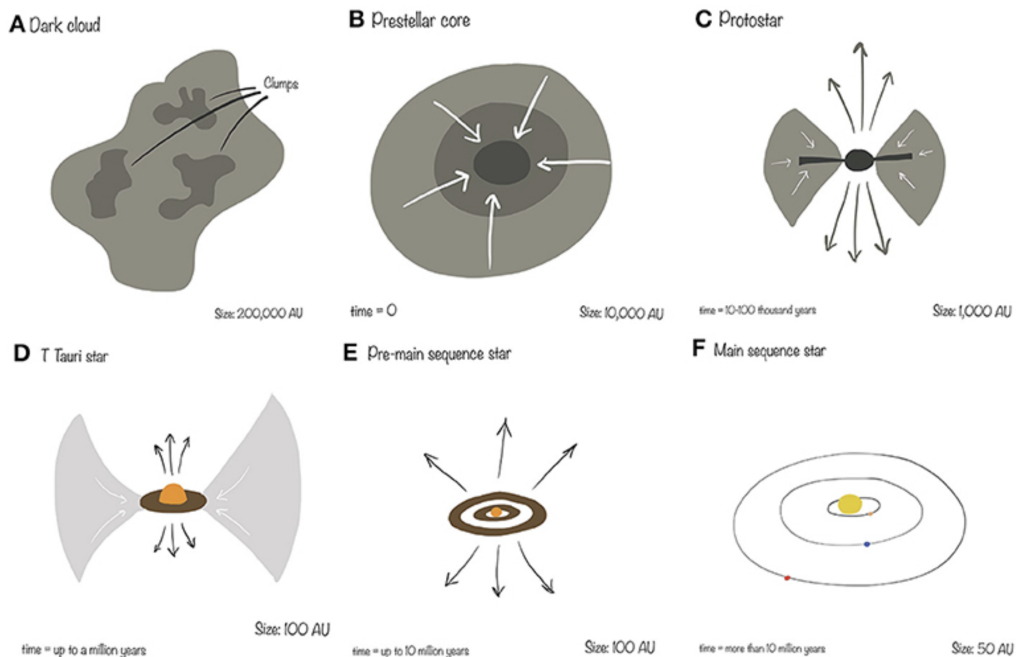
Syftet med detta kandidatarbete är att undersöka hur förekomsten av metanol varierar mellan gasfas och isform i omgivningen kring sex olika protostjärnor, baserat på observationer från radioteleskopet APEX. Genom att bestämma metanolhalten i gasfas och jämföra dessa resultat med tidigare mätningar av metanol i is, avser studien att öka förståelsen för samspelet mellan dessa två faser i interstellära miljöer. En ökad förståelse för denna fördelning kan i sin tur ge insikt i de kemiska processer som ligger bakom bildningen av mer komplexa organiska molekyler i rymden.

1.2 Teoretisk bakgrund

1.2.1 Stjärnors bildande och kopplingen till interstellär kemi

I en galax finns det utrymme mellan stjärnor som kallas det interstellära mediet (ISM) och i dessa utrymnen finns det områden som innehåller en blandning av atomer, molekyler och stoft. Ett sådant område med gas och stoft genomgår turbulenta rörelser som ojämnt fördelar atomerna och molekylerna som vidare leder till stjärnbildning (Christensen 2019). Bildandet av en stjärna är en lång och komplex process som kan delas in i olika faser där den molekylära utvecklingen blir alltmer komplex.

I den första fasen börjar materia ackumuleras mot centrum av ett interstellärt moln av gas och stoft på grund av de turbulenta rörelserna, se figur 1 (A). Från början har dessa täta moln, även kallade stjärnlösa kärnor, högre densitet än omgivningen. Detta gör att densiteten i centrum av molnet ökar samtidigt som temperaturen sjunker på grund av att stoftet skärmar av yttre värmande strålning på kortare våglängder och molekylerna strålar ut energi på längre våglängder. I denna kalla miljö fryser atomer och molekyler från gasfasen fast på ytorna av stoftkornen och bildar isiga mantlar. På dessa ytor blir lätta väteatomer mest rörliga, vilket möjliggör kemiska reaktioner där atomer och enklare molekyler som CO (kolmonoxid) vidare omvandlas till mer komplexa ämnen som H_2O (vatten), H_2CO (formaldehyd) och CH_3OH (metanol). Stoftkornen spelar en avgörande roll då de tillhandahåller ytor där molekyler kan bildas, skyddar mot destruktiv strålning, katalyserar kemiska reaktioner och fungerar som kylmekanismer i de tätaste regionerna.



Figur 1: Illustration av de olika stegen för stjärnbildning (Christensen 2019).

När densiteten i centrum blir tillräckligt hög når kärnan ett tillstånd där gravitationskrafter övervinner

tryckkrafter, och därmed accelererar kollapsen. I dessa kärnor, som från detta skeende kallas pre-ställära kärnor som illustreras i figur 1 (B), fortsätter densiteten att öka. Detta sker samtidigt som temperaturen sjunker i centrum. Den höga densiteten och låga temperaturen orsakar att kolmonoxid i gasfas minskar då de i så stor utsträckning fryser på stoftet. Det bildas även molekyler som N_2H^+ (diazenylum) och NH_3 (ammoniak) som bildas mer effektivt desto mindre kolmonoxid det finns i gasfas, samt isotopiska effekter som deuterium- respektive kvävefraktionering uppstår. Molekyler på kornen kan frigöras genom inverkan av strålning, men då de interstellära fotonerna inte kan tränga in i dessa täta pre-ställära kärnorna så leder det till att de isiga mantlarna byggs upp till tjocka lager (Caselli och Ceccarelli 2012).

Kollapsen fortsätter och systemet går in i den protoställära fasen där ett protoställärt hölje som omger den blivande stjärnan. Gravitationsenergi omvandlas till strålning, vilket gör att temperaturen ökar mot centrum. Detta leder till att de frusna molekylerna på stoftkornen får ökad rörlighet och kan reagera vidare till mer komplexa molekyler. När temperaturen blir tillräckligt hög sublimerar de isiga mantlarna och molekyler återgår till gasfas där de kan observeras via sina rotationsspektra. Samtidigt kastas en del materia ut från systemet, se figur 1 (C), och när detta materia kolliderar med omgivande gas uppstår chockvågor som kan förånga både korn och mantlar (Caselli och Ceccarelli 2012).

Det protoställära höljet är inte homogent utan består av flera kemiska zoner: en yttre zon som liknar det ursprungliga molnet, en kall zon där kolmonoxid är utarmat och kemin liknar den i pre-ställära kärnor, en zon där sublimering av metanis driver varm kolkedjekemi samt en varm zon där vattenrika mantlar sublimerar och komplex gasfas-kemi dominerar. Dessa kemiska signaturer används för att förstå objektets historia och fortsatta utveckling (Caselli och Ceccarelli 2012).

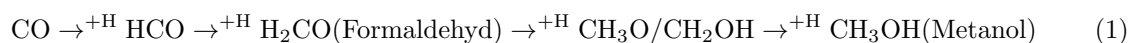
I nästa fas tunnas det protoställära höljet ut och en roterande cirkumstellär skiva blir kvar, även kallad protoplanetär disk. Den protoplanetära disken består huvudsakligen av gas som kan ackumuleras av stjärnan, vilket bidrar till ökandet av stjärnans storlek. Vid denna tidpunkt är stjärnan först observerbar och den kallas för T Tauri-stjärna, se figur 1 (D) (Christensen 2019). I de inre delarna av disken är det varmt och kemiska reaktioner fortsätter att bilda nya komplexa molekyler. I de yttre delarna är det kallt och där finns majoriteten av materia. I dessa kalla delar fryser molekyler återigen fast på stoftkorn och en del av den ursprungliga isiga materian från tidigare faser kan bevaras (Caselli och Ceccarelli 2012).

Härnäst börjar stoftkornen i den cirkumstellära skivan klumpa ihop sig genom kollisioner och de bildar större kroppar, se figur 1 (E). Dessa så kallade planetesimaler är byggstenar till planeter, kometer och asteroider. Under denna process bevaras delar av de isiga mantlarna, vilket gör att tidig kemisk information kan föras vidare till det färdiga planetsystemet (Caselli och Ceccarelli 2012).

Slutligen leder denna utveckling till planetbildning. De kvarvarande små kropparna, såsom kometer och asteroider, kan senare kollidera med unga planeter. I figur 1 (F) illustreras ett slutgiltigt solsystem med planeter. I vårt eget solsystem tros sådana kollisioner ha bidragit till att leverera vatten tillsammans med andra ämnen till den tidiga jorden, vilket möjliggjorde bildandet av hav och den sekundära atmosfären (Caselli och Ceccarelli 2012).

1.2.2 Astrokemisk ämnesbildning och metanol i interstellära mediet

Som beskrivs ovan sker bildandet av molekyler i det kalla och täta interstellära mediet (ISM), främst genom att gasfasatomer fryser på kalla stoftkorn och bildar ismantlar. Atomerna får en yta att mötas på där de reagerar och sannolikheten att atomerna och molekylerna möts blir mycket större. Isarna fungerar som katalytiska ytor (Boogert, Gerakines och Whittet 2015). Atomer och enkla molekyler som H, O och C landar på de kalla stoftkornen som är runt 10 K. På kornet kan atomerna vandra, tunnla eller diffundera tills de möter en annan reaktant och det sker ytreaktion (Cuppen, Linnartz och Ioppolo 2024). Eftersom väte är det mest förekommande grundämnet och rör sig snabbast på ytan domineras kemin av hydrogenering, vilket innebär successiv addering av väteatomer. Metanol anses vara en av de viktigaste molekylerna som bildas på dessa ytor då det är den enklaste komplexa molekylerna och kan ge bättre förståelse för andra ämnens kemi. Den primära bildningsvägen för metanol är hydrogenering av kolmonoxid som har frusit fast på kornet enligt: (Gürtler m. fl. 2002)



Denna process är särskilt effektiv i låga temperaturer där väteatomer kan diffundera över ytan och reagera med kolmonoxid. Den är extra viktig för just metanol eftersom det fungerar som ett förstadium till mer

komplexa molekyler som sockerarter och aminosyror (Caselli och Ceccarelli 2012). Det totala antalet identifierade molekyler i rymden ökar ständigt, och metanol är en central del i den räkningen (McGuire 2022).

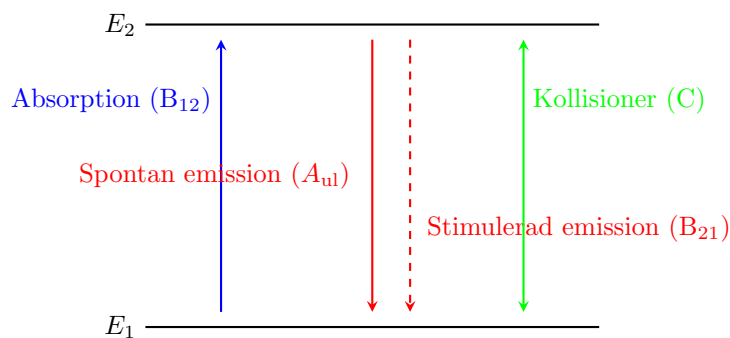
Metanol är en särskilt intressant molekyl att studera eftersom den i princip enbart bildas i isfasen. Närvaron av metanol runt unga protostjärnor är därför ett tecken på att ismantlarna har förångats eller desorberats på något annat sätt (Boogert, Pontoppidan m. fl. 2008). Observationer av områden där det bildas lågmassiva stjärnor har visat att den stora majoriteten av metanol finns bunden i is, och gas-till-is-förhållandet är ofta så lågt som 10^{-4} (Perotti, Rocha m. fl. 2020). Studier har också visat på lokala variationer: i områden med utflöden från protostjärnor kan halten i gasfasen öka avsevärt på grund av chockvågor som frigör molekyler från stoftet (Perotti, Jørgensen, Fraser m. fl. 2021). Variationen mellan olika stjärnsamlingar tyder även på att den lokala strålningsmiljön och temperaturen skulle kunna spela en betydande roll för hur mycket metanol som förblir i isfas jämfört med gasform (Perotti, Jørgensen, Rocha m. fl. 2023).

Metanol är en utmärkt indikator på den fysikaliska och kemiska historien hos ett objekt (Carl 2024). Eftersom molekylen har ett komplext rotationspektrum kan den användas för att bestämma både temperatur och densitet i gasen runt protostjärnor (Caselli och Ceccarelli 2012). Dessutom ger jämförelsen mellan is och gas en direkt insyn i hur material transporteras från det interstellära molnet till ett eventuellt blivande planetsystem (Perotti, Rocha m. fl. 2020).

1.2.3 Kvantmekaniska övergångsprocesser

Molekyler i en gasansamling är fördelade i diskreta energinivåer, där de lägsta energinivåerna huvudsakligen är kopplade till molekylernas rotationsrörelser. När en molekyl övergår mellan två energinivåer sker en förändring i dess rotationsenergi. Det är övergångar mellan dessa kvantiserade rotationsnivåer som ger upphov till spektrallinjer i emission eller absorption, vilka kan studeras med radioastronomi (Wilson, Rohlfs och Hüttemeister 2013).

Övergångar som sker mellan två olika energinivåer drivs av fysikaliska processer, inklusive spontan emission (A_{ul}), strålning i form av stimulerad emission och absorption (B-koefficienter) samt kollisionella excitationer och de-excitationer (C-koefficienter). Balansen mellan dessa processer bestämmer populationsfördelningen mellan energinivåerna (Carl 2024). Ett tvånivåsystem som visar de processer som orsakar övergångar mellan energinivåerna illustreras i figur 2.

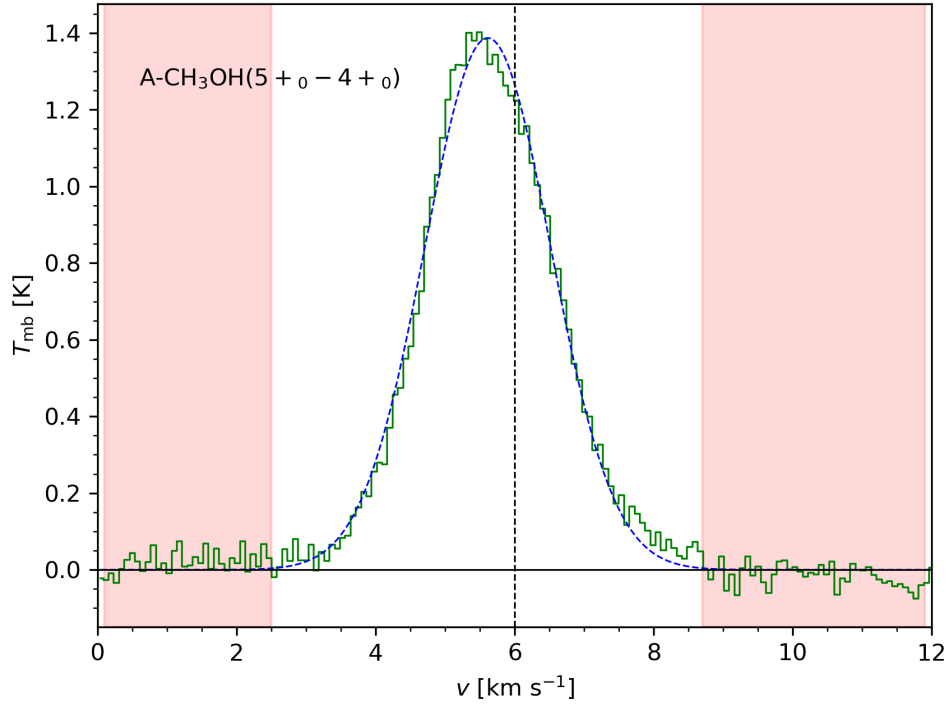


Figur 2: Tvånivåsystem med övergångar mellan två energinivåer.

1.2.4 Spektrallinjeanalys: Gaussanpassning och integrerad intensitet

Radioastronomiska observationer möjliggör studier av molekylär gas i interstellära miljöer genom analys av spektrallinjer, vilka bär information om de fysikaliska och kemiska förhållandena i det observerade objektet. Spektrallinjer erhållna från sådana observationer uppvisar inte en ideal, oändligt smal profil, utan förekommer med en viss linjebredd. Denna linjebreddning orsakas främst av molekylernas termiska rörelser, men påverkas även av turbulens och andra storskaliga rörelser i gasen. Som en följd av detta får spektrallinjer ofta en profil som kan approximeras med en Gaussfunktion (Yamamoto 2017).

För att kvantitativt beskriva spektrallinjernas egenskaper används en Gaussanpassning som innebär att en Gaussprofil anpassas till den observerade linjen. Figur 3 visar ett exempelspektrum med den anpassade Gausskurvan. Genom denna anpassning erhålls tre centrala linjeparametrar. Dessa är linjecentrum (uttryckt i frekvens eller hastighet, f_0 respektive v_0), toppintensitet ($T_A; T_{mb}$) samt linjebredd (Δv , FWHM). Dessa parametrar möjliggör karakterisering av linjens form och emissionsstyrka (Yamamoto 2017).



Figur 3: Exempel på en spektrallinje med anpassad Gausskurva.

Det är inte tillräckligt att enbart analysera spektrallinjens toppintensitet. Två linjer kan uppvisa identisk toppintensitet samtidigt som de har olika linjebredd, vilket innebär att gasens emission på den frekvensen skiljer sig åt. En analys baserad enbart på toppintensiteten kan därför ge en missvisande bild av gasens egenskaper. I analysen av den emitterande gasen används istället den integrerade intensiteten, det vill säga arean under spektrallinjen. Den integrerade intensiteten är proportionell mot populationen av antalet molekyler i den övre energinivån, och därmed mot totala antalet emitterade molekyler. Denna storhet utgör därmed en central koppling mellan observerade spektrallinjer och de fysikaliska egenskaperna hos det studerade mediet, och används som grund för vidare analys, exempelvis vid konstruktion av rotationsdiagram (Yamamoto 2017).

1.2.5 Kolumntäthet

Den totala kolumntätheten, N_{tot} , beskriver det totala antalet molekyler per areaenhet längs synlinjen och utgör därmed ett mått på förekomsten av den studerade molekylen i det observerade området. Genom att koppla den observerade emissionen till populationsantalet i olika energinivåer kan den totala kolumntätheten bestämmas från spektrallinjedata. Den kan därmed uttryckas genom följande samband:

$$N_{\text{tot}}^{\text{thin}} = \frac{8\pi\nu^2}{c^2 A_{ul}} \frac{Q_{\text{rot}}}{g_u} \exp\left(\frac{E_u}{k_B T_{\text{ex}}}\right) \left[\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T_{\text{ex}}}\right) - 1 \right]^{-1} \frac{1}{f [J_\nu(T_{\text{ex}}) - J_\nu(T_{\text{bg}})]} \int T_A(\nu) d\nu \quad (2)$$

Här är ν frekvensen, c är ljusets hastighet, A_{ul} är Einsteins A-koefficient, Q_{rot} rotationspartitionsfunktionen, k_B är Boltzmanns konstant och h är Plancks konstant. f är fyllnadsfaktorn som beskriver hur stor del av teleskopets insamlings-ytvinkel som utgörs av källan. Storheten g_u är den övre energinivåns degenerationsfaktor och beskriver antalet tillgängliga kvanttillstånd. $J_\nu(T_{\text{ex}})$ och $J_\nu(T_{\text{bg}})$ är Rayleigh-Jeans ekvivalenta temperaturer för excitationstemperaturen respektive bakgrundsstrålningen. $T_{\text{bg}} = 2.73$ K är

temperaturen för den kosmiska bakgrundsstrålningen. Ekvation 2 antar att emissionen är optiskt tunn samt att lokal termodynamisk jämvikt (LTE) råder (Carl 2024).

