A-Typ Methanol Maser in interstellaren Molekülwolken unter Berücksichtigung von IR/H II Quellen und Linienüberlapp

Diplomarbeit
von
Markus Röllig

Institut für Theoretische Physik
Johann Wolfgang Goethe-Universität
Frankfurt am Main

26. März 1997

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **5**

2 Strahlungstransporttheorie **9**

2.1 Wechselwirkungen Strahlung↔Materie 9
2.2 Die Strahlungstransportgleichung 13
2.3 Die Ratengleichungen 16
2.4 Die Strahlungstransportgleichung mit Linienüberlapp 18
2.4.1 Grundlagen 18
2.4.2 Integration des Linienüberlapps in die Strahlungstransport- und Ratengleichungen 22

3 Eigenschaften des Methanols **25**

3.1 Das CH_3OH-Molekül 25
3.2 Auswahlregeln 30
3.3 Die Moleküldaten 31
3.4 Stoßraten 34

4 Das Modell **37**

4.1 Annahmen 37
4.1.1 'on-the-spot' Approximation 37
4.1.2 Profilfunktion 39
4.1.3 Vollständiger Linienüberlapp 40
4.2 Modellierung der Umgebung 41
4.2.1 Kosmische Mikrowellen-Hintergrundstrahlung 41
4.2.2 Strahlung einer H II-Region 42
4.2.3 Infrarotstrahlung 44
4.3 Modellparameter 49
4.3.1 Kinetische Temperatur der Gaswolke 49

4.4 Säulendichte 49
4.4.1 Wasserstoffdichte 50
4.4.2 H II Region 50
4.4.3 Staubmantel 51
4.4.4 Linienüberlapp 52

5 Lösungsverfahren **57**
5.1 Vollständige Linearisierung 57
5.1.1 D_{ik} ohne Überlapp 59
5.1.2 D_{ik} mit Zweierüberlapp 59
5.1.3 D_{ik} mit Dreierüberlapp 61
5.2 Matrixelemente $\tilde{D}_{ik}$ 62
5.2.1 Matrixelemente ohne Überlapp 62
5.2.2 Matrixelemente mit Doppelüberlapp 63
5.2.3 Matrixelemente bei Dreifachüberlapp 64
5.3 Startnäherung - Local Thermal Equilibrium 65

6 Ergebnisse **67**
6.1 Klasse I-Maser 72
6.1.1 Übergänge $J_{0+} \rightarrow (J-1)_{1+}$ 72
6.1.2 Übergänge $J_{1\pm} \rightarrow (J-1)_{2\pm}$ 83
6.2 Klasse II-Maser 92
6.2.1 Übergänge $J^0_{1+} \rightarrow (J-1)^0_{0+}$ 92
6.2.2 Übergänge $J^0_{2\pm} \rightarrow (J+1)^0_{1\pm}$ 100
6.2.3 Übergänge $J^0_{2\pm} \rightarrow (J-1)^0_{3\pm}$ 106
6.3 Übergänge $J^0_{3\pm} \rightarrow (J+1)^0_{2\pm}$ 114

7 Zusammenfassung **123**

A Intensitäten der Klasse I & II Maser **127**

Tabellenverzeichnis **130**

Abbildungsverzeichnis **131**

Literaturverzeichnis **135**

Kapitel 1

Einleitung

Interstellare Materie

Zu Beginn dieses Jahrhunderts entdeckte man Beweise für die Existenz von interstellarem Material. Bei der Untersuchung von Sternspektren fand man einen Zusammenhang zwischen der Stärke der Absorptionsmerkmale und der Entfernung des zugehörigen Hintergrundsterns. Das deutete darauf hin, daß sich das absorbierende Material in dem dazwischenliegenden Raum befindet. Als *J.Hartmann* 1904 die Spektren von Doppelsternen analysierte, fand er einige CaII Linien, die nicht wie die Mehrheit der anderen Linien an einer periodischen Variation, resultierend aus der periodischen Änderung der Radialgeschwindigkeit, teilnahmen. Erst 1926 schloß *Eddington*, daß diese Spektrallinien in einer Gasschicht entstehen, die die ganze Milchstraße ausfüllt. Die Existenz des interstellaren Mediums (ISM) ließ sich nicht mehr leugnen.

Genau wie in den Sternatmosphären, ist auch in der interstellaren Materie Wasserstoff das häufigste Element. Ionisierter Wasserstoff, man spricht von einer H II Region, ist sogar im optischen Spektralbereich gut zu beobachten. Der neutrale Wasserstoff entzog sich jedoch lange Zeit der Beobachtung. Im Jahr 1944 konnte *van de Hulst* zeigen, daß der Übergang zwischen den beiden Hyperfeinstruktur-Niveaus des Wasserstoffgrundzustandes zu einer Radio-Emissionslinie mit einer Wellenlänge von 21 cm führen müsse, was 1951 auch durch Beobachtungen bestätigt wurde (siehe auch [Uns81]) Nach der Entdeckung dieser sogenannten H I Strahlung, konnte das Studium der ISM intensiviert werden, denn nun war man in der Lage, das häufigste Element der ISM in all seinen atomaren Erscheinungsformen zu detektieren. Beobachtungen bei 21 cm offenbarten die Existenz von kühlen ($T \leq 150$K) und dichten

($n \geq 10\mathrm{cm}^{-3}$) Wolken eingelagert in ein heißes ($T \approx 10^4$K) und dünnes ($n \approx 0.1\mathrm{cm}^{-3}$) Zwischenwolkenmedium. Es blieb jedoch nicht bei der Entdeckung interstellarer Atome. Interstellare Moleküle entdeckte man um 1940, als man Absorptionslinien von drei 2-atomigen Radikalen CH, CH^+ und CN in den Spektren heißer Sterne fand. Bis heute kennt man mehr als 70 verschiedene Moleküle im interstellaren Raum. Davon sind ca. $^1/_3$ anorganische und $^2/_3$ organische Moleküle. Das komplizierteste bisher gefundene Molekül ist $HC_{11}N$ Cyanpentazetylen mit insgesamt 13 Atomen [Eli92].

Diese Molekülwolken sind Gegenstand intensivster astrophysikalischer und astronomischer Forschung. Das Verständnis ihrer Physik liefert wichtige Implikationen für die Entstehung der Sterne und ihre Entwicklung. Aus diesem Grund versuchte man schon lange, bei den beobachteten Wolken auf ihre Temperatur, Dichte, Zusammensetzung und Struktur zu schließen. Ein wichtiges Instrument hierfür ist die Analyse von Spektrallinien. Aus dem Verhältnis der Linienstärke verschiedener Spektrallinien kann man auf die herrschenden physikalischen Bedingungen schließen. Dabei befindet sich die Mehrheit der Molekülwolken nicht im thermischen Gleichgewicht.Durch die niedrige Anzahldichte der Teilchen im interstellaren Raum ist eine thermische Besetzung der Energieniveaus, resultierend aus Stößen der Moleküle untereinander, eher die Ausnahme, und nur in Gebieten relativ hoher Dichte anzutreffen. Man findet also vielerorts Abweichungen vom thermischen Gleichgewicht. Diese Abweichungen haben großen Einfluß auf den Strahlungstransport innerhalb einer Wolke.

Bei der detaillierten Auswertung einer großen Zahl von gemessenen Spektren stieß man auf Spektrallinien, die außerordentlich hohe Intensitäten und nur sehr geringe Linienbreiten aufwiesen, so daß eine thermische Emission nicht in Betracht kommen konnte. Dabei fand man Leuchtkräfte innerhalb einer einzigen Linie, die so intensiv waren, wie die Sonnenleuchtkraft im gesamten Spektrum. Der einzige Mechanismus, der zur Verstärkung in Frage kommt, ist induzierte Emission von sehr stark überbesetzten höheren Niveaus. Das Prinzip ist das gleiche wie bei einem künstlich hergestellten Laser, nur daß man ohne die komplizierte Anordnung von Reflektoren auskommt. Das, was erst durch hohen technischen Aufwand im Labor möglich ist, kommt im interstellaren Raum auf ganz natürliche Art und Weise als sogenannter natürlicher Maser (*m*icrowave *a*mplification by *s*timulated *e*mission of *r*adiation) vor. Aufgrund ihrer enormen Intensität lassen sich diese Maser sehr gut beobachten und liefern der Astrophysik eine effektive Sonde, um die dort vorliegenden physikalischen Bedingungen zu messen.

In der Astrophysik ist es, im Gegensatz zu anderen physikalischen Disziplinen, nicht möglich, ein Experiment nach Wunsch zu präparieren und durchzuführen. Man ist nicht in der Lage, einzelne Einflüsse auf das Gesamtsystem zu isolieren und getrennt zu studieren. Die einzige Möglichkeit, die ein Astronom bei seiner Arbeit hat, ist die Wahl des Beobachtungsobjektes, und des Beobachtungsspektrums. Da die Natur sehr viel komplizierter und vielschichtiger ist, als sie ein Experimentator in seinem Labor nachstellt, ist es für die Astrophysik schwer, nur mit Beobachtungen zu arbeiten. Um die vielfältigen Prozesse im Weltraum verstehen zu können, muß man zu anderen Hilfsmitteln greifen. Ein sehr häufig angewendetes Verfahren beruht darauf, ein Modell der Wirklichkeit numerisch zu simulieren, und die Ergebnisse dieser Simulation mit den Beobachtungen zu vergleichen. Anschließend variiert man die Einflußparameter der numerischen Rechnung, in Form von physikalischen Größen, um eine möglichst gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Beobachtung zu erreichen. Unter der Annahme, daß das zugrundeliegende Modell eine gute Beschreibung der Wirklichkeit darstellt, kann man annehmen, daß die verwendeten Einflußparameter die gleichen sind, die tatsächlich herrschen.

Für das Verständnis von Masern bedeutet das, eine Molekülwolke im Computer zu modellieren und ihre Strahlungseigenschaften unter verschiedensten physikalischen Bedingungen zu simulieren. Die Ergebnisse dieser Rechnungen kann man anschließend mit der beobachteten Strahlung vergleichen und so beispielsweise auf Temperatur und Dichte der wirklichen Wolke schließen. Obwohl das Strahlungstransportverhalten einer Molekülwolke durch eine Vielzahl komplizierter und nichtlinear miteinander gekoppelter Prozesse bestimmt wird, kann, wie so oft in der Physik, ein vergleichsweise einfaches Modell genügen, um die Realität überraschend gut zu beschreiben. Trotzdem ist die Modellierung der Molekülwolke der kritische Punkt. Angefangen bei den molekularen Modelleigenschaften, über die Geometrie und Struktur, bis hin zur Dynamik der Wolke, kann ein solches Modell beliebig kompliziert aufgebaut werden. Trotz der enormen technischen Fortschritte ist auch heute noch durch die Leistungsfähigkeit der verfügbaren Computer eine Grenze für die realitätsnahe Modellierung der Wolken gesetzt. Durch die Kopplung von Strahlungstransportgleichung und Ratengleichung entsteht ein nichtlineares gekoppeltes Differentialgleichungssystem, dessen Lösung nur noch numerisch, und auch nur unter bestimmten Bedingungen, möglich ist.

In unserer Arbeit sind wir im Bezug auf die Realitätsnähe des Wolkenmodells einen Kompromiß in Hinsicht auf geringere Rechenzeit eingegangen. Dieser Nachteil wird dadurch wettgemacht, daß es uns so möglich wurde, eine große Anzahl von verschiedenen Parameterkombinationen durchzurechnen, und so ein qualitatives Verständnis der physikalischen Vorgänge innerhalb der Wolke zu erhalten.

Nachdem [Doe93] bereits die Strahlungstransporteigenschaften einer Wolke des E-Typ Methanols untersucht hat, lag es nahe, auch das sogenannte A-Typ Methanol einer genauen Untersuchung zu unterziehen. Die Maserlinien des Methanols gehören zu den stärksten überhaupt gefundenen Linien. Das macht sie zum Gegenstand vieler Beobachtungsprojekte, und begründet den Bedarf nach theoretischer Untersuchung der Anregungsbedingungen des Masers.

Bei der Modellierung des Moleküls wurde großer Wert darauf gelegt, die bisher gemachten Rechnungen an Präzision zu übertreffen. Dazu wurde auf die besten spektroskopischen Daten zurückgegriffen, die zur Zeit verfügbar sind. Diese wurden uns freundlicherweise von *Moruzzi, Winnewisser, et. al.* zur Verfügung gestellt. Im Gegensatz zu sonst üblichen Rechnungen haben wir nicht nur die Rotationsübergänge im Torsionsgrundzustand des Moleküls, sondern auch die ersten torsionsangeregten Zustände des Energietermschemas berücksichtigt. Es erschien uns wichtig, bei der recht hohen Unsicherheit und Ungenauigkeit der übrigen Modellteile, wie zum Beispiel den Stoßraten für Stöße mit neutralem Wasserstoff, wenigsten hier eine möglichst hohe Genauigkeit zu erzielen. Trotzdem sind die Rechnungen in erster Ordnung dazu geeignet, ein qualitatives Verständnis der Physik zu erreichen.

In folgenden Kapitel werden wir kurz theoretisch auf die Wechselwirkung zwischen Strahlung und Materie, beschrieben durch die Strahlungstransportgleichung und die Ratengleichung, eingehen. Kapitel 3 widmet sich der etwas komplizierteren Molekülphysik, die dem CH_3OH Molekül zugrunde liegt. Das Modell, daß in unseren Rechnungen verwendet wurde, wollen wir in Kapitel 4 kurz vorstellen, ebenso wie die Auswirkungen auf die theoretische Beschreibung. Das Verfahren der vollständigen Linearisierung erläutern wir in Kapitel 5. Im daran anschließenden Kapitel 6 stellen wir die Ergebnisse der Rechnungen am Beispiel einiger ausgewählter Maserlinien vor. In Kapitel 7 liefern wir eine Zusammenfassung der Arbeit mit möglichen Verbesserungen und einer Diskussion des Modells.

Kapitel 2

Strahlungstransporttheorie

Interstellare Materie und elektromagnetische Strahlung wechselwirken ständig miteinander. Dabei verändern sich sowohl das Strahlungsfeld, wie auch der Zustand der Materie. Entspricht die Frequenz ν eines Photons der Energiedifferenz zwischen zwei Zuständen eines Atoms oder eines Moleküls, so kann es zu Emissions- oder Absorptionsprozessen kommen. Dabei beschreibt die Strahlungstransportgleichung (Gl. 2.14) die Änderung der Strahlungsintensität I_ν entlang des Weges durch die Wolke. Die Ratengleichung (Gl. 2.29) erklärt die Änderung der Besetzungszahlen des Moleküls durch Wechselwirkung mit den Photonen und durch andere Prozesse.
Um die mathematische Behandlung zu vereinfachen, vernachlässigen wir grundsätzlich Polarisation der Strahlung, Magnetfelder sowie Effekte durch Staub. Der Einfluß eines Linienüberlapps wird später erörtert.

2.1 Wechselwirkungen Strahlung↔Materie

In der Nummerierung bezeichnet i jeweils das untere Energieniveau eines speziellen Übergangs, k jeweils das obere, mit den Energien E_i und E_k. Die zugehörigen statistischen Gewichte sind g_i und g_k. Dabei befinden sich n_i Moleküle pro cm^3 im Niveau i. Drei Prozesse sind zu unterscheiden:

- Absorption
- spontane Emission
- induzierte Emission

Die Wahrscheinlichkeit jedes einzelnen dieser Prozesse wird durch die zugehörigen Einstein'schen Koeffizienten B_{ki}, A_{ik} und B_{ik} beschrieben [Eli92].

Absorption

Befindet sich ein Molekül im unteren Energieniveau eines Strahlungsübergangs, so kann es ein Photon des Strahlungsfeldes absorbieren. Dies führt zu einer $i \rightarrow k$ Anregung. Die Rate dieser Absorption ist proportional der Strahlungsintensität I_ν sowie einer Proportionalitätskonstante B_{ki}. B_{ki} ist der sogenannte **Einstein B-Koeffizient für Absorption**. Die Einheit von B_{ki} ist $\mathrm{cm^2\,Hz\,ster\,erg^{-1}}$. Die Absorptionswahrscheinlichkeit ist $B_{ki} \cdot I_{\nu_{ik}}$ $[\mathrm{s}^{-1}]$. Photonen mit einer Frequenz ν werden dann mit einer Rate von

$$n_i \cdot B_{ki} \cdot \Phi_a(\nu_{ik}) \cdot I_{\nu_{ik}} \tag{2.1}$$

pro Volumeneinheit und Frequenz absorbiert. Das bedeutet für die Energierate, die dem Strahlungsfeld bei einer Absorption entzogen wird, folgenden Zusammenhang:

$$\frac{4\,\pi}{c} \cdot h \cdot \nu_{ik} \cdot n_i \cdot B_{ki} \cdot \Phi_a(\nu_{ik}) \cdot I_{\nu_{ik}}\,. \tag{2.2}$$

Hierbei entspricht $h \cdot \nu_{ik} = E_k - E_i$ der Energie des Photons, das absorbiert wird. Bei $\Phi_a(\nu_{ik})$ handelt es sich um das Linienabsorptionsprofil,resultierend aus der Geschwindigkeitsverteilung der Teilchen im unteren Level, h ist das Plancksche Wirkunsquantum und c ist die Vakuumlichtgeschindigkeit:

$$h = 6.6261 \cdot 10^{-27} \mathrm{erg} \cdot \mathrm{s} \quad ,$$
$$c = 2.9979 \cdot 10^{10} \mathrm{cm} \cdot \mathrm{s}^{-1} \quad .$$

Spontane Emission

Ein Teilchen, das sich in einem energetisch angeregten Zustand befindet, wird immer in einen niedrigeren Energiezustand zurückfallen. Dies passiert auch ohne äußere Einflüsse. Diese $k \rightarrow i$ Abregung wird von der Emission eines Photons mit der Frequenz $\nu_{ik} = \frac{E_k - E_i}{h}$ begleitet und heißt spontane Emission. Die Wahrscheinlichkeit, mit der diese Emission stattfindet ist A_{ik} $[\mathrm{s}^{-1}]$, der **Einstein A-Koeffizient**. Sein Kehrwert entspricht der Lebenszeit des oberen Niveaus. Die Rate, mit der Photonen emittiert werden, ist

$$n_k \cdot A_{ik} \cdot \Phi_e(\nu_{ik}) \tag{2.3}$$

Hier ist $\Phi_e(\nu_{ik})$ das Linienemissionsprofil, resultierend aus der Geschwindigkeitsverteilung der Teilchen im oberen Energiezustand k. Der Energieabgabe eines Moleküls an das Strahlungsfeld durch spontane Emission ist somit

$$h \cdot \nu_{ik} \cdot n_k \cdot A_{ik} \cdot \Phi_e(\nu_{ik})\,. \tag{2.4}$$

Induzierte Emission

Durch Wechselwirkung eines Teilchens mit dem Strahlungsfeld kann es zur Absorption eines Photons, und dem Übergang $i \to k$ kommen. Die Invarianz dieses Prozesses gegenüber Zeitumkehr impliziert einen Prozeß $k \to i$ mit der gleichen Wahrscheinlichkeit, verbunden mit der Emission eines entsprechenden Photons. Dieser Prozeß heißt induzierte oder stimulierte Emission. Die Übergangswahrscheinlichkeit ist analog zur Absorption $B_{ik} \cdot I_{\nu_{ik}}$, mit dem **Einstein B-Koeffizient für stimulierte Emission** B_{ik} . Die Produktionsrate von Photonen der Frequenz ν_{ik} pro Volumeneinheit ist

$$n_k \cdot B_{ik} \cdot \Phi_e(\nu_{ik}) \cdot I_{\nu_{ik}}\,. \tag{2.5}$$

Das Strahlungsfeld erhält hierbei die Energie

$$\frac{4\pi}{c} \cdot h \cdot \nu_{ik} \cdot n_k \cdot B_{ik} \cdot \Phi_e(\nu_{ik}) \cdot I_{\nu_{ik}}\,. \tag{2.6}$$

Die Linienprofile für Absorption und Emission gehorchen der Normierungsbedingung

$$\int_o^\infty \Phi_a(\nu)\,d\nu \;=\; \int_o^\infty \Phi_e(\nu)\,d\nu \;=\; 1\;. \tag{2.7}$$

Beide Profile können jedoch durchaus unterschiedlich sein. Zur Vereinfachung machen wir die Annahme der vollständigen Wiederverteilung der Photonen, was bedeutet, daß die Frequenz eines emittierten Photons unabhängig davon ist, bei welcher Frequenz es absorbiert wurde; die Moleküle haben keine "Erinnerung" an ihre Vergangenheit. Dies führt dazu, daß beide Profile identisch werden

$$\Phi_a(\nu) \;=\; \Phi_e(\nu) \;=\; \Phi(\nu) \tag{2.8}$$

Einstein'sche Relationen

Es zeigt sich, daß die verschiedenen Einsteinkoeffizienten nicht unabhängig voneinander sind. Um die Beziehungen zwischen A_{ik}, B_{ik} und B_{ki} herzuleiten, betrachtet man ein Strahlungsfeld im thermodynamischen Gleichgewicht. Ein solches Feld hat die Energiedichte $u_\nu = \frac{4\pi}{c} \cdot B_\nu(T)$. Hier ist

$$B_\nu(T) = \frac{2 \cdot h \cdot \nu^3}{c^2} \cdot \frac{1}{e^{-\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right)} - 1} \tag{2.9}$$

die Kirchhoff Planck-Funktion, k_B die Boltzmann-Konstante und T die Temperatur

$$k = 1.3807 \cdot 10^{-16}\,\mathrm{erg\,K^{-1}}.$$

Die Annahme des thermodynamischen Gleichgewichts bedeutet, daß die Zahl der Absorptionsübergänge gleich der Zahl der Emissionsübergänge sein muß:

$$\overbrace{n_i \cdot B_{ki} \cdot u_\nu}^{Absorption} = \underbrace{n_k \cdot (A_{ik} + u_\nu \cdot B_{ik})}_{Emission} \tag{2.10}$$

Laut Boltzmann-Verteilung stehen die Besetzungszahlen der Niveaus i und k dann in folgendem Verhältnis:

$$\frac{n_k}{n_i} = \frac{g_k}{g_i} \cdot e^{-\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right)}. \tag{2.11}$$

Dabei sind g_i und g_k die statistischen Gewichte der Niveaus i, k. Bei dem statistischen Gewicht eines Niveaus handelt es sich um den Entartungsgrad des Niveaus, also die Zahl der zugehörigen Quantenzellen, die man dem Niveau ohne spezielle, besonders energetische Kenntnisse über das System zuschreiben kann. Aus den Beziehungen (2.9),(2.10) und (2.11) erhält man mit den vorher gemachten Annahmen[Uns68]:

$$A_{ik} = \frac{8\pi \cdot h \cdot \nu^3}{c^3} \cdot B_{ik} \tag{2.12}$$

$$B_{ki} = \frac{g_k}{g_i} \cdot B_{ik} \tag{2.13}$$

Die Gleichungen (2.12) und (2.13) sind die sogenannten Einstein-Relationen. Sie gelten allgemein, und unterliegen nicht der einschränkenden Bedingung des thermodynamischen Gleichgewichts, da es sich bei ihnen um rein mikroskopische Relationen handelt, in denen makroskopische Größen wie die Temperatur nicht vorkommen.

2.2 Die Strahlungstransportgleichung

Mit Hilfe der im vorherigen Kapitel gemachten Überlegungen erhält man nun die Strahlungstransportgleichung für gebunden-gebunden Übergänge:

$$\frac{dI_\nu}{ds} = \underbrace{-\frac{h\nu}{c} n_i \cdot B_{ki} \cdot \Phi(\nu) \cdot I_\nu}_{Absorption} + \overbrace{\frac{h\nu}{c} n_k \cdot B_{ik} \cdot \Phi(\nu) \cdot I_\nu}^{induzierte Emission} + \overbrace{\frac{h\,\nu}{4\pi} n_k \cdot A_{ik} \cdot \Phi(\nu)}^{spontane Emission} \tag{2.14}$$

Dabei ist die Intensität I_ν definiert über

$$dE_\nu(\theta, \phi) \;=\; I_\nu(\theta, \phi)\, d\nu\, cos\theta\, d\sigma\, d\Omega \tag{2.15}$$

die Energiemenge dE, die im Frequenzintervall $d\nu$ aus dem Raumwinkel $d\Omega$ unter dem Winkel θ durch die Fläche $d\sigma$ fließt[Uns68]. Der Buchstabe ν soll im weiteren jeweils die Frequenz

$$\nu_{ik} = \frac{E_k - E_i}{h} \tag{2.16}$$

kennzeichnen. Da sowohl Absorption, als auch stimulierte Emission vom Strahlungsfeld abhängen, ist es sinnvoll, sie zum **makroskopischen Absorptionskoeffizienten** κ_ν zusammenzufassen.

$$\begin{aligned} \kappa_\nu &= -\frac{h \cdot \nu}{c} \cdot \Phi(\nu) \cdot (n_k \cdot B_{ik} - n_i \cdot B_{ki}) \\ &= \frac{h \cdot \nu}{c} \cdot \Phi(\nu) \cdot B_{ik} \cdot \Delta n_{ik} \end{aligned} \tag{2.17}$$

mit

$$\Delta n_{ik} = \frac{g_k}{g_i} \cdot n_i - n_k\,. \tag{2.18}$$

Der **makroskopische Emissionskoeffizient** ϵ_ν, auch **Emissivität** genannt, ist dann

$$\epsilon_\nu = \frac{h \cdot \nu}{4\pi} \cdot \Phi(\nu) \cdot n_k \cdot A_{ik}\,. \tag{2.19}$$

Das Verhältnis zwischen ϵ_ν und κ_ν wird dann definiert als die Quellfunktion S_ν [Uns68].

$$S_\nu = \frac{\epsilon_\nu}{\kappa_\nu} \tag{2.20}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{c}{4\pi} \cdot \frac{n_k \cdot A_{ik} \cdot \Phi(\nu)}{n_i \cdot B_{ki} \cdot \Phi(\nu) - n_k \cdot B_{ik} \cdot \Phi(\nu)} \\ &= \frac{2 \cdot h \cdot \nu^3}{c^2} \cdot \frac{n_k}{\Delta n_{ik}} \end{aligned} \tag{2.21}$$

Wie man leicht sieht, kann κ_ν und damit auch S_ν negativ werden, für den Fall $n_k > n_i$, d.h. $\Delta n_{ik} < 0$. Diesen Fall nennt man **Besetzungsinversion**, da im Gegensatz zur thermodynamischen Gleichgewichtssituation das obere Energieniveau stärker besetzt ist, als das untere. Eine Besetzungsinversion entspricht einem Maser. Wir können nun die Strahlungstransportgleichung (Gl. 2.14) folgendermaßen schreiben [Uns68]:

$$\begin{aligned} \frac{dI_\nu}{dl} &= \kappa_\nu \cdot I_\nu - \epsilon_\nu \\ &= \kappa_\nu \cdot (I_\nu - S_\nu) \end{aligned} \tag{2.22}$$

Da es für den späteren Verlauf günstiger ist, führen wir anstelle des Wegelementes ds ein Wegelement $dl = -ds$ entlang des Sehstrahls durch die Wolke ein. Die Zählrichtung ist dabei umgekehrt zu der von ds und wird durch Abbildung (2.1) verdeutlicht. Die Lösung dieser Gleichung erfolgt mittels

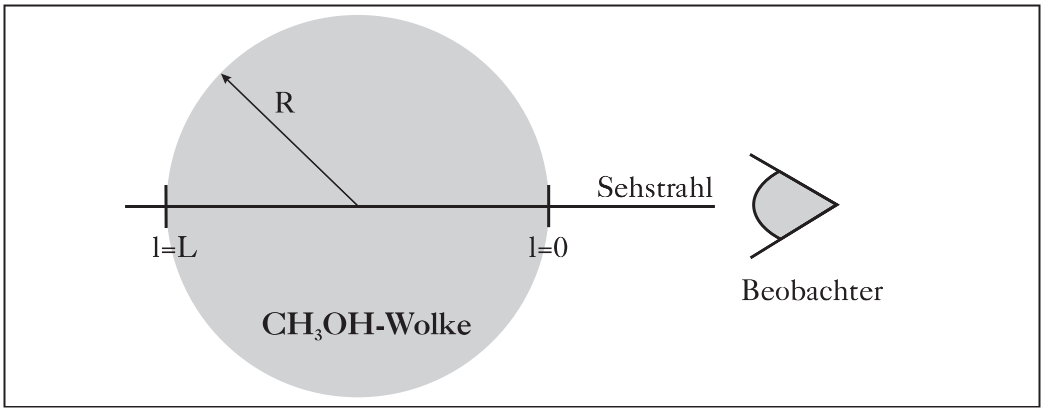

Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des Wolkenmodells

Variation der Konstanten (siehe Anhang). Man erhält dadurch die Integraldarstellung der Strahlungstransportgleichung

$$I_\nu(\,l = 0\,) \;=\; \int_0^L \kappa_\nu(l) \cdot S_\nu(l) \cdot e^{-\tau_\nu(l)}\, dl \;+\; I_\nu(l = L) \cdot e^{-\tau_\nu(L)} \tag{2.23}$$

Wir definieren die **optische Dicke** τ_ν

$$\tau_\nu(l) = \int_o^l \kappa_\nu(l')\, dl' \tag{2.24}$$

und setzen sie in Gleichung (2.23) ein

$$I_\nu(\,l=0\,) \;=\; \underbrace{\int_0^{\tau(L)} S_\nu(l)\cdot e^{-\tau_\nu(l)}\,d\tau_\nu}_{\substack{wolkeninterne\\ Strahlungsproduktion}} \;+\; \underbrace{I_\nu(l=L)\cdot e^{-\tau_\nu(L)}}_{Hintergrundstrahlung} \tag{2.25}$$

Gleichung (2.25) zerfällt in zwei leicht zu interpretierende Teile. Der Integralterm gibt an, wieviel aus der Wolke stammende Strahlung aus ihr austritt, und zum Beobachter gelangt. Er enthält die Quellfunktion, die beschreibt, wieviel Strahlung innerhalb der Wolke durch spontane Emission entsteht. Dieser Anteil wird mit einem Faktor $e^{-\tau_\nu(l)}$ modifiziert, der beschreibt, wieviel Photonen zwischen dem Ort der Emission und dem Wolkenende wieder absorbiert werden. Der zweite Term beschreibt, wie stark von außen bzw. hinten ($l = L$) auf die Wolke auftreffende Strahlung, z.B. die kosmische 2,7 Kelvin-Hintergrundstrahlung, beim Durchgang durch die Wolke absorbiert wird. Betrachten wir uns Gleichung (2.23) genauer. Für den Fall einer Besetzungsinversion ($\Delta n_{ik} < 0$) wird κ_ν und damit auch τ_ν und S_ν negativ. Der Integrand in Gleichung (2.23) bleibt positiv. Gleichzeitig wird der "Dämpfungsterm" $e^{-\tau_\nu}$ größer als Eins. Statt einer Abschwächung der Intensität durch Absorption findet eine Verstärkung durch stimulierte Emission statt; wir haben einen Maser. Durch die stärkere Besetzung des oberen Niveaus, relativ zum unteren, überwiegt nun die induzierte Emission die Absorption.

