Herleitung einer einfachen Gleichung zur Abschätzung des Fehlers bei Äquivalentbreiten von Spektrallinien

Abstract In der Spektroskopie wird zusätzlich zur berechneten Äquivalentbreite einer Spektrallinie auch das Signal-Rausch-Verhältnis S/N angegeben. In dieser Arbeit wird eine kurze Ableitung präsentiert, wie man aus dem Signal-Rausch-Verhältnis den Fehler der Äquivalentbreite abschätzen kann. Der relative Fehler der Äquivalentbreite ergibt sich in erster Näherung als Kehrwert von S/N. Für schwache Linien, die sich nicht wesentlich vom Kontinuum abheben, muss aber eine Korrektur angebracht werden, um deren Ableitung es hier im Wesentlichen geht.

Eine ausführliche Behandlung des Themas Spektroskopie finden Sie im Buch *›Astronomie in Theorie und Praxis‹*, 6. Auflage (ISBN 978-3-00-040524-2).

Dr. Erik Wischnewski

Heinrich-Heine-Weg 13 • D-24568 Kaltenkirchen
E-Mail: proab@t-online.de • Internet: http://www.astronomie-buch.de

Version: 13.02.2014 08:47:44

1 Definition der Äquivalentbreite

Für die Herleitung des Fehlers wird folgende Definition der Äquivalentbreite W verwendet:

$$W = \int_{\lambda 1}^{\lambda 2} \left(1 - \frac{I_\lambda}{I_C}\right) d\lambda \, ,$$

wobei I_λ die Linienintensität an der Stelle λ und I_C das (Pseudo-)Kontinuum bei der Wellenlänge λ ist. In der Praxis wird das Integral durch eine Summe ersetzt, das sich durch die Digitalisierung des Spektrums ergibt. Die Schrittweite ist dabei ein Pixel, dλ wird zur Δλ und entspricht der linearen Dispersion in Angström/Pixel (oder nm/Pixel).

Für die Abschätzung des Fehlers (nicht zur Berechnung der Äquivalentbreite) genügt es, die Summierung zu vereinfachen, indem von einem konstanten Kontinuum I_C und einer konstanten Linienintensität I_λ ausgegangen wird. Letzterer wird hinreichend charakterisiert, wenn das „Halbe Maximum" verwendet wird, wie es von der Halbwertsbreite FWHM (*Full Width at Half Maximum*) her bekannt ist.

Somit ergibt sich als Näherung für die Äquivalentbreite W:

$$W = n \cdot \Delta\lambda \cdot \left(1 - \frac{I_{HM}}{I_C}\right),$$

wobei n die Anzahl der Pixel im Intervall λ_1 und λ_2 , Δλ die lineare Dispersion und I_{HM} die halbe Maximalintensität der Linie ist.

2 Signal-Rausch-Verhältnis

Es hat sich eingebürgert, zur Beschreibung der Genauigkeit der Messungen an geeigneter Stelle nahe der Linie einen kurzen Abschnitt des Kontinuums zu mitteln. Zu diesem Mittelwert lässt sich die Streuung bestimmen. Der Mittelwert I_C ist das Signal, der mittlere Fehler des Einzelwertes σ_C das Maß für das Rauschen (Noise). Der Quotient bildet das S/N, das jeder Bestimmung einer Äquivalentbreite beigefügt werden sollte.

Zwar ist der zur S/N-Bestimmung verwendete Abschnitt des Kontinuums nicht genau jener bei der Linie, jedoch darf davon ausgegangen werden, dass sich der Fehler nicht nennenswert unterscheidet. Ebenso möge dieser Fehler als charakteristisches Maß für den Fehler der Linienintensität gelten und einfach als σ bezeichnet werden.

Spätestens jetzt wird deutlich, warum man im Allgemeinen von einer Abschätzung des Fehlers spricht (oder schreibt). Im Endeffekt gibt die Fehlerangabe nur eine Idee der Genauigkeit des Messwertes, in diesem Falle der Äquivalentbreite.

Bei der Auswahl des Kontinuumabschnittes müssen vorhandene Linie, auch relativ schwache berücksichtigt werden. Das ist umso schwieriger, je höher die spektrale Auflösung R ist.