Rotationspartitionsfunktionen, Q_{rot} , beskriver den statistiska fördelningen av molekylerna över alla rotationsnivåer vid en viss temperatur och kan beräknas enligt ekvation 3:

$$Q_{\text{rot}} = Q_{\text{rot}}(9.375 \text{ K}) \left(\frac{T_{\text{ex}}}{9.375 \text{ K}} \right)^{3/2} \quad (3)$$

där $Q_{\text{rot}}(9.375 \text{ K}) = 19.5$ är ett känt referensvärde för metanol (Carl 2024).

Jämfört med den totala kolumntätheten N_{tot} , representerar N_{u} kolumntätheten av molekyler i en specifik övre energinivå. Den är proportionell mot antalet molekyler i detta tillstånd och kan beräknas från den observerade integrerade intensiteten från varje spektrallinje enligt ekvation 4.

$$N_{\text{u}} = \frac{8\pi k_{\text{B}} \nu^2}{hc^3 A_{\text{ul}}} \int T_{\text{A}} dv \quad (4)$$

där T_{A} är den uppmätta antenntemperaturen.

1.2.6 Rotationsdiagram: LTE och icke-LTE förhållanden

Rotationsdiagram är en metod som används för att analysera hur molekyler är fördelade över sina olika energinivåer i den interstellära miljön som studeras. Genom att analysera observerade spektrallinjer möjliggör metoden en direkt koppling mellan uppmätt emission och populationsfördelningen av molekyler. Detta gör det möjligt att bestämma viktiga fysikaliska storheter, som rotationstemperatur och kolumntäthet, och bidrar därigenom till slutsatser om de fysikaliska förhållandena och mängden av den emitterande molekylerna i det studerade området. Ett rotationsdiagram konstrueras genom att plotta $\ln(N_{\text{u}}/g_{\text{u}})$ som funktion av energin hos den övre kvantnivån E_{u} , för ett antal observerade spektrallinjer (Wilson, Rohlfs och Hüttemeister 2013).

Populationsfördelningen av molekyler över olika energinivåer bestäms av en kombination av kollisionsprocesser och strålningsprocesser, vilket illustreras i tvånivåsystemet i figur 2. Kollisioner med molekyllärt väte, frekvensen av vilka beror på densitet och gasens kinetiska temperatur, T_{K} , tenderar att driva systemet mot termodynamisk jämvikt. Samtidigt påverkar den omgivande strålningen populationsfördelningen genom absorption och emission av fotoner. Samspillet mellan dessa processer avgör hur molekyler exciteras och de-exciteras i den interstellära miljön (Wilson, Rohlfs och Hüttemeister 2013).

Lokal termodynamisk jämvikt (LTE) uppstår när kollisionsprocesserna dominerar över de radiativa processerna, vilket innebär att excitationstemperaturen, T_{ex} , kan approximeras som lika med den kinetiska temperaturen, T_{K} (Yamamoto 2017). Under dessa förhållanden kan populationsfördelningen beskrivas med Boltzmannfördelning vid en enda temperatur. Detta leder till att rotationsdiagrammet uppvisar en linjär relation som kan beskrivas med en rät linje enligt ekvation 5 (Goldsmith och Langer 1999).

$$\ln \left(\frac{N_{\text{u}}}{g_{\text{u}}} \right) = \ln \left(\frac{N_{\text{tot}}}{Q_{\text{rot}}} \right) - \frac{E_{\text{u}}}{T_{\text{ex}}} \quad (5)$$

Genom en linjär anpassning av datapunkterna kan centrala fysikaliska storheter bestämmas, där lutningen motsvara $-1/T_{\text{ex}}$ och skärningen med y-axeln motsvarar $\ln(N_{\text{tot}}/Q_{\text{rot}})$. Således kan både excitationstemperaturen och den totala kolumntätheten för den studerade molekylerna bestämmas från observationsdata (Goldsmith och Langer 1999).

I icke-lokal termodynamisk jämvikt (icke-LTE) varierar excitationstemperaturen mellan olika energinivåer, vilket innebär att populationsfördelningen inte längre kan beskrivas med en enkel Boltzmannfördelning. Detta leder till att rotationsdiagrammet avviker från en rät linje. Under sådana förhållanden är de förenklade relationerna inte längre giltiga, och mer avancerade modeller krävs för att korrekt beskriva excitationen. Dessa modeller bygger ofta på numeriska beräkningar och lösningar av statistisk jämvikt med hjälp av datorbaserade metoder, se sektion 2.4 för ett exempel (Wilson, Rohlfs och Hüttemeister 2013).

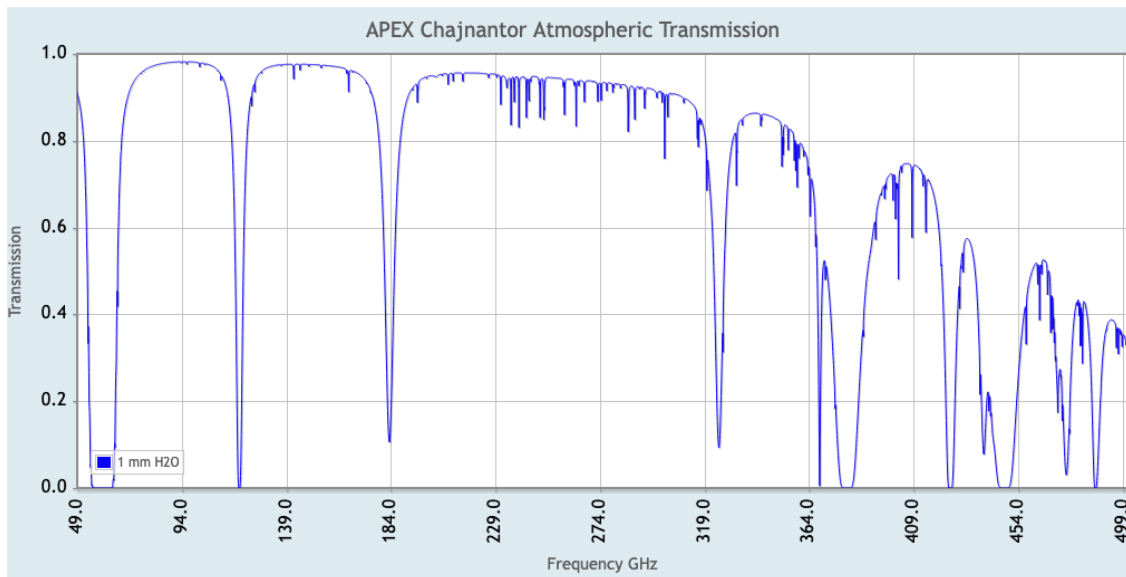
1.2.7 Observationstekniker och datareduktion

Atmosfären som omger jorden varierar i genomsläpplighet för elektromagnetisk strålning vid olika våglängder och våglängdsområden där den är mest transparent kallas för atmosfäriskt fönster. Detta är avgörande inom astronomi eftersom det bestämmer om teleskop på marken kan användas eller om det behövs satelliter i rymden. Frekvenserna i denna undersökning ligger mellan 193 GHz och 242 GHz, och i detta intervall finns stora problem med vattenånga i atmosfären som blockerar en stor mängd strålning. Inkommande strålning från rymden kommer till atmosfären med en initial intensitet, I_0 . Den uppmätta intensiteten, I , på marknivån kan sedan användas för att ta reda på transmissionen, T , enligt:

$$T = \frac{I}{I_0} \quad (6)$$

där en transmission på 1 skulle innebära att 100 procent av strålningen har färdats genom atmosfären.

APEX-teleskopet har byggts på hög höjd i Atacamaöknen i Chile just för att kunna observera radiovågor med dessa frekvenser. I figur 4 visas transmissionen för olika frekvenser som observeras av APEX-teleskopet där transmissionen är nära 1 för frekvensintervallet i denna undersökning trots vattenånga som blockerar strålningen. Detta teleskop har därför använts i denna studie.



Figur 4: Den atmosfäriska transmissionen vid APEX-teleskopet för 1 mm vattenkolumn i atmosfären.

Spektralfördelningen för svartkroppsstrålning vid en viss temperatur beskrivs av Plancks strålningslag:

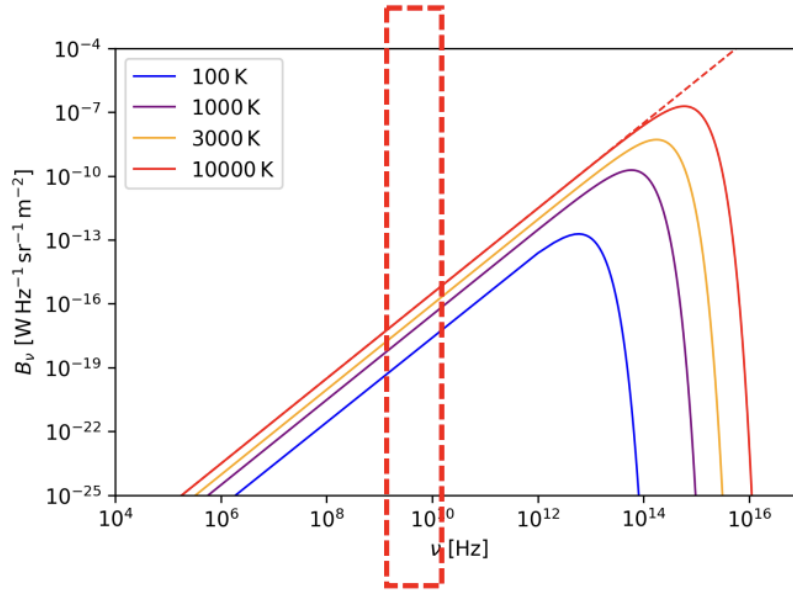
$$I = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 \left(e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1 \right)} \quad (7)$$

Radioastronomer arbetar oftast i området där $h\nu \ll k_B T$. Under detta förhållande kan strålningstätheten, B_ν , approximeras som:

$$B_\nu(T) = \frac{2k_B T \nu^2}{c^2} \quad (8)$$

vilket kallas för Rayleigh-Jeans approximationen som representeras av den streckade linjen i figur 5.

Molecular radio emission



Figur 5: Plancks strålningslag för svartkroppsstrålning med fokus på radioområdet.

Ur figur 5 kan läsas att frekvenserna i denna undersökning ligger precis till höger om det röda området där graferna är linjära. Detta innebär att Rayleigh-Jeans approximationen kan användas. Den uppmätta strålningsintensiteten kan då uttryckas i form av en strålningstemperatur, T_S , som är proportionell mot spektralintensiteten, I_ν , enligt:

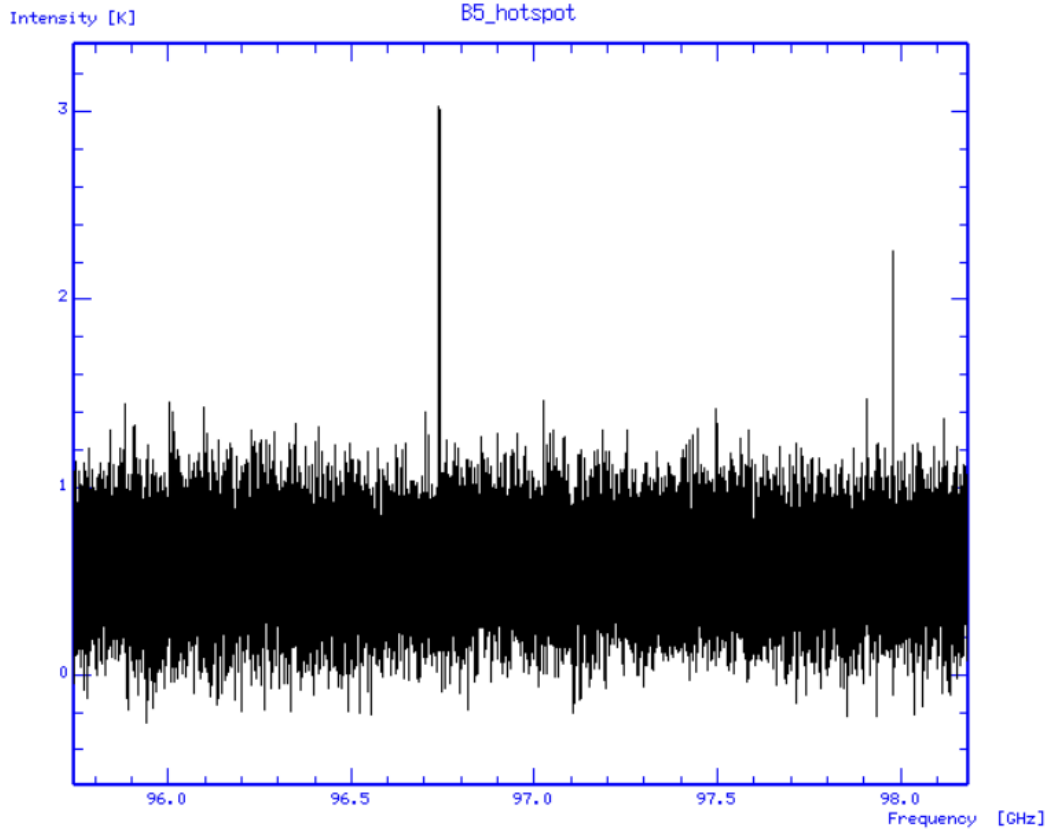
$$T_S(\nu) = \frac{I_\nu c^2}{2k_B \nu^2} \quad (9)$$

där svartkroppsstrålning antas.

Vid observationer med ett radioteleskop, som APEX, är strålningstemperaturen från molnet/objektet mycket liten jämfört med strålningen från mer lokala källor. Summan av alla naturliga och artificiella signaler som uppmäts av teleskopet vid en specifik frekvens kallas systemtemperaturen, T_{sys} :

$$T_{sys} = T_S + T_{CMB} + T_{ATM} + T_{ground} + \dots \quad (10)$$

T_S är källans temperatur och resterande termer består av olika bakgrundstemperaturer i rymden och atmosfären, teleskopets temperatur, med mera. Om två närliggande områdens systemtemperaturer mäts kan alla termer utom T_S antas konstanta. Genom att använda olika växlingsmetoder kan på så sätt källans signal filtreras ut och källans temperatur kan bestämmas. Metoden som använts i detta projekt är positions-växling, vilket innebär att systematiskt växla mätningar av källan (på) med motsvarande mätningar av ett emissionsfritt, närliggande, område på himlen (av) för att ta fram ΔI_ν som är skillnaden mellan intensiteter för på- och avsignalerna. Andra växlingsmetoder inkluderar strålväxling och frekvensväxling.

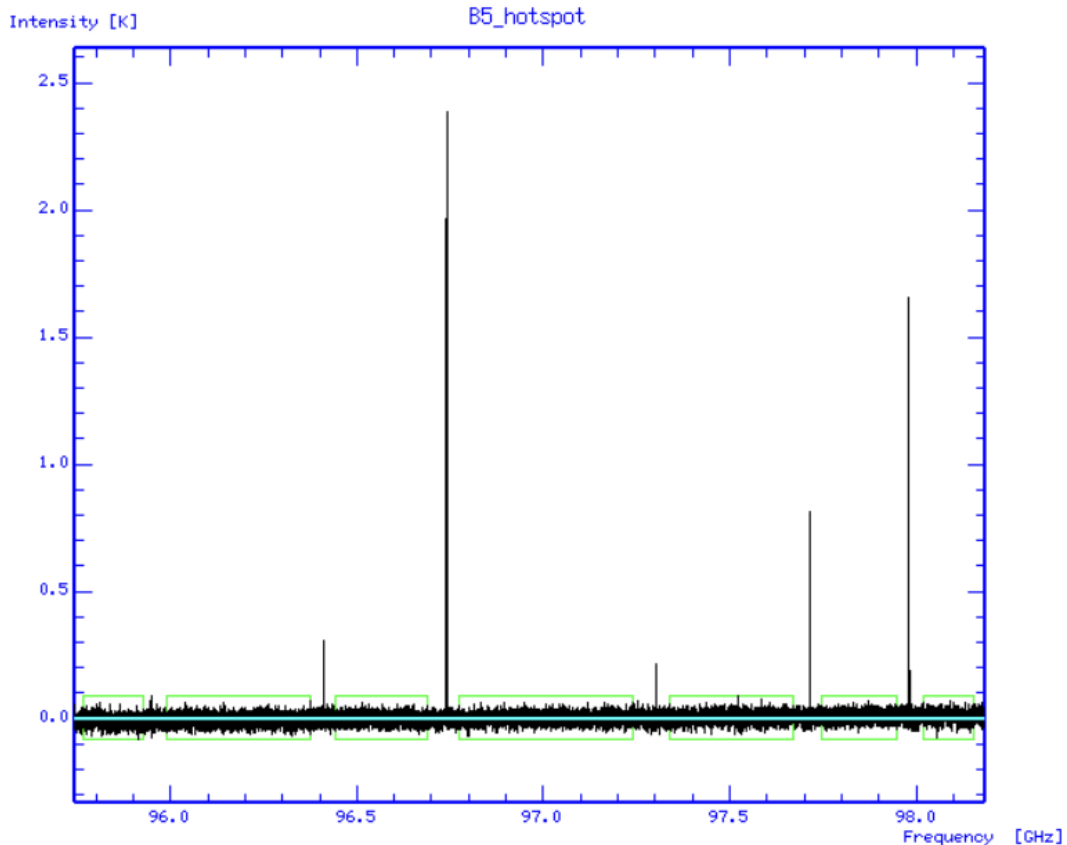


Figur 6: Spektrum mot molekylnolnet Barnard 5 med två minuters integrationstid given av handledare.

Figur 6 visar ett exempel på ett råspektrum som erhållits efter två minuters observationer med positionsväxling. Redan här kan enstaka intensitetstoppar utläsas, men majoriteten finns fortfarande gömda bakom det randomiserade bruset:

$$\sigma_T = \frac{T_{\text{sys}}}{\sqrt{\Delta\nu t_{\text{int}}}} \quad (11)$$

Detta brus minskar ju längre tid som källan observeras och brusnivån, som brukar anges med rotmedelkvadravärdet, är proportionell mot systemtemperaturen och minskar med en längre integrationstid, t_{int} vid given bandbredd, $\Delta\nu$. Efter lång integrering kan bruset minimeras och intensitetstopparna visualiseras enklare och identifieras även om de har lägre intensitet som kan ses i figur 7, där 124 individuella spektra har medelvärdesbildats så att den totala observationstiden är cirka 4 timmar.



Figur 7: Reducerat exempelspektrum mot Barnard 5 med total integrationstid på 4.1h och tydliga intensitetstoppar given av handledare.