2.3 Die Ratengleichungen

Um das Integral in Gleichung (2.25) zu lösen, ist es nötig, die Besetzungszahlen n_i zu kennen, die in κ_ν eingehen. Diese Besetzungszahlen werden durch die sogenannte **Ratengleichung** (Gl. 2.29) bestimmt [Keg79].
Im weiteren vernachlässigen wir Strömungen, d.h. wir gehen davon aus, daß die Anzahldichte der Moleküle im betrachteten Volumenelement dV mit der Zeit konstant bleibt. Das bedeutet, die Änderung der Besetzungszahlen mit der Zeit $\frac{dn_i}{dt}$ ist genau die Differenz aller Übergänge, die in das Niveau i führen, minus der Zahl der Übergänge, die aus dem Niveau i hinausgehen. Die Beiträge für die verschiedenen Prozesse sind:

- spontane Emission

$$\sum_{k>i} n_k \cdot A_{ik} \; - \; n_i \cdot \sum_{k<i} A_{ki} \tag{2.26}$$

- stimulierte Emission

$$\frac{4\pi}{c} \sum_{k>i} n_k \cdot B_{ik} \cdot \tilde{J}_{ik} \; - \; \frac{4\pi}{c} n_i \cdot \sum_{k<i} B_{ki} \cdot \tilde{J}_{ki} \tag{2.27}$$

- Absorption

$$\frac{4\pi}{c} \sum_{k<i} n_k \cdot B_{ik} \cdot \tilde{J}_{ik} \; - \; \frac{4\pi}{c} n_i \cdot \sum_{k>i} B_{ki} \cdot \tilde{J}_{ki} \tag{2.28}$$

Zusammengefaßt ergibt sich dann für die Änderung der Besetzungszahlen mit der Zeit:

$$\begin{aligned} \frac{dn_i}{dt} \; &= \; \sum_{k\neq i} n_k \cdot \left(A_{ik} + \frac{4\pi}{c} B_{ik} \cdot \tilde{J}_{ik} + C_{ik} \right) \\ &- \; n_i \cdot \sum_{k\neq i} \left(A_{ik} + \frac{4\pi}{c} B_{ki} \cdot \tilde{J}_{ki} + C_{ki} \right) \end{aligned} \tag{2.29}$$

Es gilt dabei[Keg79]:

$$A_{ik} = 0 \quad \text{für} \quad k < i \tag{2.30}$$

$\tilde{J}_{ik}$ ist die über alle Raumwinkel Ω und Frequenzen ν integrierte Intensität I_ν gewichtet mit dem Linienprofil $\Phi(\nu)$.

$$\tilde{J}_{ik} \; = \; \frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} \int_0^{\infty} I_\nu \cdot \Phi(\nu) \, d\nu \, d\Omega \tag{2.31}$$

Wegen Gleichung (2.8) gilt:

$$\tilde{J}_{ik} \;=\; \tilde{J}_{ki} \tag{2.32}$$

C_{ik} ist die Wahrscheinlichkeit für einen inelastischen Stoßübergang vom Niveau k zum Niveau i.
Zur Vereinfachung vernachlässigen wir die Erzeugung und Vernichtung von Molekülen. Das bedeutet:

$$\sum_i \frac{dn_i}{dt} = 0 \qquad \text{bzw.} \qquad \sum_i n_i \;=\; n_{CH_3OH} \tag{2.33}$$

Gesucht wird jetzt ein stationärer Zustand

$$\frac{dn_i}{dt} = 0 \tag{2.34}$$

Dies führt zu folgendem Gleichungssystem:

$$\sum_k n_k \cdot D_{ik} \;=\; 0 \tag{2.35}$$

mit den Elementen

$$\begin{aligned} D_{ik} &= A_{ik} + \frac{4\pi}{c} \cdot B_{ik} \cdot \tilde{J}_{ik} + C_{ik} \\ D_{ii} &= -\sum_{k \neq i} \left(A_{ki} + \frac{4\pi}{c} \cdot B_{ki} \cdot \tilde{J}_{ki} + C_{ki} \right) \end{aligned} \tag{2.36}$$

Unter Zuhilfenahme der Definition für die Quellfunktion (Gl. 2.21), formen wir die Matrixelemente folgendermaßen um:

$$\begin{aligned} D_{ik} &= \frac{4\pi}{c} \cdot B_{ik} \cdot \left(\tilde{J}_{ik} - S_{ik} \right) + C_{ik} \\ D_{ii} &= -\sum_{k \neq i} \left(\frac{4\pi}{c} \cdot B_{ki} \cdot \left(\tilde{J}_{ik} - S_{ik} \right) + C_{ki} \right) \end{aligned} \tag{2.37}$$

Die Gleichungen (2.37) stellen die endgültigen Matrixelemente der Gleichung (2.35) dar. Sie sind in ihrer Form numerisch günstiger zu handhaben als in Gleichung (2.36). Ihre Lösung wird in Kapitel (5) behandelt.

2.4 Die Strahlungstransportgleichung mit Linienüberlapp

2.4.1 Grundlagen

Aus der Quantenmechanik weiß man, daß nur diskrete Energieänderungen gebundener Zustände von Atomen und Molekülen möglich sind. Dabei verändert sich der Energiezustand des Teilchens durch Emission eines Photons zu einem niedrigeren Energieniveau, bzw. durch Absorption zu einem höheren Niveau. Die Energie des entstandenen oder aufgenommenen Photons ist gleich der Energieänderung des Atoms/Moleküls und proportional zu seiner Frequenz. Versuchen wir nun mit einem Detektor, die Photonen nachzuweisen, die beispielsweise in einer Molekülwolke erzeugt wurden, so finden wir nicht die erwarteten schmalen Spektrallinien. Stattdessen sind die Linien mehr oder weniger verbreitert. Das geschieht durch drei Prozesse:

- Strahlungsdämpfung
- Druckverbreiterung
- Dopplerverbreiterung

Strahlungsdämpfung

Aus der einfachen Tatsache, daß ein spontaner Energieübergang möglich ist, ergibt sich die Existenz einer endlichen Lebenszeit Δt des oberen Niveaus. Aus der Heisenbergschen Unschärferelation folgt, daß diese Zeitunschärfe mit einer Energieunschärfe ΔE einhergeht:

$$\Delta E \geq \frac{h}{2\pi \cdot \Delta t} \tag{2.38}$$

Gleichgesetzt mit

$$\Delta E = h \cdot \Delta\nu \tag{2.39}$$

ergibt sich für die Verbreiterung

$$\Delta\nu \geq \frac{1}{2\pi \cdot \Delta t} \tag{2.40}$$

Die natürliche Lebensdauer Δt des entsprechenden Energieniveaus wird durch die Summe aller zugehörigen Einstein A-Werte $\sum_k A_{ki}$ $[\frac{1}{s}]$ spezifiziert. Damit ist Δt gegeben durch $\frac{1}{\sum A}$. Zur Verdeutlichung vergleichen wir einen Strahlungsübergang a im Infrarotbereich und einen Übergang b im Radiobereich:

$$A_a^{Infrarot} > A_b^{Radio} \Rightarrow \Delta t_a^{Infrarot} < \Delta t_b^{Radio} \Rightarrow \Delta\nu_a^{Infrarot} > \Delta\nu_b^{Radio} \tag{2.41}$$

Man sieht, daß die Verbreiterung im Infraroten stärker ist, als im Radiobereich. Doch auch im Falle der Infrarotlinien fällt dieser Verbreiterungsmechanismus betragsmäßig nicht ins Gewicht, und wird von uns im weiteren vernachlässigt.

Druckverbreiterung

Für den Fall sehr großer Teilchendichten wird die Linienverbreiterung durch den Mechanismus der Druckverbreiterung mit Atomen und Molekülen relevant. Da im interstellaren Raum solch hohe Moleküldichten nur selten anzutreffen sind, vernachlässigen wir auch diesen Mechanismus.

Dopplerverbreiterung

Der wichtigste Einfluß auf die Linienbreite resultiert aus dem *Dopplereffekt*. Betrachten wir ein Molekül mit einer Geschwindigkeit v_0. Die Frequenz eines emittierten Photons ist in dem Moment festgelegt, in dem die Richtung der Emission bekannt ist. Sie kann sowohl rot- als auch blauverschoben (relativ zur nicht-dopplerverschobenen Frequenz) sein, je nachdem, ob sich das Molekül auf den Beobachter zu, oder von ihm wegbewegt. Betrachtet man nun nicht mehr nur ein einzelnes Molekül, sondern ein ganzes Ensemble, mit unterschiedlichen Geschwindigkeitsvektoren, und summiert über alle Verschiebungen, so bekommt man ein *verbreitertes* Linienprofil für jeden Strahlungsübergang. Der Betrag der Frequenzverschiebung einzelner Photonen ist durch seine Relativgeschwindigkeit zum Beobachter festgelegt:

$$\underbrace{\nu_0 \cdot \left(1 - \frac{v}{c}\right)}_{rotverschoben} \quad \longleftarrow \quad \nu_0 \quad \longrightarrow \quad \overbrace{\nu_0 \cdot \left(1 + \frac{v}{c}\right)}^{blauverschoben} \tag{2.42}$$

Mit dem Betrag der Frequenzverschiebung:

$$\Delta\nu = \nu_0 \cdot \frac{v}{c} \tag{2.43}$$

Die genaue Form der Geschwindigkeitsverteilung $f(v)$ der Teilchen legt das Aussehen der Profilfunktion Φ fest. Es gilt:

$$\Phi(\Delta\nu)d\nu \;=\; f(v)dv \tag{2.44}$$

Für die Geschwindigkeitsverteilung nimmt man eine Maxwell-Verteilung an:

$$f(v) \;=\; \frac{1}{v_{therm}^{max}\cdot\sqrt{\pi}}\cdot e^{-\left(\frac{v^2}{\left(v_{therm}^{max}\right)^2}\right)} \tag{2.45}$$

Hierbei ist v_{therm}^{max} die wahrscheinlichste Geschwindigkeit, also die Geschwindigkeit, bei der die Maxwell-Verteilung ihr Maximum erreicht. Ihr Wert ist:

$$v_{therm}^{max} \;=\; \sqrt{\frac{2\cdot k_B\cdot T_{kin}}{m}} \tag{2.46}$$

Durch Einsetzen von Gleichung (2.45) in (2.44) erhalten wir für die Profilfunktion eine Gaußsche Glockenkurve:

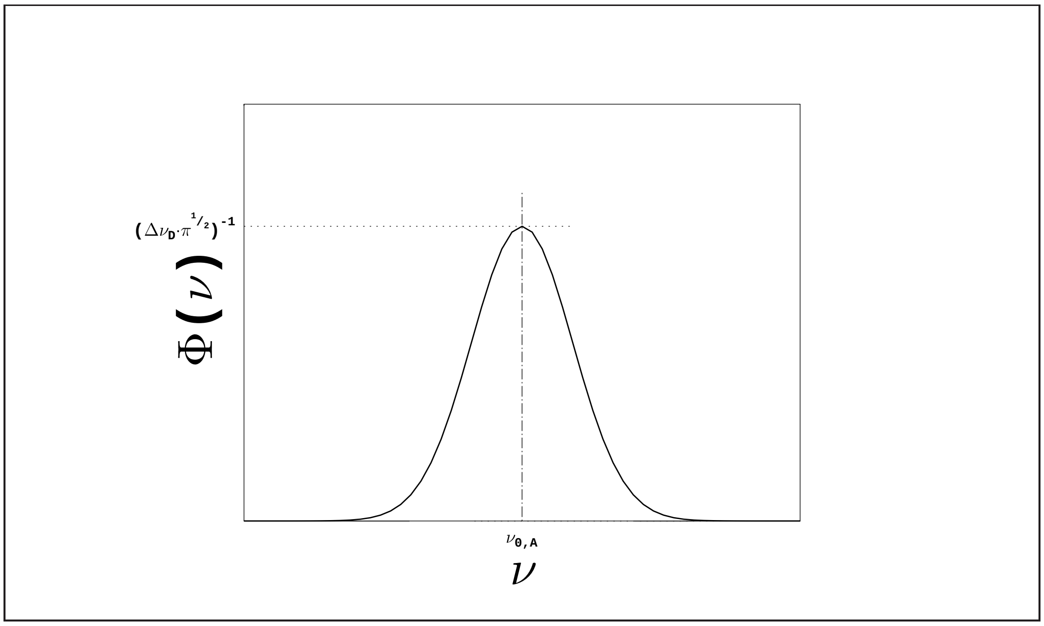

Abbildung 2.2: Gaußsche Glockenkurve

$$\Phi(\Delta\nu) \;=\; \frac{1}{\Delta\nu_D\cdot\sqrt{\pi}}\cdot e^{-\left(\frac{\Delta\nu}{\Delta\nu_D}\right)^2} \tag{2.47}$$

mit der Dopplerbreite

$$\Delta\nu_D \;=\; \nu_0 \cdot \frac{v_{therm}^{max}}{c} \tag{2.48}$$

Partieller Linienüberlapp

Betrachtet man nun zwei Spektrallinien, deren Linienmitten bei Frequenzen von$\nu_{0,A}$ und $\nu_{0,B}$ liegen, und zwar so nahe beieinander, daß sie einander an den Linienflügeln überlappen : $|\nu_{0,A} - \nu_{0,B}| < \frac{\nu_D}{2}$.

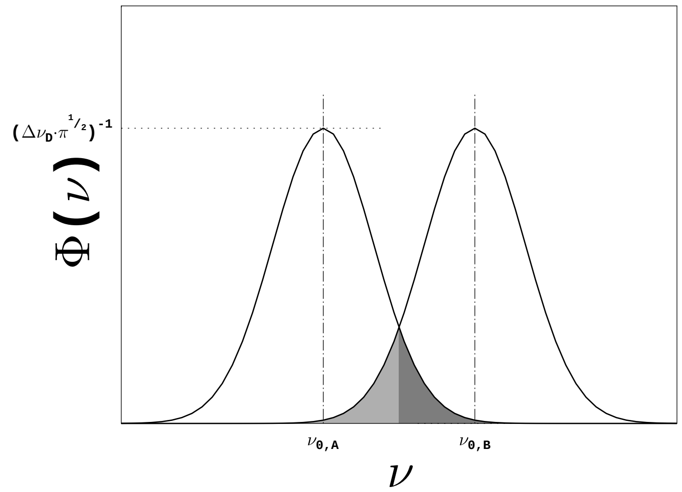

Abbildung 2.3: partieller Überlapp von Linienprofilen

Die Konsequenz dieses Linienüberlapps ist die, daß es nun möglich ist, daß sich Photonen der Linien A und B “vermischen”. Das bedeutet, daß ein Photon, daß im Strahlungsübergang A emittiert wurde, nun eine endliche Wahrscheinlichkeit besitzt, im Übergang B absorbiert zu werden. Dies kann genau dann geschehen, wenn die Frequenz des emittierten Photons eine Frequenz hat, mit der das Linienprofil des Übergangs B überlappt. In der Abbildung (2.3) entspricht das dem schraffierten Bereich. Die genaue Wahrscheinlichkeit, daß ein emittiertes Photon einer bestimmten Frequenz von unterschiedlichen Molekülen des einen oder anderen Zustandes absorbiert wird, hängt von den einzelnen Linienprofilfunktionen $\Phi_A(\nu)$ und $\Phi_B(\nu)$ ab. Die Wahrscheinlichkeit einer Absorption steigt bei jeder Frequenz an, da im Gegensatz zum Fall ohne Überlapp, nun zusätzliche Möglichkeiten der Absorption bestehen. Damit wird natürlich auch die optische Dicke größer.

Vollständiger Linienüberlapp

Es ist klar, daß ein Photon, dessen Frequenz nicht in den überlappenden Bereich fällt, natürlich nur im gleichen Übergang wieder absorbiert werden kann. Daß heißt natürlich auch, daß man bei einer detailierten Behandlung des Strahlunstransports, für jedes Photon prüfen muß, ob seine Frequenz in einem überlappenden Bereich liegt, oder nicht. Diese Schwierigkeit entfällt, wenn sich die Profilfunktionen zweier Übergänge vollständig überlappen. Es ist klar, daß nun *jedes* Photon, daß im Übergang A emittiert wurde im Übergang B absorbiert werden kann, unabhängig davon, in welchem Bereich des Linienprofil die Emissionsfrequenz liegt. Die Wahrscheinlichkeit für Absorption in einem Übergang bei jeder diskreten Frequenz wird durch die Summe der Absorptionswahrscheinlichkeiten der einzelnen Übergänge festgelegt. Analytisch heißt daß

$$\begin{aligned} \epsilon_{\ddot{U}berlapp} &= \epsilon_A + \epsilon_B \\ \kappa_{\ddot{U}berlapp} &= \kappa_A + \kappa_B \end{aligned} \tag{2.49}$$

2.4.2 Integration des Linienüberlapps in die Strahlungstransport- und Ratengleichungen

Wie im vorherigen Abschnitt bereits erwähnt, ist die optische Dicke des interstellaren Mediums stark davon abhängig, ob man Linienüberlapp berücksichtigt, oder nicht. Man kann zwar ad hoc eine Zunahme der optischen Dicke antizipieren, aber quantitative Aussagen sind nur durch detaillierte Rechnungen möglich. Dazu ist es notwendig, die Strahlungstransportgleichung (2.22) sowie die Ratengleichungen (2.37) zu modifizieren (siehe [Alb81]).

Modellierung des Zweierüberlapps

Zur Vereinfachung gehen wir von dem Fall des vollständigen 2er-Linienüberlapps aus. Es gelten die Gleichungen (2.49).

$$\kappa_{\nu,\ddot{U}berlapp} = \kappa_1 + \kappa_2 \tag{2.50}$$

mit der entsprechenden optischen Dicke:

$$\tau_G(l) \;=\; \int_o^{\tau_G(L)} (\kappa_1 + \kappa_2) dl \tag{2.51}$$

Die Ziffern 1 und 2 bezeichnen die beiden beteiligten Übergänge, und R ist der Radius der betrachteten Molekülwolke. Wenn man dies nun in der Strahlungstransportgleichung berücksichtigt, so wird aus

$$\frac{dI_\nu}{dl} \;=\; -\kappa_\nu \cdot I_\nu \;+\; \kappa_\nu \cdot S_\nu \tag{2.52}$$

eine Gleichung der Form

$$\begin{aligned}
\frac{dI_\nu}{dl} &= -\kappa_\nu \cdot I_\nu + \kappa_1 \cdot S_1 + \kappa_2 \cdot S_2 \\
&= -\kappa_\nu \cdot I_\nu + \kappa_1 \cdot S_1 + \kappa_2 \cdot S_2 + \kappa_2 \cdot S_1 - \kappa_2 \cdot S_1 \\
&= -\kappa_\nu \cdot I_\nu + \kappa_1 \cdot S_1 + \kappa_2 \cdot (S_2 - S_1) + \kappa_2 \cdot S_1 \\
&= -\kappa_\nu \cdot (I_\nu - \tilde{S}_\nu)
\end{aligned} \tag{2.53}$$

Dabei ist $\tilde{S}_\nu$ folgendermaßen definiert:

$$\tilde{S}_\nu \;=\; S_1 + \frac{\kappa_2 \cdot (S_2 - S_1)}{\kappa_\nu} \tag{2.54}$$

Die Behandlung des Zweierüberlapps entspricht der in [Doe93] und kann dort detailliert nachgelesen werden.

Erweiterung auf 3 überlappende Niveaus

Betrachtet man das Energietermschema des A-Methanols genauer, so stellt man fest, daß nicht nur der Fall des Zweierüberlapps vorkommt, sondern auch der seltenere Fall des Dreierüberlapps. Hierbei haben **drei** Übergänge (1,2 und 3) gleich große Übergangsfrequenzen. Die analytische Modellierung erfolgt analog zum Zweierüberlapp:

$$\begin{aligned}
\kappa_{\nu,\ddot{U}berlapp} &= \kappa_1 + \kappa_2 + \kappa_3 \\
\epsilon_{\nu,\ddot{U}berlapp} &= \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3
\end{aligned} \tag{2.55}$$

Das heißt, daß sich die Emissions- und Absorptionswahrscheinlichkeiten jetzt durch eine Summation über die drei einzelnen Linien ausdrückt. Jedes der sechs beteiligten Niveaus liefert seinen Beitrag zur gesamten Übergangswahrscheinlichkeit. Dies muß man genau wie oben auch in der Strahlungstransportgleichung berücksichtigen. Das macht man allerdings in einer Form, die das formale Aussehen der Gleichung nicht verändert. Dieser Trick wurde bereits oben beim Zweierüberlapp angewendet. Analog verfährt man beim Dreierüberlapp.

$$\begin{aligned}
\frac{dI_\nu}{dl} &= -\kappa_\nu \cdot I_\nu + \kappa_1 \cdot S_1 + \kappa_2 \cdot S_2 + \kappa_3 \cdot S_3 \\
&= -\kappa_\nu \cdot I_\nu + \kappa_1 \cdot S_1 + \kappa_2 \cdot S_2 + \kappa_3 \cdot S_3 + \kappa_2 \cdot S_1 - \kappa_2 \cdot S_1 \\
&= -\kappa_\nu \cdot I_\nu + \kappa_1 \cdot S_1 + \kappa_2 \cdot (S_2 - S_1) + \kappa_2 \cdot S_3 + \kappa_2 \cdot S_1 \\
&= -\kappa_\nu \cdot I_\nu + \kappa_1 \cdot S_1 + \kappa_2 \cdot (S_2 - S_1) + \kappa_2 \cdot S_3 + \kappa_2 \cdot S_1 + \kappa_3 \cdot S_1 - \kappa_3 \cdot S_1 \\
&= -\kappa_\nu \cdot I_\nu + S_1 \cdot (\kappa_1 + \kappa_2 + \kappa_3) + \kappa_2 \cdot (S_2 - S_1) + \kappa_3 \cdot (S_3 - S_1) \\
&= -\kappa_\nu \cdot I_\nu + \kappa_\nu \cdot \tilde{S}_\nu \qquad (2.56)
\end{aligned}$$

Die modifizierte Quellfunktion $\tilde{S}_\nu$, bezogen auf das 1. Niveau, ist:

$$\tilde{S}_\nu = S_1 + \frac{\kappa_2 \cdot (S_2 - S_1)}{\kappa_\nu} + \frac{\kappa_3 \cdot (S_3 - S_1)}{\kappa_\nu} \qquad (2.57)$$

Die entsprechende optische Dicke τ_G ist:

$$\tau_G(l) = \int_o^{\tau_G(L)} (\kappa_1 + \kappa_2 + \kappa_3) dl \qquad (2.58)$$

Kapitel 3

Eigenschaften des Methanols

3.1 Das CH_3OH-Molekül

Methanol, CH_3OH, ist ein sechsatomiges, asymetrisches Molekül (siehe Abbildung 3.1).

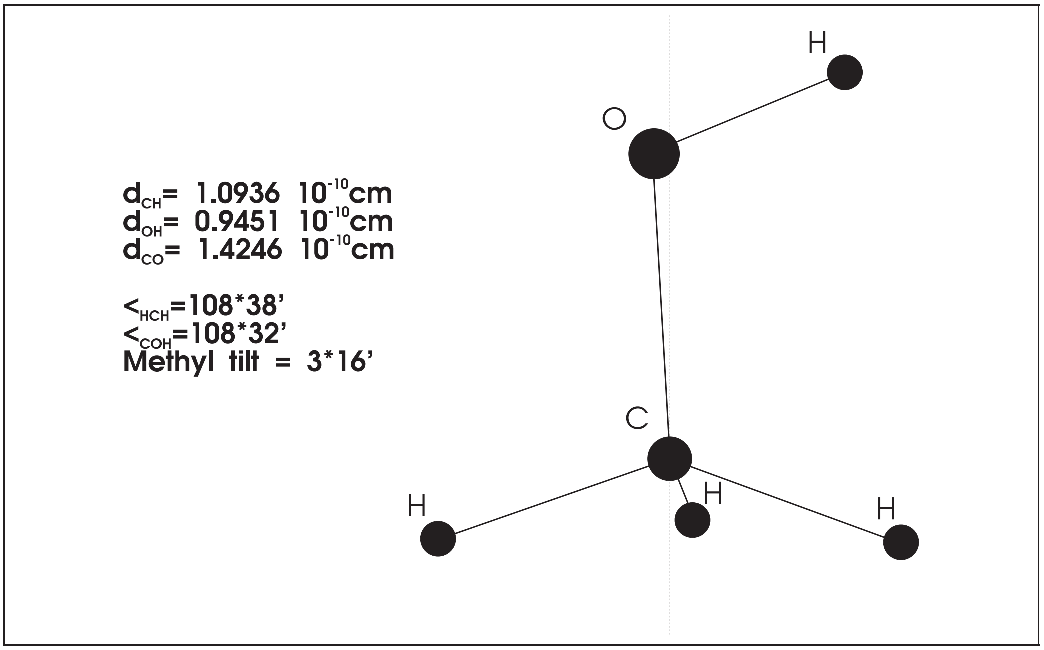

Abbildung 3.1: Schematische Darstellung von CH_3OH

Es besteht im wesentlichen aus zwei Teilen:

- der *unteren* CH_3-Basis, die einen Tetraeder bildet
- der *oberen* OH-Gruppe, die gegen die Basis rotieren kann.