3 Extraktion des Fehlerterms

Um einen handlichen Ausdruck für die Fehlerabschätzung zu erhalten, wird der Summenausdruck für die Äquivalentbreite wie folgt umgeschrieben:

$$W^{\pm} = n \cdot \Delta\lambda \cdot \left(1 - \frac{I_{HM} \pm \sigma}{I_C \pm \sigma}\right).$$

Wandeln wir zunächst den Bruch um:

$$\frac{I_{HM} \pm \sigma}{I_C \pm \sigma} = \frac{I_{HM}}{I_C \pm \sigma} \pm \frac{\sigma}{I_C \pm \sigma}.$$

Mit $\sigma \ll I_C$ können wir den zweiten Term vereinfachen:

$$\frac{I_{HM}}{I_C \pm \sigma} \pm \frac{\sigma}{I_C}$$

und mit $I_C \pm \sigma = \ I_C \cdot \left(1 \pm \frac{\sigma}{I_C}\right)$ unter Beachtung von $\frac{1}{I_C \pm \sigma} \approx I_C \mp \sigma$ wie folgt beschreiben:

$$\frac{I_{HM}}{I_C} \cdot \left(1 \mp \frac{\sigma}{I_C}\right) \pm \frac{\sigma}{I_C}.$$

Nehmen wir nun wieder den gesamten Klammerausdruck aus der Definition und fassen die Glieder neu zusammen:

$$\begin{aligned} &1 - \frac{I_{HM}}{I_C} \cdot \left(1 \mp \frac{\sigma}{I_C}\right) \pm \frac{\sigma}{I_C} \\ &= 1 - \frac{I_{HM}}{I_C} \mp \frac{I_{HM}}{I_C} \cdot \frac{\sigma}{I_C} \pm \frac{\sigma}{I_C} \\ &= 1 - \frac{I_{HM}}{I_C} \pm \frac{\sigma}{I_C} \cdot \sqrt{\left(\frac{I_{HM}}{I_C}\right)^2 + 1}\,. \end{aligned}$$

Da es sich bei den beiden Gliedern mit vorangestelltem ± um voneinander unabhängigen Gauß-sche Fehler handelt, werden sie im Sinne der Fehlerfortpflanzung quadratisch addiert.

Setzen wir nun wieder alle Teile zusammen:

$$\begin{aligned} W^{\pm} &= n \cdot \Delta\lambda \cdot \left(1 - \frac{I_{HM}}{I_C} \pm \frac{\sigma}{I_C} \cdot \sqrt{\left(\frac{I_{HM}}{I_C}\right)^2 + 1}\right) \\ &= n \cdot \Delta\lambda \cdot \left(1 - \frac{I_{HM}}{I_C}\right) \pm n \cdot \Delta\lambda \cdot \frac{\sigma}{I_C} \cdot \sqrt{\left(\frac{I_{HM}}{I_C}\right)^2 + 1}\,. \end{aligned}$$

Der vordere Teil ist die Äquivalentbreite W und der hintere Teil die zugehörige Fehlerangabe ΔW.

Wir betrachten nun den relativen Fehler:

$$\frac{\Delta W}{W} = \frac{n \cdot \Delta\lambda \cdot \frac{\sigma}{I_C} \cdot \sqrt{\left(\frac{I_{HM}}{I_C}\right)^2 + 1}}{n \cdot \Delta\lambda \cdot \left(1 - \frac{I_{HM}}{I_C}\right)} = \frac{\sigma}{I_C} \cdot \frac{\sqrt{\left(\frac{I_{HM}}{I_C}\right)^2 + 1}}{1 - \frac{I_{HM}}{I_C}}.$$

Mit $\frac{\sigma}{I_C} = \frac{1}{S/N}$ erhalten wir endgültig:

$$\frac{\Delta W}{W} = k \cdot \frac{1}{S/N} \quad mit \quad k = \frac{\sqrt{\left(\frac{I_{HM}}{I_C}\right)^2 + 1}}{1 - \frac{I_{HM}}{I_C}}.$$

Hierbei ist k ein Korrekturfaktor, der bei starken Linien nahe 1 liegt nur bei schwachen Linien, die sich nur wenig vom Kontinuum abheben, größere Werte annimmt.

4 Korrekturfaktor

Nennen wir I_{HM}/I_C die Linienstärke, dann ist diese bei Absorptionslinien kleiner als 1 und bei Emissionslinien größer als 1. Daraus ergibt sich, dass k bei Absorptionslinien positiv ist und bei Emissionslinien negativ, genauso wie W selbst.

Die nachfolgende Tabelle gibt den Korrekturfaktor in Abhängigkeit der Linienstärke an.

	I_{HM}/I_C	k
Absorption	0.1	1.1
	0.3	1.5
	0.5	2.2
	0.7	4.1
	0.8	6.4
	0.9	13.5
Emission	1.1	−14.9
	1.2	−7.8
	1.5	−3.6
	2.0	−2.2
	3.0	−1.6
	5.0	−1.3
	10.0	−1.1
	50.0	−1.0

Beispiel Liegt der Peak einer Emissionslinie nur 40% über dem Kontinuum ($I_{HM}/I_C = 1.2$) und beträgt S/N = 50, so ist ΔW/W = 7.8/50 = 15.6%.