1.3 Frågeställning

Metanol är en av de mest observerade organiska molekylerna i interstellära miljöer, dock är samspelet mellan dess förekomst i gasfas och isform ännu inte fullt klarlagt. Särskilt oklart är hur metanol fördelas mellan dessa faser runt protostjärnor och i vilken utsträckning gasfasens halter återspeglar de mängder som finns bundna i is på stoftpartiklar. Denna osäkerhet begränsar förståelsen av de fysikaliska och kemiska processer som styr övergången mellan isform och gasfas, samt de mekanismer som ligger bakom bildningen av mer komplexa organiska molekyler i dessa miljöer.

I denna studie undersöks dessa frågor med hjälp av observationer av ett urval protostjärnor: IRAS15398, CrAIRS5, CrAIRS7b, HH100IRS, HH46IRS och ChaINa2. Dessa objekt representerar olika fysikaliska miljöer, vilket möjliggör en jämförelse av hur metanolens fördelning mellan gas- och isfas varierar mellan olika typer av protostellära system.

1.4 Avgränsningar

I den ursprungliga problembeskrivningen framgick att data från 13 protostjärnor skulle analyseras. Pågrund av ofullständiga dataset för flera av källorna samt arbetets omfattning avgränsades analysen till sex protostjärnor. Detta beror även på att en fullständig analys av samtliga 13 objekt och data inte var möjlig inom projektets tidsram.

Data från radioteleskop innehåller ofta en stor mängd information som inte är direkt relevant för den planerade analysen. För att möjliggöra en hanterbar och fokuserad bearbetning av materialet har därför endast de frekvensintervall som innehåller tio utvalda spektrallinjer av metanol analyserats, baserat på urval gjort av handledarna. Detta har gjort det möjligt att isolera den information som är mest relevant för bestämning av metanolhalter.

På grund av komplexitetsnivån var det endast möjligt att inom projektets tidsram genomföra analys av icke-LTE excitation för en av de studerade källorna, vilket innebär att en mer detaljerad modellering av excitationstillståndet begränsades till endast detta objekt.

1.5 Användning av AI-vertyg

Användning av AI-verktyg i detta kandidatarbete har begränsats inom gruppen då tidigare erfarenheter har lett till medvetenhet om felaktiga AI-genererade svar. Detta innebär att ingen information eller fakta i studien har kommit från ett AI-vertyg för att säkerställa att korrekt fakta används i analyserna. AI-vertyg, i detta fall ChatGPT, har använts som stöd vid kodning i LaTeX Overleaf då detta typsättningssystem har varit nytt för flera av gruppmedlemmarna. I dessa fall har ChatGPT hjälpt med att få korrekta LaTeX-syntaxer för matematiska operationer och symboler i ekvationer. AI-vertyget har även använts för att samla stora mängder data till tabeller då samt som hjälpmedel för att få tabeller och figurer i en flytande ordning utan att de flyttas eller bryts i en sidbrytning.

2 Metod

2.1 Förarbete

För att möjliggöra arbetet har en del förarbete utförts av handledare. Inledningsvis observerades de aktuella protostjärnorna i två frekvensband mellan 193-242 GHz med APEX-teleskopet via positionsväxling, där spektra för tio rotationsövergångar från metanol erhöles. Genom att byta mellan på- och avposition cirka varannan minut minskades brusets och spektrallinjerna identifierades. Handledarna tillhandahöll en pythonkod som anpassar Gaussiska parametrar till intensitetstopparna och beräknar en integrerad intensitet, se sektion 1.2.4. Koden kan ses under bilagor 7.1. För icke-LTE beräkningar användes en pythonkod med ALI-modellering som var framtagen av handledare som tillgängliggjordes för studenterna via en extern anslutning till en server tillhörande Onsala rymdobservatorium genom mjukvaran X2Go.

I tabell 1 och 2 listas de olika källorna och övergångar som studeras, samt dess frekvenser, energinivåer, vikter, Einsteinkoefficienter och koordinater med mera. Detta är den data som användes för APEX-observationerna och är underlaget för den fortsatta metoden och analysen i arbetet.

Tabell 1: Övergångar, kvanttal, frekvenser, Einsteinkoefficienter, övre energinivåer och statistiska vikter.

Övergång Nr.	Kvanttal	Frekvens [GHz]	$\log(A_{ul})$ [s ⁻¹]	E_u [K]	g_u
1	5 _{0,0} → 4 _{0,0}	241.70016	-4.22	47.9	11
2	5 _{-1,0} → 4 _{-1,0}	241.76723	-4.24	40.4	11
3	5 _{0,0} ⁺ → 4 _{0,0} ⁺	241.79135	-4.22	34.8	11
4	4 _{0,0} → 3 _{0,0}	193.41532	-4.52	36.3	9
5	4 _{-1,0} → 3 _{-1,0}	193.44160	-4.55	28.8	9
6	4 _{0,0} ⁺ → 3 _{0,0} ⁺	193.45436	-4.52	23.2	9
7	4 _{-3,0} → 3 _{-3,0}	193.48896	-4.88	85.9	9
8	4 _{1,0} → 3 _{1,0}	193.50656	-4.54	44.3	9
9	4 _{-2,0} → 3 _{-2,0}	193.51123	-4.64	49.1	9
10	4 _{2,0} → 3 _{2,0}	193.51134	-4.65	45.5	9

Tabell 2: De observerade källorna samt deras koordinater, integrationstid för inställningar A och B och V_{LSR} . Se 2.2 för förklaring av V_{LSR} .

Källa	RA [hh:mm:ss.ss]	Dec [hh:mm:ss.ss]	Int.tid inst.A [min]	Int.tid inst.B [min]	V_{LSR} [km/s]
1 IRAS15398	15 : 43 : 02.26	-34 : 09 : 06.7	5.5	26.6	5
2 CrAIRS5	19 : 01 : 48.03	-36 : 57 : 21.6	20.0	10.7	6
3 CrAIRS7b	19 : 01 : 56.41	-36 : 57 : 28.0	13.3	9.3	6
4 HH100IRS	19 : 01 : 50.56	-36 : 58 : 08.9	20.0	11.3	6
5 HH46IRS	08 : 25 : 43.78	-51 : 00 : 35.6	186.0	870.0	5
6 ChaINa2	11 : 09 : 36.60	-76 : 33 : 39.0	48.2	48.0	5

2.2 Integrerad intensitet och rotationsdiagram

Den integrerade intensiteten för de tio spektrallinjerna från sex olika källor beräknades med hjälp av en pythonkod som tillhandahölls av handledarna. Kodens uppgift är att läsa in datan framtagen från APEX-teleskopet och göra beräkningarna utifrån den. För att genomföra analysen krävdes att ett antal parametrar angavs manuellt, mer specifikt vspan (bredden av det extraherade intervallet), V_{LSR} (källans radiella hastighet relativt Local Standard of Rest) samt frekvensen för respektive spektrallinje, vilket är information som tillhandahålls i tabell 1 och tabell 2.

Utifrån den inlästa datan och de definierade parametrarna plottade koden spektrallinjerna för varje övergång i respektive källa. Därefter utfördes en Gaussanpassning till varje linje, varifrån de centrala parametrarna toppintensitet (T_{mb}), linjecentrum (V_{cent}) och linjebredd (FWHM) erhöles, se sektion 1.2.4. Tillslut beräknade koden den sökta integrerade intensiteten för varje spektrallinje i alla sex källor. För alla plottar av spektrallinjer med Gaussanpassningar se sektion 7.2

Vid analysen togs även hänsyn till brusnivån (noise level), vilken motsvarar bakgrundsbruset i observationerna. För att beräkna brusnivån valdes frekvens/hastighetsintervall i spektrumet som inte innehöll själva spektrallinjen. Detta gjordes manuellt utifrån spektrats visuella utseende och dessa områden markerades med röd bakgrundsfärg. Därefter beräknades brusnivån av koden, vilket användes för att bedöma datans kvalitet samt osäkerheten i de erhållna parametrarna.

Resultaten från koden exporterades till en Excel-fil där de strukturerades i tabeller. För varje källa skapades en separat tabell, där värden för samtliga tio spektrallinjer dokumenterades. För varje linje inkluderades de Gaussanpassade parametrarna, den integrerade intensiteten samt brusnivån. Totalt erhöles därmed sex tabeller, en för varje källa.

Vidare användes Excel för att beräkna värdet på $\ln(N_u/g_u)$ för varje spektrallinje, vilket därefter tabellerades. Rotationsdiagram konstruerades genom att plotta $\ln(N_u/g_u)$ som funktion av den övre energinivån E_u . En linjär anpassning utfördes med hjälp av Excels inbyggda funktioner, vilket resulterade i en rät linje för varje källa samt tillhörande linjerekvation och Determinationskoefficienten som är ett mått på hur väl den anpassade linjen passar datapunkterna. Detta steg upprepades för samtliga sex källor, vilket gav upphov till sex separata rotationsdiagram.

2.3 Kolumntäthet med LTE-beräkning

Rotationsdiagrammen användes för att bestämma både excitationstemperatur och total kolumntäthet för respektive källa. Under antagandet om lokal termodynamisk jämvikt (LTE) där populationsfördelningen följer en Boltzmannfördelning vid en och samma temperatur, förväntas datapunkterna i rotationsdiagrammet kunna beskrivas av en rät linje. En linjär anpassning gjordes därför för varje källa för att undersöka detta beteende, där den linjära relationen kan skrivas som ekvation 5.

För att kunna bestämma den totala kolumntätheten av metanol, N_{tot} , beräknades först rotationspartitionsfunktionen, Q_{rot} , vid den erhållna excitationstemperaturen enligt ekvation 4 med känt referensvärde för metanol, se sektion 1.2.5. Därefter kunde den totala kolumntätheten bestämmas från sambandet

$$N_{\text{tot}} = e^{\ln(\frac{N_u}{g_u})} Q_{\text{rot}} \quad (12)$$

där $\ln(\frac{N_u}{g_u})$ är y-skärningen från den linjära anpassningen (ekvation 5) i respektive rotationsdiagram.

Beräkningarna utfördes för samtliga sex källor. Antagandet om LTE innebär att excitationstemperaturen är densamma för alla energinivåer, vilket motiverar användningen av denna metod för att extrahera fysikaliska parametrar från observationsdata.

2.4 Kolumntäthet med icke-LTE-kod

Kolumntätheten togs även fram under antagandet om icke lokal termodynamisk jämvikt (icke-LTE). Detta gjordes för att undersöka validiteten hos antagandet om LTE samt om gasens kinetiska temperatur, T_K , motsvarar excitationstemperaturen, T_{ex} . Beräkningar med antagandet om icke-LTE gjordes enbart för den källa som uppvisade starkast spektrallinjer, vilket var källa CrAIRS7b. För dessa beräkningar användes

en pythonkod som tillgängliggjordes via en extern anslutning till en server på Onsala rymdobservatorium via mjukvaran X2Go. För beräkningarna användes ALI-modellering, vilket är en numerisk metod för att lösa just icke-LTE strålningstransportproblem. Denna modellering kräver att input-parametrar som storlek på källan och avståndet till källan måste anges i koden. Koden kallar på ALI-modellen och samlar resultaten för upprepade beräkningar för olika input-parametrar och hittar den bästa lösningen givet de observerade integrerade intensiteterna. Genom att ändra olika spann för två parametrar, densiteten av vätgas respektive kolumntäthet av metanol, för att sedan köra koden för olika kinetiska temperaturer. Koden genererar olika kombinationer av kinetisk temperatur, densitet av vätgas och kolumntäthet av metanol samt ett χ^2 -värde. En exakt överensstämmelse mellan modell och data ger ett χ^2 -värde på 1. Koden kördes ett antal gånger med krympande spann av de två parametrarna för att få så lågt χ^2 -värde som möjligt. Vid lägsta framtagna χ^2 -värde noterades de genererade värdena.

3 Resultat

3.1 Integrerad intensitet med Gaussanpassningar

Resultaten för de beräknade integrerade intensiteterna för de tio olika övergångarna i de sex källorna är presenterade i tabell 3–8, där varje tabell motsvarar en källa. Tabellerna innehåller även de Gaussanpassade parametrarna och den beräknade integrerade intensiteten. Brusnivån (Noise RMS) är inkluderad för att ge en uppfattning om datakvaliteten. Spektrallinjer med Gaussanpassningar för respektive källa och övergång återfinns i bilaga 7.2.

För källan ChaINa2, tabell 8, saknas värden för flera övergångar på grund av otillräcklig signalstyrka, se sektion 4.3.2. Därför har istället övre gränsvärdet på den integrerade intensiteten beräknats för att ge en indikation på den maximala möjliga emissionen från vardera spektrallinje, vilket möjliggör en meningsfull jämförelse med de källor där linjen detekterades. I tabellerna 3–8 framgår även att övergångarna nio och tio uppvisar mycket liknande värden, vilket beror på en överlappning som förklaras i mer detalj i sektion 3.1.1.

Tabell 3: Observerade övergångar för IRAS15398 med Gaussiska parametrar.

Övergång	T_{mb} [mK]	V_{cent} [km/s]	FWHM [km/s]	I_{int} [mK km/s]	Noise RMS [mK]
$5_{0,0} \rightarrow 4_{0,0}$	79.16 ± 15.30	5.19 ± 0.10	0.96 ± 0.23	80.47 ± 24.72	26.25
$5_{-1,0} \rightarrow 4_{-1,0}$	296.00 ± 33.10	5.10 ± 0.02	0.70 ± 0.05	218.61 ± 29.10	27.45
$5_{0,0}^+ \rightarrow 4_{0,0}^+$	350.69 ± 42.09	5.09 ± 0.02	0.54 ± 0.05	200.52 ± 30.79	33.90
$4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$	98.70 ± 12.34	5.07 ± 0.03	0.58 ± 0.06	61.06 ± 10.11	11.07
$4_{-1,0} \rightarrow 3_{-1,0}$	449.92 ± 47.97	5.08 ± 0.01	0.58 ± 0.03	274.95 ± 32.78	18.11
$4_{0,0}^+ \rightarrow 3_{0,0}^+$	531.12 ± 56.06	5.09 ± 0.01	0.62 ± 0.03	347.14 ± 40.36	17.67
$4_{-3,0} \rightarrow 3_{-3,0}$ ^(a)	681.96 ± 68.92	5.39 ± 0.00	0.36 ± 0.01	261.22 ± 26.97	11.49
$4_{1,0} \rightarrow 3_{1,0}$	44.25 ± 7.30	5.04 ± 0.09	1.10 ± 0.21	51.64 ± 12.97	12.42
$4_{-2,0} \rightarrow 3_{-2,0}$ ^(b)	81.13 ± 10.90	4.98 ± 0.03	0.56 ± 0.07	48.16 ± 8.98	11.66
$4_{2,0} \rightarrow 3_{2,0}$ ^(b)	81.49 ± 11.01	5.15 ± 0.03	0.58 ± 0.08	49.98 ± 9.42	11.69

^(a)Se avsnitt 3.1.2

^(b)Se avsnitt 3.1.1

Tabell 4: Observerade övergångar för CrAIRS5 med Gaussiska parametrar.

Övergång	T_{mb} [mK]	V_{cent} [km/s]	FWHM [km/s]	I_{int} [mK km/s]	Noise RMS [mK]
$5_{0,0} \rightarrow 4_{0,0}$	104.68 ± 12.17	5.49 ± 0.05	1.31 ± 0.11	145.14 ± 20.96	15.32
$5_{-1,0} \rightarrow 4_{-1,0}$	441.11 ± 44.61	5.45 ± 0.01	1.28 ± 0.03	597.23 ± 61.79	14.60
$5_{0,0}^+ \rightarrow 4_{0,0}^+$	526.07 ± 53.02	5.48 ± 0.01	1.26 ± 0.02	701.58 ± 71.83	13.81
$4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$	128.05 ± 15.14	5.54 ± 0.05	1.23 ± 0.11	166.45 ± 24.85	17.36
$4_{-1,0} \rightarrow 3_{-1,0}$	508.30 ± 51.41	5.48 ± 0.01	1.21 ± 0.03	649.37 ± 67.21	14.80
$4_{0,0}^+ \rightarrow 3_{0,0}^+$	664.65 ± 67.15	5.50 ± 0.01	1.22 ± 0.03	857.92 ± 88.51	17.21
$4_{-3,0} \rightarrow 3_{-3,0}$ ^(a)	116.11 ± 13.93	5.85 ± 0.04	0.91 ± 0.09	111.64 ± 17.13	14.92
$4_{1,0} \rightarrow 3_{1,0}$	41.68 ± 7.85	5.82 ± 0.15	1.51 ± 0.35	66.51 ± 19.79	14.83
$4_{-2,0} \rightarrow 3_{-2,0}$ ^(b)	93.90 ± 11.47	5.33 ± 0.06	1.36 ± 0.14	135.03 ± 21.44	13.69
$4_{2,0} \rightarrow 3_{2,0}$ ^(b)	95.92 ± 11.45	5.50 ± 0.06	1.46 ± 0.14	148.40 ± 22.55	13.66

^(a)Se avsnitt 3.1.2

^(b)Se avsnitt 3.1.1

Tabell 5: Observerade övergångar för CrAIRS7b med Gaussiska parametrar.

Övergång	T_{mb} [mK]	V_{cent} [km/s]	FWHM [km/s]	I_{int} [mK km/s]	Noise RMS [mK]
$5_{0,0} \rightarrow 4_{0,0}$	421.65 ± 42.55	5.64 ± 0.02	2.18 ± 0.04	974.39 ± 100.13	15.41
$5_{-1,0} \rightarrow 4_{-1,0}$	1147.17 ± 114.97	5.61 ± 0.01	2.16 ± 0.02	2630.41 ± 264.41	18.80
$5_{0,0}^+ \rightarrow 4_{0,0}^+$	1387.16 ± 138.97	5.61 ± 0.01	2.13 ± 0.02	3134.43 ± 315.20	18.59
$4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$	451.12 ± 45.67	5.64 ± 0.02	2.30 ± 0.05	1098.49 ± 113.97	19.11
$4_{-1,0} \rightarrow 3_{-1,0}$	1186.14 ± 118.91	5.62 ± 0.01	2.19 ± 0.02	2752.14 ± 277.36	17.57
$4_{0,0}^+ \rightarrow 3_{0,0}^+$	1438.88 ± 144.15	5.63 ± 0.01	2.21 ± 0.02	3363.26 ± 338.22	18.75
$4_{-3,0} \rightarrow 3_{-3,0}$ ^(a)	217.25 ± 22.72	6.01 ± 0.03	1.71 ± 0.08	394.49 ± 44.78	12.60
$4_{1,0} \rightarrow 3_{1,0}$	248.87 ± 25.84	5.62 ± 0.04	2.29 ± 0.09	603.65 ± 67.22	16.20
$4_{-2,0} \rightarrow 3_{-2,0}$ ^(b)	403.25 ± 41.15	5.57 ± 0.03	2.31 ± 0.07	986.07 ± 104.70	20.87
$4_{2,0} \rightarrow 3_{2,0}$ ^(b)	403.09 ± 41.04	5.74 ± 0.03	2.31 ± 0.06	984.95 ± 103.88	18.98

^(a)Se avsnitt 3.1.2

^(b)Se avsnitt 3.1.1

Tabell 6: Observerade övergångar för HH100IRS med Gaussiska parametrar.