Methanol gehört damit zu der Gruppe von Molekülen, die einer **internen Rotation** fähig sind. Es ist das am einfachsten gebaute Molekül dieser Gruppe [Mor95, S. 1] und dadurch seit den 40-er Jahren intensivst theoretisch und experimentell untersucht worden. Die interne Rotation wird allerdings durch die gegenseitige Wechselwirkung der Basis und der OH-Gruppe gehemmt, man spricht in der Literatur von *hindered internal rotation*. Trotz seines relativ simplen Aufbaus, ist die Energieniveaustruktur von Methanol äußerst kompliziert und es kann somit als das komplizierteste der einfachen Moleküle (oder das einfachste der komplizierten Moleküle) betrachtet werden [Mor95, S. 1] Die zu Methanol gehörende Symmetriegruppe ist $C_{3\nu}$. Von dieser Punkt- oder Symmetriegruppe spricht man, wenn das Molekül eine dreifache Symmetrieachse hat und gleichzeitig mit dieser Achse drei Symmetrieebenen σ_ν aufgespannt werden. Im Fall von Methanol verlaufen diese Ebenen jeweils durch die Symmetrieachse (Lot über C-Atom) und ein H-Atom der CH_3-Basis. Das H-Atom der *oberen* OH-Gruppe befindet sich innerhalb einer der drei σ_ν-Ebenen und damit *über einem der drei Basis-H-Atome*. Figur (3.2) zeigt das Methanolmolekül von oben. Dabei sind die einzelnen Atombausteine des Moleküls mit unterschiedlichen Graustufen gekennzeichnet. Je *tiefer* ein Atom unter dem Beobachter liegt desto dunkler ist es eingefärbt. So sind zum Beispiel, die von oben gesehen am weitesten entfernten Atome, die drei H-Atome des Basistetraeders und, folgerichtig weisen sie die dunkelste Graustufe auf. Man kann deutlich sehen, daß das H-Atom der oberen OH-Gruppe sich genau in einer der drei Symmetrieebenen befindet. Diese Stellung entspricht einem Potentialminimum des Torsionspotential, das die drei Basis-H-Atome auf das rotierende H-Atom der OH-Gruppe ausüben. Dieses Potential hat die Form

$$V(\gamma) = \frac{\bar{V}_3}{2} \cdot (1 - cos\, 3\gamma) + \frac{\bar{V}_6}{2} \cdot (1 - cos\, 6\gamma) + \frac{\bar{V}_9}{2} \cdot (1 - cos\, 9\gamma) + \ldots \quad (3.1)$$

Sein Verlauf ist in Abbildung (3.3) zu sehen. Hierbei ist V die Potentialhöhe und γ entspricht dem Drehwinkel. Die Werte der Koeffizienten betragen $V_3 = 373.21\text{cm}^{-1}$ und $V_6 = -0.52\text{cm}^{-1}$, während V_9 vollständig vernachlässigt werden kann [Mor95, S. 14]. Dabei beschreibt die Größe V_6 die

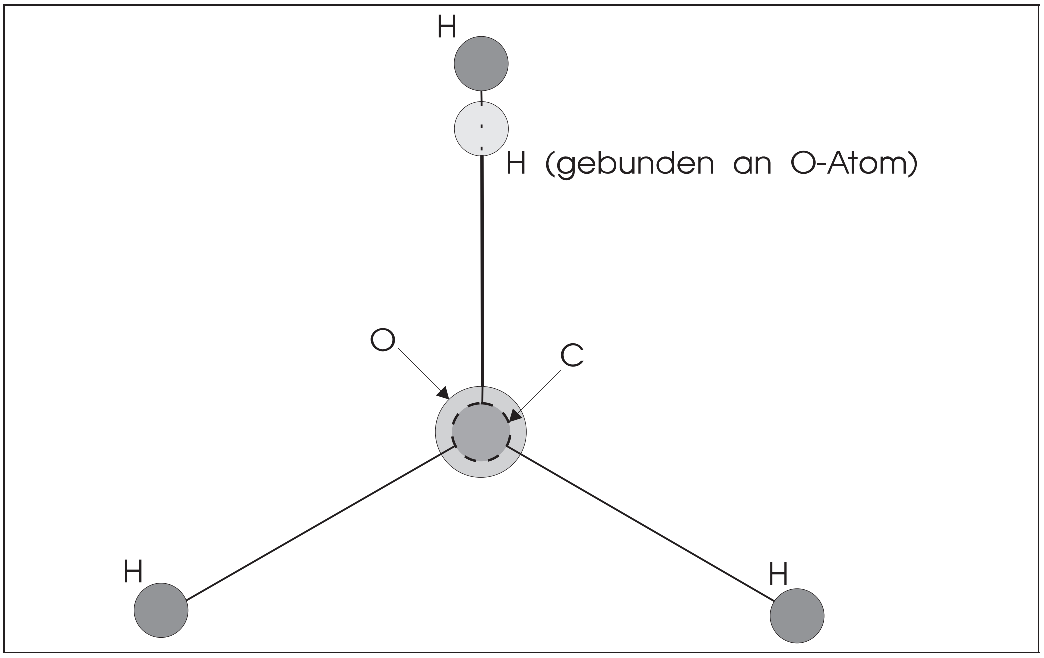

Abbildung 3.2: Draufsicht auf das CH_3OH-Molekül

Abweichung des Potentialverlaufs von einem idealen sinusförmigen Verlauf. Wäre dieser Potentialwall unendlich hoch, so hätte man den Fall eines eindimensionalen, harmonischen Oszillators, dessen stationäre Zustände mit einer fortlaufenden Quantenzahl $n = 1, 2, 3, \ldots$ durchnummeriert werden würden. Es gäbe separate Eigenfunktionen und eigene n Quantenzahlen für jede der drei Potentialminima, und jedes E_n Niveau wäre aufgrund der dreifachen Symmetrie der Potentialfunktion *dreifach entartet*. Doch aufgrund der endlichen Höhe des Potentialwalls existiert eine endliche Wahrscheinlichkeit für einen Tunneleffekt *zwischen* den drei Potentialwällen, der die dreifache Entartung aufhebt. Jeder $|n\rangle$ Zustand spaltet in drei Unterzustände auf, die aufgrund der Symmetriegruppenzugehörigkeit A, E_1 und E_2 genannt werden. Dabei ist zu bemerken, daß E_1 und E_2 keine streng verschiedenen Spezies darstellen, sondern, daß die $|\pm K, E_1\rangle$ Niveaus mit den $|\mp K, E_2\rangle$ Zuständen entartet sind. Zur Unterscheidung verwendet man zwei verschiedene Notationen:

- man beschränkt die K Werte auf Zahlen ≥ 0 und bezeichnet die Energieniveaus mit E_1 und E_2 , oder

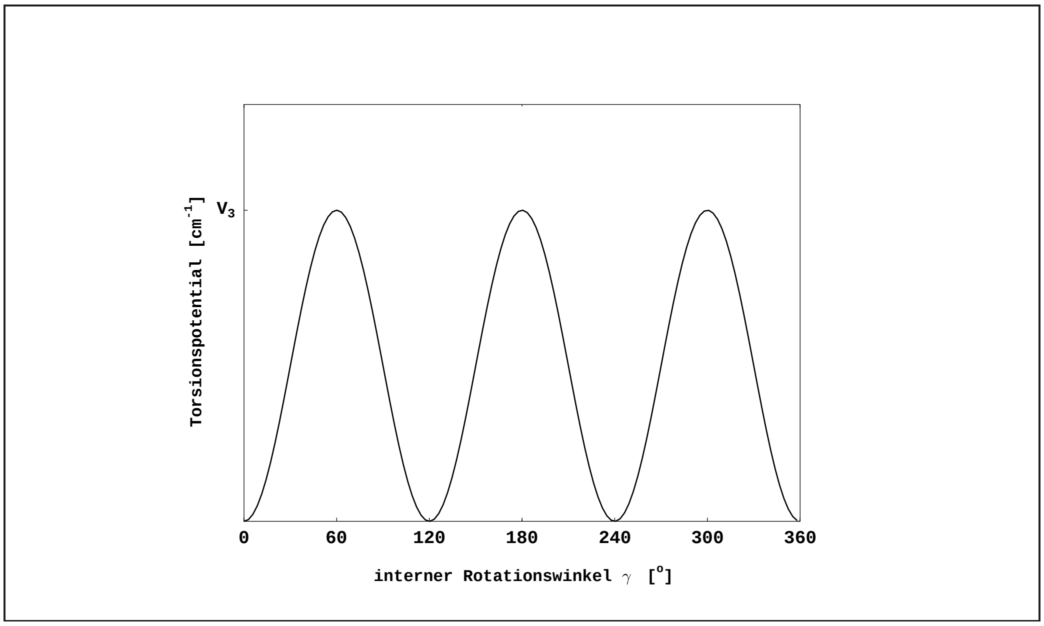

Abbildung 3.3: Behinderungspotential für Torsionsschwingungen

- man nennt beide Spezies $E - Typ$ und verwendet $\pm K$.

Wir beschränken uns wie [Doe93] auf die zweite Notation mit positiven σ-Werten für E_1 und negativen für E_2 (für $K = 0$ kann man zwischen E_1 und E_2 nicht unterscheiden). *Lees* und *Baker* [Lee68] führten die Quantenzahl σ ein, mit den Werten $\sigma = 0, \pm 1$. Jedes σ entspricht einer Symmetriespezies der $C_{3\nu}$ Gruppe A ($\sigma = 0$),$E_1(\sigma = +1)$ und $E_2(\sigma = -1)$. Wichtig ist dabei die Tatsache, daß ein Übergang mit $\Delta\sigma = \pm 1$ nicht erlaubt ist, daß heißt, *es gibt keine Übergänge zwischen den E und A-Typen!* Daraus folgt, daß man E- und A-Methanol bei jeder Untersuchung wie zwei völlig verschiedene Moleküle betrachten kann [Mor95, S. 15]! Eine weitere Quantenzahl $n \geq 0$, genannt *Torsionsquantenzahl*, wird eingeführt, um die Torsionsschwingungszustände zu kennzeichnen. Zusammenfassend kann man den Zustand eines CH_3OH-Moleküls durch **fünf** Quantenzahlen $|\sigma, \nu, n, K, J\rangle$ kennzeichnen, wobei J die gewöhnliche Rotationsquantenzahl ist und K die Projektion von J auf die Symmetrieachse. ν ist die sogenannte Vibrationsquantenzahl , die die verschiedenen Vibrationsmoden beschreibt. Ein besonderer Wert dieser Quantenzahl ist ν_t bzw ν_{12}, der einer Vibration der OH-Gruppe um seine Ruhelage, bzw. gegen die CH_3-Basis entspricht. Diese Verrückung entspricht eigentlich einer *Torsionsschwingung* der OH-Gruppe ist aber eine der

Vibrationsmoden.[Mor95, S. 8] Eine Besonderheit des A-Typ Methanols ist, daß aufgrund der leichten Asymmetrie des Moleküls außer den Zuständen der K=0 Leiter, jeder Zustand $|q, K\rangle$ (mit q alle Quantenzahlen außer K) aufspaltet in $|q, K^{\pm}\rangle$. Bei E-Methanol findet diese Aufspaltung nicht statt; die Niveaus sind zweifach entartet. Diese Aufspaltung wird auch durch die Notation $A^{\pm}$ dargestellt. Sie ist nicht zu verwechseln mit der gesamten Parität. Bei festem K wächst die Aufspaltung mit wachsendem J, und für ein gegebenes J ist die Aufspaltung maximal für $K = 1$ (bei $K = 0$ existiert diese Aufspaltung nicht) und wird für wachsende K schnell sehr klein. Der Wert dieser Energieaufspaltung kann durch folgende semi-empirische Formel berechnet werden:

$$\Delta E(n, K, J) = \frac{(J+K)!}{(J-K)!} \cdot [\bar{S}(n, K) + J(J+1) \cdot \bar{T}(n, K)] \qquad (3.2)$$

$\bar{S}(n, K)$ und $\bar{T}(n, K)$ sind sogenannte *asymmetry splitting parameters*.
Die Anordnung der A^+ und A^- Niveaus alterniert mit K für $n = 0$ (siehe Termschema)(sehr detailliert nachzulesen in [Mor95] und [Her60])

3.2 Auswahlregeln

Man unterscheidet je nach Orientierung des oszillierenden elektrischen Feldes relativ zum Molekül zwischen zwei verschiedenen Übergängen:

1. *a-Typ Übergänge:* Sie werden durch ein elektrisches Feld induziert, das parallel zur molekularen a-Achse schwingt, so daß entlang dieser Achse kein Drehmoment ausgeübt wird (die a-Achse entspricht dem Lot auf der Ebene der drei 'unteren' H-Atome durch das C-Atom; siehe auch Abbildung (3.1)). Das bedeutet, daß sich der Wert von K, der ja die Projektion des gesamten Molekül-Drehimpulses auf die a-Achse ist, nicht ändern kann.

   $$\Delta K = 0, \quad \Delta J = 0, \pm 1, \;\; \Delta n = 0,$$

   Speziell für A-Typ Methanol:

   $$\begin{aligned} A^{\pm} \;\; &\leftrightarrow \;\; A^{\pm} \;\text{ für }\; \Delta J = \pm 1, \\ A^{\pm} \;\; &\leftrightarrow \;\; A^{\mp} \;\text{ für }\; \Delta J = 0. \end{aligned} \tag{3.3}$$

2. *b-Typ Übergänge:* Sie werden durch ein elektrisches Feld, senkrecht zur a-Achse, induziert. Das bedeutet, daß sich K ändern muß.

   $$\Delta K = \pm 1, \quad \Delta J = 0, \pm 1, \;\; \Delta n = \text{beliebig},$$

   Für A-Typ Methanol:

   $$\begin{aligned} A^{\pm} \;\; &\leftrightarrow \;\; A^{\mp} \;\text{ falls }\; \Delta n + \Delta J = \text{gerade} \\ A^{\pm} \;\; &\leftrightarrow \;\; A^{\pm} \;\text{ falls }\; \Delta n + \Delta J = \text{ungerade}. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Wie bereits erwähnt, gilt die zusätzliche Auswahlregel

$$E_1 \leftrightarrow E_1, \quad E_2 \leftrightarrow E_2 \quad \text{und} \quad A \leftrightarrow A, \quad bzw. \quad \Delta\sigma = 0 \tag{3.5}$$

Die Übergänge innerhalb des E-Typ Methanols stellen hierbei insofern eine Ausnahme dieser Regeln dar, da ein indirekter Übergang zwischen E_1 und E_2 stattfinden kann, und zwar über die K=0 Leiter, die für E_1 und E_2 nicht unterschieden ist. Somit ist ein Übergang $E_1 \leftrightarrow E_2$ möglich über

$$E_1(K \neq 0) \leftrightarrow E_1(K = 0) = E_2(K = 0) \leftrightarrow E_2(K \neq 0)$$

3.3 Die Moleküldaten

Für unsere Berechnungen benötigten wir sowohl die Einsteinkoeffizienten der einzelnen Übergänge, wie auch die Energien der entsprechenden Niveaus. Die Energieniveaus wurden uns freundlicherweise von [Mor95] noch vor Veröffentlichung Ihres Buches zur Verfügung gestellt. Die Einsteinkoeffizienten berechneten wir selbst. Dazu macht man sich folgende Relation zu nutze:

$$A_{l\,u} \;=\; \frac{64\,\pi^4}{3\,h} \cdot \frac{1}{\lambda^3} \cdot \frac{|\langle\; l \mid M \mid u \;\rangle|^2}{g_u} \tag{3.6}$$

Dabei kennzeichnen l und u das *untere* bzw. *obere* Energieniveau, g_u ist das sog. *statistische Gewicht* des unteren Niveaus:

$$g_u \;=\; 2\,J \,+\, 1 \tag{3.7}$$

λ ist die Wellenlänge des Übergangs und $\langle\; l \mid M \mid u \;\rangle$ ist das Überlappmatrixelement des elektrischen Dipolmoments. Es setzt sich zusammen aus:

$$|\langle\; l \mid M \mid u \;\rangle|^2 \;=\; |\langle\; l \mid S_R \mid u \;\rangle|^2 \;\cdot\; |\langle\; l \mid S_T \mid u \;\rangle|^2 \tag{3.8}$$

Die zweiten Matrixelemente, auch S_T-Faktor genannt, sind uns von Frau Dr. Brenda Winnewisser zur Verfügung gestellt worden. Sie resultieren aus der internen Rotationsbewegung des Moleküls. Der erste Term der rechten Seite ist der sog. H_{ln} *Hönl-London Faktor*. Er repräsentiert die Übergangsstärke eines starren symmetrischen Rotators und errechnet sich wie folgt:

1. *Für a-Typ Übergänge:*

$$\begin{aligned}
|\langle\; J-1, K \mid S_R \mid J, K \;\rangle|^2 &= \mu_a^2 \cdot \frac{J^2 - K^2}{J} \\
|\langle\; J, K \mid S_R \mid J, K \;\rangle|^2 &= \mu_a^2 \cdot \frac{K^2 \cdot (\,2\,J+1)}{J \cdot (J+1)} \\
|\langle\; J+1, K \mid S_R \mid J, K \;\rangle|^2 &= \mu_a^2 \cdot \frac{(J+1)^2 - K^2}{(J+1)}
\end{aligned} \tag{3.9}$$

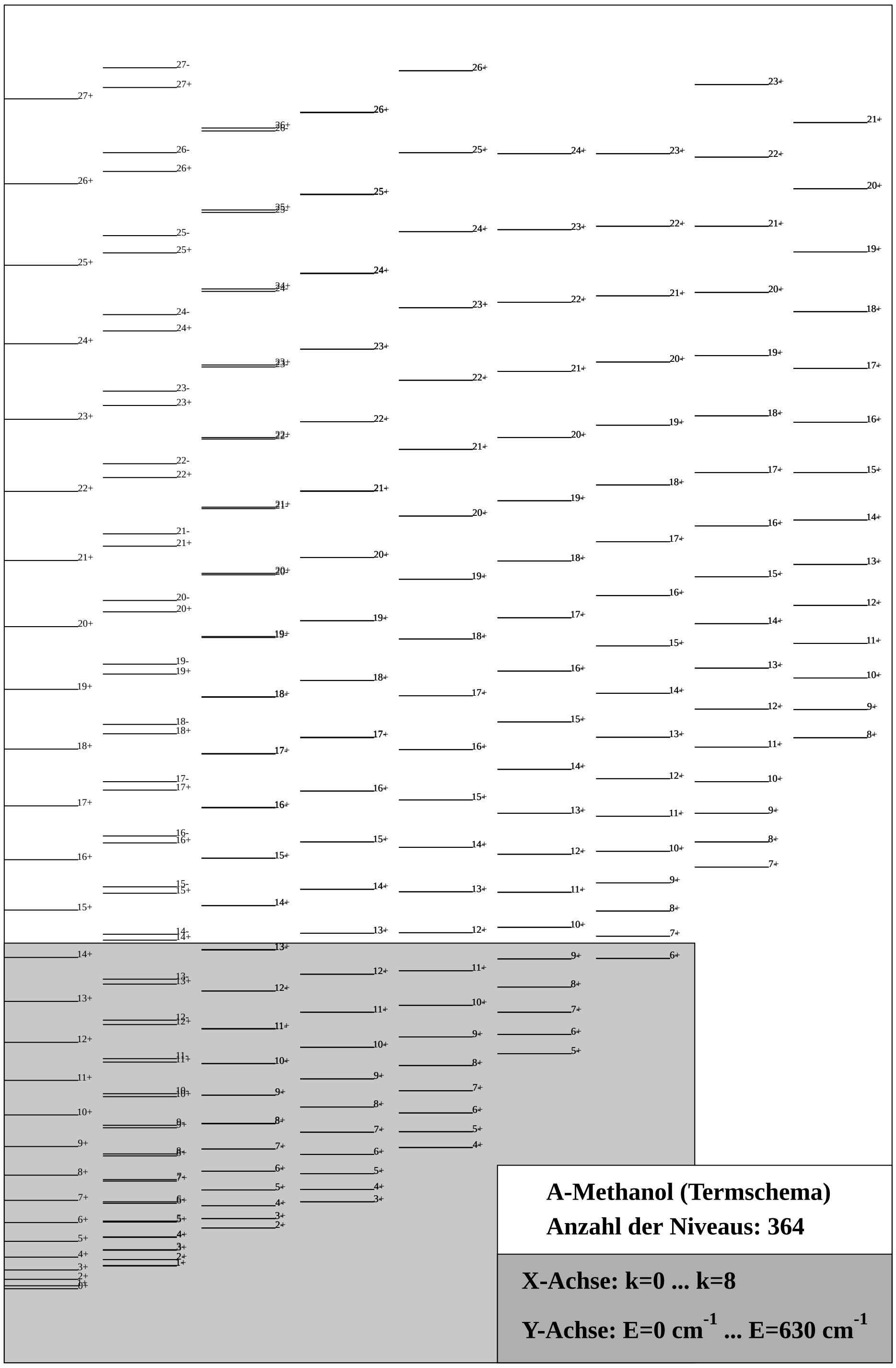

Abbildung 3.4: Termschema des CH_3OH-Moleküls im Torsionsgrundzustand $\nu_t = 0$

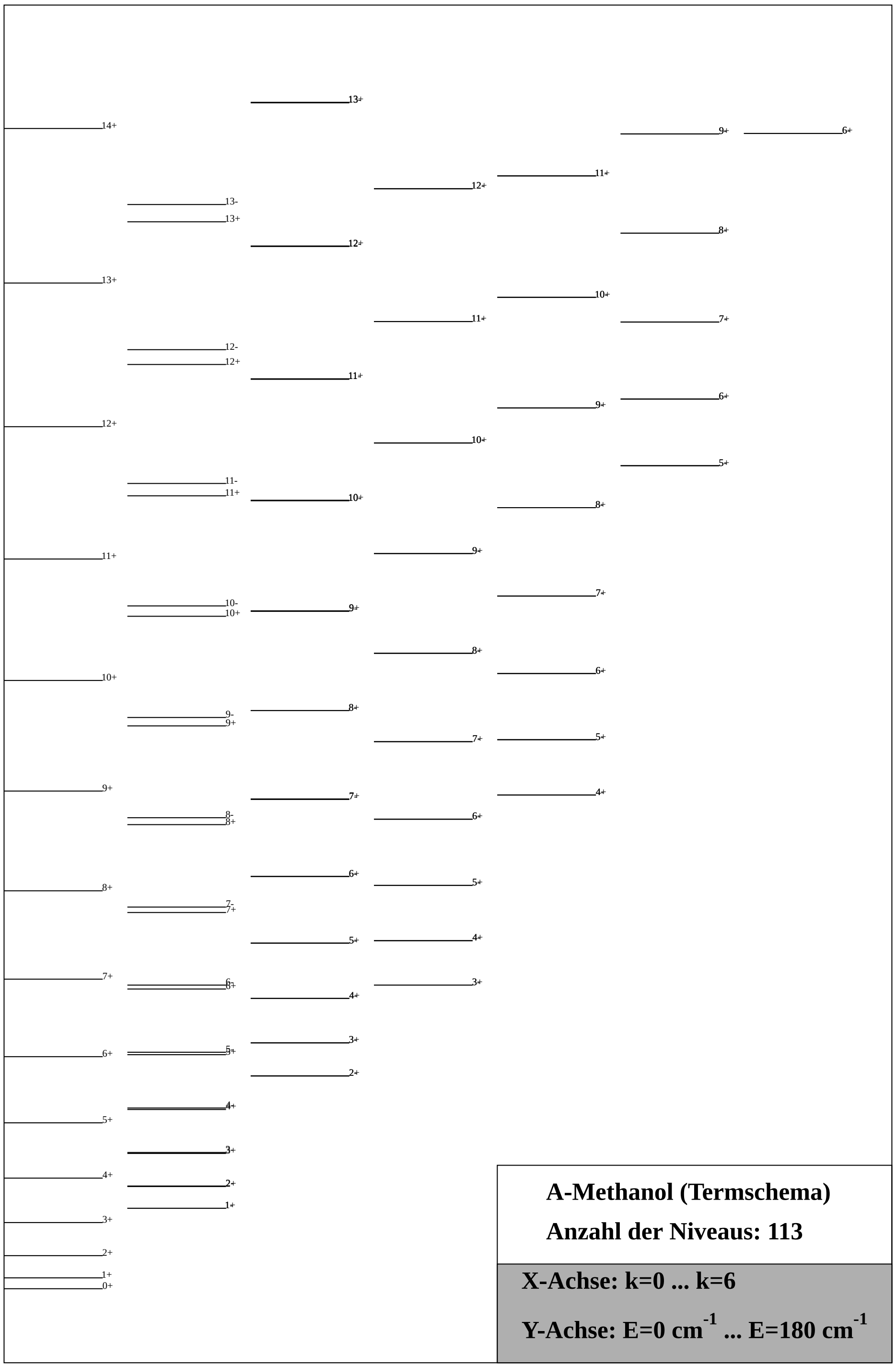

Abbildung 3.5: Ausschnittsvergrößerung des schraffierten Bereichs der Abbildung (3.4)

2. *Für b-Typ Übergänge*

$$\begin{aligned}
|\langle\, J-1, K\pm 1 \mid S_R \mid J, K\,\rangle|^2 &= \mu_b^2 \cdot \frac{(J\mp K-1)\cdot(J\mp K)}{4J} \\
|\langle\, J, K\pm 1 \mid S_R \mid J, K\,\rangle|^2 &= \mu_b^2 \cdot \frac{(2J+1)\cdot(J\pm K+1)\cdot(J\mp K)}{4J\cdot(J+1)} \\
|\langle\, J+1, K\pm 1 \mid S_R \mid J, K\,\rangle|^2 &= \mu_b^2 \cdot \frac{(J+2\pm K)\cdot(J+1\pm K)}{4\cdot(J+1)} \qquad (3.10)
\end{aligned}$$

μ_a und μ_b sind die entsprechenden Komponenten des elektrischen Dipolmoments [Mor95, S. 22].Die Einstein-B-Koeffizienten errechnen sich aus den bereits genannten Einsteinschen Relationen (Gleichungen 2.12 und 2.13).

3.4 Stoßraten

Im interstellaren Raum ist molekularer Wasserstoff mit Abstand das am häufigsten vorkommende Molekül. Es hat eine solch hohe Dichte, daß man bei Strahlungstransportrechnungen Stöße mit Wasserstoff unbedingt berücksichtigen muß! Die Stoßraten habe ich, in Übereinstimmung mit [Doe93, S. 28] aus Arbeiten von [Nag79] und [Lee74] übernommen. Die Autoren betrachten dabei Stöße mit molekularem Wasserstoff H_2. Es findet sich, daß Stoßübergänge mit $\Delta K = 0$ fünf mal häufiger sind, als Übergänge mit $\Delta K = \pm 1$. Gleichzeitig sind die Stoßraten proportional zu $\frac{1}{|\Delta J|}$. Mit dem totalen Wirkungsquerschnitt $\sigma = 10^{-15}\mathrm{cm}^2$ ergibt sich für die abregenden Stöße von Niveau k ($J'_{K'}$) zu Niveau i (J_K) die Form:

$$C_{ik} = \sigma \cdot a_J \cdot b_k \cdot n_{H_2} \cdot \bar{v}_{thermisch} \qquad (3.11)$$

Für a_J und b_k gilt:

$$a_J = \begin{cases} 0 & f\ddot{u}r \quad |J-J'| \geq 5 \\ \frac{1}{|\Delta J|} & f\ddot{u}r \quad |J-J'| < 5 \\ 1 & f\ddot{u}r \quad |J-J'| = 0 \end{cases} \qquad (3.12)$$

und

$$b_k = \begin{cases} 1.0 & f\ddot{u}r \quad |K-K'| = 0 \\ 0.2 & f\ddot{u}r \quad |K-K'| = 1 \\ 0.1 & f\ddot{u}r \quad |K-K'| = 2 \\ 0.05 & f\ddot{u}r \quad |K-K'| = 3 \\ 0.0 & f\ddot{u}r \quad |K-K'| \geq 4 \end{cases} \qquad (3.13)$$

Dabei ist n_{H_2} die Dichte der Wasserstoffmoleküle und $\bar{v}_{thermisch}$ ist die thermische Geschwindigkeit, die der mittleren Geschwindigkeit in einer Maxwellschen Geschwindigkeitsverteilung entspricht:

$$\bar{v}_{thermisch} = \sqrt{\frac{8 \cdot k_B \cdot T}{\pi \cdot M_r \cdot m_u}} \tag{3.14}$$

M_r ist das reduzierte Molekulargewicht und $m_u = 1.6605 \cdot 10^{-24}$g ist die Atommassenkonstante. Die anregenden Stöße ergeben sich bei Annahme der Maxwell-Verteilung mittels

$$C_{ki} = \frac{g_k}{g_i} \cdot C_{ik} \cdot e^{-\frac{h\nu_{ik}}{k_B T_{kin}}} \tag{3.15}$$

Kapitel 4

Das Modell

4.1 Annahmen

Um die Besetzungszahlen der interstellaren Wolke und ihre emittierte Strahlung überhaupt erst bestimmen zu können, machen wir eine Reihe von vereinfachenden Annahmen:

4.1.1 'on-the-spot' Approximation

Im Allgemeinen ist das Strahlungsfeld eine nichtlokale Größe, die durch die Zustandsgrößen in der gesamten Wolke determiniert wird. Bei einer *on-the spot* Approximation nimmt man an, daß das Strahlungsfeld durch die lokalen Größen näherungsweise bestimmt werden kann. Wir machen dabei die folgenden speziellen Annahmen:

- *Die Molekülwolke ist homogen in Temperatur, Dichte und Besetzungszahlen n_i.*

  Damit vereinfacht sich die optische Dicke aus Gleichung (2.24) zu:

$$\tau_\nu(l) = \int_o^l \kappa_\nu(l')\, dl' \;=\; l \cdot \kappa_\nu \tag{4.1}$$

  Desweiteren vereinfacht sich Gleichung (2.23) zu:

$$\begin{aligned} I_\nu(\,l = 0\,) \;&=\; \int_0^L \kappa_\nu(l) \cdot S_\nu(l) \cdot e^{-\tau_\nu(l)}\, dl \;+\; I_\nu(l = L) \cdot e^{-\tau_\nu(L)} \\ &=\; S_{ik} \cdot (1 - e^{-\tau_\nu(L)}) \;+\; I_\nu(L) \cdot e^{-\tau_\nu(L)} \end{aligned} \tag{4.2}$$

- *Der kosmische Mikrowellenhintergrund ist isotrop.*

$$I_\nu(L) \;=\; I_{CMBR} \tag{4.3}$$

  Um die Rechnungen noch weiter zu vereinfachen, legen wir die Geometrie der Wolke fest.

- *Die Wolke sei sphärisch symmetrisch mit dem Radius R.*

  Mit

$$\tau_\nu \;=\; \tau_\nu(R) \tag{4.4}$$

  folgt für Gleichung (4.2):

$$I_\nu \;=\; S_\nu \cdot (1 - e^{-\tau_\nu}) \;+\; I_{CMBR} \cdot e^{-\tau_\nu} \tag{4.5}$$

- *Bezugspunkt aller Rechnungen sei der Mittelpunkt der Wolke.* Aufgrund der vorher gemachten Annahmen kann man sagen, daß der Mittelpunkt der Wolke repräsentativ für die gesamte Molekülwolke ist. Wenn wir die Strahlungsintensität im Zentrum der Wolke bestimmen, so können wir ausnutzen, daß sich alle Winkelintegrationen über das Gesamtvolumen der Wolke zu 4π vereinfachen. Damit wird Gleichung (2.31) zu:

$$\tilde{J}_{ik} \;=\; \int_0^\infty \; I_\nu \cdot \Phi(\nu)\, d\nu \tag{4.6}$$

Einige der gemachten Annahmen sind physikalisch durchaus sinnvoll, wie zum Beispiel die Annahme der isotropen 2.73K-Strahlung. Die ersten Anisotropien dieses Strahlungshintergrundes treten als sogenannte Dipolanisotropie bei $\frac{\Delta T}{T} \;\approx\; 10^{-3}$ auf. Das ist sehr wenig und macht unsere Annahme sehr plausibel. Die anderen Vereinfachungen erhalten ihre Rechtfertigung zum einen aus der Tatsache, daß sie die Rechenzeit so weit verkürzen, daß man in relativ kurzer Zeit ein großes Ensemble an Parametersätzen rechnen kann, und so ein gutes qualitatives Verständnis für die Physik der Molekülwolke entwickeln kann. Würde man einer realistischeren Modellierung zuliebe, auf die gemachten Homogenitätsannahmen verzichten, müßte man gleichzeitig eine um Größenordnung höhere Rechenzeit in Kauf nehmen. Außerdem treten dabei Nichtlinearitäten auf, die eine Konvergenz der Rechnungen vereiteln können.

4.1.2 Profilfunktion

Wie in Abschnitt (2.4.1) bereits geschildert, führen unterschiedliche physikalische Prozesse dazu, daß Linien nicht beliebig scharf sind, sondern in ihrem spektralen Verlauf durch die Profilfunktion $\Phi(\nu)$ dargestellt werden können. Die genaue Gestalt dieser Funktion hat großen Einfluß auf die Behandlung des Linienüberlapps. Zu der bereits gemachten Annahme der Gleichheit von Absorptions- und Emissionsprofilen in Gleichung (2.8) beschränken wir uns im weiteren bei der Form von $\Phi(\nu)$ auf ein reines *Kastenprofil* (siehe Abbildung (4.1)):

$$\Phi(\nu) \;=\; \begin{cases} \frac{1}{\Delta\nu_D} & \text{für} \quad |\nu - \nu_0| \;<\; \frac{\Delta\nu_D}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{4.7}$$

Man beobachtet Linienbreiten in Molekülwolken in der Größenordnung

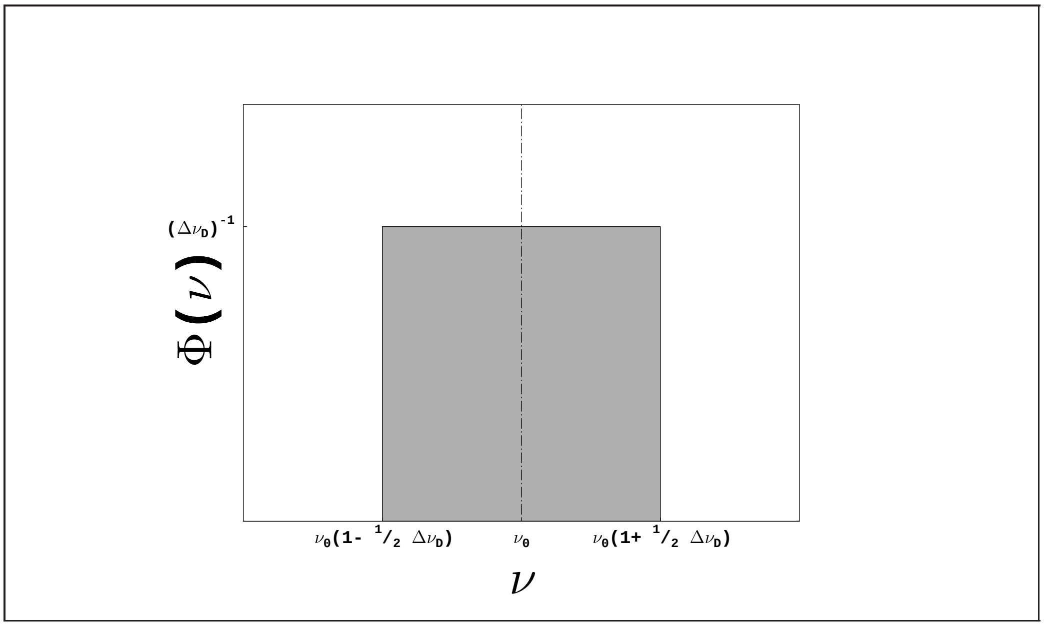

Abbildung 4.1: Verlauf der Kastenprofilfunktion

$$\frac{\Delta\nu}{\nu} \;=\; 10^{-5} \tag{4.8}$$

Als einzige Ursache für diese Verbreiterung findet man die Dopplerverbreiterung:

$$\frac{\nu - \nu_0}{\nu_0} \;=\; \frac{v}{c} \tag{4.9}$$

Würde man die auftretende Geschwindigkeit v als thermische Bewegung interpretieren, so erhielte man viel höhere Temperaturen, als es den Anregungszuständen der Linien entspricht. Als alternative Erklärung geht man von Turbulenzbewegungen innerhalb der Wolke aus. Wir gehen von Mikroturbulenz aus, indem wir die Annahme machen, daß die Skalenlänge der Turbulenz kleiner ist als die mittlere freie Weglänge der Photonen. Dieser Grenzfall äußert sich in einer Verbreiterung des Absorptionskoeffizienten. Damit haben alle Linien die gleiche relative Breite:

$$\frac{\Delta\nu_{ik}}{\nu_{ik}} \tag{4.10}$$

Aus der Beziehung (4.7) folgt für das Integral (4.6):

$$\tilde{J}_{ik} \;=\; I_\nu \tag{4.11}$$

Die optische Dicke ergibt sich aus Gleichung (2.17 und 4.1) zu:

$$\tau_\nu \;=\; R \cdot \frac{h}{c} \cdot \frac{\nu}{\Delta\nu} \cdot B_{ik} \cdot \Delta n_{ik} \;=\; \tau_{ik} \tag{4.12}$$

Eingesetzt in Gleichung (4.5) erhält man den Ausdruck:

$$\tilde{J}_{ik} \;=\; \tilde{S}_{ik} \cdot (1 - e^{-\tau_{ik}}) \;+\; I_{CMBR} \cdot e^{-\tau_{ik}} \tag{4.13}$$

4.1.3 Vollständiger Linienüberlapp

Bei unseren Berechnungen behandeln wir nur solche Linien als überlappend, bei denen der Frequenzabstand $\Delta v = \frac{\Delta\nu}{\nu}c$, ausgedrückt in Geschwindigkeiten, unter dem Wert von $0.1\frac{\mathrm{km}}{\mathrm{s}}$ liegt, also

$$\frac{\nu_{ik} \;-\; \nu_{lm}}{\nu_{ik}} \cdot c \;<\; 0.1 \;\; \frac{\mathrm{km}}{\mathrm{s}} \tag{4.14}$$

Um die Behandlung des Linienüberlapps mathematisch möglichst wenig aufwendig zu gestalten, gehen wir bei allen, solchermaßen als *überlappend* gekennzeichneten Linien dazu über, diesen Linienüberlapp als **vollständig** zu definieren, d.h. wir verschieben die Linienprofile so, daß sie sich komplett überdecken [Qua93], mit der Konsequenz:

$$\nu_{ik} \;=\; \nu_{lm} \quad bzw. \;\; \nu_{ik} \;=\; \nu_{lm} \;=\; \nu_{op} \tag{4.15}$$

Das ist eine unbedenkliche Variation der Linienfrequenz, da wir die Bedingung für einen Linienüberlapp von vorneherein sehr eng angesetzt haben, und gleichzeitig eine enorme Vereinfachung der Behandlung des Linienüberlapps erreichen.

4.2 Modellierung der Umgebung

4.2.1 Kosmische Mikrowellen-Hintergrundstrahlung

Wir simulieren den Einfluß von unterschiedlichen Strahlungsquellen auf unsere Methanolwolke. Der wichtigste Strahlungshintergrund ist die 2.7-Kelvin Hintergrundstrahlung. Dieser kosmische Mikrowellenhintergrund (CMBR *cosmic microwave background radiation*) ist im Universum allgegenwärtig. Er folgt in seinem Verlauf sehr genau der Kirchhoff-Planck Funktion $B_\nu(T)$, die die thermische Strahlung eines schwarzen Körpers darstellt.

$$I_{CMBR} \; = \; B_\nu(T_{CMBR}) \; = \; \frac{2 \cdot h \cdot \nu}{c^2} \cdot \left(e^{\frac{h\,\nu}{k_B\,T_{CMBR}}} - 1 \right)^{-1} \tag{4.16}$$

Für T_{CMBR} setzten wir einen Wert von 2.7 Kelvin an. Siehe dazu auch Ab-

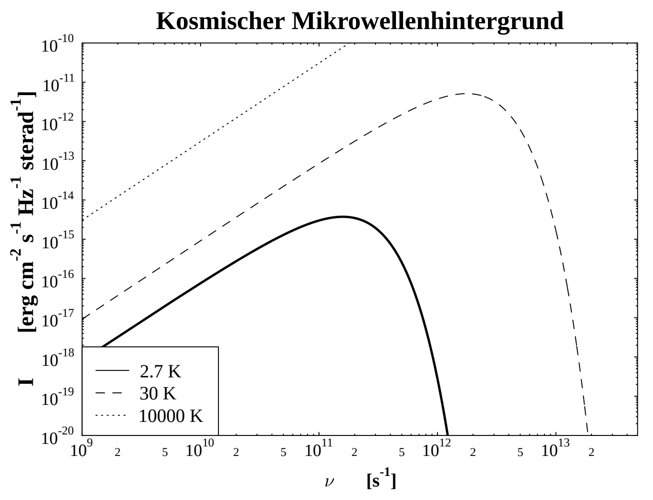

Abbildung 4.2: Spektrum des kosmischen Mikrowellenhintergrunds

bildung (4.2). Diesen Strahlungshintergrund berücksichtigen wir bei unseren Rechnungen immer. Zum Vergleich sind in der Grafik die Schwarzkörperspektren bei 30 K, was der kinetischen Temperatur einer durchschnittlichen Molekülwolke entspricht, und 10000 K, der kinetischen Temperatur einer H II Region, aufgeführt.

4.2.2 Strahlung einer H II-Region

Man findet Methanolmaser sehr häufig in der Nähe von sehr aktiven Sternentstehungsgebieten. Oft sind sie assoziiert mit H II Regionen. Aus diesem Grund haben wir unsere Modellwolke auch der Strahlung einer H II Region ausgesetzt. Für den Absorptionskoeffizienten im Radiobereich gilt die Rayleigh-Jeans Näherung. Man kann schreiben [Keg91]:

$$\kappa_\nu^{HII} = \frac{4}{3}\sqrt{\frac{2\pi}{3}} \cdot \frac{Z^2 \cdot e^6 \cdot n_e \cdot n_H \cdot g_{ff}}{\sqrt{m_e \cdot k \cdot T_{HII}}^3 \cdot \nu^3 \cdot c} \tag{4.17}$$

Dabei ist der sogenannte Gauntfaktor g_{ff} eine schwach mit ν variierende Funktion, in der alle Abweichungen von der klassischen Formel, also auch alle Quanteneffekte, zusammengefaßt sind. T_{HII} ist die kinetische Temperatur der H II-Region. Für den Fall $\nu \ll \frac{kT}{h}$ gilt für g_{ff} die Näherung:

$$g_{ff} = 9.77 \cdot \left(1 + 0.13 \cdot log\left(\frac{\sqrt{T_{HII}}^3}{\nu}\right)\right) \tag{4.18}$$

Setzt man Gleichung (4.18) in (4.17) ein, so erhält man in cgs-Einheiten:

$$\kappa_\nu^{HII} = 0.173 \cdot \left(1 + 0.13 \cdot log\left(\frac{\sqrt{T_{HII}}^3}{\nu}\right)\right) \cdot \frac{Z^2 \cdot n_e \cdot n_H}{\sqrt{T_{HII}}^3 \cdot \nu^2} \tag{4.19}$$

Man sieht, daß κ_ν^{HII} nicht ganz proportional ist zu ν^{-2}. Je höher also die Frequenz ist, desto kleiner ist der Absorptionskoeffizient, d.h. desto optisch dünner ist die H II Region. Umgekehrt ist sie bei niedrigeren Frequenzen entsprechend optisch dicker. Wir setzten ein $Z^2 = 1$ und $n_e = n_H$, d.h. wir nehmen eine vollständig ionisierte H II Region an. Dadurch erhalten wir als zusätzlichen freien Parameter das sogenannte Emissionsmaß der H II Region:

$$EM = \int n_e^2 \, dl \tag{4.20}$$

Mit dem Emissionsmaß (Gleichung (4.20))können wir die optische Dicke nun folgendermaßen ausdrücken :

$$\tau_\nu^{HII} = \frac{\kappa_\nu^{HII}}{n_e^2} \cdot EM \tag{4.21}$$

Mit Gleichung (4.21) können wir nun den Ausdruck für die Intensität der gesamten relevanten Hintergrundstrahlung neu formulieren. Ihr Verlauf ist in

Abbildung (4.4) dargestellt. Zum Vergleich ist zusätzlich die 3K-Hintergrundstrahlung aufgeführt. Vom Mittelpunkt der Methanolwolke aus gesehen, kann man 2 Komponenten der Hintergrundstrahlung unterscheiden:

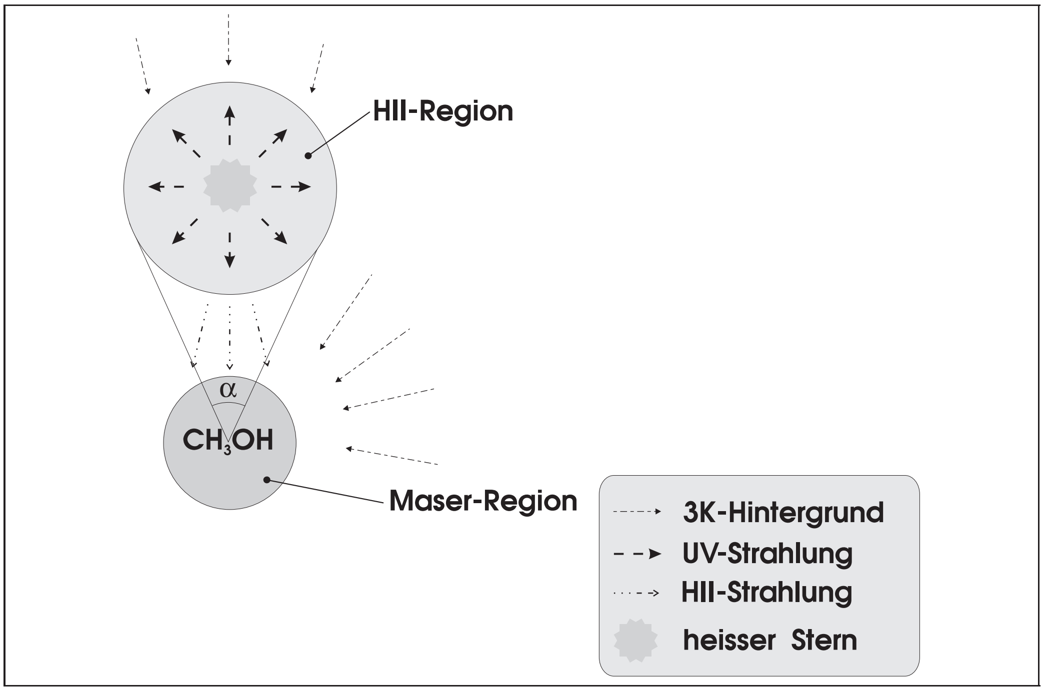

Abbildung 4.3: Modellierte Anordnung der H II Region

- Eine Komponente trifft unsere Molekülwolke aus Richtung der H II Region. Sie beinhaltet zum einen die Strahlung der H II Region selber, und zum anderen die kosmische Hintergrundstrahlung, die durch die H II Region zur Methanolwolke dringt (siehe Figur (4.3)). Hierbei ist es wichtig, welchen Raumwinkel $\Delta\Omega$ die H II Region, von der Methanolwolke aus gesehen, einnimmt. Das drücken wir durch den Verdünnungsfaktor W aus. In Gleichung (4.22) sieht man deutlich, wie die kosmische Hintergrundstrahlung beim Durchlauf durch die H II Region absorbiert wird.

- Die zweite Komponente stellt den Teil der kosmischen Hintergrundstrahlung dar, der durch den 'H II-freien' Raumwinkel auf unsere Wolke trifft.

$$
\begin{aligned}
I_\nu^{HII} &= \overbrace{\left(B_\nu(T_{HII}) \cdot (1 - e^{-\tau_\nu^{HII}}) + B_\nu(T_{CMBR}) \cdot e^{-\tau_\nu^{HII}}\right) \cdot W}^{durchdringt\ die\ HII-Region} \\
&+ \underbrace{(1 - W) \cdot B_\nu(T_{CMBR})}_{freier\ Raumwinkel} \qquad (4.22) \\
mit & \qquad (4.23) \\
\Delta\Omega &= 2\pi \cdot (1 - cos\alpha) \qquad \text{mit } \alpha \text{ entsprechend Abb.(4.3)} \qquad (4.24) \\
W &= \frac{\Delta\Omega}{4\pi} \qquad (4.25)
\end{aligned}
$$

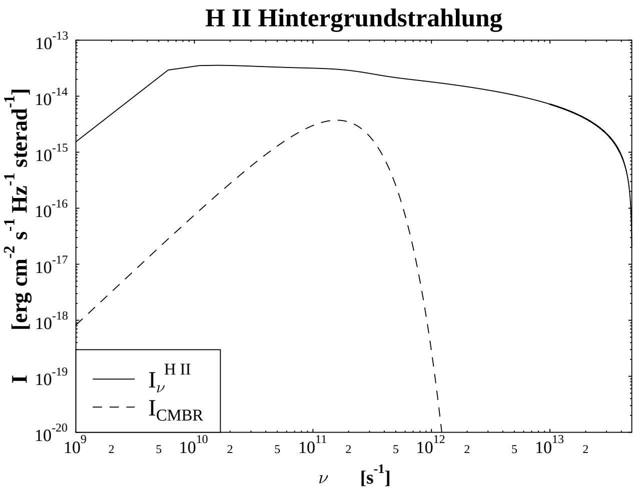

Abbildung 4.4: Intensität des Strahlungshintergrundes mit einer H II Region mit $T_{HII} = 10000$K, $W = 0.5$, $EM = 10^8$pc cm^{-6}

4.2.3 Infrarotstrahlung

Eine Vorstellung über den Aufbau von H II Regionen ist die, daß sie von einem Staubmantel umgeben ist. Dieser Staubmantel wird durch die UV-Strahlung des heißen Zentralsterns aufgeheizt und strahlt die so aufgenommene Energie als Infrarotstrahlung wieder ab (siehe Figur(4.5)). Um diese zusätzliche Strahlung in unser Modell zu integrieren, ist es notwendig, das Energietermschema unseres Moleküls zu erweitern. Bisher hatten wir uns bei

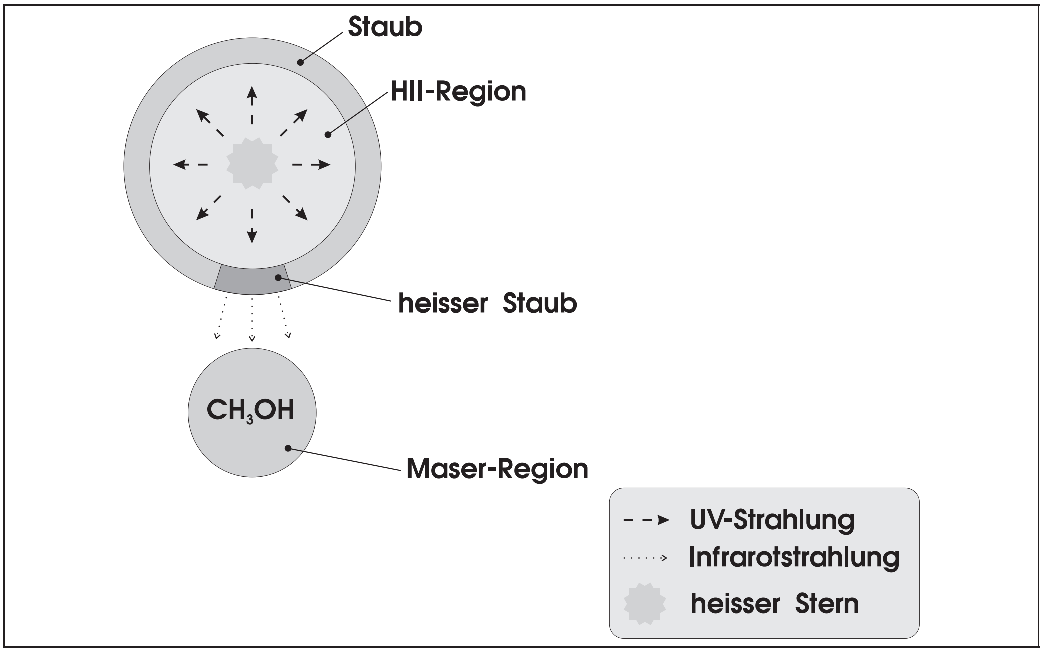

Abbildung 4.5: Modell des Staubmantels einer H II Region

der Beschreibung des Moleküls auf den Torsionsgrundzustand beschränkt. Die Energieniveaus der torsionsangeregten Zustände liegen jedoch genau in einem Bereich, der sie zur Absorption von Infrarotstrahlung befähigt. Um unser Modell also überhaupt erst gegen infrarote Strahlung empfindlich zu machen war es nötig, das verwendete Energietermschema um die Zustände der ersten Torsionsquantenzahl zu erweitern (siehe Figur(4.6)). Um die Absorptionseigenschaften des Staubmantels zu beschreiben, benötigt man eine Beziehung zwischen der optischen Dichte des Mantels τ_ν^{IR} und der Wellenlänge λ bzw. Frequenz ν der Photonen. Man bedient sich dabei häufig eines relativ einfachen Ansatzes der Form:

$$\tau_\nu^{IR} \sim \lambda^{-1.5} \tag{4.26}$$

Zur genaueren Spezifikation, normiert man eine solche Beziehung auf eine Basiswellenlänge λ_{norm}. Man erhält :

$$\tau_\lambda^{IR} = \tau_{30\mu m} \cdot \left(\frac{30\mu m}{\lambda}\right)^{1.5} \tag{4.27}$$

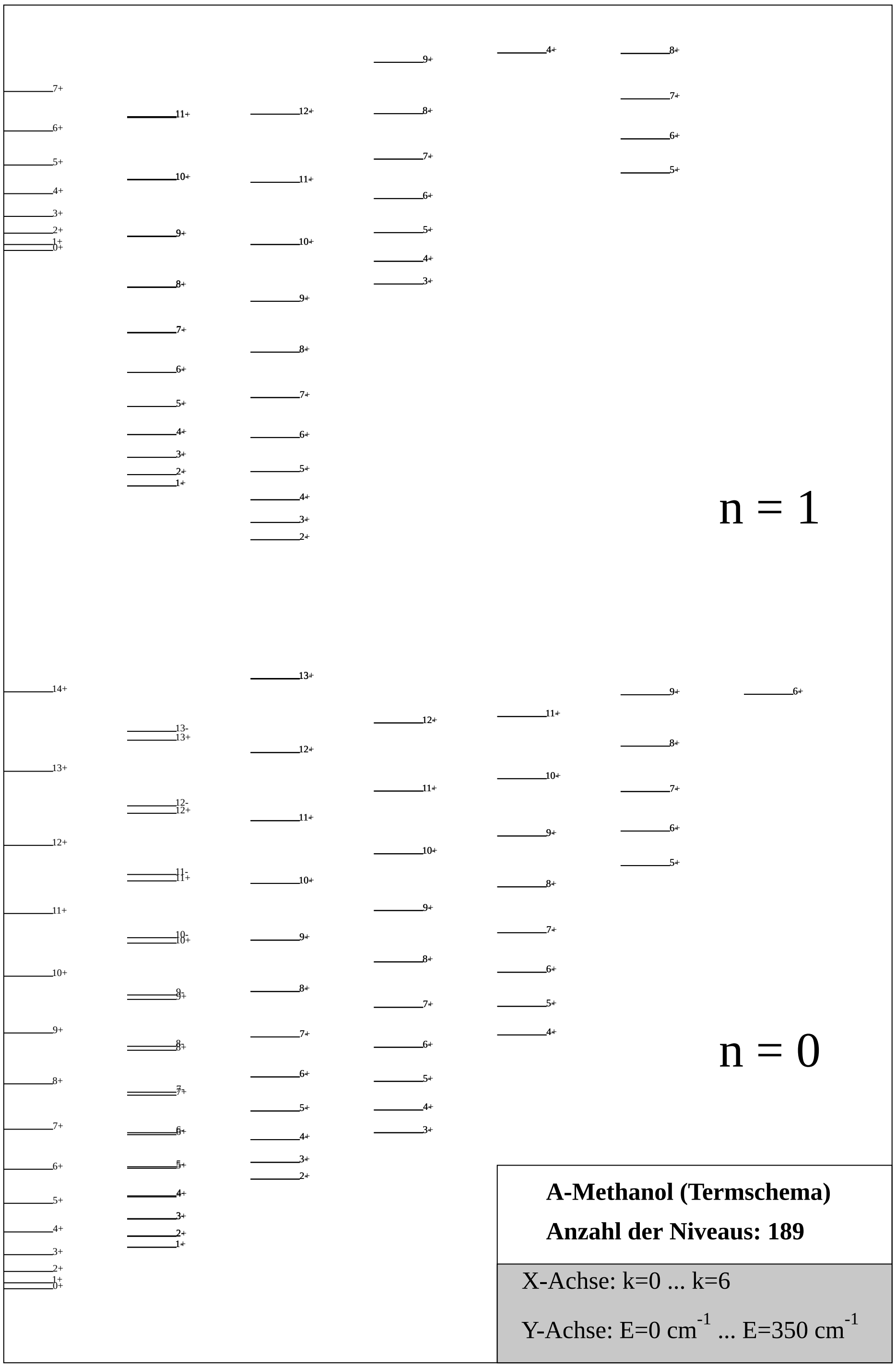

Abbildung 4.6: Termschema des CH_3OH-Moleküls mit Torsionszuständen $n = 0, 1$

oder bezogen auf die Frequenz ν:

$$\tau_\nu^{IR} = \tau_{30\mu m} \cdot \left(\frac{\nu}{\nu_{30\mu m}}\right)^{1.5} \tag{4.28}$$