Övergång	T_{mb} [mK]	V_{cent} [km/s]	FWHM [km/s]	I_{int} [mK km/s]	Noise RMS [mK]
$5_{0,0} \rightarrow 4_{0,0}$	130.45 ± 14.47	5.79 ± 0.04	1.39 ± 0.10	192.63 ± 25.20	15.67
$5_{-1,0} \rightarrow 4_{-1,0}$	789.91 ± 79.40	5.77 ± 0.01	1.22 ± 0.02	1021.18 ± 103.73	14.68
$5_{0,0}^+ \rightarrow 4_{0,0}^+$	964.31 ± 96.76	5.76 ± 0.01	1.24 ± 0.01	1271.25 ± 128.48	15.95
$4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$	168.05 ± 18.35	5.68 ± 0.03	1.28 ± 0.08	227.63 ± 28.71	16.79
$4_{-1,0} \rightarrow 3_{-1,0}$	1017.35 ± 102.20	5.73 ± 0.01	1.22 ± 0.02	1315.51 ± 133.41	16.71
$4_{0,0}^+ \rightarrow 3_{0,0}^+$	1197.96 ± 120.32	5.73 ± 0.01	1.24 ± 0.02	1568.81 ± 158.97	18.31
$4_{-3,0} \rightarrow 3_{-3,0}$ ^(a)	22.01 ± 5.73	6.10 ± 0.35	2.40 ± 0.83	55.92 ± 24.27	12.89
$4_{1,0} \rightarrow 3_{1,0}$	40.00 ± 6.92	5.83 ± 0.17	1.97 ± 0.40	83.35 ± 22.27	14.42
$4_{-2,0} \rightarrow 3_{-2,0}$ ^(b)	116.48 ± 13.68	5.68 ± 0.05	1.20 ± 0.11	147.74 ± 21.77	15.68
$4_{2,0} \rightarrow 3_{2,0}$ ^(b)	116.00 ± 13.65	5.85 ± 0.05	1.19 ± 0.11	145.91 ± 21.57	15.97

^(a)Se avsnitt 3.1.2

^(b)Se avsnitt 3.1.1

Tabell 7: Observerade övergångar för HH46IRS med Gaussiska parametrar.

Övergång	T_{mb} [mK]	V_{cent} [km/s]	FWHM [km/s]	I_{int} [mK km/s]	Noise RMS [mK]
$5_{0,0} \rightarrow 4_{0,0}$	45.15 ± 6.39	5.37 ± 0.05	0.78 ± 0.11	37.16 ± 7.51	9.45
$5_{-1,0} \rightarrow 4_{-1,0}$	165.75 ± 17.24	5.30 ± 0.02	0.95 ± 0.04	166.60 ± 18.66	10.19
$5_{0,0}^+ \rightarrow 4_{0,0}^+$	212.58 ± 21.72	5.31 ± 0.01	0.87 ± 0.03	197.06 ± 21.01	9.54
$4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$	47.21 ± 4.86	5.32 ± 0.01	0.91 ± 0.03	45.57 ± 4.97	2.30
$4_{-1,0} \rightarrow 3_{-1,0}$	259.09 ± 26.08	5.26 ± 0.01	0.75 ± 0.01	206.97 ± 21.11	2.69
$4_{0,0}^+ \rightarrow 3_{0,0}^+$	320.57 ± 32.28	5.27 ± 0.01	0.77 ± 0.01	262.88 ± 26.85	3.53
$4_{-3,0} \rightarrow 3_{-3,0}$ ^(a)	360.92 ± 36.90	5.34 ± 0.01	0.54 ± 0.02	206.06 ± 21.99	1.94
$4_{1,0} \rightarrow 3_{1,0}$	23.96 ± 2.65	5.34 ± 0.03	0.97 ± 0.07	24.67 ± 3.21	2.28
$4_{-2,0} \rightarrow 3_{-2,0}$ ^(b)	39.73 ± 4.11	5.19 ± 0.02	0.98 ± 0.04	41.37 ± 4.58	2.07
$4_{2,0} \rightarrow 3_{2,0}$ ^(b)	39.73 ± 4.11	5.36 ± 0.02	0.96 ± 0.04	40.19 ± 4.46	2.09

^(a)Se avsnitt 3.1.2

^(b)Se avsnitt 3.1.1

Tabell 8: Observerade övergångar för ChaINa2 med Gaussiska parametrar.

Övergång	T_{mb} [mK]	V_{cent} [km/s]	FWHM [km/s]	I_{int} [mK km/s]	Noise RMS [mK]
$5_{0,0} \rightarrow 4_{0,0}$	–	–	–	< 16.51	11.21
$5_{-1,0} \rightarrow 4_{-1,0}$	33.42 ± 10.08	4.82 ± 0.04	0.24 ± 0.10	8.44 ± 4.30	11.69
$5_{0,0}^+ \rightarrow 4_{0,0}^+$	35.07 ± 7.64	4.65 ± 0.05	0.41 ± 0.12	15.40 ± 5.45	10.88
$4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$	–	–	–	< 17.44	11.84
$4_{-1,0} \rightarrow 3_{-1,0}$	100.21 ± 14.49	4.79 ± 0.02	0.32 ± 0.05	33.48 ± 7.00	12.81
$4_{0,0}^+ \rightarrow 3_{0,0}^+$	89.82 ± 13.32	4.81 ± 0.02	0.34 ± 0.05	32.11 ± 6.96	12.83
$4_{-3,0} \rightarrow 3_{-3,0}$	–	–	–	< 18.40	12.49
$4_{1,0} \rightarrow 3_{1,0}$	–	–	–	< 16.45	11.17
$4_{-2,0} \rightarrow 3_{-2,0}$	–	–	–	< 15.79	10.72
$4_{2,0} \rightarrow 3_{2,0}$	–	–	–	< 15.48	10.51

3.1.1 Hantering av överlappande spektrallinjer

Baserat på de initiala tabellerna och rotationsdiagrammen behövdes ytterligare beräkningar genomföras för att undersöka sambandet mellan integrerade intensiteten för linje 9 och 10. Detta beror på några observationer, såsom den väldigt låga frekvenskillanden mellan dessa två linjer, som kan ses i tabell 1 och de mycket liknande värdena för Gaussparametrar och integrerad intensitet hos alla källor som kan observeras i tabellerna 3–8. Det observerades även visuella likheter i mellan spektrallinjerna i sektion 7.2. Dessa observationer visade på att de sista två linjernas emission överlappar varandra och en uppskattning av hur stor andel av den integrerade intensiteten som kom från vilken linje behövde undersökas.

För detta ändamål härleddes ett uttryck för förhållandet mellan de två linjernas integrerade intensiteter genom en omskrivning av ekvation 2. Eftersom båda linjerna observeras från samma molekyl och samma källa antogs den totala kolumntätheten N_{tot} vara densamma för båda linjerna, vilket innebär att $N_{\text{tot},9} = N_{\text{tot},10}$. Vidare är faktorer som är oberoende av övergången, såsom $8\pi/c^2$, Q_{rot} samt g_u identiska för båda linjerna och kunde därför ta ut varandra. Eftersom linje 9 och 10 ligger mycket nära varandra i frekvens gjordes även antagandet att deras frekvenser är approximativt lika, det vill säga $\nu_9 \approx \nu_{10}$. Detta medför att frekvensberoende termer blir identiska för båda linjerna, och termen $\left[\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T_{\text{ex}}}\right) - 1\right]^{-1}$ kunde därför elimineras ur kvoten. Efter dessa antaganden erhöles ett förenklat uttryck för förhållandet

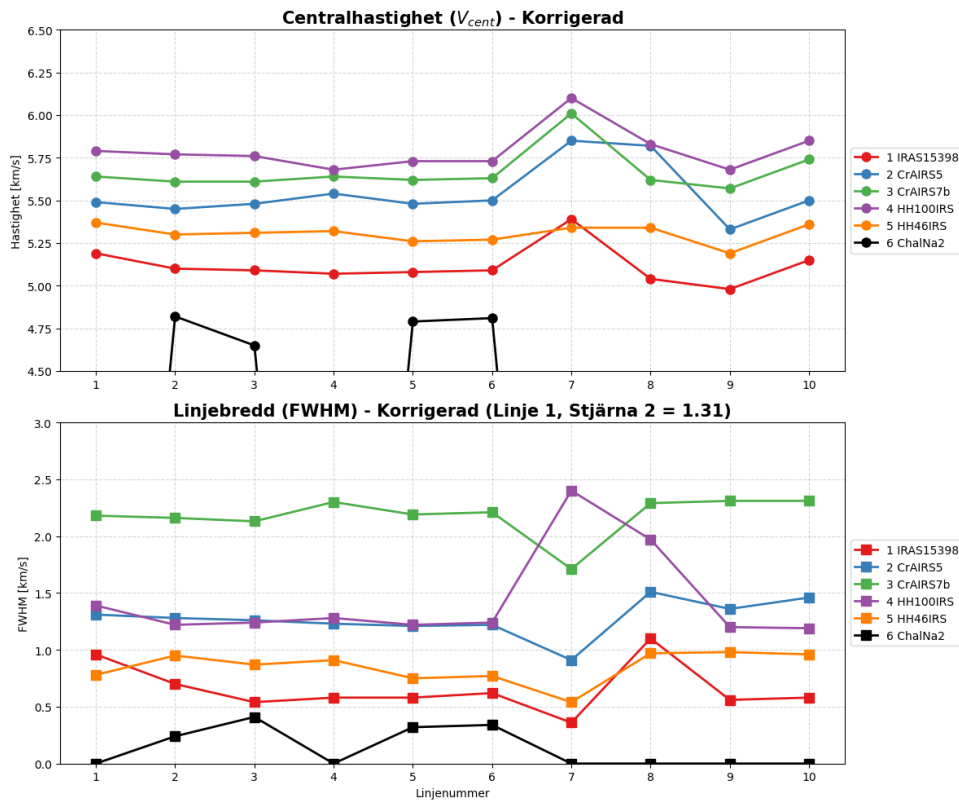
mellan de två linjernas integrerade intensiteter, vilket redovisas i ekvation 13.

$$\frac{\int T_{A,10} dv}{\int T_{A,9} dv} = \frac{A_{ul,10} \exp\left(-\frac{E_{u,10}}{k_B T_{ex}}\right)}{A_{ul,9} \exp\left(-\frac{E_{u,9}}{k_B T_{ex}}\right)} \quad (13)$$

Resultatet från de genomförde beräkningarna gav ett förhållande på 80/20 procent där övergång 9 är 80 procent av totala intensiteten och övergång 10 är 20 procent.

3.1.2 Identifiering av en icke-metanol övergång

För noggrannare analys av linjeprofilerna för de olika övergångarna plottades grafer för centrumhastighet och linjebredden där båda dessa är erhållna från pythonkoden, se figur 8. Detta för att undersöka vilka övergångar som avviker och vilka trender som finns.



Figur 8: Källornas V_{cent} och FWHM plottat mot varje övergång. Siffrorna på x-axlarna korrelerar med övergångarnas ordning enligt tabell 1.

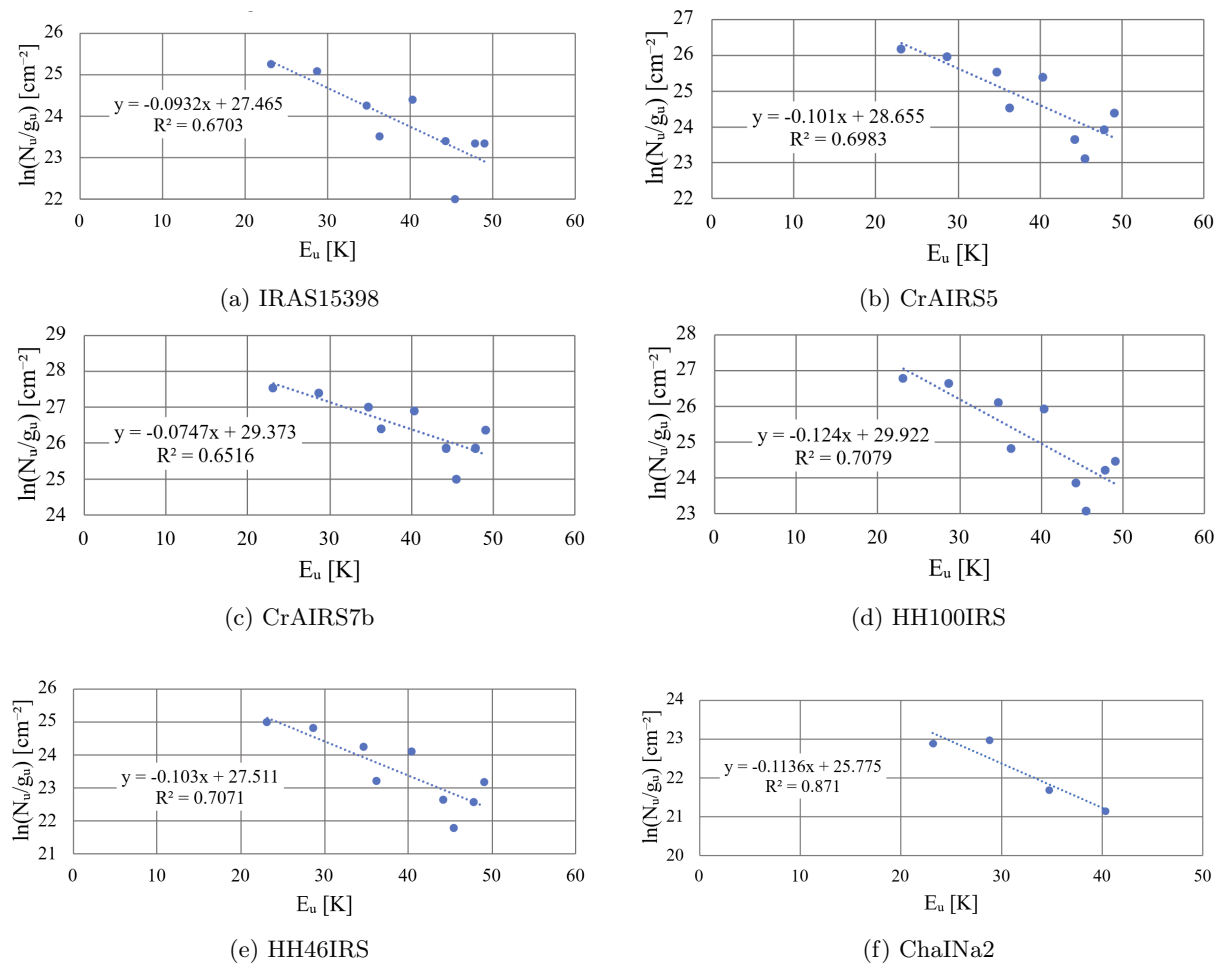
Ett avvikande mönster i de Gaussiska parametrarna identifierades hos övergång 7. Samtliga intensiteter skilde sig från vad som förväntades från figur 8 medan de centralhastigheten och linjebredden stod ut från resterande övergångar där parametrarna var i princip identiska. FWHM var överlägset lägst för övergång 7 för samtliga källor förutom HH100IRS där den istället var mycket högre än resten. Även centrumhastigheten var märkbart avvikande från de andra övergångarna. Dessutom noterade vi att linjens intensitet var oväntat hög i alla källor, givet att övergångens övre energinivå, E_u , är signifikant högre än de andra (85.9 K jämfört med 23-50 K för övriga, se tabell 1).

Efter att avvikelserna hos övergång 7 observerades undersöktes huruvida den observerade spektrallinjen vid denna övergång skulle kunna komma från en annan molekyl än metanol. Frekvensen slogs upp i databasen Splatalogue¹ och efter filterning på relativt låga värden av övre energinivåer så fastställdes att spektrallinjen i själva verket sannolikt orsakas av en rotationsövergång hos $c\text{-C}_3\text{H}_2$ (cyklopropenyliden).

Denna molekyl har en matchande spektrallinje på 193.488758 GHz och är vanlig i protostjärnors höljen. Därmed exkluderades denna övergång i resterande analys av metanolgasen.

3.2 Rotationsdiagram

Rotationsdiagrammen för de sex källorna presenteras i figur 9. Diagram a–e baseras på nio övergångar vardera, då övergång 7 exkluderades efter att ha identifierats som en icke-metanollinje, se sektion 3.1.2. Diagram (f), motsvarande ChaINa2, innehåller endast fyra övergångar till följd av otillräcklig signalstyrka i de övriga linjerna. En linjär anpassning har utförts för respektive källa, och den tillhörande linjiekvationen redovisas i varje diagram tillsammans med determinationskoefficienten R^2 som är ett mått på hur väl den anpassade linjen passar datapunkterna. För mer detaljerade värden på datapunkterna (x- och y-värden) för rotationsdiagrammen, se sektion 7.3.



Figur 9: Rotationsdiagram för samtliga sex källor med anpassade linjära ekvationer och determinationskoefficienter R^2 .

¹<https://splatalogue.online/#/home>

3.3 Kolumntäthet med LTE och gas/is-förhållandet

De beräknade kolumntätheterna för metanol i gasfas för samtliga sex källor med antagandet av LTE förhållanden är presenterade i tabell 9. Tabellen innehåller även litteraturvärdena för kolumntätheten av metanol i isfas. Sist visar även tabellen förhållandet mellan gas- och is-metanol i de sex studerade protostjärnorna.

Tabell 9: Excitationstemperaturer och kolumntätheter för metanol i gas- och isfas samt deras förhållande för de sex studerade källorna.

Källa	T_{ex} [K]	$N(\text{CH}_3\text{OH})_{\text{gas}}$ [10^{13} cm^{-2}]	$N(\text{CH}_3\text{OH})_{\text{is}}$ [10^{17} cm^{-2}]	Förhållande (gas/is) [10^{-4}]
IRAS15398	10.7	2.02	15.20 ± 0.43 ^(a)	0.13
CrAIRS5	9.9	5.89	2.36 ± 0.59 ^(a)	2.50
CrAIRS7b	13.4	18.99	7.50 ± 1.40 ^(a)	2.53
HH100IRS	8.5	14.23	3 ^(b)	4.74
HH46IRS	9.7	1.82	4.28 ± 0.48 ^(a)	0.43
ChaINa2	8.8	0.28	3 ± 0.05 ^(c)	0.09

^(a) (Boogert, Pontoppidan m. fl. 2008)

^(b) (Gürtler m. fl. 2002)

^(c) (Pontoppidan m. fl. 2003)

3.4 Kolumntäthet med icke-LTE

Icke-LTE beräkningar utfördes för att undersöka hur bra antagandet av LTE är och resultatet från den bästa modellen är presenterat i tabell 10. Observera att den resulterande kolumntätheten för icke-LTE är betydligt högre än för LTE. Detta är under antagandet av en beamstorlek i centrum av molnet men även efter en korrektionsfaktor som kompenserar för detta antagande blir värdet $8.6 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ vilket fortfarande är 4.5 gånger större än LTE. Vårt T_K är 17 K och T_{ex} är 13.4 K. Detta säger att $T_K > T_{\text{ex}}$, vilket innebär att excitationen är subtermisk vilket är vanligt för metanol. Tabell 11 visar erhållna intensiteter för varje övergång från vår anpassning med icke-LTE-modellen jämfört med de observerade intensiteterna.

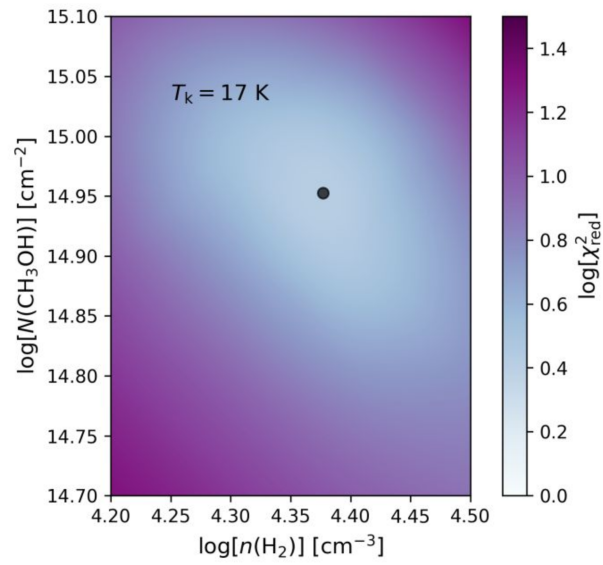
Tabell 10: Värderna erhållna från icke-LTE beräkning.

Källa	$N(\text{CH}_3\text{OH})_{\text{gas}}$ [10^{13} cm^{-2}]	T_K [K]	n_{H_2} [10^3 cm^{-3}]	χ^2	Gas/is-förhållande
CrAIRS7b	89.1	17	24	2.4	11.9

Tabell 11: Intensiteter modellerade med icke-LTE jämfört med de observerade.

Frekvens [GHz]	icke-LTE intensiteter [K km/s]	Observerade intensiteter [K km/s]
241.70016	0.46	0.97 ± 0.10
241.76723	2.16	2.63 ± 0.26
241.79135	2.90	3.13 ± 0.31
193.41532	1.35	1.10 ± 0.11
193.44160	3.09	2.75 ± 0.28
193.45436	3.54	3.36 ± 0.34
193.50656	0.46	0.60 ± 0.06
193.51123	0.03	0.79 ± 0.08
193.51134	0.29	0.20 ± 0.02

Figur 10 illustrerar en karta över logaritmen av det reducerade χ^2 -värdet som funktion av kolumntätheten för metanol och densitet som resulterar från vår bästa anpassning av icke-LTE-koden, där färgskalan representerar $\log(\chi_{\text{red}}^2)$. Här visas ett optimalt χ^2 -värde för alla värden koden testat, alltså det lägsta värdet vi lyckades uppnå och utifrån detta kan kolumntätheten approximeras.



Figur 10: Reducerad χ^2 -karta från bästa icke-LTE-modellen för CrAIRS7b.

4 Diskussion

4.1 Tolkning och diskussion av resultat

4.1.1 Faktorer som påverkar metanolhalter i gasfas

De beräknade kolumntätheterna för metanol i gasfas med LTE ger att källa 3, CrAIRS7b, och 4, HH100IRS, har högsta halter gasmetanol, se tabell 9. Dessa två källor har kolumntäthet på $18.99 \cdot 10^{13}$ respektive $14.23 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, vilket är avsevärt högre än resterande källor där kolumntätheten ligger inom ett spann från $0.28 \cdot 10^{13}$ till $5.89 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. En möjlig förklaring till att just CrAIRS7b har den högsta halten gasmetanol kan vara att den också har den högsta excitationstemperaturen bland de observerade källorna. Dock visar källa 4, HH100IRS, relativt höga gasfashalter av metanol trots en låg observerad excitationstemperatur. Detta tyder på att excitationstemperaturen inte nödvändigtvis speglar den lokala kinetiska temperaturen i hela objektet.

Som nämns i sektion 1.2.2 bildas metanol i princip enbart i isfasen och metanol i gasfas runt protostjärnor är därmed ett tecken på att ismantlarna har förångats. Detta kan leda till att högre lokala temperaturer gör att metanol lättare sublimerar från isfas till gasfas. Det är också möjligt att lokala varma regioner med hög kinetisk temperatur eller chockprocesser bidrar till desorption av metanol från isytor, trots att de observeras ha en låg excitationstemperatur.

Enligt sektion 1.2.6 beskriver excitationstemperaturen hur molekylernas populationsfördelning är fördelad över olika energinivåer. Vid högre excitationstemperaturer exciteras fler molekyler till högre rotationsnivåer, vilket ger upphov till starkare emissionslinjer. Detta kan i sin tur påverka anpassningen i rotationsdiagrammet och därmed de beräknade kolumntätheterna. Dock kan det också bero på vilka emissionslinjer som används då punkterna i rotationsdiagrammen, se figur 9, vid högre energinivåer behöver ligga relativt högre jämfört med punkterna vid lägre energier för att motsvara en högre excitationstemperatur.

4.1.2 Jämförelse av resultat med och utan LTE

Initiellt var planen att behandla samtliga källor som icke-LTE för så noggranna resultat som möjligt eftersom metanolexcitation oftast inte motsvarar LTE, men innan vi skulle börja med icke-LTE beräkningar skapades rotationsdiagrammen i figur 9 för att undersöka om det kan vara rimligt att anta LTE. En rät linje anpassas till punkterna och om dessa inte avviker för mycket från linjen skulle detta innebära att LTE är ett rimligt antagande och hypotesen var att detta ej skulle erhållas. Efter att dessa skapats insågs däremot att punkterna låg väldigt bra till för att kunna anta LTE - vissa bättre än andra, detta visas i R^2 -värdena i figur 8. Beslutet togs att utföra beräkningar med och utan LTE för endast en källa för att undersöka huruvida resultaten skilde sig åt och detta gjordes för källa 3, CrAIRS7b.

Resultaten från metoderna med LTE och icke-LTE visas i tabell 9 respektive tabell 10. Där visas att excitationstemperaturen med LTE för källa 3 beräknades till ett värde på 13.4 K respektive det modellerade värdet på den kinetiska temperaturen gav ett värde på 17 K. Resultatet från kolumntätheterna av metanol för källa 3 med LTE beräknades till $18.99 \cdot 10^{13}$ respektive $89.1 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ för icke-LTE. Detta gav ett gas- till is-förhållande som var 4.5 gånger större för icke-LTE jämfört med LTE. Detta är en märkbar skillnad men beslutet togs att utföra resterande beräkningar med antagandet av LTE på grund av tidsbrist. Resultatet från våra icke-LTE beräkningar ger vetskapen om att den sanna kolumntätheten sannolikt är större för samtliga källor beräknade med LTE vilket måste tas i beaktning vid diskussion av resultaten. Icke-LTE ses fortsatt som en överlägsen metod för mer exakta värden då vi erhöll ett χ^2 -värde på så lågt som 2.4 vilket innebär en mer fysikalisk modellering av excitationen som ger bättre uppskattningar av kolumntätheten. För icke-LTE beräkningar på samtliga källor hade mer tid krävts och därmed lämnas det som framtida förbättringsarbete men resultaten visar på att i fallet med våra källor är LTE en bra och effektiv metod för övergripande slutsatser.

4.1.3 Olika parametrars påverkan på gas/is-kvot

Resultatet visar att variationer i gas/is-kvoten mellan olika protostjärnor inte kan förklaras av en enskild parameter, utan snarare av ett samspel mellan flera olika faktorer. En viktig parameter är densiteten i de täta molekylnmolnen. Vid högre densitet ökar sannolikheten för interaktioner mellan reaktanter, vilket kan leda till att fler molekyler på stoftkornens ytor reagerar med varandra och bildar mer komplexa

molekyler, såsom metanol.

Det evolutionära stadiet hos protostjärnan verkar också ha en betydande påverkan på metanolens fördelning mellan is- och gasfas. I yngre system dominerar kalla ismantlar där metanol huvudsakligen är fryst på stoftkorn, medan äldre och mer utvecklade protostjärnor generellt förväntas uppvisa högre halter av metanol i gasfas till följd av termisk uppvärmning och strålningsdriven desorption från isytorna. Utifrån detta skulle ChaINa2, som är det mest utvecklade objektet mellan de observerade källorna (Luhman 2007), förväntas ha den högsta metanolhalten i gasfas. Resultaten visar dock att ChaINa2 istället var den källan med minst gas/is-kvot samtidigt som CrAIRS7B och HH100IRS istället uppvisar relativt höga gasfashalter av metanol. Detta tyder på att ålder inte ensam styr metanolfördelningen, utan att den snarare påverkar metanol indirekt genom förändringar i temperaturstruktur och strålningsmiljö. Därmed verkar flera parametrar, såsom lokal uppvärmning, densitet och möjliga chockprocesser, samverka och påverka mängden metanol i gasfas.

4.2 Framtida problemställningar och vidare forskning

En naturlig fortsättning på studien vore att inkludera fler källor, där en bra start är de sju källor som exkluderades på grund av ofullständiga dataset som ökade arbetets omfattning. Detta skulle ge ett mycket bredare och omfattande underlag för att dra generella slutsatser kring metanolets fördelning mellan isfas och gasfas.

För en mer fysikalisk modellering av excitationen som ger bättre uppskattningar av kolumntätheten kan icke-LTE-beräkningar utföras av resterande källor. Detta hanns inte med i detta arbete, men hade varit en lämplig åtgärd för att få en djupare förståelse av hur fysiska parametrar som densitet, temperatur, med mera faktiskt påverkar fördelningen mellan faser.

För att få en mer komplett bild av kemin kan ytterligare ämnen studeras som tros bildas via metanol. Metanol är en bra start då det som tidigare nämnt är den enklaste komplexa molekylen, men vidare studier som inkluderar fler komplexa molekyler skulle fördjupa förståelsen för kemin ytterligare.

Studien har haft en del problem med svaga signaler och närliggande spektrallinjer så ett värdefullt nästa steg skulle vara att observera med andra teleskop, som exempelvis ALMA som med interferometer kan ge en rumslig upplösning som kan visa om metanolen är koncentrerad till vissa områden i molnen.

4.3 Felkällor

4.3.1 Identifiering och korrigerande av överlappande spektrallinjer

Efter analys av de observerade integrerade intensiteterna var det klart att övergång 9 och 10 var i princip identiska för samtliga värden och parametrar, mest noterbart var deras integrerade intensiteter exakt lika stora. Detta väckte frågor huruvida det i självaste fallet handlade om en enda övergång som hade delats i två. Slutsatsen blev att den totala integrerade intensiteten av båda övergångarna stod listad på båda. Detta innebar dubbla intensiteten för övergångarna och gav ett felaktigt resultat.

Vi började fundera på hur dessa kunde separeras för varje enskild övergång och med ekvation 2 kunde ett förhållande mellan hur mycket linjen bidrog till deras totala intensitet tas fram. Genom denna metod fastställdes ett förhållande på 80/20 i procent. Detta uppdaterades sedan och användes i LTE och icke-LTE beräkningar. Ser vi däremot till resultaten från icke-LTE i tabell 11 är det tydligt att detta inte är det verkliga fallet då övergång 10 har mer än tio gånger högre intensitet än övergång 9. Detta lämnades som en felkälla på grund av bristande tid och en relativt liten magnitud från övergångarna jämfört med resten men detta har förmodligen påverkat resultaten från LTE beräkningarna marginellt.

4.3.2 Begränsad detektion av spektrallinjer i källa 6

I källa 6 kunde endast fyra av tio spektrallinjer urskiljas. Tabell 8 visar tydligt hur källan ChaINA2 inte kunde användas ordentligt. Detta berodde på högt brus kombinerat med låga integrerade intensiteter. Det ledde till att pythonkoden inte kunde göra ordentliga Gaussianpassningar till spektrallinjerna då dessa inte kunde urskiljas ur allt brus. På grund av detta kunde endast ett fåtal övergångar faktiskt studeras och för resten beräknades ett övre gränsvärde för att istället bestämma ett värde på kolumntätheten till

skillnad från ett ordentligt värde. Orsaken bakom detta kan vara flera, men en låg main beam temperatur visas i tabell 8 vilket tyder på en liten mängd gas-metanol. Källan inkluderas i arbetet, men på grund av bristande metanolvärdet kunde den inte ge rimliga resultat och detta visas i figurer 9 (f), 21 och 22 i bilagor 7.2, samt kolumntätheten i tabell 9.

5 Slutsats

I denna studie har metanolhalten i gasfas undersökts kring sex protostjärnor med hjälp av observationsdata från APEX-teleskopet. Genom spektrallinjeanalys och Gaussanpassning av rotationsövergångar har kolumntätheter och excitationstemperaturer bestämts och jämförts med tidigare mätningar av metanol i isfas.

Resultaten visar att metanolhalten i gasfas varierar betydligt mellan källorna, där CrAIRS7b och HH100IRS uppvisar de högsta halterna och ChaINa2 den lägsta. Variationen kan inte förklaras av en enskild parameter, utan beror sannolikt på ett samspel mellan excitationstemperatur, densitet och det evolutionära stadiet hos protostjärnan.

Jämförelsen mellan LTE- och icke-LTE-beräkningar för CrAIRS7b visar att LTE utgör en rimlig approximation för övergripande slutsatser, även om icke-LTE ger mer fysikaliskt korrekta värden. Studien belyser även vikten av noggrann spektrallinjeanalys, där överlappande linjer och felaktigt identifierade övergångar kan påverka resultaten. Sammantaget visar studien därmed att metanolfördelningen i protostellära miljöer är komplex och styrs av flera samverkande processer.

6 Källförteckning

Referenser

- Boogert, A. C. A., P. A. Gerakines och D. C. B. Whittet (2015). “Observations of the Icy Universe”. I: *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 53, s. 541–581. DOI: 10.1146/annurev-astro-082214-122348.
- Boogert, A. C. A., K. M. Pontoppidan m. fl. (2008). “The c2d Spitzer Spectroscopic Survey of Ices Around Low-Mass Young Stellar Objects. I. H₂O and the 5–8 μ m Bands”. I: *The Astrophysical Journal* 678.2, s. 985–1004. DOI: 10.1086/533545.
- Carl, Tadeus (2024). “Astrochemical Investigations of Complex Organics in Cold Molecular Cloud Cores”. Licentiate Thesis. Gothenburg, Sweden: Chalmers University of Technology.
- Caselli, Paola och Cecilia Ceccarelli (2012). “Our Astrochemical Heritage”. I: *The Astronomy and Astrophysics Review* 20.1, s. 56. DOI: 10.1007/s00159-012-0056-x.
- Christensen, Majken Brahe Ellegaard (2019). “How Do Stars Form?” I: *Frontiers for Young Minds* 07. DOI: 10.3389/frym.2019.00092.
- Cuppen, Herma M., H. Linnartz och S. Ioppolo (2024). “Laboratory and Computational Studies of Interstellar Ices”. I: *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 62, s. 243–286. DOI: 10.1146/annurev-astro-071221-052732.
- Goldsmith, Paul F. och William D. Langer (1999). “Population Diagram Analysis of Molecular Line Emission”. I: *The Astrophysical Journal* 517.1. DOI: 10.1086/307195.
- Gürtler, J. m. fl. (2002). “Detection of solid ammonia, methanol, and methane with ISOPHOT”. I: *Astronomy & Astrophysics* 390.3, s. 1075–1087. DOI: 10.1051/0004-6361:20020772.
- Luhman, K. L. (2007). “The Stellar Population of the Chamaeleon I Star-Forming Region”. I: *The Astrophysical Journal Supplement Series* 173, s. 104. DOI: 10.1086/520114.
- McGuire, Brett A. (2022). “2021 Census of Interstellar, Circumstellar, Extragalactic, Protoplanetary Disk, and Exoplanetary Molecules”. I: *The Astrophysical Journal Supplement Series* 259.2, s. 30. DOI: 10.3847/1538-4365/ac2a48.
- Perotti, G., J. K. Jørgensen, H. J. Fraser m. fl. (2021). “Linking ice and gas in the λ Orionis Barnard 35A cloud”. I: *Astronomy & Astrophysics* 652, A20. DOI: 10.1051/0004-6361/202140664.
- Perotti, G., J. K. Jørgensen, W. R. M. Rocha m. fl. (2023). “Linking ice and gas in the Coronet cluster in Corona Australis”. I: *Astronomy & Astrophysics* 678, A78. DOI: 10.1051/0004-6361/202245541.
- Perotti, G., W. R. M. Rocha m. fl. (2020). “Linking ice and gas in the Serpens low-mass star-forming region”. I: *Astronomy & Astrophysics* 643, A48. DOI: 10.1051/0004-6361/202038102.
- Pontoppidan, K. M. m. fl. (2003). “Detection of Abundant Solid Methanol Toward Young Low-Mass Stars”. I: *Astronomy & Astrophysics* 404, s. L17–L20. DOI: 10.1051/0004-6361:20030529.
- Wilson, Thomas L., Kristen Rohlfs och Susanne Hüttemeister (2013). *Tools of Radio Astronomy*. 6. utg. Springer. DOI: 10.1007/978-3-642-39950-3.
- Yamamoto, Satoshi (2017). *Introduction to Astrochemistry: Chemical Evolution from Interstellar Clouds to Star and Planet Formation*. Springer. DOI: 10.1007/978-4-431-54171-4.