Dabei ist $\nu_{30\mu m} = 10^{13}$. Um die Intensität der Infrarotquelle zu bestimmen,

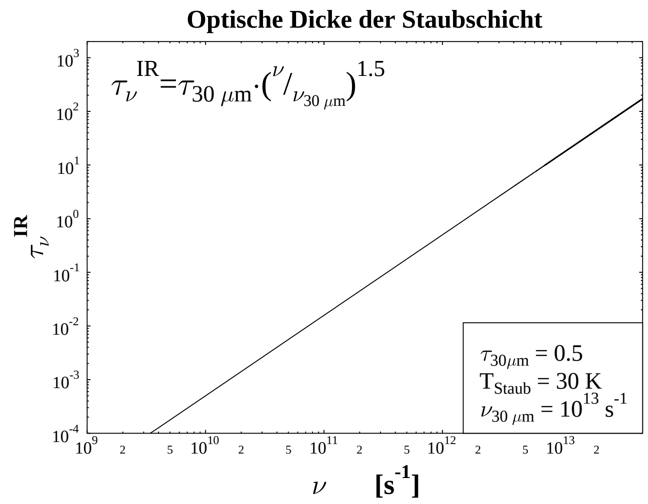

Abbildung 4.7: Verlauf der optische Dicke der Staubschicht

verfährt man analog zu Gleichung(4.22).

$$\begin{aligned} I_\nu^{IR} &= \overbrace{\left[B_\nu(T_{IR}) \cdot (1 - e^{-\tau_\nu^{IR}}) + B_\nu(T_{CMBR}) \cdot e^{-\tau_\nu^{IR}}\right] \cdot W}^{durchdringt\ den\ Staubmantel} \\ &+ \underbrace{(1 - W) \cdot B_\nu(T_{CMBR})}_{freier\ Raumwinkel} \end{aligned} \tag{4.29}$$

$$\tag{4.30}$$

Wie man sieht, ist jetzt die Strahlung der H II Region und ihre optische Dicke *nicht berücksichtigt*. Wir wählen diese Darstellung, um den Einfluß des Staubes isoliert betrachten zu können. Will man die H II Strahlung auch weiterhin berücksichtigen, so folgt einfach:

$$\begin{aligned} I_\nu^{IR+HII} &= \left[B_\nu(T_{HII}) \cdot (1 - e^{-\tau_\nu^{HII}}) \cdot e^{-\tau_\nu^{IR}} + B_\nu(T_{IR}) \cdot (1 - e^{-\tau_\nu^{IR}})\right. \\ &+ \left. B_\nu(T_{CMBR}) \cdot e^{-(\tau_\nu^{HII} + \tau_\nu^{IR})}\right] \cdot W \\ &+ (1 - W) \cdot B_\nu(T_{CMBR}) \end{aligned} \tag{4.31}$$

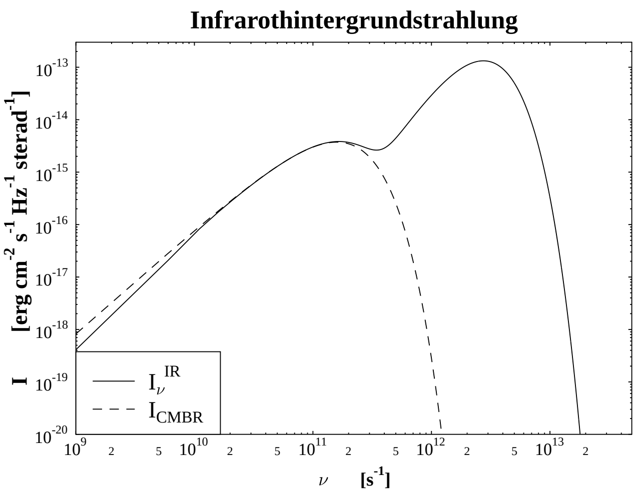

Abbildung 4.8: Intensität des Strahlungshintergrundes mit einer IR Region, bei $T_{IR} = 30\mathrm{K}$, $\tau_{30\mu m} = 0.5$ und $W = 0.5$

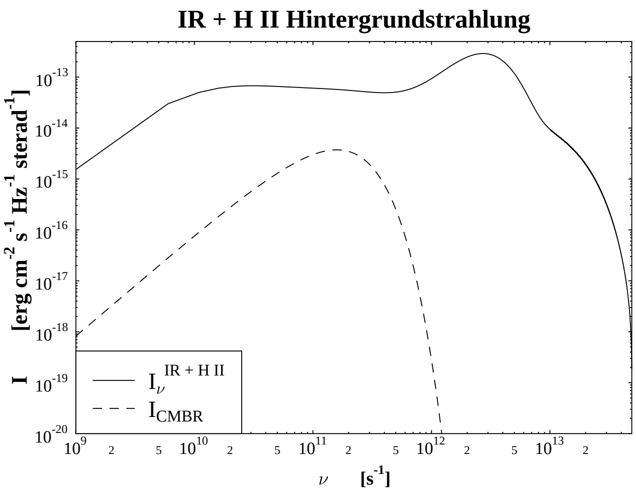

Abbildung 4.9: Intensität des Strahlungshintergrundes mit einer IR & H II Region, $T_{HII} = 10000\mathrm{K}$, $T_{IR} = 30\mathrm{K}$, $\tau_{30\mu m} = 0.5$ und $EM = 10^8 \mathrm{pc\ cm}^{-6}$, $W = 0.5$

4.3 Modellparameter

Durch die vielen Komponenten unseres Modells, haben wir eine große Zahl von freien Parametern, mit denen wir verschiedenste physikalische Zustände simulieren können.

4.3.1 Kinetische Temperatur der Gaswolke

Mit der kinetischen Temperatur legen wir fest, wie stark die Besetzungszahlen der Wolke durch Stoßpumpen beeinflußt werden. Je höher T_{kin} desto dominanter sind die Stoßbeiträge. Wir haben mit

$$T_{kin} \;=\; 20\,\mathrm{K} \ldots 50\,\mathrm{K} \ldots 100\,\mathrm{K} \tag{4.32}$$

gerechnet. Bei den Eckwerten haben wir uns an [Doe93] gehalten, um die Vergleichbarkeit zu wahren. Bei der Analyse der Daten zeigte sich, daß die Rechnungen mit 50 K keine neuen Erkenntnisse liefern. Daher haben wir uns bei der Darstellung der Ergebnisse auf die beiden Eckwerte 20 und 100 K beschränkt.

4.4 Säulendichte

Ein wichtiger Parameter, um eine Gaswolke physikalisch zu beschreiben, ist die Dichte der Wolke. Ein anderer ist die räumliche Ausdehnung der Wolke. Entsprechend unserer bisherigen Beschreibung müßten wir somit die Moleküldichte n_{CH_3OH} und den Radius R der Wolke jeweils spezifizieren. Beide Größen tauchen innerhalb des Produktes $R \cdot n_{CH_3OH} \cdot \frac{\nu}{\Delta\nu}$ in der optischen Dicke (Gleichung (4.12)) auf. Es liegt nahe, diese Parameter zu einem einzigen zusammenzufassen. Dazu definieren wir zuerst die Säulendichte. Die Säulendichte $N_{Molek\ddot{u}l}$ ist die Anzahldichte der Moleküle integriert entlang des Sehstrahls:

$$N_{CH_3OH} \;=\; \int_0^L n_{CH_3OH}\, dl \tag{4.33}$$

Innerhalb unserer *on-the-spot*-Approximation wird daraus:

$$N_{CH_3OH} \;=\; n_{CH_3OH} \cdot R \tag{4.34}$$

Ein bestimmter Wert für N_{CH_3OH} kann entweder eine *kleine, dichte* Wolke oder aber eine *große* Wolke mit *geringer* Dichte repräsentieren. Man muß sich auch immer klarmachen, daß ein Beobachter auf der Erde immer nur Aussagen über die Säulendichte einer Wolke machen kann, da sie die Projektion aller Teilchen auf eine Fläche beschreibt, und das ist genau das, was man von außen sehen kann; die räumliche Tiefe einer Wolke entzieht sich unserer genauen Kenntnis. Unser Parameterraum ist:

$$N_{CH_3OH} = 10^{11} \dots 10^{21} \mathrm{cm}^{-2} \tag{4.35}$$

Innerhalb unserer gesamten Formulierung tritt die Säulendichte immer zusammen mit der relativen Linienbreite auf. Wir können somit alle drei einzelnen Parameter zu einem einzigen zusammenfassen:

$$R \cdot n_{CH_3OH} \cdot \frac{\nu}{\Delta\nu} = N_{CH_3OH} \cdot \frac{\nu}{\Delta\nu} \tag{4.36}$$

$$\text{mit} \quad \frac{\nu}{\Delta\nu} = \frac{c}{3\frac{\mathrm{km}}{\mathrm{s}}} = 10^5 \tag{4.37}$$

4.4.1 Wasserstoffdichte

Die Wasserstoffmoleküle haben in unserem Modell die Funktion von Stoßpartnern für die Methanolmoleküle. In Gleichung (3.11) sieht man, daß die Wahrscheinlichkeit für einen Stoß proportional zur Wasserstoffdichte n_{H_2} steigt. Je höher die Dichte der Wasserstoffmoleküle ist, desto häufiger werden Stöße und desto geringer wird der Einfluß von Strahlungspumpen. Wir haben folgende Werte für n_{H_2} angesetzt:

$$n_{H_2} = 10^1 \dots 10^{12} \mathrm{cm}^{-3} \tag{4.38}$$

4.4.2 H II Region

Für die Charakterisierung der H II Region nehmen wir folgende Werte an:

$$\begin{aligned} T_{HII} &= 10000\mathrm{K} \\ W &= 0.5 \\ EM &= 10^8 \text{ pc cm}^{-6} \end{aligned} \tag{4.39}$$

4.4.3 Staubmantel

Der die H II Region umgebende Staubmantel wird von uns durch folgende Werte parametrisiert:

$$\begin{aligned}
\tau_{30\mu m} &= \tau_{Norm} = 0.5 \\
W &= 0.5 \\
T_{Staub} &= 30\mathrm{K}
\end{aligned} \tag{4.40}$$

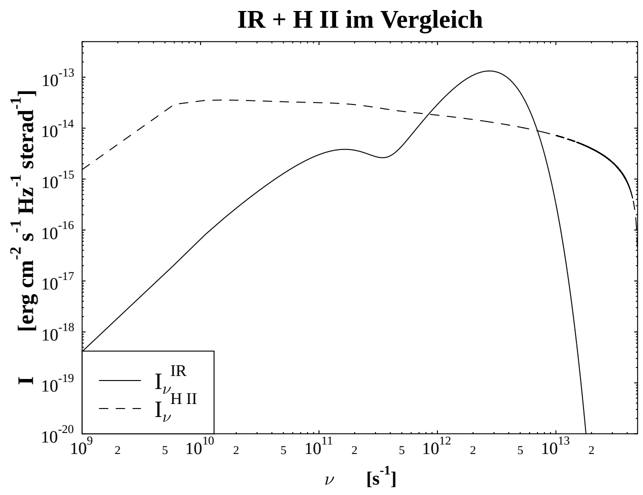

Abbildung 4.10: Vergleich der Intensitäten von IR & H II Region, $T_{HII} = 10000\mathrm{K}$, $T_{IR} = 30\mathrm{K}$, $\tau_{30\mu m} = 0.5, W = 0.5, EM = 10^8\mathrm{pc\ cm}^{-6}$

4.4.4 Linienüberlapp

Wir haben bei unseren Rechnungen insgesamt 75 überlappende Dubletts und zweimal Dreifachüberlapp. Geordnet nach Übergangsfrequenz handelt es sich dabei um die folgenden Linien. Die Notation entspricht:

$$J_{k\ K_k\pm}^{\ (n_k)} \rightarrow J_{i\ K_i\pm}^{\ (n_i)} \qquad \nu_{ik} = \ldots \mathrm{s}^{-1}$$

Dabei ist J der Gesamtdrehimpuls, K seine Projektion auf die Symmetrieachse und n die Torsionsquantenzahl. Der Index i bezeichnet das untere, k das obere Energieniveau.Die Frequenzen der überlappenden Linien erstrecken sich über einen Bereich von 144 GHz bis 9178 GHz, bzw. Wellenlängen von 2 mm bis 32μm.

$\boldsymbol{J}_{\ k\pm}^{\ (n_k)} \rightarrow \boldsymbol{J}_{\ i\pm}^{\ (n_i)}$	$\boldsymbol{J'}_{\ k'\pm}^{\ (n'_k)} \rightarrow \boldsymbol{J'}_{\ i'\pm}^{\ (n'_i)}$	$\boldsymbol{\nu_{ik}}$ [GHz]
$3_{\ 2-}^{\ (1)} \rightarrow 2_{\ 2-}^{\ (1)}$	$3_{\ 2+}^{\ (1)} \rightarrow 2_{\ 2+}^{\ (1)}$	$\nu_{ik} = 144.72\text{GHz}$
$4_{\ 3-}^{\ (0)} \rightarrow 3_{\ 3-}^{\ (0)}$	$4_{\ 3+}^{\ (0)} \rightarrow 3_{\ 3+}^{\ (0)}$	$\nu_{ik} = 193.47$
$5_{\ 3-}^{\ (1)} \rightarrow 4_{\ 3-}^{\ (1)}$	$5_{\ 2-}^{\ (1)} \rightarrow 4_{\ 2-}^{\ (1)}$	$\nu_{ik} = 241.20$
$5_{\ 4+}^{\ (0)} \rightarrow 4_{\ 4+}^{\ (0)}$	$5_{\ 4-}^{\ (0)} \rightarrow 4_{\ 4-}^{\ (0)}$	$\nu_{ik} = 241.80$
$5_{\ 3-}^{\ (0)} \rightarrow 4_{\ 3-}^{\ (0)}$	$5_{\ 3+}^{\ (0)} \rightarrow 4_{\ 3+}^{\ (0)}$	$\nu_{ik} = 241.83$
$6_{\ 5+}^{\ (1)} \rightarrow 5_{\ 5+}^{\ (1)}$	$6_{\ 5-}^{\ (1)} \rightarrow 5_{\ 5-}^{\ (1)}$	$\nu_{ik} = 289.34$
$6_{\ 5+}^{\ (0)} \rightarrow 5_{\ 5+}^{\ (0)}$	$6_{\ 5-}^{\ (0)} \rightarrow 5_{\ 5-}^{\ (0)}$	$\nu_{ik} = 290.14$
$6_{\ 4+}^{\ (0)} \rightarrow 5_{\ 4+}^{\ (0)}$	$6_{\ 4-}^{\ (0)} \rightarrow 5_{\ 4-}^{\ (0)}$	$\nu_{ik} = 290.16$
$7_{\ 5+}^{\ (1)} \rightarrow 6_{\ 5+}^{\ (1)}$	$7_{\ 5-}^{\ (1)} \rightarrow 6_{\ 5-}^{\ (1)}$	$\nu_{ik} = 337.55$
$7_{\ 5+}^{\ (0)} \rightarrow 6_{\ 5+}^{\ (0)}$	$7_{\ 5-}^{\ (0)} \rightarrow 6_{\ 5-}^{\ (0)}$	$\nu_{ik} = 338.48$
$8_{\ 5+}^{\ (1)} \rightarrow 7_{\ 5+}^{\ (1)}$	$8_{\ 5-}^{\ (1)} \rightarrow 7_{\ 5-}^{\ (1)}$	$\nu_{ik} = 385.74$
$8_{\ 3+}^{\ (1)} \rightarrow 7_{\ 3+}^{\ (1)}$	$8_{\ 3-}^{\ (1)} \rightarrow 7_{\ 3-}^{\ (1)}$	$\nu_{ik} = 385.88$
$8_{\ 5+}^{\ (0)} \rightarrow 7_{\ 5+}^{\ (0)}$	$8_{\ 5-}^{\ (0)} \rightarrow 7_{\ 5-}^{\ (0)}$	$\nu_{ik} = 386.81$
$8_{\ 4+}^{\ (0)} \rightarrow 7_{\ 4+}^{\ (0)}$	$8_{\ 4-}^{\ (0)} \rightarrow 7_{\ 4-}^{\ (0)}$	$\nu_{ik} = 386.85$
$4_{\ 4+}^{\ (0)} \rightarrow 5_{\ 3+}^{\ (0)}$	$4_{\ 4-}^{\ (0)} \rightarrow 5_{\ 3-}^{\ (0)}$	$\nu_{ik} = 394.58$
$9_{\ 5+}^{\ (0)} \rightarrow 8_{\ 5+}^{\ (0)}$	$9_{\ 5-}^{\ (0)} \rightarrow 8_{\ 5-}^{\ (0)}$	$\nu_{ik} = 435.14$
$9_{\ 4+}^{\ (0)} \rightarrow 8_{\ 4+}^{\ (0)}$	$9_{\ 4-}^{\ (0)} \rightarrow 8_{\ 4-}^{\ (0)}$	$\nu_{ik} = 435.20$
$10_{\ 4+}^{\ (0)} \rightarrow 9_{\ 4+}^{\ (0)}$	$10_{\ 4-}^{\ (0)} \rightarrow 9_{\ 4-}^{\ (0)}$	$\nu_{ik} = 483.53$

Tabelle 4.1: Liste aller überlappenden Linien mit $A_{ik} > 10^{-10}$

$J_{k\pm}^{(n_k)} \rightarrow J_{i\pm}^{(n_i)}$	$J'_{k'\pm}{}^{(n'_k)} \rightarrow J'_{i'\pm}{}^{(n'_i)}$	ν_{ik} [GHz]
$5_{4+}^{(0)} \rightarrow 5_{3-}^{(0)}$	$5_{4-}^{(0)} \rightarrow 5_{3+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 636.38$
$4_{4+}^{(0)} \rightarrow 4_{3-}^{(0)}$	$4_{4-}^{(0)} \rightarrow 4_{3+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 636.41$
$9_{5+}^{(0)} \rightarrow 10_{4+}^{(0)}$	$9_{5-}^{(0)} \rightarrow 10_{4-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 715.55$
$8_{5+}^{(0)} \rightarrow 9_{4+}^{(0)}$	$8_{5-}^{(0)} \rightarrow 9_{4-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 763.94$
$7_{5+}^{(0)} \rightarrow 8_{4+}^{(0)}$	$7_{5-}^{(0)} \rightarrow 8_{4-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 812.32$
$6_{6-}^{(0)} \rightarrow 7_{5-}^{(0)}$	$6_{6+}^{(0)} \rightarrow 7_{5+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 824.55$
$4_{4+}^{(0)} \rightarrow 3_{3+}^{(0)}$	$4_{4-}^{(0)} \rightarrow 3_{3-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 829.88$
$6_{5+}^{(0)} \rightarrow 7_{4+}^{(0)}$	$6_{5-}^{(0)} \rightarrow 7_{4-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 860.70$
$5_{4+}^{(0)} \rightarrow 4_{3+}^{(0)}$	$5_{4-}^{(0)} \rightarrow 4_{3-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 878.21$
$5_{5+}^{(0)} \rightarrow 6_{4+}^{(0)}$	$5_{5-}^{(0)} \rightarrow 6_{4-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 909.06$
$6_{4+}^{(0)} \rightarrow 5_{3+}^{(0)}$	$6_{4-}^{(0)} \rightarrow 5_{3-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 926.54$
$4_{4+}^{(1)} \rightarrow 5_{5+}^{(1)}$	$4_{4-}^{(1)} \rightarrow 5_{5-}^{(1)}$	$\nu_{ik} = 1019.91$
$6_{6+}^{(0)} \rightarrow 6_{5-}^{(0)}$	$6_{6-}^{(0)} \rightarrow 6_{5+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 1163.03$
$9_{5+}^{(0)} \rightarrow 9_{4-}^{(0)}$	$9_{5-}^{(0)} \rightarrow 9_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 1199.08$
$8_{5+}^{(0)} \rightarrow 8_{4-}^{(0)}$	$8_{5-}^{(0)} \rightarrow 8_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 1199.14$
$7_{5+}^{(0)} \rightarrow 7_{4-}^{(0)}$	$7_{5-}^{(0)} \rightarrow 7_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 1199.18$
$6_{5+}^{(0)} \rightarrow 6_{4-}^{(0)}$	$6_{5-}^{(0)} \rightarrow 6_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 1199.20$
$5_{5+}^{(0)} \rightarrow 5_{4-}^{(0)}$	$5_{5-}^{(0)} \rightarrow 5_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 1199.22$
$5_{5+}^{(0)} \rightarrow 4_{4+}^{(0)}$	$5_{5-}^{(0)} \rightarrow 4_{4-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 1441.02$
$6_{6-}^{(0)} \rightarrow 5_{5-}^{(0)}$	$6_{6+}^{(0)} \rightarrow 5_{5+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 1453.17$
$6_{5+}^{(0)} \rightarrow 5_{4+}^{(0)}$	$6_{5-}^{(0)} \rightarrow 5_{4-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 1489.60$
$7_{5+}^{(0)} \rightarrow 6_{4+}^{(0)}$	$7_{5-}^{(0)} \rightarrow 6_{4-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 1537.68$
$8_{5+}^{(0)} \rightarrow 7_{4+}^{(0)}$	$8_{5-}^{(0)} \rightarrow 7_{4-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 1585.99$
$9_{5+}^{(0)} \rightarrow 8_{4+}^{(0)}$	$9_{5-}^{(0)} \rightarrow 8_{4-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 1634.28$
$4_{4-}^{(1)} \rightarrow 4_{3+}^{(1)}$	$4_{4+}^{(1)} \rightarrow 4_{3-}^{(1)}$	$\nu_{ik} = 1770.28$
$4_{4-}^{(1)} \rightarrow 3_{3-}^{(1)}$	$4_{4+}^{(1)} \rightarrow 3_{3+}^{(1)}$	$\nu_{ik} = 1963.25$
$3_{3-}^{(1)} \rightarrow 3_{2+}^{(1)}$	$3_{3+}^{(1)} \rightarrow 3_{2-}^{(1)}$	$\nu_{ik} = 2030.28$
$4_{3-}^{(1)} \rightarrow 4_{2+}^{(1)}$	$5_{3+}^{(1)} \rightarrow 5_{2-}^{(1)}$	$\nu_{ik} = 2030.28$
$3_{3-}^{(1)} \rightarrow 2_{2-}^{(1)}$	$3_{3+}^{(1)} \rightarrow 2_{2+}^{(1)}$	$\nu_{ik} = 2175.00$
$4_{3+}^{(1)} \rightarrow 3_{2+}^{(1)}$	$4_{3-}^{(1)} \rightarrow 3_{2-}^{(1)}$	$\nu_{ik} = 2223.24$

Tabelle 4.2: Liste aller überlappenden Linien mit $A_{ik} > 10^{-10}$ (Fortsetzung)

$\boldsymbol{J_{k\pm}^{(n_k)} \to J_{i\pm}^{(n_i)}}$	$\boldsymbol{J'{}_{k'\pm}^{(n'_k)} \to J'{}_{i'\pm}^{(n'_i)}}$	$\boldsymbol{\nu_{ik}} =$ [GHz]
$6_{3+}^{(1)} \to 5_{2+}^{(1)}$	$6_{3-}^{(1)} \to 5_{2-}^{(1)}$	$\nu_{ik} = 2319.71$
$5_{5-}^{(1)} \to 6_{6+}^{(0)}$	$5_{5+}^{(1)} \to 6_{6-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 4434.55$
$6_{5+}^{(1)} \to 6_{6+}^{(0)}$	$6_{5-}^{(1)} \to 6_{6-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 4723.90$
$3_{2-}^{(1)} \to 4_{3+}^{(0)}$	$3_{2+}^{(1)} \to 4_{3-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 4991.54$
$2_{2-}^{(1)} \to 3_{3+}^{(0)}$	$2_{2+}^{(1)} \to 3_{3-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 5040.28$
$7_{5-}^{(1)} \to 6_{6+}^{(1)}$	$7_{5+}^{(1)} \to 6_{6-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 5061.44$
$3_{2+}^{(1)} \to 3_{3+}^{(0)}$	$3_{2-}^{(1)} \to 3_{3-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 5185.01$
$4_{3+}^{(1)} \to 5_{4-}^{(0)}$	$4_{3-}^{(1)} \to 5_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 6336.56$
$3_{3+}^{(1)} \to 4_{4-}^{(0)}$	$3_{3-}^{(1)} \to 4_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 6385.40$
$4_{3-}^{(1)} \to 4_{4-}^{(0)}$	$4_{3+}^{(1)} \to 4_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 6578.37$
$8_{5+}^{(1)} \to 9_{4-}^{(0)}$	$8_{5-}^{(1)} \to 9_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 6648.85$
$7_{5+}^{(1)} \to 8_{4-}^{(0)}$	$7_{5-}^{(1)} \to 8_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 6698.31$
$6_{5+}^{(1)} \to 7_{4-}^{(0)}$	$6_{5-}^{(1)} \to 7_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 6747.62$
$5_{5+}^{(1)} \to 6_{4-}^{(0)}$	$5_{5-}^{(1)} \to 6_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 6796.78$
$4_{4+}^{(1)} \to 5_{5-}^{(0)}$	$4_{4-}^{(1)} \to 5_{5+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 6907.63$
$8_{5-}^{(1)} \to 8_{4-}^{(0)}$	$8_{5+}^{(1)} \to 8_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 7084.05$
$7_{5-}^{(1)} \to 7_{4-}^{(0)}$	$7_{5+}^{(1)} \to 7_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 7085.16$
$6_{5-}^{(1)} \to 6_{4-}^{(0)}$	$6_{5+}^{(1)} \to 6_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 7086.12$
$5_{5-}^{(1)} \to 5_{4-}^{(0)}$	$5_{5+}^{(1)} \to 5_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 7086.94$
$5_{5+}^{(1)} \to 4_{4-}^{(0)}$	$5_{5-}^{(1)} \to 4_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 7328.74$
$6_{5+}^{(1)} \to 5_{4-}^{(0)}$	$6_{5-}^{(1)} \to 5_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 7376.28$
$7_{5+}^{(1)} \to 6_{4-}^{(0)}$	$7_{5-}^{(1)} \to 6_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 7423.67$
$8_{5+}^{(1)} \to 7_{4-}^{(0)}$	$8_{5-}^{(1)} \to 7_{4+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 7470.90$
$3_{3-}^{(1)} \to 2_{2+}^{(0)}$	$3_{3+}^{(1)} \to 2_{2-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 7612.31$
$4_{4-}^{(1)} \to 5_{3+}^{(0)}$	$4_{4+}^{(1)} \to 5_{3-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 8743.23$
$4_{4+}^{(1)} \to 4_{3-}^{(0)}$	$4_{4-}^{(1)} \to 4_{3+}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 8985.06$
$4_{4-}^{(1)} \to 3_{3+}^{(0)}$	$4_{4+}^{(1)} \to 3_{3-}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 9178.52$

Tabelle 4.3: Liste aller überlappenden Linien mit $A_{ik} > 10^{-10}$ (Fortsetzung)

$J_{k\pm}{}^{(n_k)} \rightarrow J_{i\pm}{}^{(n_i)}$	$\nu_{ik} =$ [GHz]
$4_{3-}{}^{(1)} \rightarrow 3_{3-}{}^{(1)}$	$\nu_{ik} = 192.96$
$4_{3+}{}^{(1)} \rightarrow 3_{3+}{}^{(1)}$	
$4_{2+}{}^{(1)} \rightarrow 3_{2+}{}^{(1)}$	
$7_{4+}{}^{(0)} \rightarrow 6_{4+}{}^{(0)}$	$\nu_{ik} = 338.51$
$7_{4-}{}^{(0)} \rightarrow 6_{4-}{}^{(0)}$	
$7_{2-}{}^{(0)} \rightarrow 6_{2-}{}^{(0)}$	

Tabelle 4.4: Linien mit Dreifachüberlapp

Kapitel 5

Lösungsverfahren

5.1 Vollständige Linearisierung

Fassen wir die letzten Kapitel kurz zusammen, so ergibt sich folgendes. Das Gleichungssystem, daß es zu lösen gilt hat die Form:

$$\sum_k n_k \cdot D_{ik} \;=\; 0 \quad mit \qquad D_{ik} \;=\; D_{ik}(n_i, n_k, n_l, n_m, n_o, n_p) \tag{5.1}$$

Um das Gleichungssystem (5.1) zu lösen bedient man sich einer iterativen Methode. Man gibt eine Anfangslösung des Gleichungssystems vor: $n_k^{t_0}$ und $D_{ik}^{t_0}$. Beginnend mit dieser Startnäherung, sucht man nun eine Lösung des Gleichungssystems $n_k^{t_1}$ und $D_{ik}^{t_1}$ mit:

$$\sum_k D_{ik}^{t_1} \cdot n_k^{t_1} \;=\; 0 \tag{5.2}$$

Dabei soll zwischen den Schritten t_0 und t_1 die Beziehung

$$\begin{aligned} n_k^{t_1} &= n_k^{t_0} + \delta n_k \\ D_{ik}^{t_1} &= D_{ik}^{t_0} + \delta D_{ik} \end{aligned} \tag{5.3}$$

gelten. Setzt man Gleichung(5.3) in das Gleichungssystem (5.2) ein, folgt:

$$\sum_k \left(D_{ik}^{t_0} + \delta D_{ik} \right) \cdot \left(n_k^{t_0} + \delta n_k \right) \;=\; 0 \tag{5.4}$$

Anschließend multipliziert man aus und erhält:

$$\sum_k \left(D_{ik}^{t_0} \cdot n_K^{t_0} + \delta D_{ik} \cdot n_k^{t_0} + D_{ik}^{t_0} \cdot \delta n_k + \underbrace{\delta D_{ik} \cdot \delta n_k}_{\approx 0} \right) \;=\; 0 \tag{5.5}$$

Wir vernachlässigen alle Terme höherer Ordnung und stellen die Gleichung um:

$$\sum_k \left(\delta D_{ik} \cdot n_k^{t_0} \; + \; D_{ik}^{t_0} \cdot \delta n_k \right) \; = \; - \sum_k D_{ik}^{t_0} \cdot n_k^{t_0} \tag{5.6}$$

Nun entwickeln wir δD_{ik} bis zu Termen erster Ordnung

$$\delta D_{ik} \; = \; \sum_j \frac{\partial D_{ik}^{t_0}}{\partial n_j^{t_0}} \cdot \delta n_j \tag{5.7}$$

$$\delta D_{ik} \cdot n_k^{t_0} \; = \; n_k^{t_0} \cdot \sum_j \frac{\partial D_{ik}^{t_0}}{\partial n_j^{t_0}} \cdot \delta n_j \tag{5.8}$$

Einsetzen in Gleichung (5.6) und umsortieren der Indizes liefert für den ersten Summanden

$$\sum_k n_k^{t_0} \cdot \sum_j \frac{\partial D_{ik}^{t_0}}{\partial n_j^{t_0}} \cdot \delta n_j \; = \; \sum_k \sum_l n_l^{t_0} \cdot \frac{\partial D_{il}^{t_0}}{\partial n_k^{t_0}} \cdot \delta n_k \tag{5.9}$$

Wie man sofort sieht, hängen nun beide Summanden nur noch von δn_k ab. Unser Gleichungssystem vereinfacht sich also zu

$$\sum_k \delta n_k \cdot \underbrace{\left(D_{ik}^{t_0} + \sum_l n_l^{t_0} \cdot \frac{\partial D_{il}^{t_0}}{\partial n_k^{t_0}} \right)}_{\tilde{D}_{ik}} \; = \; - \sum_k D_{ik}^{t_0} \cdot n_k^{t_0} \tag{5.10}$$

mit den Matrixelementen

$$\tilde{D}_{ik} \; = \; D_{ik}^{t_0} + \sum_l n_l^{t_0} \cdot \frac{\partial D_{il}^{t_0}}{\partial n_k^{t_0}} \tag{5.11}$$

Dabei haben die einzelnen Matrixelemente D_{ik} die Form:

$$D_{ik} \; = \; \frac{4\pi}{c} \cdot B_{ik} \cdot \left(\tilde{S}_{ik} \cdot \left(1 - e^{-\tau_{ik}}\right) \; + \; I_{bg} \cdot e^{-\tau_{ik}} \; - \; S_{ik} \right) \; + \; C_{ik} \tag{5.12}$$

und

$$D_{ii} \; = \; - \sum_{k \neq i} \left(\frac{4\pi}{c} \cdot B_{ki} \cdot \left(\tilde{S}_{ik} \cdot \left(1 - e^{-\tau_{ik}}\right) \; + \; I_{bg} \cdot e^{-\tau_{ik}} \; - \; S_{ik} \right) \; + \; C_{ki} \right) \tag{5.13}$$

Die Elemente $\tilde{S}_{ik}$ sind abhängig von dem Vorhandensein von Überlapp. Mit ihnen kann man die einzelnen D_{ik} folgendermaßen ausdrücken:

5.1.1 D_{ik} ohne Überlapp

Dieser Fall ist eigentlich trivial. Da keine Linien überlappen gilt:

$$\begin{aligned}\tilde{S}_{ik} &= S_{ik}\\ \tilde{J}_{ik} &= S_{ik}\cdot(1-e^{-\tau_{ik}}) + I_{bg}\cdot e^{-\tau_{ik}}\end{aligned}$$

Damit haben die Matrixelemente D_{ik} die Form:

$$\begin{aligned}D_{ik} &= \frac{4\cdot\pi}{c}\cdot B_{ik}\cdot(-S_{ik} + I_{bg})\cdot e^{-\tau_{ik}} + C_{ik}\\ D_{ii} &= -\sum_{i\neq k}\left(\frac{4\cdot\pi}{c}\cdot B_{ik}\cdot(-S_{ik} + I_{bg})\cdot e^{-\tau_{ik}} + C_{ik}\right)\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}\kappa_{ik} &= \frac{h\cdot\nu_{ik}}{c}\cdot\Phi(\nu_{ik})\cdot B_{ik}\cdot\Delta n_{ik}\\ \Delta n_{ik} &= \frac{g_k}{g_i}\cdot n_i - n_k\\ S_{ik} &= \frac{2\cdot h\cdot\nu_{ik}^3}{c^2}\cdot\frac{n_k}{\Delta n_{ik}}\\ \Phi(\nu_{ik})\cdot\nu_{ik} &= \frac{\nu_{ik}}{\Delta\nu_{ik}} = const\\ \tau_{ges} &= R\cdot\kappa_{ik} = \frac{R\cdot h\cdot\nu}{c\cdot\Delta\nu}\cdot n_{CH_3OH}\cdot B_{ik}\cdot\frac{\Delta n_{ik}}{n_{CH_3OH}}\end{aligned}\tag{5.14}$$

Jetzt kann man D_{ik} als reine Funktion von n_k und n_i darstellen. Bei der optischen Dicke τ_{ges} und Δn_{ik} verzichten wir aus Gründen der Übersichtlichkeit auf das direkte Einsetzen. Ihre Abhängigkeit von den Besetzungszahlen ist oben gezeigt worden.

$$\begin{aligned}D_{ik} &= \frac{4\cdot\pi}{c}\cdot B_{ik}\cdot\left(-\frac{2\cdot h\cdot\nu_{ik}^3}{c^2}\cdot\frac{n_k}{\Delta n_{ik}} + I_{bg}\right)\cdot e^{-\tau_{ges}} + C_{ik}\\ D_{ii} &= -\sum_{i\neq k}\left(\frac{4\cdot\pi}{c}\cdot B_{ki}\cdot\left(-\frac{2\cdot h\cdot\nu_{ik}^3}{c^2}\cdot\frac{n_k}{\Delta n_{ik}} + I_{bg}\right)\cdot e^{-\tau_{ges}} + C_{ki}\right)\end{aligned}$$

5.1.2 D_{ik} mit Zweierüberlapp

Betrachten wir die Linie $k\to i$, die mit der Linie $m\to l$ überlappt, so sind an diesem Übergang die Niveaus i,k,l,m beteiligt. Im weiteren geben wir nur noch die explizite Gestalt von D_{ik} an, da sich D_{ii} leicht durch $-\sum_{i \neq k} D_{ki}$ herleiten läßt. Wie in Gleichung (2.54) gezeigt, gilt:

$$
\begin{aligned}
\tilde{S}_{ik} &= S_{ik} + \frac{\kappa_{lm} \cdot (S_{lm} - S_{ik})}{\kappa_{ik} + \kappa_{lm}} \\
\tilde{J}_{ik} &= S_{ik} \cdot \left(1 - e^{-\tau_{ges}}\right) + I_{bg} \cdot e^{-\tau_{ges}} + \frac{\kappa_{lm} \cdot (S_{lm} - S_{ik})}{\kappa_{ik} + \kappa_{lm}} \cdot \left(1 - e^{-\tau_{ges}}\right)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
D_{ik} &= \frac{4 \cdot \pi}{c} \cdot B_{ik} \cdot \left[-S_{ik} \cdot \left(e^{-\tau_{ges}} + \frac{\kappa_{lm}}{\kappa_{ik} + \kappa_{lm}} \cdot \left(1 - e^{-\tau_{ges}}\right) \right) \right. \\
&+ \left. \frac{\kappa_{lm}}{\kappa_{ik} + \kappa_{lm}} \cdot S_{lm} \cdot \left(1 - e^{-\tau_{ges}}\right) + I_{bg} \cdot e^{-\tau_{ges}} \right] + C_{ik}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\kappa_{ik} &= \frac{h \cdot \nu_{ik}}{c} \cdot \Phi(\nu_{ik}) \cdot B_{ik} \cdot \Delta n_{ik} \\
\kappa_{lm} &= \frac{h \cdot \nu_{lm}}{c} \cdot \Phi(\nu_{lm}) \cdot B_{lm} \cdot \Delta n_{lm}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Delta n_{ik} &= \frac{g_k}{g_i} \cdot n_i - n_k \\
\Delta n_{lm} &= \frac{g_m}{g_l} \cdot n_l - n_m
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
S_{ik} &= \frac{2 \cdot h \cdot \nu_{ik}^3}{c^2} \cdot \frac{n_k}{\Delta n_{ik}} \\
S_{lm} &= \frac{2 \cdot h \cdot \nu_{lm}^3}{c^2} \cdot \frac{n_m}{\Delta n_{lm}}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Phi(\nu_{ik}) \cdot \nu_{ik} &= \frac{\nu_{ik}}{\Delta \nu_{ik}} = \Phi(\nu_{lm}) \cdot \nu_{lm} = const \\
\tau_{ges} &= R \cdot (\kappa_{ik} + \kappa_{lm}) \\
&= \frac{R \cdot h}{c} \cdot \frac{\nu}{\Delta \nu} \cdot (B_{ik} \cdot \Delta n_{ik} + B_{lm} \cdot \Delta n_{lm}) \qquad (5.15)
\end{aligned}
$$

Setzt man nun wie oben die Definitionen für die Quellfunktion und den Absorptionskoeffizienten ein, und macht davon Gebrauch, daß $\nu_{ik} = \nu_{lm}$, können wir D_{ik} wieder schreiben, als:

$$D_{ik} = \frac{4\pi}{c} \cdot B_{ik} \cdot I_{bg} \cdot e^{-\tau_{ges}} + C_{ik} + \frac{8\pi \cdot h \cdot \nu_{ik}^3}{c^3} \cdot B_{ik} \cdot \left[\frac{-\frac{n_k}{\Delta n_{ik}} \cdot (B_{ik} \cdot \Delta n_{ik} \cdot e^{-\tau_{ges}} + B_{lm} \cdot \Delta n_{lm}) + B_{lm} \cdot n_m \cdot (1 - e^{-\tau_{ges}})}{B_{ik} \cdot \Delta n_{ik} + B_{lm} \cdot \Delta n_{lm}} \right]$$

Das Matrixelement D_{lm} erhält man einfach durch zyklisches Vertauschen der Indizes $i \to l$; $k \to m$.

5.1.3 D_{ik} mit Dreierüberlapp

$$\begin{aligned} D_{ik} = {} & \frac{4\pi}{c} \cdot B_{ik} \cdot I_{bg} \cdot e^{-\tau_{ges}} + C_{ik} + \frac{8\pi \cdot h \cdot \nu_{ik}^3}{c^3} \cdot B_{ik} \cdot \\ & \cdot \left[\frac{-\frac{n_k}{\Delta n_{ik}} \cdot (B_{ik} \cdot \Delta n_{ik} \cdot e^{-\tau_{ges}} + B_{lm} \cdot \Delta n_{lm} + B_{op} \cdot \Delta n_{op})}{B_{ik} \cdot \Delta n_{ik} + B_{lm} \cdot \Delta n_{lm} + B_{op} \cdot \Delta n_{op}} + \right. \\ & \left. + \frac{(B_{lm} \cdot n_m + B_{op} \cdot n_p \cdot) \cdot (1 - e^{-\tau_{ges}})}{B_{ik} \cdot \Delta n_{ik} + B_{lm} \cdot \Delta n_{lm} + B_{op} \cdot \Delta n_{op}} \right] \end{aligned}$$

Die allgemeine Beziehung für n-fachen Überlapp lautet somit:

$$\begin{aligned} D_{ik} = {} & \frac{4\pi}{c} \cdot B_{ik} \cdot I_{bg} \cdot e^{-\tau_{ges}} + C_{ik} + \frac{8\pi \cdot h \cdot \nu_{ik}^3}{c^3} \cdot B_{ik} \cdot \\ & \cdot \left[\frac{-\frac{n_k}{\Delta n_{ik}} \cdot (B_{ik} \cdot \Delta n_{ik} \cdot e^{-\tau_{ges}} + \sum_x B_x \cdot \Delta n_x)}{\kappa_{ges}} + \right. \\ & \left. + \frac{(1 - e^{-\tau_{ges}}) \cdot \sum_x B_x \cdot n_{x,upper}}{\kappa_{ges}} \right] \end{aligned}$$

Hierbei bedeutet x alle Linien, die mit $i \to k$ überlappen, und $n_{x,upper}$ das jeweils obere Energieniveau der Linie x. Die gesamte optische Dicke ist

$$\tau_{ges} = R \cdot \left(\kappa_{ik} + \sum_x \kappa_x \right)$$

Alle oben angeführten Matrixelemente D_{ik} sind zur vollständigen Linearisierung, nach den entsprechenden Besetzungszahlen abzuleiten. Aus den Matrixelementen bei Überlapp kann mein leicht ersehen, daß sie von den Besetzungszahlen aller beteiligter Niveaus abhängen.

5.2 Matrixelemente $\tilde{D}_{ik}$

Zur besseren Übersicht wollen wir nun kurz auf die explizite Gestalt der Matrixelemente eingehen. Dabei unterscheiden wir die drei Fälle:

5.2.1 Matrixelemente ohne Überlapp

Betrachtet werden alle Matrixelemente, die nötig sind, um alle Wechselwirkungen eines oberen Niveaus k mit einem unteren Niveau i zu beschreiben. Überlapp findet nicht statt. Unter diesen Voraussetzungen findet man für eine Linie eine 2x2-Matrix:

$$\begin{matrix} \tilde{D}_{ii} & \tilde{D}_{ik} \\ \tilde{D}_{ki} & \tilde{D}_{kk} \end{matrix} \tag{5.16}$$

Die Diagonalelemente beschreiben die Übergangsraten der Zustände, die von dem entsprechenden Niveau in alle anderen Zustände übergehen, d.h.

$$D_{ii} \;=\; -\sum_{j \neq i} D_{ji} \tag{5.17}$$

Alle anderen Elemente beschreiben die Kopplung aller *direkt* am Übergang beteiligten Niveaus. Wir erinnern uns daran, daß alle Summationsindizes nur über die an dem einen betrachteten Übergang beteiligten Niveaus laufen. In dem Fall ohne Überlapp heißt das, wir summieren über i und k:

$$\tilde{D}_{ik} \;=\; D_{ik}^{t_0} + \frac{\partial D_{ik}}{\partial n_k} \cdot n_k^{t_0} + \frac{\partial D_{ii}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0} \tag{5.18}$$

Mit Gleichung (5.17) folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{ii}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0} \;&=\; \sum_{j \neq i} -\frac{\partial D_{ji}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0} \\ &=\; -\frac{\partial D_{ki}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0} \end{aligned} \tag{5.19}$$

5.2.2 Matrixelemente mit Doppelüberlapp

Berücksichtigen wir nun den Überlapp von zwei Linien, so müssen wir natürlich berücksichtigen, daß die Übergangsraten für die Linie $k \rightarrow i$ jetzt auch von den Besetzungszahlen der überlappenden Linie $m \rightarrow l$ abhängen, und ebenso umgekehrt. Das heißt, die Summation in Gleichung (5.11) läuft jetzt über i, k, l, m. Aus der 2x2-Matrix im Fall ohne Überlapp wird nun eine 4x4-Matrix:

$$
\begin{matrix}
\tilde{D}_{ii} & \tilde{D}_{ik} & \tilde{D}_{il} & \tilde{D}_{im} \\
\tilde{D}_{ki} & \tilde{D}_{kk} & \tilde{D}_{kl} & \tilde{D}_{km} \\
\tilde{D}_{li} & \tilde{D}_{lk} & \tilde{D}_{ll} & \tilde{D}_{lm} \\
\tilde{D}_{mi} & \tilde{D}_{mk} & \tilde{D}_{ml} & \tilde{D}_{mm}
\end{matrix}
\qquad (5.20)
$$

Wir behandeln wieder ein Matrixelement exemplarisch. Alle anderen ergeben sich analog.

$$
\tilde{D}_{ik} = D_{ik}^{t_0} + \underbrace{\frac{\partial D_{ik}}{\partial n_k} \cdot n_k^{t_0} + \frac{\partial D_{il}}{\partial n_k} \cdot n_l^{t_0} + \frac{\partial D_{im}}{\partial n_k} \cdot n_m^{t_0}}_{Zufluß} + \underbrace{\frac{\partial D_{ii}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0}}_{Abfluß}
$$

mit

$$
\frac{\partial D_{ii}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0} = -\frac{\partial D_{ki}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0} - \frac{\partial D_{ii}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0} - \frac{\partial D_{mi}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0}
$$

Eingesetzt sieht man schön die Zerlegung in Anteile, die die Übergangsraten durch den Überlapp erhöhen (positives Vorzeichen) und Anteile, die die Raten reduzieren (negatives Vorzeichen):

$$
\begin{aligned}
\tilde{D}_{ik} = D_{ik}^{t_0} &+ \frac{\partial D_{ik}}{\partial n_k} \cdot n_k^{t_0} + \frac{\partial D_{il}}{\partial n_k} \cdot n_l^{t_0} + \frac{\partial D_{im}}{\partial n_k} \cdot n_m^{t_0} \\
&- \frac{\partial D_{ki}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0} - \frac{\partial D_{li}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0} - \frac{\partial D_{mi}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0}
\end{aligned}
\qquad (5.21)
$$

5.2.3 Matrixelemente bei Dreifachüberlapp

Wie stellen nur kurz die Matrix und ein Matrixelement vor. Alle anderen Elemente kann man sich durch analoges Vorgehen und zyklische Indexvertauschung ermitteln.

$$\begin{array}{cccccc}
\tilde{D}_{ii} & \tilde{D}_{ik} & \tilde{D}_{il} & \tilde{D}_{im} & \tilde{D}_{io} & \tilde{D}_{ip} \\
\tilde{D}_{ki} & \tilde{D}_{kk} & \tilde{D}_{kl} & \tilde{D}_{km} & \tilde{D}_{ko} & \tilde{D}_{kp} \\
\tilde{D}_{li} & \tilde{D}_{lk} & \tilde{D}_{ll} & \tilde{D}_{lm} & \tilde{D}_{lo} & \tilde{D}_{lp} \\
\tilde{D}_{mi} & \tilde{D}_{mk} & \tilde{D}_{ml} & \tilde{D}_{mm} & \tilde{D}_{mo} & \tilde{D}_{mp} \\
\tilde{D}_{oi} & \tilde{D}_{ok} & \tilde{D}_{ol} & \tilde{D}_{om} & \tilde{D}_{oo} & \tilde{D}_{op} \\
\tilde{D}_{pi} & \tilde{D}_{pk} & \tilde{D}_{pl} & \tilde{D}_{pm} & \tilde{D}_{po} & \tilde{D}_{pp}
\end{array}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{D}_{ik} = D_{ik}^{t_0} &+ \frac{\partial D_{ik}}{\partial n_k} \cdot n_k^{t_0} - \frac{\partial D_{ki}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0} \\
&+ \frac{\partial D_{il}}{\partial n_k} \cdot n_l^{t_0} + \frac{\partial D_{im}}{\partial n_k} \cdot n_m^{t_0} - \frac{\partial D_{li}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0} - \frac{\partial D_{mi}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0} \\
&+ \frac{\partial D_{io}}{\partial n_k} \cdot n_o^{t_0} + \frac{\partial D_{ip}}{\partial n_k} \cdot n_p^{t_0} - \frac{\partial D_{oi}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0} - \frac{\partial D_{pi}}{\partial n_k} \cdot n_i^{t_0}
\end{aligned}$$

Um das Gleichungssystem (5.10) endgültig lösen zu können, müssen wir noch die Zusatzbedingung

$$\sum_i n_i = n_{CH_3OH} \tag{5.22}$$

einführen. Daraus können wir die Normierungsbedingung ableiten:

$$\sum_i \delta n_i = 0 \tag{5.23}$$

5.3 Startnäherung - Local Thermal Equilibrium

Mit Hilfe der Normierungsbedingung und einer *sinnvollen* Anfangslösung wird Gleichung (5.10) gelöst. Man erhält nun eine Lösung, die erneut als Startnäherung benutzt wird, um das Gleichungssystem zu lösen. Diese Iteration führt man solange durch, bis δn_K genügend klein geworden ist. Genauere Erläuterungen findet man in [Alb81]. Von der Anfangsbedingung hängt sehr stark ab, wie oft wir das Gleichungssystem iterieren müssen, um eine Lösung zu erhalten. Wenn unsere Startnäherung sehr nahe an der wirklichen Lösung ist, konvergiert das Modell sehr schnell. Nachdem wir nun eine Lösung gefunden haben, variieren wir einen Parameter (z.B. die Säulendichte) und iterieren erneut, wobei wir unsere vorher gefundene Lösung als Startnäherung verwenden. Eine Möglichkeit, eine Startlösung zu gewinnen, ist die, bei hohen Säulendichten mit den Rechnungen zu beginnen. In diesem Fall dominiert Stoßanregung bei der Besetzung der Niveaus und man erhält eine Boltzmann-Statistik.

$$\frac{n_k}{n_i} = \frac{g_k}{g_i} \cdot e^{-\frac{\Delta E}{k_B \cdot T_{kin}}} \quad , \quad i < k \tag{5.24}$$

Dabei wird der Zustand der gesamten Wolke durch eine einzige Temperatur T_{kin} beschrieben. Um das näher zu erläutern betrachten wir erneut die Gleichungen (2.37). Für den Fall großer Säulendichten, folgt eine große optische Dicke. Dadurch werden alle Terme, die mit $e^{-\tau}$ multipliziert werden, sehr klein. Wie in diesem Kapitel gezeigt, bedeutet das $\tilde{J} \approx S_{ik}$. Wenn man das in Gleichung (2.37) einsetzt, bleiben nur noch die Stoßterme übrig und die Besetzungszahlen folgen der Boltzmann-Verteilung.

Eine weitere Möglichkeit, eine Startnäherung zu erhalten, ist bei sehr kleinen Säulendichten zu beginnen. In diesem Fall wird die optische Dicke $\tau \approx 0$ und es folgt $\tilde{J} \approx I_{bg}$, womit die Gleichungen (2.37) linear werden. Wir haben in unseren Rechnungen bei hohen Säulendichten begonnen.

Kapitel 6

Ergebnisse

Die ersten Methanolmaser wurden 1971 von *Barret,Schwartz und Waters* im Orionnebel gefunden. Dabei handelte es sich um Emissionen der $J_2 \rightarrow J_1$ Serie des E-Methanols. Diese Maser sind sehr häufig anzutreffen. Im Laufe der Zeit fanden sich immer mehr verschiedene Maser, und 1987 unterschied man nach *Batrla* 2 verschiedene Klassen von Methanolmasern:

- **Klasse I Maser** Zu ihnen zählt zum Beispiel die beim E-Methanol zuerst gefundene Maser-Serie $J_2 \rightarrow J_1$ oder die $9_0 \rightarrow 9_1 A^+$; $8_0 \rightarrow 7_1 A^+$; $7_0 \rightarrow 6_1 A^+$ Maser. Sie werden im Orionnebel, Sgr B2 und verschiedenen anderen galaktischen Molekülwolken gefunden, wo sie jeweils getrennt von kompakten H II-Regionen, starken IR-Quellen und OH oder H_2O-Maser auftreten [Cra92]. Klasse I-Maser können häufig begleitet werden von in Absorption auftretenden Linien, wie zum Beispiel $2_0 \rightarrow 3_{-1}E$ und $5_1 \rightarrow 6_0 A^+$.

- **Klasse II Maser** Sie beinhalten zum Beispiel die Übergänge $2_1 \rightarrow 3_0 E$; $7_{-2} \rightarrow 8_{-1} E$ und die Linien $9_2 \rightarrow 10_1 A^+$; $6_2 \rightarrow 5_3 A^+$; $5_1 \rightarrow 6_0 A^+$. Man findet Klasse II-Maser, gelegentlich begleitet von Linien der Klasse I-Maser in Absorption, in Sternentstehungsgebieten wie W3(OH) und NGC 6334, wo sie in unmittelbaren Nähe von kompakten H II-Regionen und OH/H_2O-Masern auftreten. In der Nähe von OH/IR Sternen sind sie nicht anzutreffen.