7 Bilagor

7.1 Pythonkod för Gaussianpassning och beräkning av integrerad intensitet

```
import math
import sys
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.ticker as tck
from scipy.optimize import curve_fit
```

physical constants

```
c = 2.99792458e8; speed of light [m/s]
h = 6.62607015e-34; Planck constant [Js]
kB = 1.38064852e-23; Boltzmann constant [J/K]
Tbg = 2.725 CM background temperature [K]
```

functions

```
def ReadTableSpectrum(file_path):
    data = np.loadtxt(file_path)
    V = data[:,0]
    T = data[:,1]
    return V, T

def gauss(x, a, b, c):
    arg = (x - b)/c
    return a*np.exp(-4.0*np.log(2.0)*arg**2)

def ExtractSpectrum(VLSR, vspan, spectrum):
    V, T = spectrum
    v_min, v_max = VLSR - vspan/2, VLSR + vspan/2

    find indices within the specified range
    mask = (V >= v_min) & (V <= v_max)

    extract the corresponding velocity and intensity values
    V_extract = V[mask]
    T_extract = T[mask]

    return V_extract, T_extract

def get_histo(X, Y):
    n = 0
    A = []
    B = []
    for x in X:
        if n > 0:
            x1 = X[n - 1]
            y1 = Y[n - 1]
            x2 = X[n]
            y2 = Y[n]
            x12 = (x1 + x2)/2.0
            A.append(x12)
            B.append(y1)
```

```

A.append(x12)
B.append(y1)
A.append(x12)
B.append(y1)
A.append(x12)
B.append(y2)
A.append(x12)
B.append(y2)
A.append(x2)
B.append(y2)
n = n + 1

return A, B

def InsideRanges(v, vranges):
for r in vranges:
if v >= r[0] and v <= r[1]:
return True
return False

def GetStat(vranges, spectrum):
V, T
= spectrum
min = max = s = s2 = 0.0
nchan = 0
first = True
for n, v in enumerate(V):
if InsideRanges(v, vranges):
t = T[n]
if first:
min = max = t
first = False
else:
if t < min:
min = t
if t > max:
max = t
s = s + t
s2 = s2 + t*t
nchan = nchan + 1

calculate RMS
ave = sigma = 0.0
if nchan == 1:
ave = s
elif nchan > 1:
ave = s/float(nchan)
sigma = math.sqrt((s2 - nchan*ave*ave)/float(n-1))
return nchan, ave, sigma, min, max

```

```

Dir = r'C:5'
Dir = r'PathToFile'

```

extraction parameters

```

vspan = 12 width of extraction [km/s]
VLSR = 5 source LSR velocity [km/s]

```

```

file = r'nu = 193.41532e9

spectrum = ReadTableSpectrum(file)
Vextr, Textr = ExtractSpectrum(VLSR, vspan, spectrum)
spectrumextr = [Vextr, Textr]

-----

Gaussian fit, integrated intensity, and noise level

iniguess = np.array([0.1, VLSR, 1])
parameters, covariance = curve_fit(gauss, Vextr, Textr, iniguess)

TA = parameters[0]
etamb = 0.5
Tmb = TA/etamb
Vcent = parameters[1]
FWHM = parameters[2]

Tmberr = np.sqrt(covariance[0, 0])
Vcenterr = np.sqrt(covariance[1, 1])
FWHMerr = np.sqrt(covariance[2, 2])

integrated peak intensity [K km/s]
IintGauss = 1.06 * Tmb * FWHM

Tmberrtot = np.sqrt(Tmberr ** 2 + (0.1 * Tmb) ** 2)

dIintdTmb = 1.06 * FWHM
dIintdFWHM = 1.06 * Tmb
DeltaIintGauss = np.sqrt((dIintdTmb * Tmberrtot) ** 2
+ (dIintdFWHM * FWHMerr) ** 2)

print('Gaussian fitting parameters:')
print(' Tmb = print(' Vcent = print(' FWHM = print('-----')

print('Integrated intensity:')
print(' Iint = DeltaIintGauss * 1e3)
print('-----')

noise level
RMSRanges = np.array([-5.9+VLSR,-1.5+VLSR], [2.0+VLSR,5.9+VLSR])
nchan, mean, sigma, a, a = GetStat(RMSRanges, spectrumextr)

print('noise RMS: print('-----')

-----

plotting

convert to histogram style
Vhisto, Thisto = get_histo(Vextr, Textr/etamb)
Vhisto, Thisto = np.array(Vhisto), np.array(Thisto)

get Gaussian function
GaussianFit = gauss(Vhisto, Tmb, Vcent, FWHM).reshape(-1, 1)

extracted spectrum with Gaussian line fit
plt.figure(dpi=300)

```

```

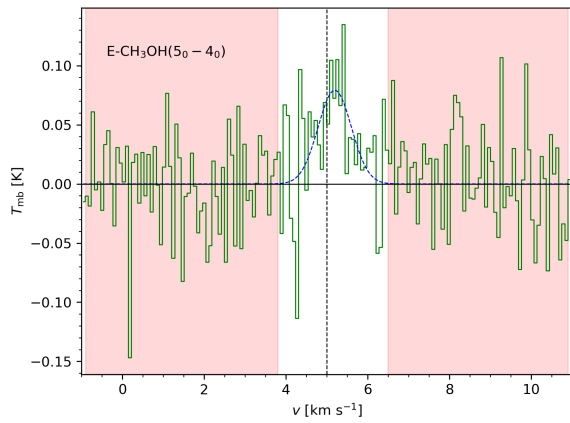
ax = plt.gca()
plt.plot(V_histo, T_histo, 'g-', linewidth = 0.8)
plt.plot(V_histo, GaussianFit, 'b--', linewidth = 0.75)
plt.xlabel('v [km s-1']
plt.ylabel('Tmb [K]')
plt.axhline(y=0.0, color='black', linestyle='-', linewidth=0.75)
plt.axvline(x=VLSR, color='black', linestyle='-', linewidth=0.75)

ax.axvspan(RMSRanges[0,0], RMSRanges[0,1], alpha=0.15, color='red')
ax.axvspan(RMSRanges[1,0], RMSRanges[1,1], alpha=0.15, color='red')

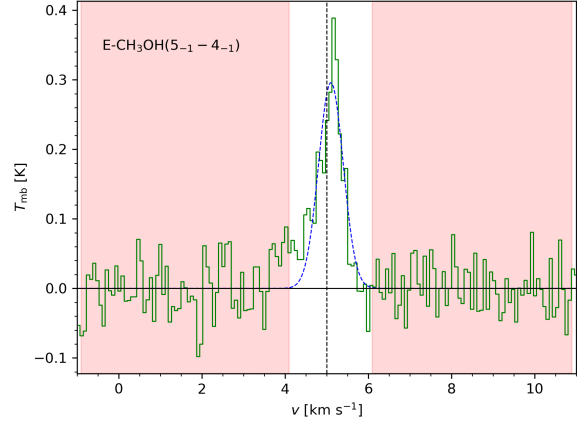
plt.xlim(-vspan/2+VLSR, vspan/2+VLSR)
plotlabel = r'E-CH3OH(40 - 30)'
ax.text(0.05, 0.87, plotlabel, transform = ax.transAxes)
ax.xaxis.set_minor_locator(tck.AutoMinorLocator())
ax.yaxis.set_minor_locator(tck.AutoMinorLocator())

```

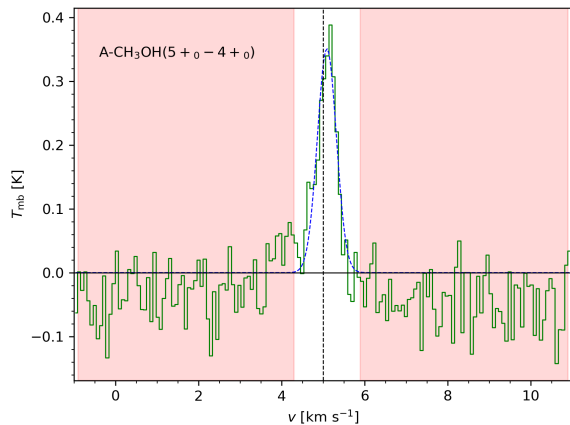
7.2 Spektrallinjer med Gaussianpassningar



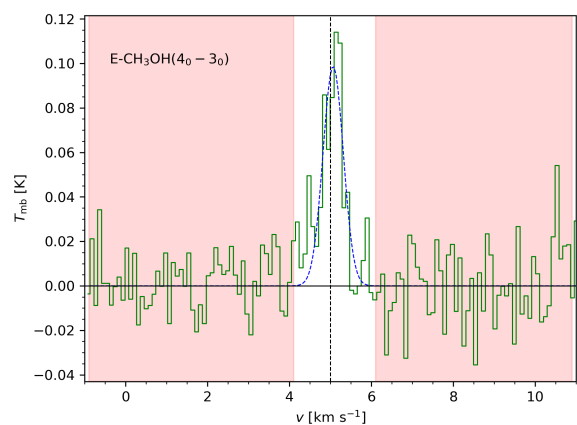
(a) Gaussianpassning för $5_{0,0} \rightarrow 4_{0,0}$.



(b) Gaussianpassning för $5_{-1,0} \rightarrow 4_{-1,0}$.

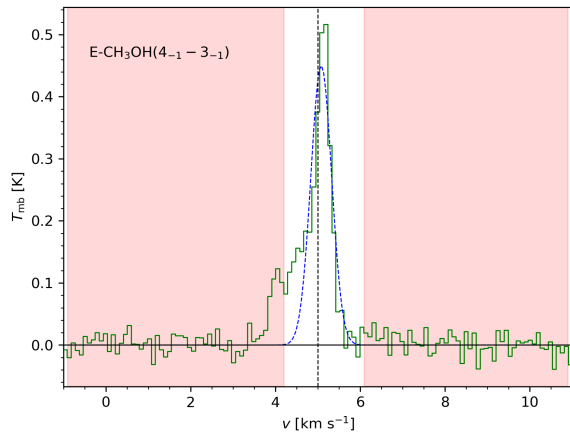


(c) Gaussianpassning för $5_{0,0}^+ \rightarrow 4_{0,0}^+$.

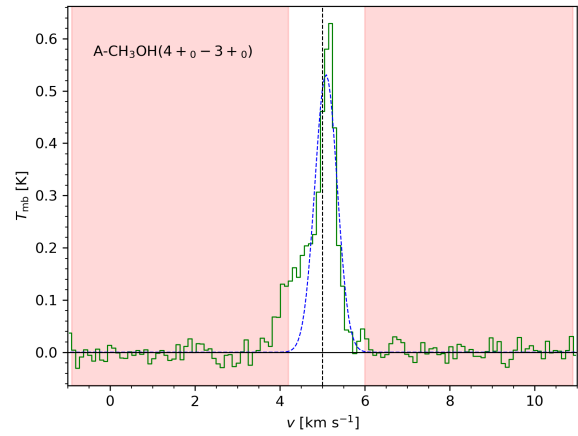


(d) Gaussianpassning för $4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$.

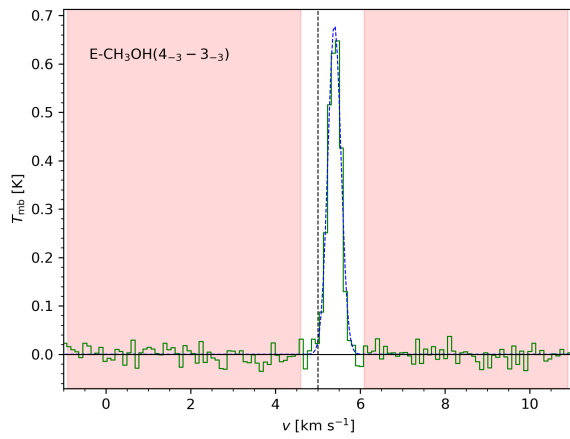
Figur 11: Gaussianpassning av spektrallinjer för källa IRAS15398 (del 1).



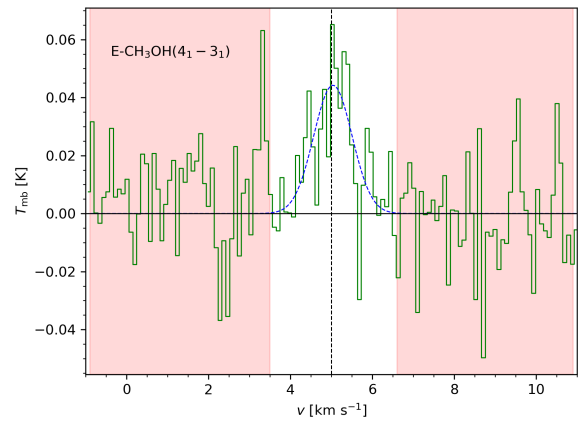
(a) Gaussianpassning för $4_{-1,0} \rightarrow 3_{-1,0}$.



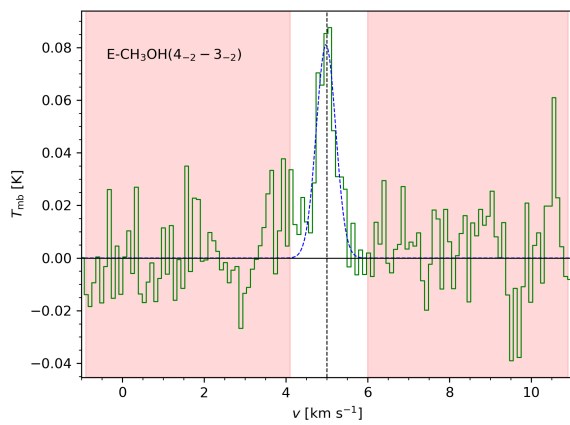
(b) Gaussianpassning för $4_{0,0}^+ \rightarrow 3_{0,0}^+$.



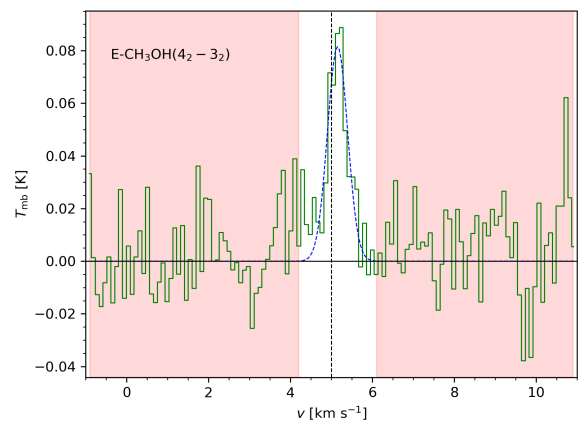
(c) Gaussianpassning för $4_{-3,0} \rightarrow 3_{-3,0}$.



(d) Gaussianpassning för $4_{1,0} \rightarrow 3_{1,0}$.

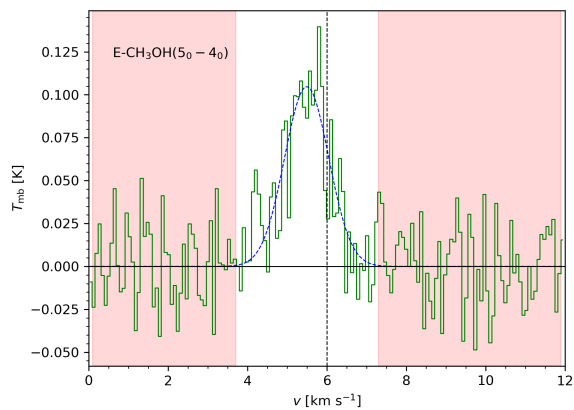


(e) Gaussianpassning för $4_{-2,0} \rightarrow 3_{-2,0}$.

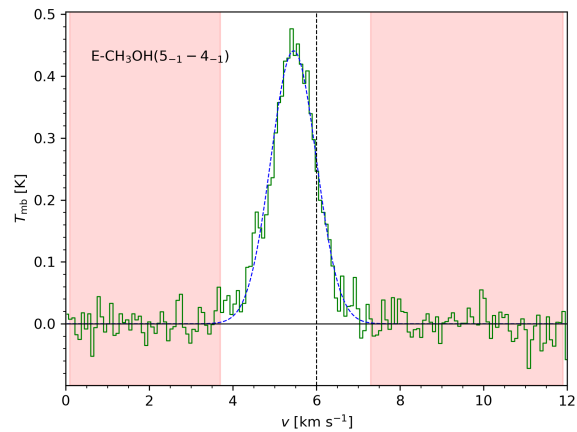


(f) Gaussianpassning för $4_{2,0} \rightarrow 3_{2,0}$.

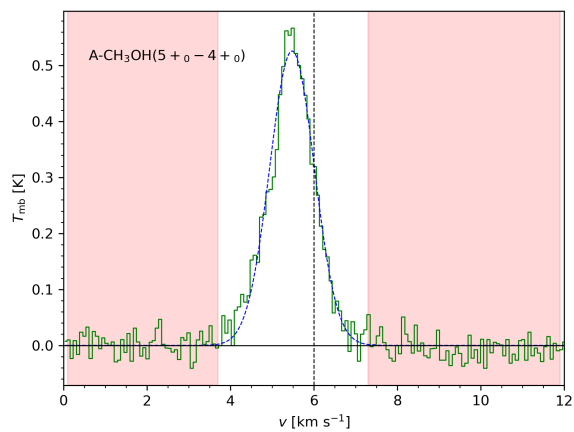
Figur 12: Gaussianpassning av spektrallinjer för källa IRAS15398 (del 2).



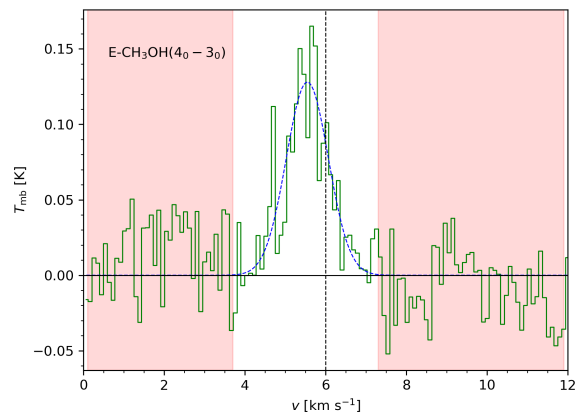
(a) Gausanpassning för $5_{0,0} \rightarrow 4_{0,0}$.



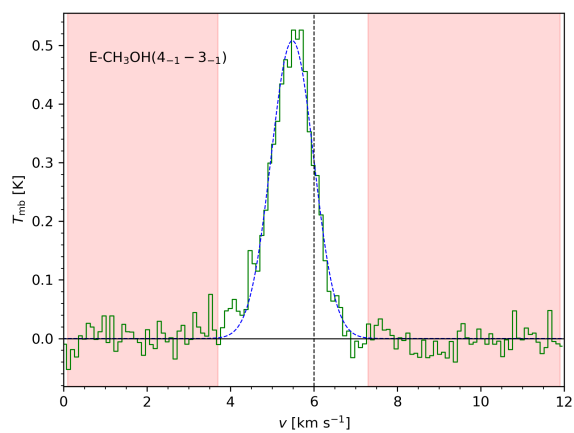
(b) Gausanpassning för $5_{-1,0} \rightarrow 4_{-1,0}$.



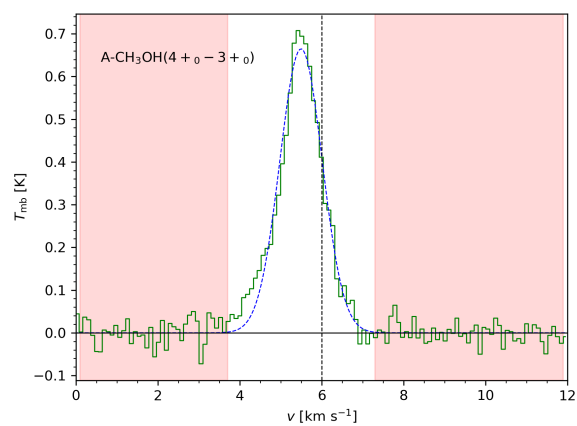
(c) Gausanpassning för $5_{0,0}^+ \rightarrow 4_{0,0}^+$.



(d) Gausanpassning för $4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$.

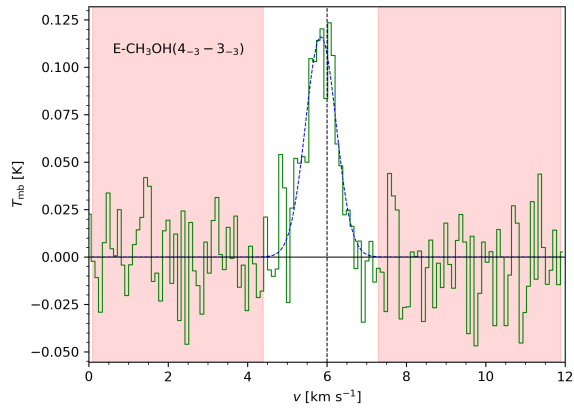


(e) Gausanpassning för $4_{-1,0} \rightarrow 3_{-1,0}$.

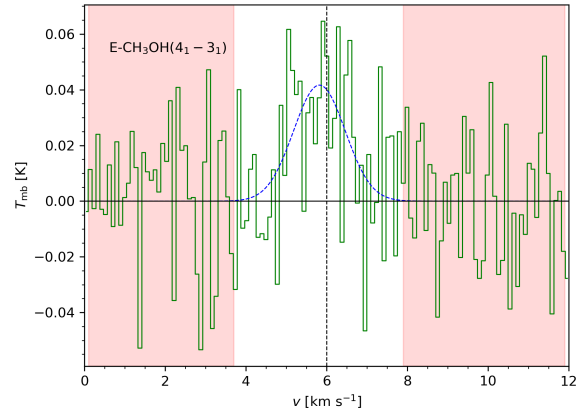


(f) Gausanpassning för $4_{0,0}^+ \rightarrow 3_{0,0}^+$.

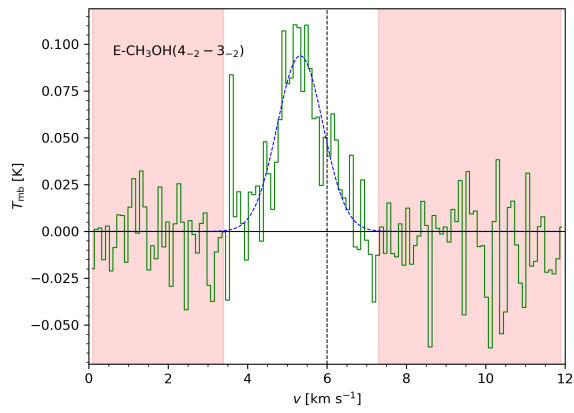
Figur 13: Gausanpassning av spektrallinjer för källa CrAIRS5 (del 1).



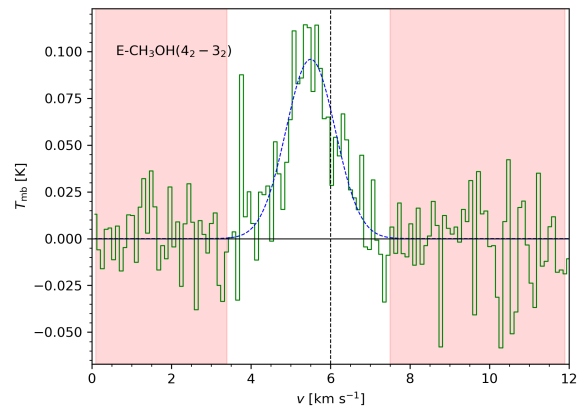
(a) Gaussianpassning för $4_{-3,0} \rightarrow 3_{-3,0}$.



(b) Gaussianpassning för $4_{1,0} \rightarrow 3_{1,0}$.

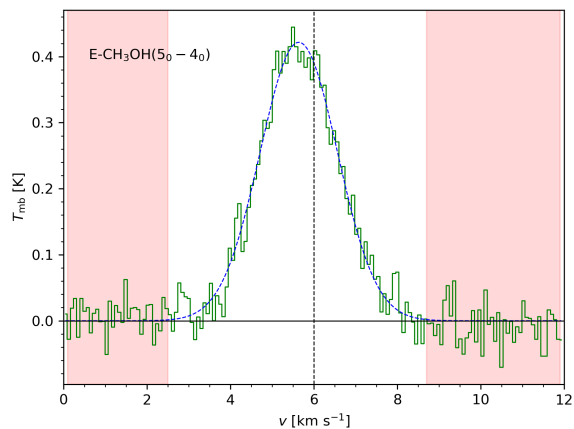


(c) Gaussianpassning för $4_{-2,0} \rightarrow 3_{-2,0}$.

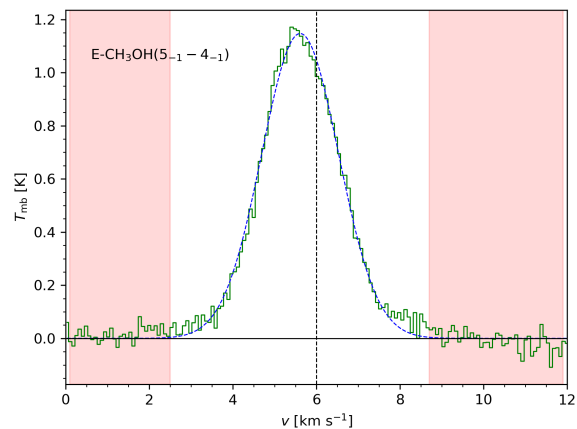


(d) Gaussianpassning för $4_{2,0} \rightarrow 3_{2,0}$.

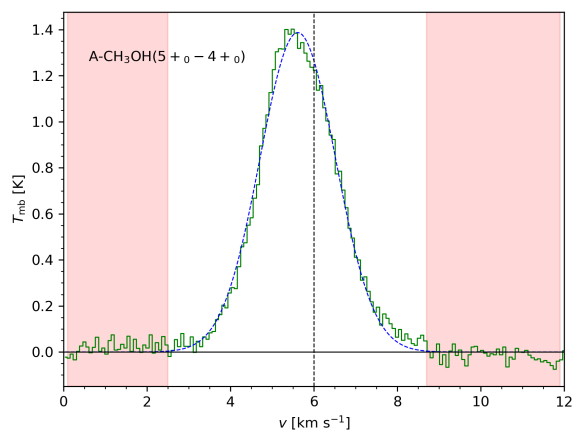
Figur 14: Gaussianpassning av spektrallinjer för källa CrAIRS5 (del 2).



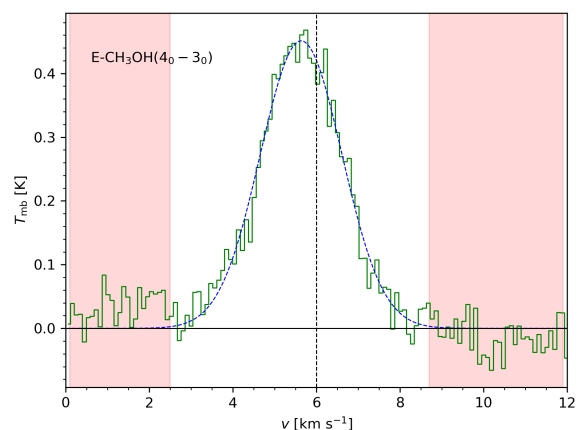
(a) Gausanpassning för $5_{0,0} \rightarrow 4_{0,0}$.



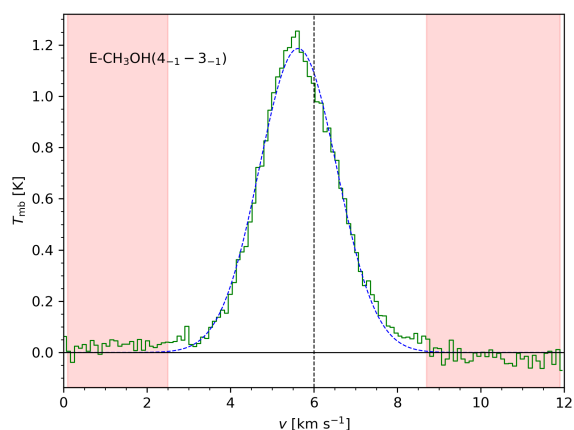
(b) Gausanpassning för $5_{-1,0} \rightarrow 4_{-1,0}$.



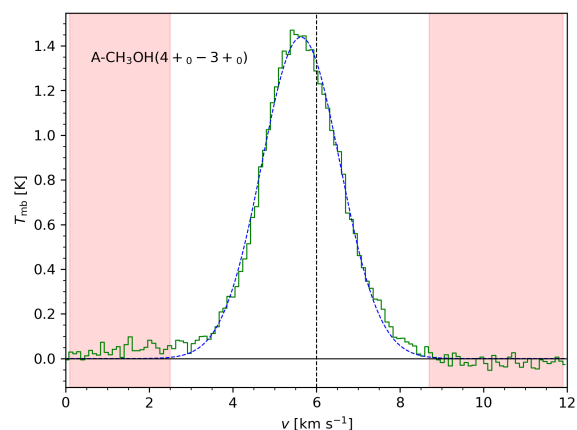
(c) Gausanpassning för $5_{0,0}^+ \rightarrow 4_{0,0}^+$.



(d) Gausanpassning för $4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$.

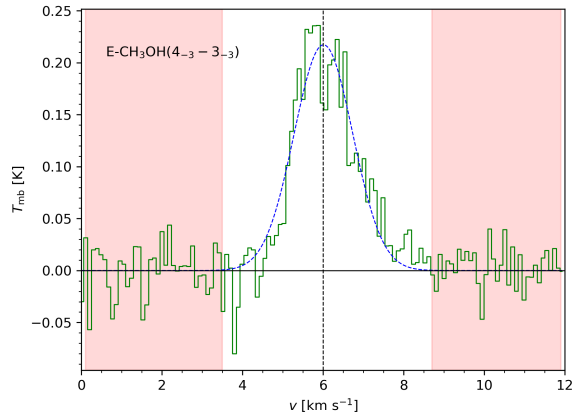


(e) Gausanpassning för $4_{-1,0} \rightarrow 3_{-1,0}$.

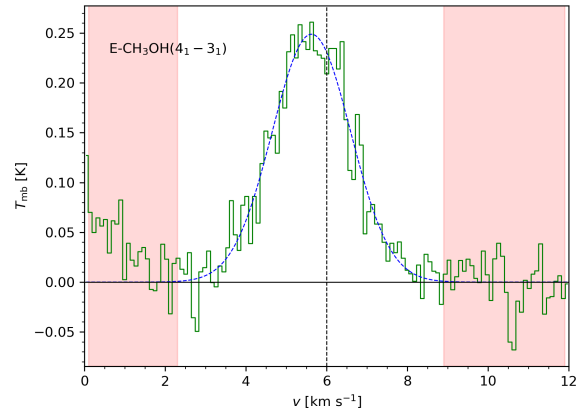


(f) Gausanpassning för $4_{0,0}^+ \rightarrow 3_{0,0}^+$.

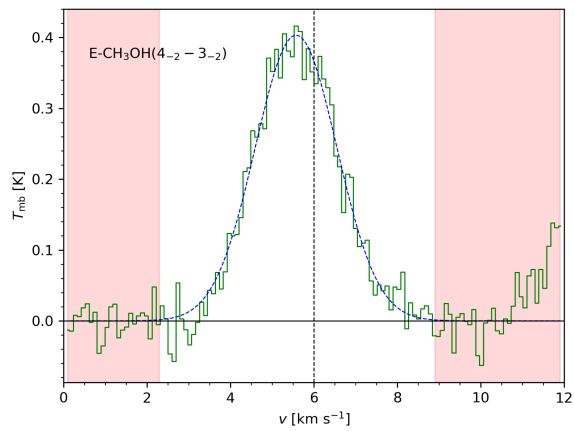
Figur 15: Gausanpassning av spektrallinjer för källa CrAIRS7b (del 1).



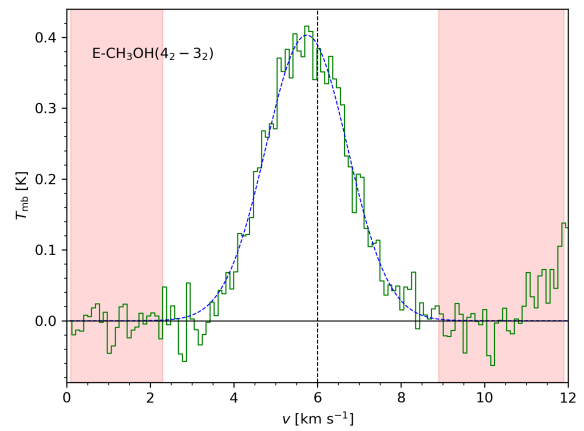
(a) Gaussianpassning för $4_{-3,0} \rightarrow 3_{-3,0}$.



(b) Gaussianpassning för $4_{1,0} \rightarrow 3_{1,0}$.

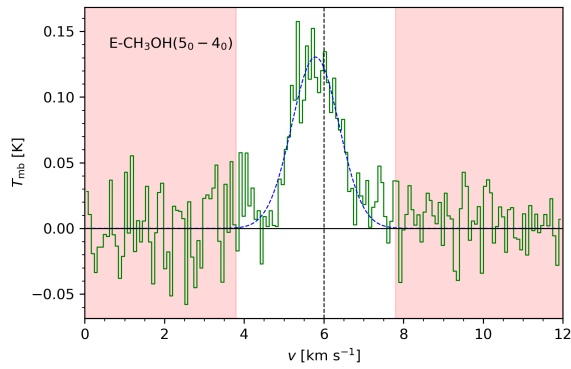


(c) Gaussianpassning för $4_{-2,0} \rightarrow 3_{-2,0}$.

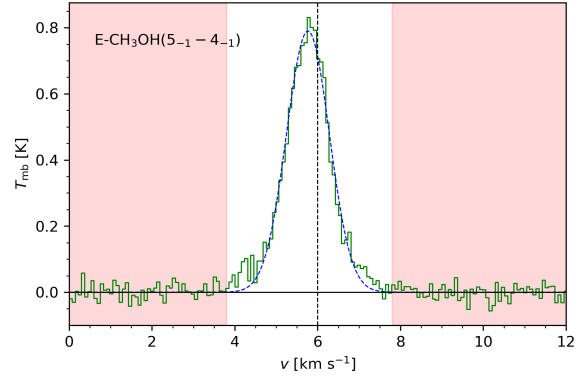


(d) Gaussianpassning för $4_{2,0} \rightarrow 3_{2,0}$.

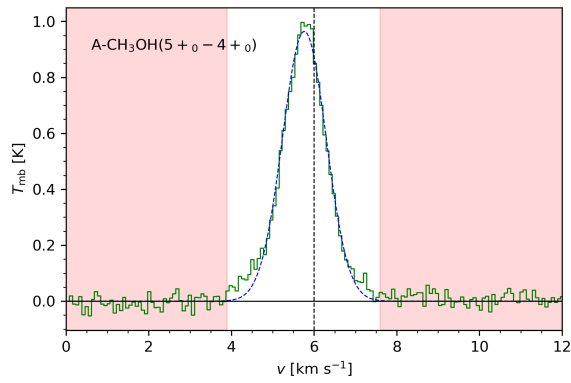
Figur 16: Gaussianpassning av spektrallinjer för källa CrAIRS7b (del 2).



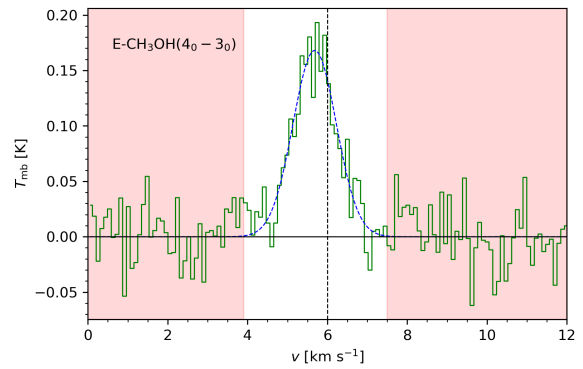
(a) Gaussianpassning för $5_{0,0} \rightarrow 4_{0,0}$.



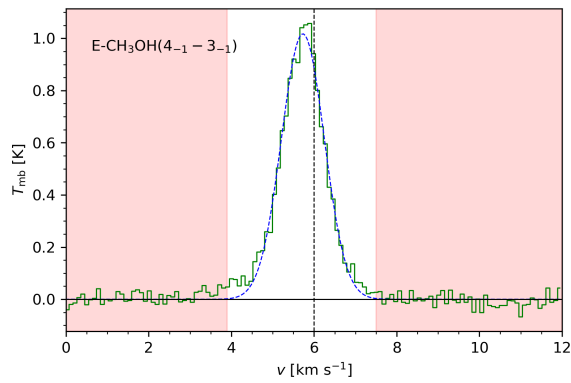
(b) Gaussianpassning för $5_{-1,0} \rightarrow 4_{-1,0}$.



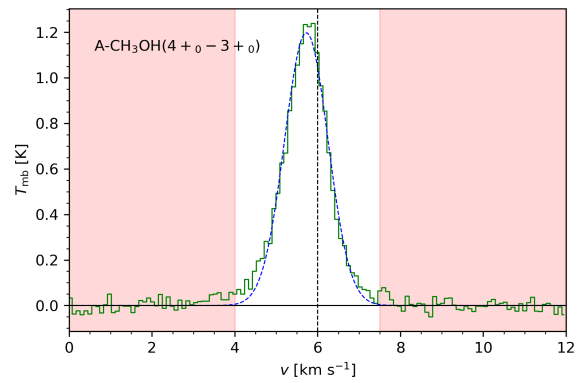
(c) Gaussianpassning för $5_{0,0}^+ \rightarrow 4_{0,0}^+$.



(d) Gaussianpassning för $4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$.

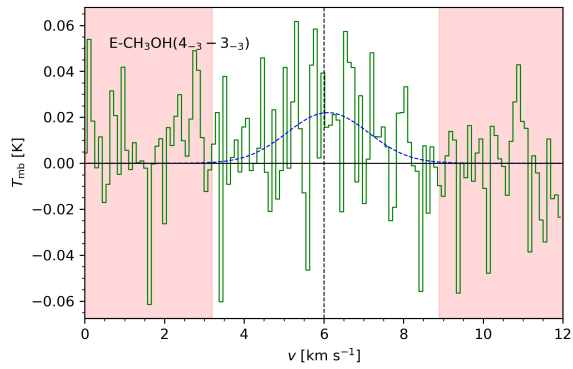


(e) Gaussianpassning för $4_{-1,0} \rightarrow 3_{-1,0}$.

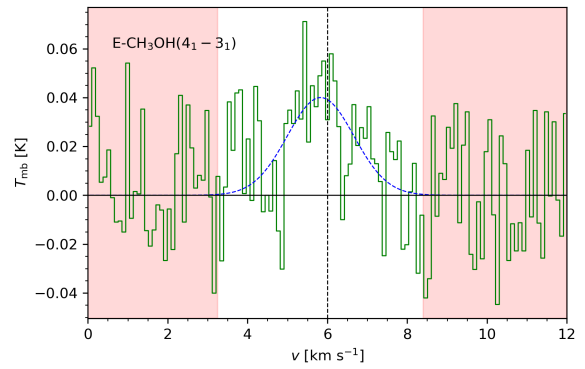


(f) Gaussianpassning för $4_{0,0}^+ \rightarrow 3_{0,0}^+$.

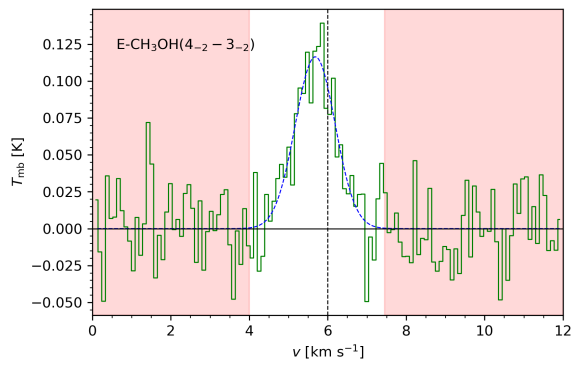
Figur 17: Gaussianpassning av spektrallinjer för källa HH100IRS (del 1).