Bei unseren Rechnungen haben wir zuerst ohne torsionsangeregte Zustände und damit natürlich auch ohne Infrarotquellen gerechnet. Damit ist es uns schon sehr gut gelungen, die gefundenen starken Maserlinien zu reproduzieren. Da sich eine große Zahl dieser Maser, bevorzugt allerdings die Klasse II-Maser in der Nähe von Infrarotquellen finden, beschlossen wir, mit Infrarotstrahlung (durch unsere Staubhülle) zu pumpen. Dazu war es nötig die unteren Rotationsniveaus des ersten angeregten Torsionszustandes zu berücksichtigen. Es zeigte sich dabei, daß allein die Erweiterung des Termschemas bereits zu quantitativ *und* qualitativ unterschiedlichen Ergebnissen führte, **ohne** daß wir eine Infrarotquelle in unsere Rechnungen einbezogen. Wir werden deshalb an nur einem Beispiel, die Rechnungen ohne torsionsangeregten Zustände vorstellen, und im direkten Vergleich zeigen, daß es immer nötig ist, mit erweitertem Termschema zu rechnen. Im weiteren Verlauf werden wir auch nur noch Ergebnisse der erweiterten Rechnungen vorstellen.

Um eine anschauliche Begründung für das Verwenden des erweiterten Termschemas zu liefern, schauen wir uns Figur (6.2 und 6.1) an. Hier haben wir am Beispiel zweier Linien die unterschiedlichen Ergebnisse für die optische Dicke bei Temperaturen von $T = 20$ K und $T = 100$ K zusammengestellt. Die oberen Diagramme sind mit dem alten, nicht erweiterten Termschema erstellt worden. Aufgetragen sind in logarithmischem Maßstab die Wasserstoffdichte n_{H_2} auf der Abszisse und die Säulendichte N_{CH_3OH} auf der Ordinate. Die Konturlinien entsprechen Gebieten konstanter optischer Dicke, wobei wir uns auf die Konturen $\tau \leq 0$ beschränken. Bei $T = 20$ K ist zwischen den einzelnen Konturplots kein wesentlicher Unterschied zu finden. Das ist vernünftig, da bei solch niedrigen Temperaturen die energetisch höher liegenden Niveaus, also auch die Rotationsniveaus des ersten torsionsangeregten Zustandes, schwach besetzt sind und somit auch keine wesentlichen Beiträge liefern können. Beispielsweise liegt das unterste Rotationsniveau des ersten Torsionsangeregten Zustandes 2^1_{2-} bei $E = 212.4\text{cm}^{-1}$, das höchste betrachtete torsionsangeregte Niveau 4^1_{4+} bei $E = 350.5\text{cm}^{-1}$. Das oberste Rotationsniveau des Torsionsgrundzustandes 13^0_{2+} liegt bei $E = 173.1\text{cm}^{-1}$. Alle Angaben sind bezogen auf den Grundzustand 0^0_{0+} bei $E = 0\text{cm}^{-1}$. Bei einer Temperatur von 20 Kelvin ist die Besetzung des Zustandes 4^1_{4+} relativ zum Grundzustand $\approx 1 \cdot 10^{-10}$, die des Niveaus 13^0_{2+} ist $\approx 1 \cdot 10^{-4}$. Die Besetzung ist so gering, daß die Beiträge der energetisch höher liegenden Niveaus ohne weiteres vernachlässigt werden können.

Bei $T = 100$ K ist die Situation eine völlig andere. Die linke Linie ist der Übergang $5_{1+} \rightarrow 6_{0+}$. Es handelt sich dabei um einen Klasse II-Maser. Man sieht deutlich, daß das Inversionsgebiet deutlich negativere optische Dicken aufweist, und zwar in einem Parameterbereich, der ohne torsionsangeregte

Zustände kaum, oder gar nicht invertiert ist. Bei dem Übergang $4_{3-} \rightarrow 5_{2-}$ ist der Unterschied sogar noch gravierender. Ohne torsionsangeregte Zustände ist diese Linie kaum invertiert. Zieht man die torsionsangeregten Zustände zur Rechnung hinzu, so wird die Inversion sehr stark, und wir haben einen starken Maser. Die Besetzung des obersten torsionsangeregten Zustandes relativ zum Grundzustand liegt bei 5.8%, die des untersten torsionsangeregten Zustandes bei 23.5% gegenüber dem Grundzustand. Es ist offensichtlich, daß bei der Analyse des Temperaturverhaltens der Molekülwolke die unteren Rotationsniveaus des ersten torsionsangeregten Zustandes berücksichtigt werden müssen. Auch in den folgenden Abschnitten, wird dies deutlich. Berücksichtigt man nun noch einen externen Strahlungshintergrund, so ist das erweiterte Termschema eine wesentliche Voraussetzung zur vollständigen Beschreibung der Anregungsmechanismen unserer Maser.

Es sei nochmal darauf hingewiesen, daß die beiden Beispiele ohne Infrarot- oder H II-Region gerechnet wurden. Es ist ein Effekt, der schon auftritt, wenn man nur das Termschema erweitert. Wir werden später noch detailliert auf das Verhalten dieser Maser eingehen. Die Darstellung soll erst einmal den qualitativen Unterschied verdeutlichen. Aus diesem Grund betrachten wir von nun an nur noch Rechnungen, die wir mit einem erweiterten Termschema durchgeführt haben, da sie eine realitätsnähere Modellierung darstellen, deren Effekte offenbar nicht zu vernachlässigen sind. Wir werden nun auf einige gefundene Maser im Detail eingehen. Dabei treffen wir die bereits erwähnte Unterscheidung in Klasse I und Klasse II-Maser.

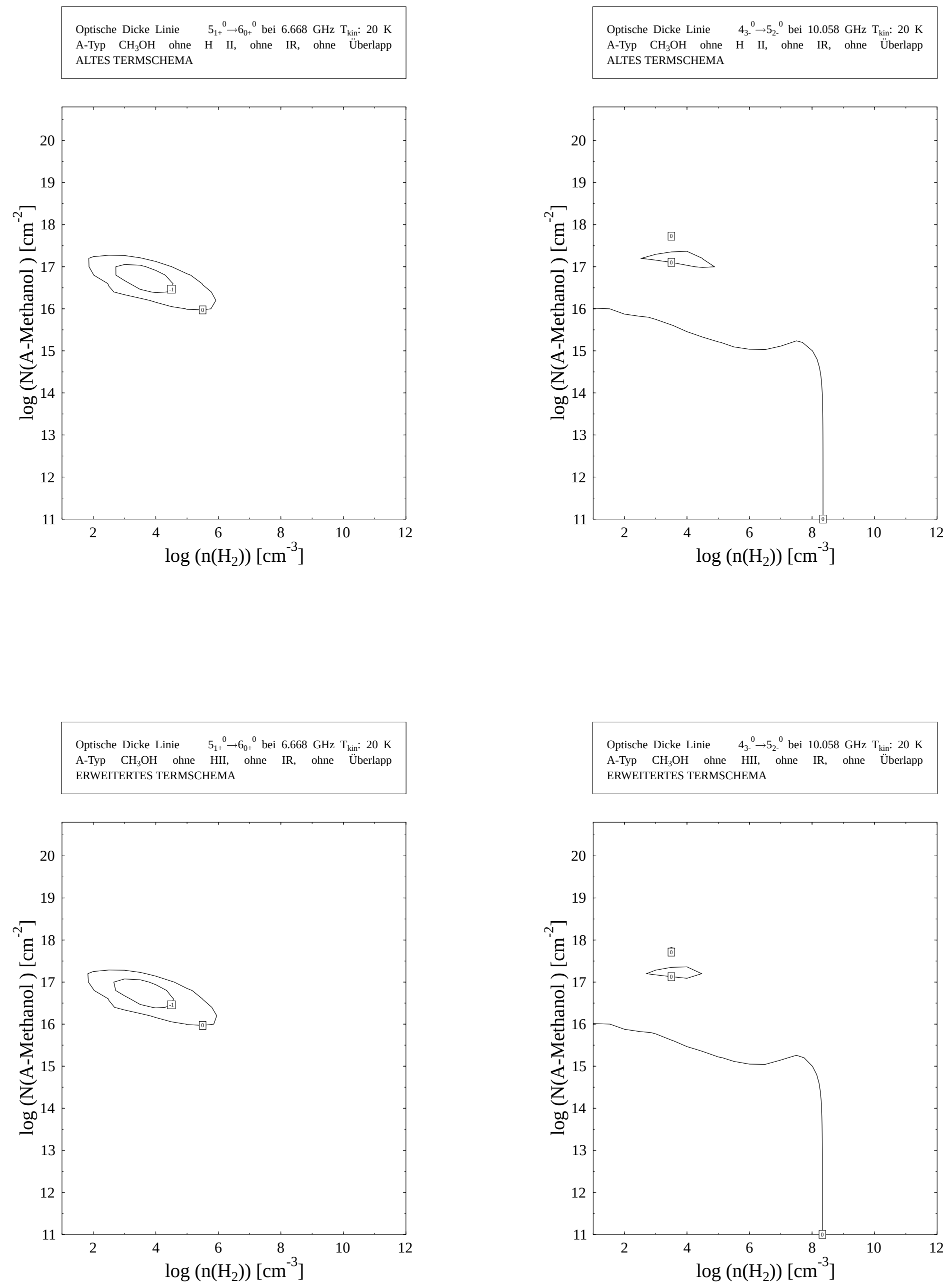

Abbildung 6.1: Vergleich der optischen Dicken bei altem (oben) und neuem (unten) Termschema bei $T = 20$ K (Konturen: $\tau = 0, -1$)

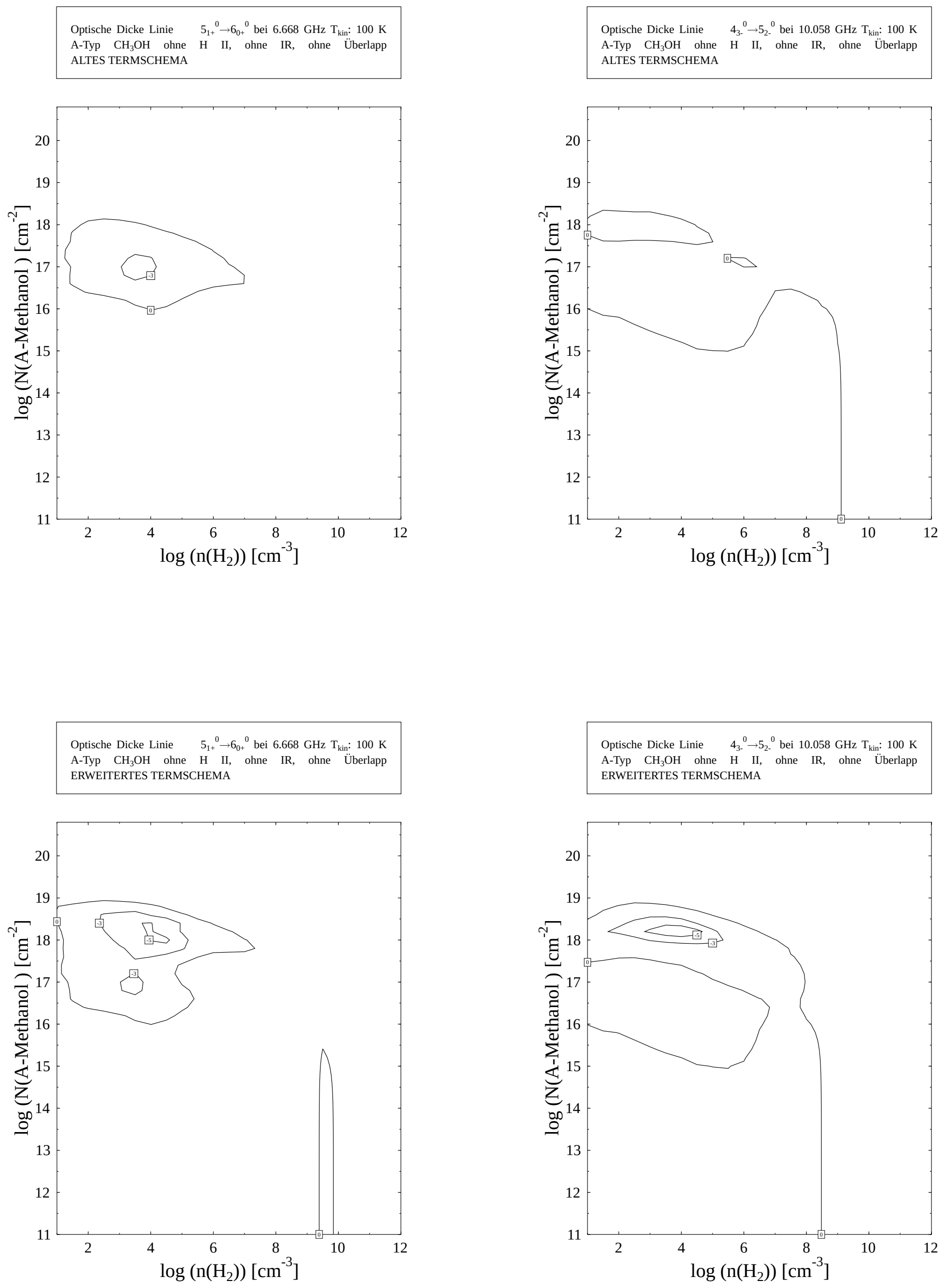

Abbildung 6.2: Vergleich der optischen Dicken bei altem (oben) und neuem (unten) Termschema bei $T = 100$ K (Konturen: $\tau = 0, -3, -5$)

6.1 Klasse I-Maser

Die ursprüngliche Klassifikation der Klasse I-Maserquellen richtete sich nach dem Auftreten der $J_2 \rightarrow J_1$ Serie der E-Methanol Maser. Erst später begann man damit, diese Klassifikation nach den lokal herrschenden physikalischen Bedingungen auszurichten. Entsprechend diesem Verständnis, sind Klasse I-Maser solche, die in einer Entfernung von bis zu 2 Parsec von H II-Quellen, starken Infrarotquellen und OH oder H_2O Maser auftreten. Sie sind häufig zu finden im Orionnebel, Sgr B2 und einigen anderen galaktischen Molekülwolken. Beim A-Methanol findet man folgende Maser Serien:

$$\begin{array}{ll} J_{0+} \rightarrow (J-1)_{1+} & J \geq 7 \\ J_{1\pm} \rightarrow (J-1)_{2\pm} & J \geq 10 \end{array}$$

Die Bezeichnung der einzelnen Übergänge ist die gleiche, wie in Abschnitt 4.4.4, wobei ein weggelassener hochgestellter Index immer ein Niveau des Torsionsgrundzustandes kennzeichnet.

In den folgenden Abschnitten werden wir aus jeder Maser Serie einen spezifischen Maserübergang detailliert behandeln. Dazu bedienen wir uns grafischer Darstellungen der optischen Dicke τ_ν. Die Darstellung erfolgt sowohl als Konturplot, wie auch als dreidimensionales Profil. Darüberhinaus benutzten wir zur Darstellung von Übergangsraten eine Abbildungen des Termschemas, in der Pfeile die entsprechenden Stoß- und Strahlungsübergänge repräsentieren. Der Einfachheit halber sind in dieser Darstellung die Energieterme fortlaufend numeriert, und nicht mit ihren Quantenzahlen gekennzeichnet. Die genaue Art der Darstellung ist in [Neb96] nachzulesen.

6.1.1 Übergänge $J_{0+} \rightarrow (J-1)_{1+}$

In Tabelle (6.1) sind die auftretenden optischen Dicken bei verschiedenen Parameterkombinationen aufgeführt. Getrennt werden dabei die Rechnungen ohne weitere Quellen (CMBR), nur mit H II-Regionen (H II), nur Infrarotquellen (IR) und die Kombination von Infrarot- und H II Quellen (H II+IR). Die Werte in Klammern beziehen sich auf Rechnungen mit Überlapp, wobei eine gepunktete Klammer [...] bzw. [.] andeutet, daß Überlapp die gleichen Ergebnisse liefert. Wie man deutlich sieht, nimmt die Inversion bei zunehmender Temperatur zu. Die Existenz eines Strahlungshintergrundes, sei es H II oder Infrarotstrahlung, liefert keine wesentlichen Effekte, in Bezug auf eine stärkere Inversion. Außerdem kann man sehr gut erkennen, daß der Überlapp hier keine Rolle spielt! In Tabelle (6.2) sind Frequenz und

Linie	T [K]	CMBR	H II	IR	H II+IR
$7_{0+} \to 6_{1+}$	**20**	-0.15[...]	-0.06[...]	-0.06[...]	-0.06[...]
	50	-0.39[...]	-0.25[...]	-0.27[...]	-0.25[...]
	100	-0.5[...]	-0.5[...]	-0.5[...]	-0.5[...]
$8_{0+} \to 7_{1+}$	**20**	-0.02[...]	-0.02[...]	-0.02[...]	-0.02[...]
	50	-0.18[...]	-0.17[...]	-0.18[...]	-0.17[...]
	100	-0.3[...]	-0.29[...]	-0.3[...]	-0.29[...]
$9_{0+} \to 8_{1+}$	**20**	$-6.1 \cdot 10^{-3}$[.]	$-5.5 \cdot 10^{-3}$[.]	$-5.8 \cdot 10^{-3}$[.]	$-5.2 \cdot 10^{-3}$[.]
	50	-0.12[...]	-0.12[...]	-0.12[...]	-0.11[-0.09]
	100	-0.23[...]	-0.22[...]	-0.23[...]	-0.22[...]
$10_{0+} \to 9_{1+}$	**20**	$-1.7 \cdot 10^{-3}$[.]	$-1.4 \cdot 10^{-3}$[.]	$-1.5 \cdot 10^{-3}$[.]	$-1.2 \cdot 10^{-3}$[.]
	50	-0.07[...]	-0.07[...]	-0.07[...]	-0.07[...]
	100	-0.18[...]	-0.18[...]	-0.18[...]	-0.18[...]
$11_{0+} \to 10_{1+}$	**20**	$-2.7 \cdot 10^{-4}$[.]	$-1.9 \cdot 10^{-4}$[.]	$-2.2 \cdot 10^{-4}$[.]	$-1.3 \cdot 10^{-4}$[.]
	50	-0.04[...]	-0.03[...]	-0.04[...]	-0.03[...]
	100	-0.12[...]	-0.12[...]	-0.12[...]	-0.12[...]

Tabelle 6.1: Minima der τ_ν aller invertierten Linien der Serie $J_{0+} \to (J-1)_{1+}$

A-Werte der verschiedenen Linien aufgeführt. Wir wollen nun den Übergang $7_{0+} \to 6_{1+}$ repräsentativ für alle anderen dieser Serie genauer analysieren. Wir werden im weiteren Verlauf häufiger von 'Zufluß' und 'Abfluß' sprechen.

Linie	Frequenz [GHz]	A_{ik}[s^{-1}]
$7_{0+} \to 6_{1+}$	44.07	$1.89 \cdot 10^{-7}$
$8_{0+} \to 7_{1+}$	95.17	$1.96 \cdot 10^{-6}$
$9_{0+} \to 8_{1+}$	146.62	$7.34 \cdot 10^{-6}$
$10_{0+} \to 9_{1+}$	198.4	$1.85 \cdot 10^{-5}$
$11_{0+} \to 10_{1+}$	250.5	$3.78 \cdot 10^{-5}$

Tabelle 6.2: Charakteristische Werte der Serie $J_{0+} \to (J-1)_{1+}$

Gemeint sind damit jeweils Zustandsübergänge *in ein Niveau hinein* oder *aus einem Niveau heraus*, und nicht Ströme von Teilchen. Trotz der Zweideutigkeit ermöglichen diese Formulierungen ein leichteres Verständnis der

Zusammenhänge.

Linie $7_{0+} \rightarrow 6_{1+}$

Zum genaueren Verständnis der physikalisch relevanten Vorgänge innerhalb einer Maseremissionslinie, ist es sinnvoll, sich Eingangs- und Ausgangslinien der Niveaus 7_{0+} und 6_{1+} genauer anzuschauen. Entsprechend der vorher genannten Auswahlregeln sind in Tabelle (6.3) alle Niveaus aufgeführt, die ankoppeln. Betrachten wir zunächst den einfachsten Fall unseres Mo-

<table>
<tr><th colspan="2">Eingänge</th><th></th><th colspan="2">Ausgänge</th></tr>
<tr><th>$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$</th><th>Niveau</th><th></th><th>Niveau</th><th>$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$</th></tr>
<tr><td>$2.5 \cdot 10^{-4}$</td><td>8^0_{0+}</td><td rowspan="6">$\longrightarrow 7^0_{0+} \longrightarrow$</td><td rowspan="3">$6^0_{0+}$</td><td rowspan="3">$1.7 \cdot 10^{-4}$</td></tr>
<tr><td>$3.4 \cdot 10^{-4}$</td><td>7^0_{1-}</td></tr>
<tr><td>$1.8 \cdot 10^{-3}$</td><td>8^0_{1+}</td></tr>
<tr><td>0.146</td><td>7^1_{1+}</td><td rowspan="3">$6^{(0)}_{1+}$</td><td rowspan="3">$1.9 \cdot 10^{-7}$</td></tr>
<tr><td>0.092</td><td>8^1_{1-}</td></tr>
<tr><td>0.058</td><td>6^1_{1-}</td></tr>
<tr><td>$1.6 \cdot 10^{-4}$</td><td>7^0_{1+}</td><td rowspan="10">$\longrightarrow 6^0_{1+} \longrightarrow$</td><td rowspan="5">$5^0_{0+}$</td><td rowspan="5">$1.2 \cdot 10^{-3}$</td></tr>
<tr><td>$5.8 \cdot 10^{-4}$</td><td>6^0_{2-}</td></tr>
<tr><td>$2 \cdot 10^{-3}$</td><td>7^0_{2+}</td></tr>
<tr><td>$1.3 \cdot 10^{-5}$</td><td>5^0_{2+}</td></tr>
<tr><td>$1.2 \cdot 10^{-9}$</td><td>6^0_{1-}</td></tr>
<tr><td>$1.9 \cdot 10^{-7}$</td><td>7^0_{0+}</td><td rowspan="5">5^0_{1+}</td><td rowspan="5">$9.9 \cdot 10^{-5}$</td></tr>
<tr><td>0.141</td><td>6^1_{2+}</td></tr>
<tr><td>0.12</td><td>7^1_{2-}</td></tr>
<tr><td>0.039</td><td>5^1_{2-}</td></tr>
<tr><td>1.463</td><td>6^1_{0+}</td></tr>
</table>

Tabelle 6.3: Linien, die an die Niveaus 7^0_{0+} und 6^0_{1+} ankoppeln.

dells, sprich keine externen Strahlungsquellen, außer dem 2.7K-Hintergrund, bei einer Temperatur von 20 Kelvin, ohne Berücksichtigung des Linienüberlapps. Das Minimum der optischen Dicke beträgt $\tau_\nu = -0.149$ und liegt bei $N_{CH_3OH} = 10^{16}\mathrm{cm}^{-2}$ und $n_{H_2} = 3.2 \cdot 10^3\mathrm{cm}^{-3}$. In Figur (6.3) sind die Konturlinien der optischen Dicke im n_{H_2}/N_{CH_3OH}-Diagramm dargestellt.Der Übersichtlichkeit halber sind nur die Konturen für $\tau_\nu = 0$ sowie $\tau_\nu \approx min\, \tau_\nu$

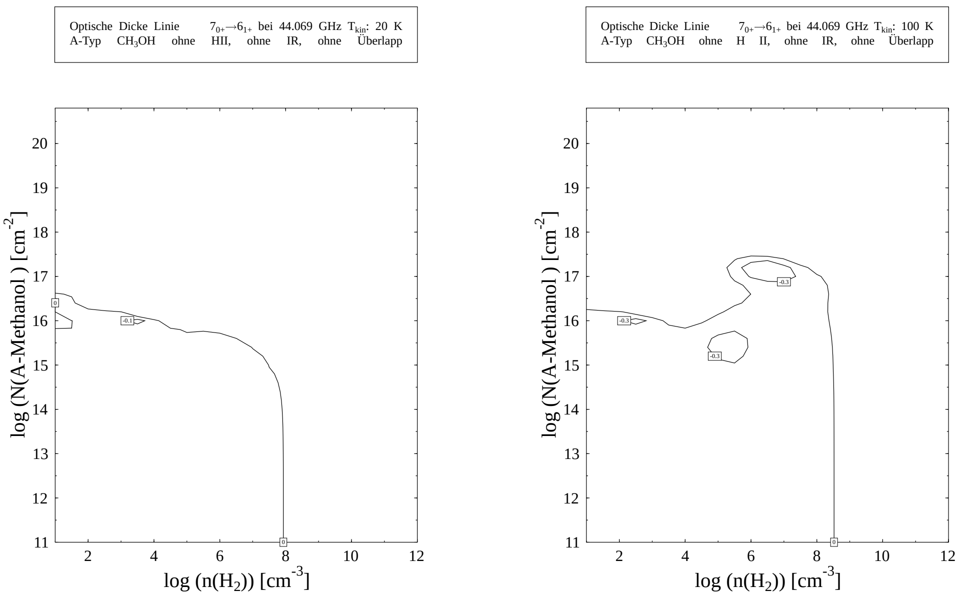

Abbildung 6.3: Optische Dicken der Linie $7^0_{0+} \rightarrow 6^0_{1+}$ bei $T = 20$K (links) und $T = 100$K (rechts)

eingezeichnet. Der Bereich der Inversion ist durch $\tau_\nu < 0$ gegeben. Wie man sieht, kommt eine Besetzungsinversion nur im Bereich $n_{H_2} < 10^9 \mathrm{cm}^{-3}$ und $N_{CH_3OH} < 10^{17} \mathrm{cm}^{-2}$ vor. Innerhalb dieses Intervalls sind die Stöße zwar vorhanden, aber nicht stark genug, um für alle Niveaus eine thermische Besetzung zu erzwingen. Vergleicht man die A-Werte der beiden betrachteten Niveaus, so stellt man fest, daß 6_{1+} schnellere Ausgangs-A-Werte als 7_{0+} besitzt. Das bedeutet, daß bei 'gleichschnellem Zufluß' sich das Niveau 6_{1+} schneller wieder entvölkert als sein Partner 7_{0+}. Dadurch kommt es zu einer Besetzungsinversion. Dieser Mechanismus funktioniert so lange, wie die Eingangskanäle nicht optisch dick werden, was von der Säulendichte abhängt. Wenn sie zu groß wird, werden die Stöße im Vergleich zu den Strahlungsübergängen wesentlich dominanter, was zu einer thermischen Besetzung der Zustände führt. Gleiches passiert bei einer Erhöhung der Wasserstoffdichte. Das Minimum der optischen Dicke erklärt sich aus der Effizienz der Linie $8_{1+} \rightarrow 7_{0+}$

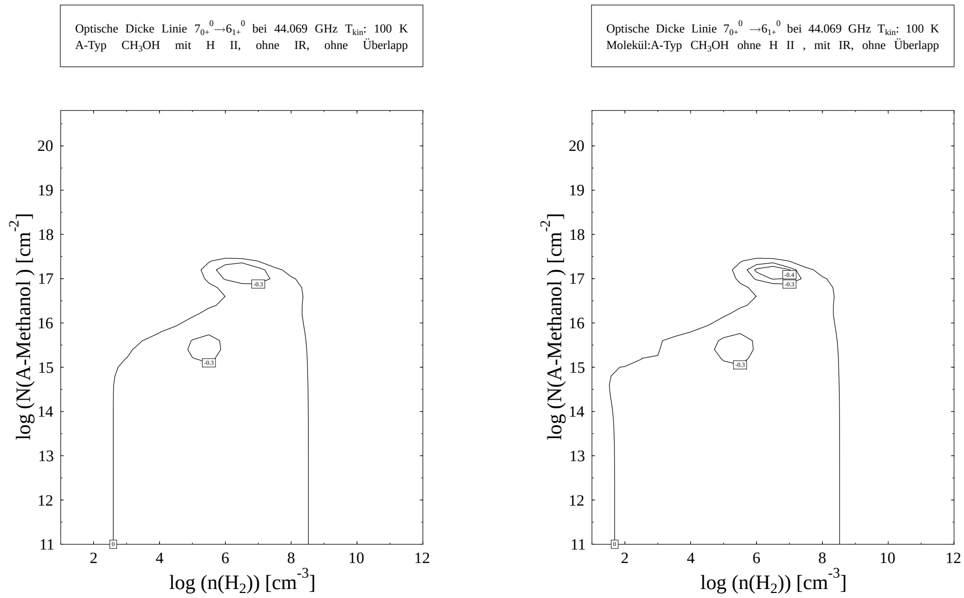

Abbildung 6.4: Optische Dicken der Linie $7^0_{0+} \rightarrow 6^0_{1+}$ bei $T = 100$K mit H II Region (links) und mit IR Region (rechts)

bei niedrigen Säulendichten. Dieser Übergang wird bei $N_{CH_3OH} = 10^{16}\mathrm{cm}^{-2}$ optisch dick. Dadurch wird der Zufluß in das Niveau 7_{0+} vermindert. Gleichzeitig wird die Kette $8_{1+} \rightarrow 7_{1+} \rightarrow 6_{1+}$ wirksam, und erhöht damit die Besetzung von Niveau 6_{1+}. Bei ansteigender Säulendichte wird über diesen Mechanismus die Inversion aufgehoben. Betrachten wir unser Modell bei einer Temperatur von 100 K, so sieht das Konturprofil der optischen Dicke etwas anders aus. In der rechten Grafik in Figur (6.3) sieht man, daß die rechte obere Ecke des Inversionsgebietes ein anderes Aussehen hat, als bei 20 K (Figur(6.3,links)). Dort findet man ein etwas stärkeres Minimum, mit $\tau_\nu = -0.49$ bei $n_{H_2} = 3.2 \cdot 10^6\mathrm{cm}^{-3}$ und $N_{CH_3OH} = 1.6 \cdot 10^{17}\mathrm{cm}^{-2}$. Durch die recht hohe Temperatur von 100 Kelvin, sind auch sehr hohe Niveaus stoßbesetzt. Alles in allem sind die Stöße bei allen Pumpzyklen die dominanten Terme. Hinzu kommt die außergewöhnliche Struktur des Termschemas bei torsionsangeregten Zuständen. Diese Struktur ist wesentlich mitverantwortlich für das Zustandekommen dieser Inversion. Anregende Stöße sind für $\Delta K = 0$ viel wahrscheinlicher, als für $\Delta K = \pm 1$. Strahlungsübergänge von $n = 1 \rightarrow n = 0$ haben jedoch die Auswahlregel $\Delta K = \pm 1$ bei $\Delta n = \pm 1$. Da die Energiedifferenz zu den Torsionszuständen innerhalb der $K = 1$ Leiter sehr viel kleiner ist, als innerhalb der $K = 0$ Leiter, sind auch torsionsanregende Stöße innerhalb der $K = 1$ Leiter viel wahrscheinlicher als bei $K = 0$. Für die Linie $7_{0+} \rightarrow 6_{1+}$ ist dies wesentlich. Der Zustand 6_{1+} regt innerhalb der $K = 1$ Leiter viele $n = 1$ Niveaus über Stöße an, was seine Besetzungszahlen vermindert. Diese angeregten $n = 1$ Niveaus machen nun Strahlungsübergänge in die $K = 0$ und $K = 2$ Rotationsniveaus des Torsionsgrundzustandes. Dadurch wird der Zustand 7_{0+} über Emissionen angeregt, und zwar über die Kette:

$$\begin{array}{ccccc} & & 6^1_{1-} & & \\ 6^0_{1+} & \xrightarrow{Stöße} & 7^1_{1+} & \xrightarrow{Emission} & 7^0_{0+} \\ & & 8^1_{1-} & & \end{array}$$

Man sieht, daß das Niveau 6_{1+} sein Partnerniveau 7_{0+} indirekt selbst mit einem Zufluß versorgt (siehe Figur (6.6)), und somit die Bedingungen für eine relativ starke Inversion schafft. Dieser Mechanismus funktioniert nur bei einer relativ hohen Wasserstoffdichte, da sonst die Stoßterme nicht stark genug sind. Wird die Säulendichte zu groß, so werden die Strahlungsübergänge in das Niveau 7_{0+} hinein optisch dick, und der Pumpzyklus ist unterbrochen.