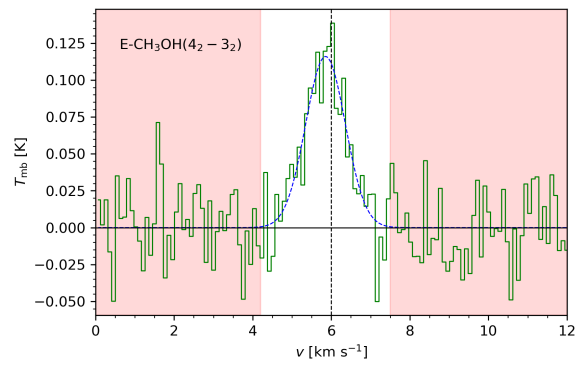
(a) Gaussianpassning för $4_{-3,0} \rightarrow 3_{-3,0}$.



(b) Gaussianpassning för $4_{1,0} \rightarrow 3_{1,0}$.

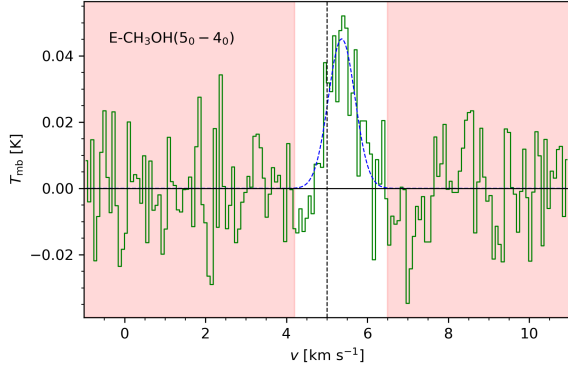


(c) Gaussianpassning för $4_{-2,0} \rightarrow 3_{-2,0}$.

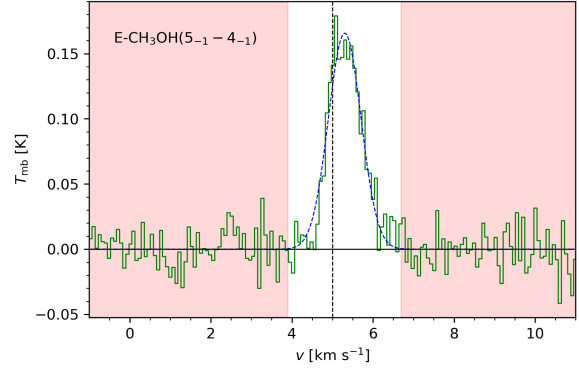


(d) Gaussianpassning för $4_{2,0} \rightarrow 3_{2,0}$.

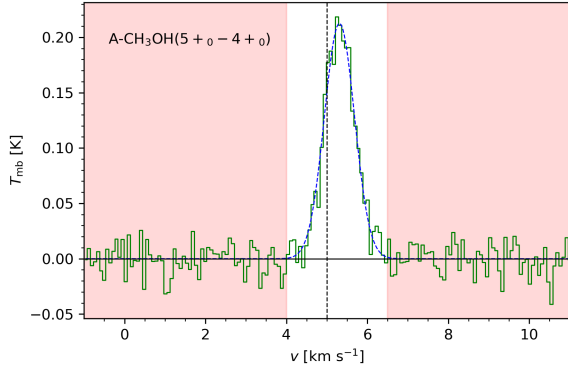
Figur 18: Gaussianpassning av spektrallinjer för källa HH100IRS (del 2).



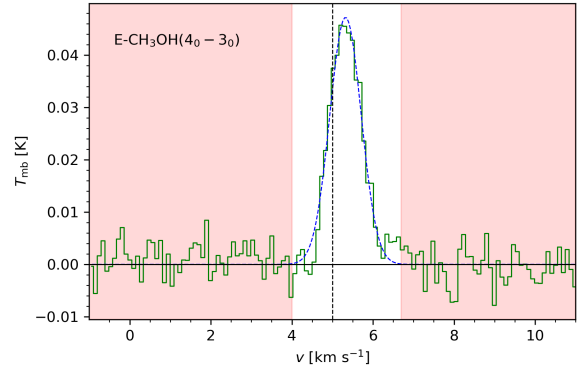
(a) Gaussianpassning för övergången $5_{0,0} \rightarrow 4_{0,0}$.



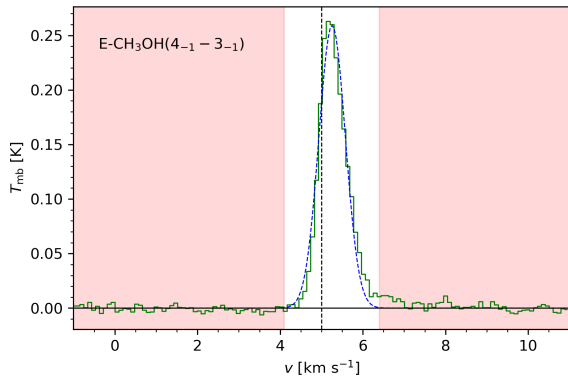
(b) Gaussianpassning för $5_{-1,0} \rightarrow 4_{-1,0}$.



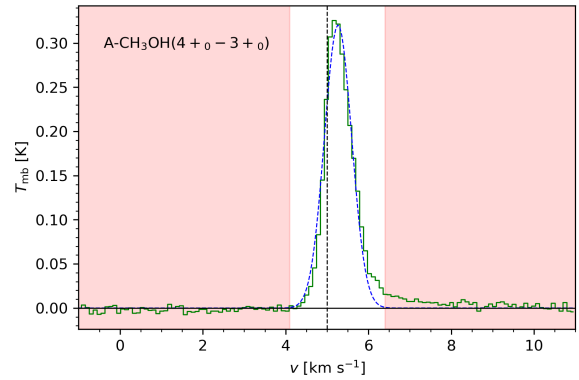
(c) Gaussianpassning för $5_{0,0}^+ \rightarrow 4_{0,0}^+$.



(d) Gaussianpassning för $4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$.

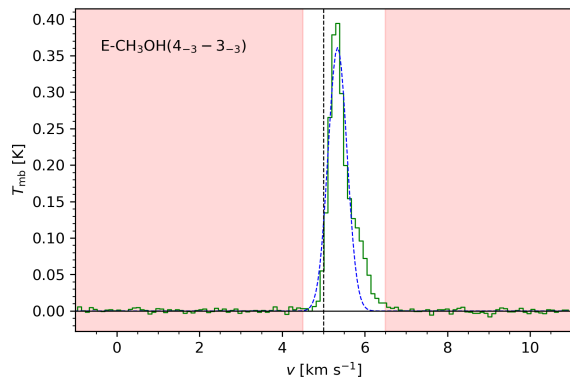


(e) Gaussianpassning för $4_{-1,0} \rightarrow 3_{-1,0}$.

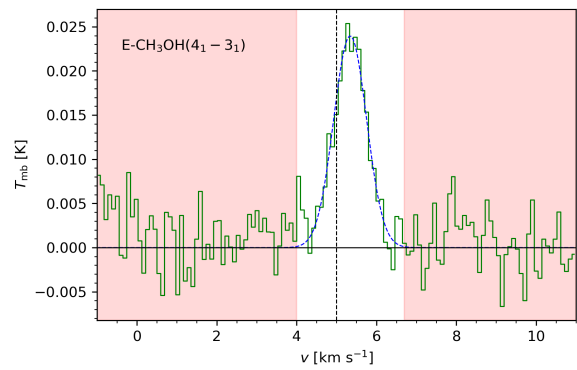


(f) Gaussianpassning för $4_{0,0}^+ \rightarrow 3_{0,0}^+$.

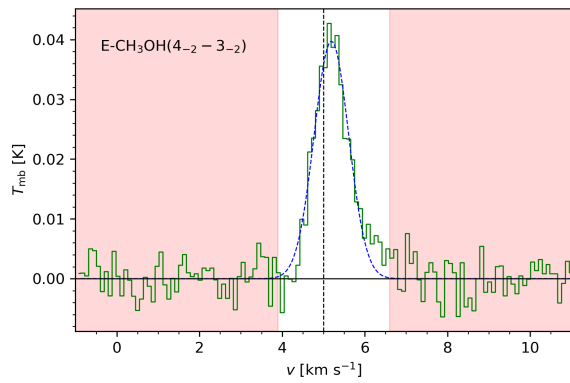
Figur 19: Gaussianpassning av spektrallinjer för källa HH46IRS (del 1).



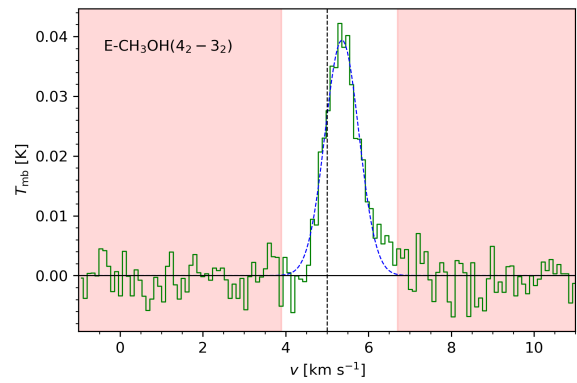
(a) Gaussianpassning för $4_{-3,0} \rightarrow 3_{-3,0}$.



(b) Gaussianpassning för $4_{1,0} \rightarrow 3_{1,0}$.

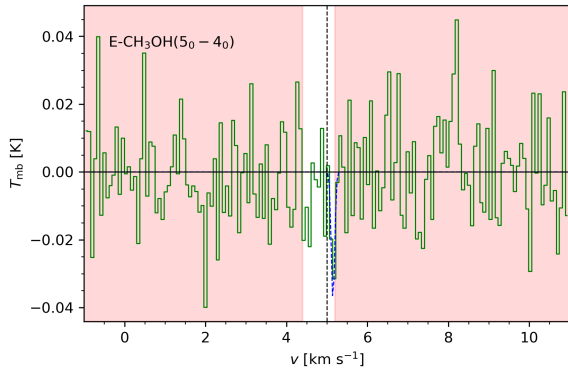


(c) Gaussianpassning för $4_{-2,0} \rightarrow 3_{-2,0}$.

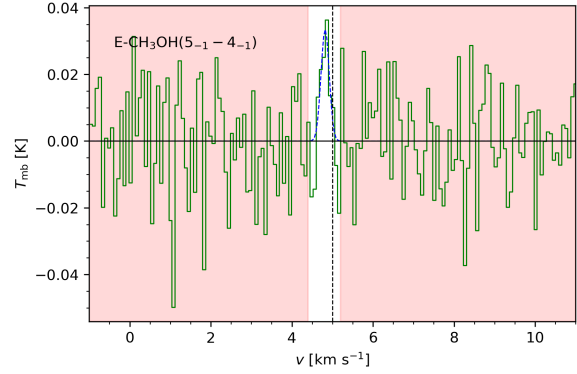


(d) Gaussianpassning för $4_{2,0} \rightarrow 3_{2,0}$.

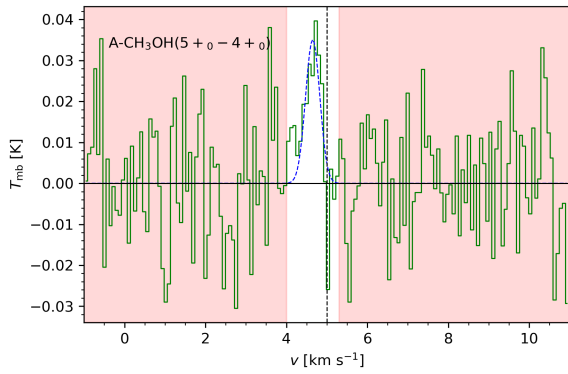
Figur 20: Gaussianpassning av spektrallinjer för källa HH46IRS (del 2).



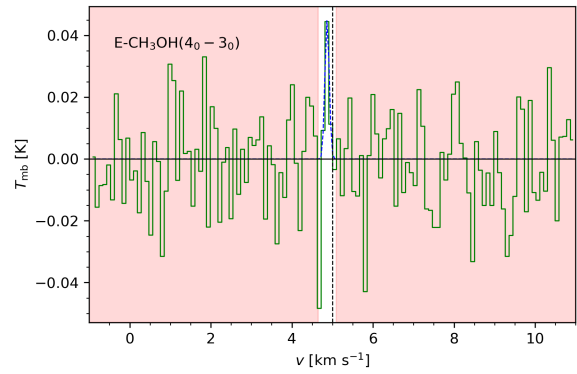
(a) Gaussanpassning för övergången $5_{0,0} \rightarrow 4_{0,0}$.



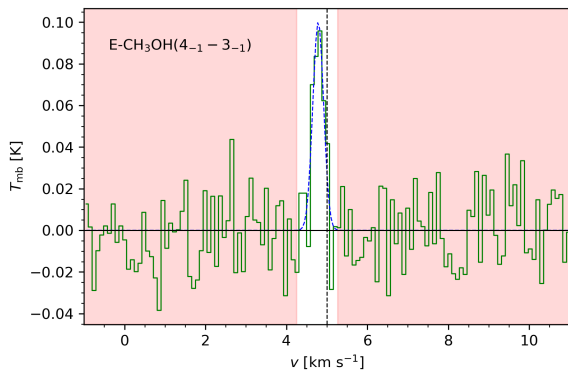
(b) Gaussanpassning för $5_{-1,0} \rightarrow 4_{-1,0}$.



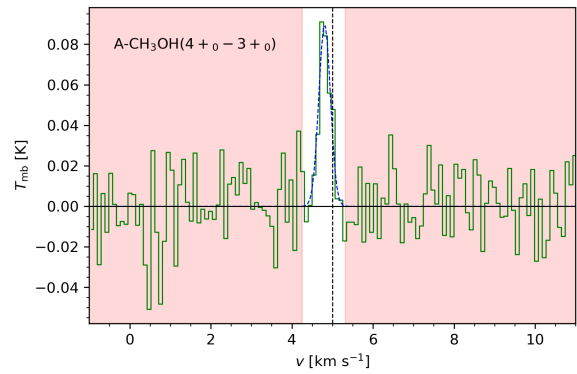
(c) Gaussanpassning för $5_{0,0}^+ \rightarrow 4_{0,0}^+$.



(d) Gaussanpassning för $4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$.

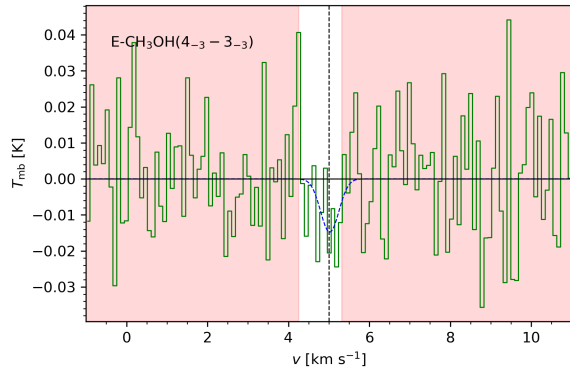


(e) Gaussanpassning för $4_{-1,0} \rightarrow 3_{-1,0}$.

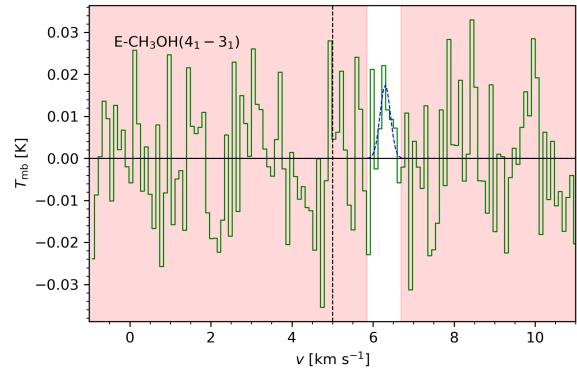


(f) Gaussanpassning för $4_{0,0}^+ \rightarrow 3_{0,0}^+$.

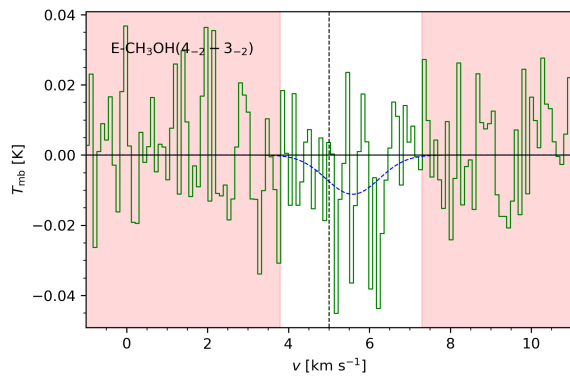
Figur 21: Gaussanpassning av spektrallinjer för källa ChaINa2 (del 1).



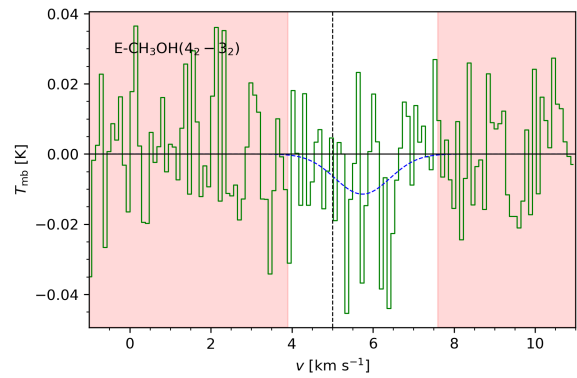
(a) Gaussianpassning för $4_{-3,0} \rightarrow 3_{-3,0}$.



(b) Gaussianpassning för $4_{1,0} \rightarrow 3_{1,0}$.



(c) Gaussianpassning för $4_{-2,0} \rightarrow 3_{-2,0}$.



(d) Gaussianpassning för $4_{2,0} \rightarrow 3_{2,0}$.

Figur 22: Gaussianpassning av spektrallinjer för källa ChaINa2 (del 2).

7.3 Tabell för rotationsdiagramdata

Tabell 12: Övre energitillståndet E_u och $\ln(N_u/g_u)$ för respektive källa för LTE-plot.

E_u [K]	IRAS15398 $\ln(N_u/g_u)$ [cm^{-2}]	CrAIRS5 $\ln(N_u/g_u)$ [cm^{-2}]	CrAIRS7b $\ln(N_u/g_u)$ [cm^{-2}]	HH100IRS $\ln(N_u/g_u)$ [cm^{-2}]	HH46IRS $\ln(N_u/g_u)$ [cm^{-2}]	ChaINa2 $\ln(N_u/g_u)$ [cm^{-2}]
47.9	23.3	23.9	25.8	24.2	22.6	–
40.4	24.4	25.4	36.9	25.9	24.1	21.1
34.8	24.3	25.5	27.0	26.1	24.2	21.7
36.3	23.5	24.5	26.4	24.8	23.2	–
28.8	25.1	25.9	27.4	26.6	24.8	23.0
23.2	25.2	26.1	27.5	26.8	25.0	22.9
44.3	23.4	23.6	25.8	23.9	22.6	–
49.1	23.3	24.4	26.4	25.5	23.2	–
45.5	22.0	23.1	25.0	23.1	21.8	–