Fügt man dem Modell eine Strahlungshintergrund in Form einer H II Region hinzu, so liefern wir eine effektive Quelle an Infrarotphotonen (siehe Abbildung(4.10)). Durch Absorption der Photonen können die $n = 1$ Zustände sehr viel stärker besetzt werden, als es ohne H II Region möglich ist. Vergleicht man Figur (6.3, rechts) mit Figur (6.4, links) so sieht man eine Aufhebung des Inversionszustandes bei kleinen Wasserstoffdichten. Geht man von einer hohen Besetzung der torsionsangeregten Zustände aus, und legt die Auswahlregeln zugrunde, so folgt eine größere Zahl von Emissionsübergängen in die $K = 1$ Leiter als in die $K = 0$ Leiter, die fast nur aus der torsionsangeregten $K = 1$ Leiter gespeist wird. Das führt zu einer stärkeren Besetzung der Zustände mit $K = 1, n = 0$ als im Fall ohne H II Region, und damit auch zu einer höheren Besetzung des Niveaus 6_{1+}, womit die Besetzungsinversion aufgehoben wird. Wächst die Wasserstoffdichte über eine kritische Grenze an, so werden die stoßdominierten Pumpzyklen wieder dominant, und wir finden wieder den gleichen Inversionsmechanismus wie im Modell ohne H II Region. Vertauscht man die H II Region mit einer IR Quelle, so ändert sich qualitativ nichts. Quantitativ liefert die IR Quelle in unserer Modellierung im Bereich von ca. $900 \ldots 7000$ GHz eine größere Intensität als die H II Region (siehe auch Abbildung(4.10)). Das führt zu einer stärkeren Besetzung der Niveaus

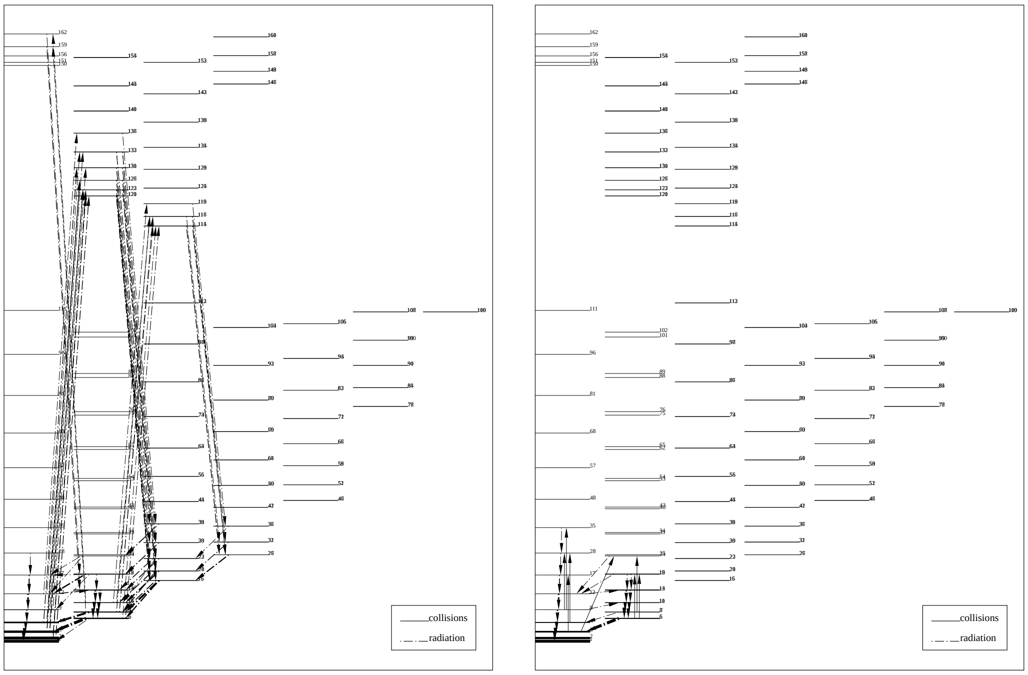

Abbildung 6.5: Vergleich der Übergangsraten bei $T = 100\mathrm{K}$, $N_{CH_3OH} = 2.5 \cdot 10^{15}\mathrm{cm}^{-2}$, $n_{H_2} = 100\mathrm{cm}^{-3}$ mit H II Hintergrund (links) und ohne (rechts)

6^1_{2+}, $5_{2-}1$, 7^1_{2-} als das bei einer H II Region der Fall ist. Allerdings ist die H II Quelle bei der Besetzung des Niveaus 6^1_{0+} um ein Vielfaches effektiver. Außerdem liefert sie im Radiobereich eine wesentlich größere Intensität, was zu einer stärkeren Besetzung der Rotationsniveaus des Torsionsgrundzustandes führt. Da das untere Maserniveau mehr Eingangsniveaus besitzt als das obere, werden seine Besetzungszahlen davon stärker beeinflußt. Somit ist die Strahlung einer H II Region bei der Aufhebung der Inversion bei kleinen Wasserstoffdichten etwas effektiver, als unsere Infrarotquelle, was dazu führt, daß mit IR-Quelle die Inversion bei kleineren Wasserstoffdichten wieder einsetzt (siehe Figur(6.4)).

Man sieht also, daß alle wichtigen Pumpmechanismen dieses Masers von der Dominanz der Stoßterme abhängen. Strahlungshintergründe liefern zwar Photonen, die an die hohen Niveaus ankoppeln, aber Inversionen werden dadurch nicht erzeugt, sondern beseitigt. Für alle anderen Maserlinien dieser Serie gelten die gleichen Mechanismen wie oben. Der wichtigste Unterschied ist, daß die Inversionen, ausgedrückt in optischer Dicke, und die Besetzungszahlen kleinere Werte annehmen. Das ist verständlich, wenn man bedenkt, daß wir den energetisch tiefsten Übergang gewählt haben, der im Vergleich zu höheren Linien durch Stöße stärker besetzt ist. Alle stoßdominierten Vorgänge sind umso effektiver, je niedriger sie im Termschema liegen und je höher die kinetische Temperatur ist. Die Werte der optischen Dicken in Tabelle (6.1) lassen diese Tendenz sehr gut nachvollziehen.

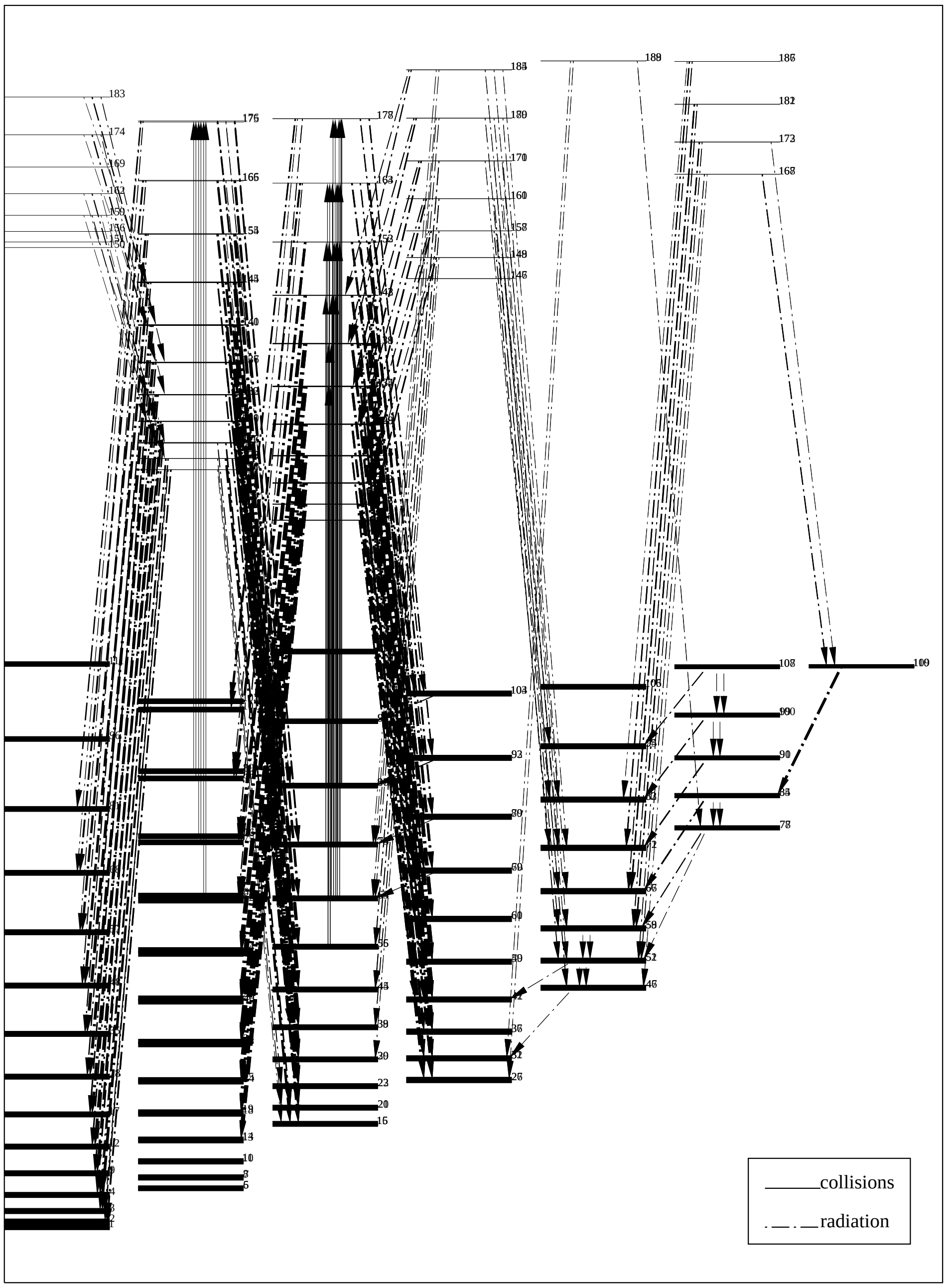

Abbildung 6.6: Stoß- und Strahlungsübergänge bei $T = 100\text{K}, n_{H_2} = 3.2 \cdot 10^6 \text{cm}^{-3}, N_{CH_3OH} = 1.6 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-2}$, ohne H II Region, ohne IR und ohne Überlapp

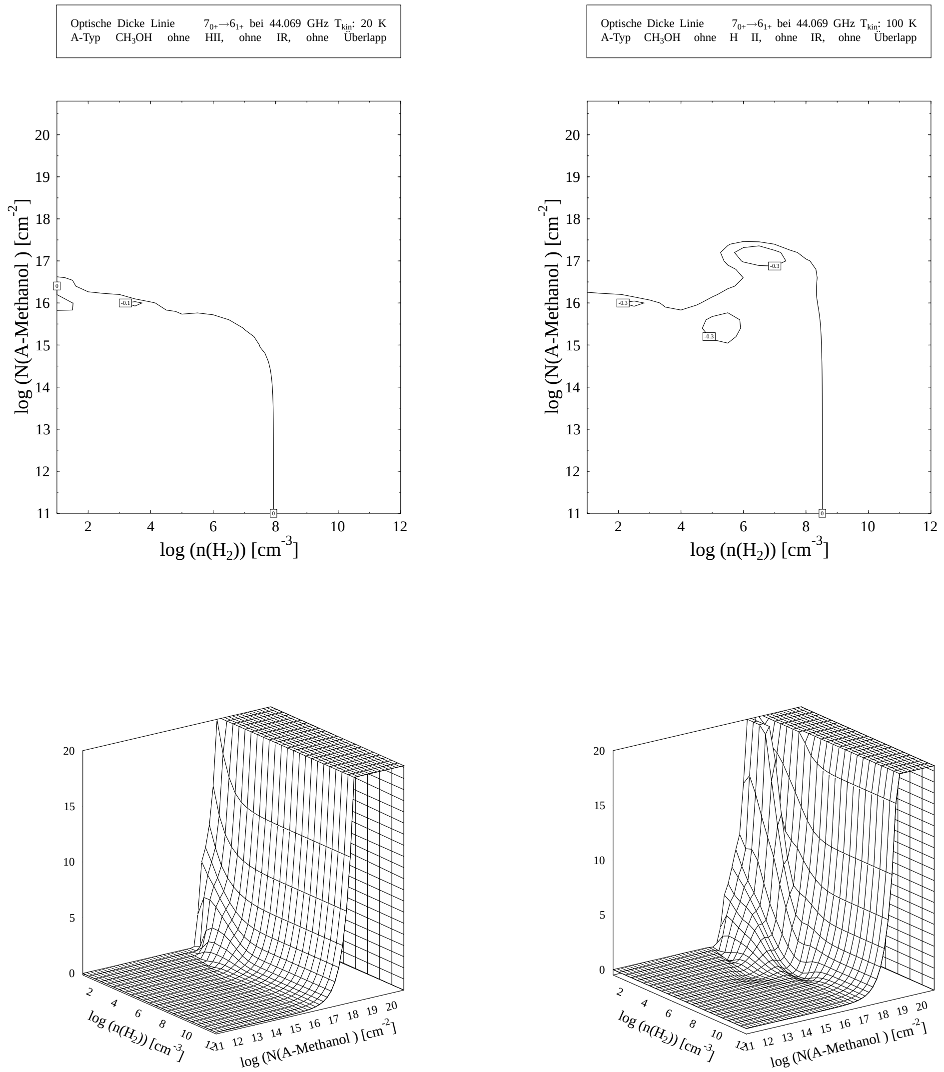

Abbildung 6.7: τ_ν der Linie $7_{0+} \rightarrow 6_{1+}$ bei $T = 20$ K(links) und $T = 100$ K(rechts), ohne H II, ohne IR, ohne Überlapp

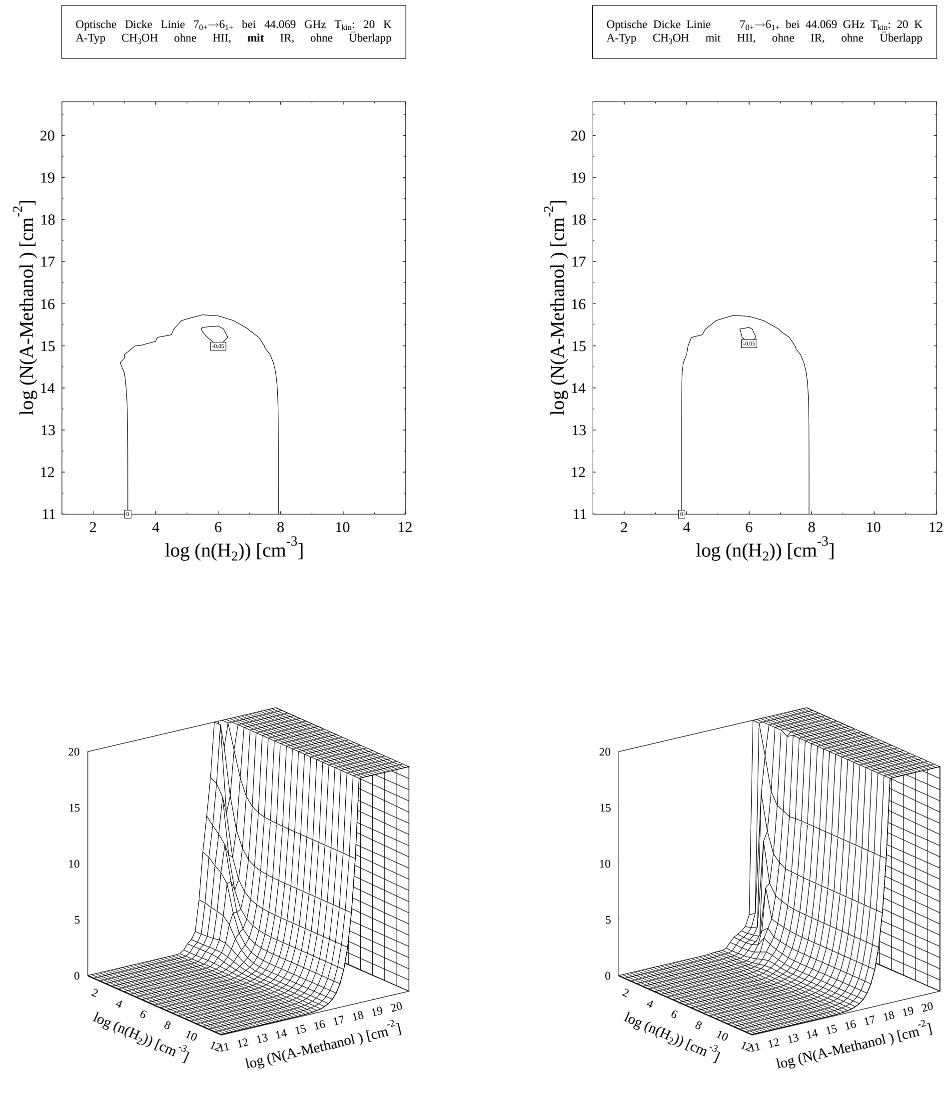

Abbildung 6.8: τ_ν der Linie $7_{0+} \rightarrow 6_{1+}$ mit IR (links) und H II (rechts), bei $T = 20$ K, ohne Überlapp

6.1.2 Übergänge $J_{1\pm} \to (J-1)_{2\pm}$

In Tabelle (6.4) sind alle auftauchenden Maserlinien dieser Serie aufgeführt. Es ist zu beachten, daß die Maser der Serie $J_{1+} \to (J-1)_{2+}$ um einiges stärker invertiert sind, als die der Serie $J_{1-} \to (J-1)_{2+}$. Das liegt daran, daß die $K = 1_+$ Leiter energetisch etwas tiefer liegt, als die $K = 1_-$ Leiter. Für K=2 ist es umgekehrt, somit haben die Übergänge $J_{1+} \to (J-1)_{2+}$ niedrigere Frequenzen, als die Linien $J_{1-} \to (J-1)_{2-}$. Die A-Werte gehen mit ν^3 (siehe auch Tabelle (6.5)), und ein größerer, also 'schnellerer' A-Wert bedeutet eine geringere Effizienz in der Entwicklung einer Besetzungsinversion, da das obere Niveau sich zu schnell wieder entleert.

Linie	T [K]	CMBR	H II	IR	H II+IR
$10_{1-} \to 9_{2-}$	**20**	-0.81[-0.78]	-0.06[-0.06]	-0.05[...]	-0.04[...]
	50	-1.94[-1.87]	-0.45[-0.42]	-0.73[-0.66]	-0.38[-0.39]
	100	-2.09[-2.08]	-0.59[...]	-1.08[-0.99]	-0.59[-0.58]
$11_{1+} \to 10_{2+}$	**20**	-0.97[-0.90]	-0.19[-0.18]	-0.27[-0.25]	-0.13[...]
	50	-2.09[-1.96]	-0.63[-0.59]	-1.17[-1.08]	-0.58[-0.55]
	100	-2.55[-2.48]	-0.87[-0.85]	-1.65[-1.62]	-0.84[-0.81]
$11_{1-} \to 10_{2-}$	**20**	-0.06[-0.03]	$-7.1 \cdot 10^{-3}$[.]	$-6.7 \cdot 10^{-3}$[.]	$-6.5 \cdot 10^{-3}$[.]
	50	-0.57[-0.53]	-0.23[...]	-0.28[-0.25]	-0.23[-0.21]
	100	-0.79[-0.76]	-0.46[...]	-0.48[-0.46]	-0.46[-0.45]
$12_{1+} \to 11_{2+}$	**20**	-0.25[-0.24]	-0.07[-0.06]	-0.09[-0.08]	-0.03[...]
	50	-0.82[-0.77]	-0.45[-0.42]	-0.64[-0.56]	-0.41[-0.39]
	100	-1.18[-1.12]	-0.65[-0.62]	-1.01[-0.98]	-0.64[-0.61]
$12_{1-} \to 11_{2-}$	**20**	$-2 \cdot 10^{-3}$[.]	$-1.9 \cdot 10^{-3}$[.]	$-1.6 \cdot 10^{-3}$[.]	$-1.5 \cdot 10^{-3}$[.]
	50	-0.12[...]	-0.11[...]	-0.11[...]	-0.11[...]
	100	-0.32[...]	-0.31[...]	-0.31[...]	-0.3[...]
$13_{1+} \to 12_{2+}$	**20**	-0.06[-0.05]	-0.02[-0.01]	-0.04[-0.03]	$-3.9 \cdot 10^{-5}$[.]
	50	-0.28[-0.25]	-0.2[-0.17]	-0.27[-0.23]	-0.19[-0.17]
	100	-0.5[-0.46]	-0.4[-0.37]	-0.48[-0.45]	-0.41[-0.37]
$13_{1-} \to 12_{2-}$	**20**	$--3.6 \cdot 10^{-4}$[.]	$-2.9 \cdot 10^{-4}$[.]	$-2 \cdot 10^{-4}$[.]	$-1.5 \cdot 10^{-4}$[.]
	50	-0.04[...]	-0.03[...]	-0.03[...]	-0.03[...]
	100	-0.16[...]	-0.16[...]	-0.16[...]	-0.16[...]

Tabelle 6.4: Minima der τ_ν aller invertierten Linien der Serie $J_{1\pm} \to (J-1)_{2\pm}$

Linie	Frequenz [GHz]	$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$
$10_{1-} \rightarrow 9_{2-}$	23.44	$2.98 \cdot 10^{-8}$
$11_{1+} \rightarrow 10_{2+}$	20.17	$1.93 \cdot 10^{-8}$
$11_{1-} \rightarrow 10_{2-}$	76.25	$1.05 \cdot 10^{-6}$
$12_{1+} \rightarrow 11_{2+}$	62.91	$5.97 \cdot 10^{-7}$
$12_{1-} \rightarrow 11_{2-}$	129.43	$5.2 \cdot 10^{-6}$
$13_{1+} \rightarrow 12_{2+}$	105.06	$2.82 \cdot 10^{-6}$
$13_{1-} \rightarrow 12_{2-}$	183.05	$1.49 \cdot 10^{-5}$

Tabelle 6.5: Charakteristische Werte der Serie $J_{1\pm} \rightarrow (J-1)_{2\pm}$

Auch bei dieser Maserserie ist zu erkennen, wie die Inversion bei steigender Temperatur immer stärker wird. Gleichzeitig ist bei Integration eines Strahlungshintergrundes in die Rechnungen, eine Verminderung der Inversion zu erkennen. Das deutet stark auf einen rein stoßgepumpten Maser hin, wie es auch durch die Klassifikation in Klasse I bereits implizit unterstellt wird. Zur genaueren Analyse gehen wir auf die stärkste Linie dieser Serie, den $11^0_{1+} \rightarrow 10^0_{2+}$ Maser ein.

Linie $11^0_{1+} \rightarrow 10^0_{2+}$

Tabelle (6.6) listet alle Eingangs- und Ausgangslinien des betrachteten Übergangs auf. Beginnen wir die Analyse wieder beim einfachsten Fall, also bei einer Temperatur von 20 Kelvin, und ohne Strahlungshintergrund oder Überlapp. Das Minimum der optischen Dicke liegt bei $n_{H_2} = 3.2 \cdot 10^3\mathrm{cm}^{-3}$ und $N_{CH_3OH} = 1.6 \cdot 10^{18}\mathrm{cm}^{-2}$ und beträgt $\tau_\nu = -0.97$. Bei niedrigeren Säulendichten, sind die beiden Linien $11_{1+} \rightarrow 10_{1+}$ und $11_{1+} \rightarrow 10_{0+}$ wesentlich intensiver, als entsprechende Ausgangslinien des Niveaus 10_{2+}, nämlich $10_{2+} \rightarrow 10_{1-}$ und $10_{2+} \rightarrow 9_{2+}$. Das liegt an der stärkeren Besetzung durch Stöße der K=1 Leiter. Diese hohen Stoßraten sind auch der Grund dafür, daß trotz der intensiven Strahlungsabregung eine Inversion stattfindet. Wird die Säulendichte größer, so wird die Linie $11_{1+} \rightarrow 10_{0+}$ optisch dick, und gleichzeitig werden alle Eingangslinien in das Niveau 11_{1+} intensiver. Das führt zu einem Anstieg der Besetzungszahlen relativ zur thermischen Besetzung. Nimmt die Säulendichte noch weiter zu, wird die Linie $10_{2+} \rightarrow 9_{2+}$ optisch dick und die letzte verbleibende Ausgangslinie $10_{2+} \rightarrow 9_{3+}$ wird wesentlich

Eingänge			Ausgänge	
$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$	Niveau		Niveau	$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$
$8.5 \cdot 10^{-4}$	12^0_{1+}	$\longrightarrow 11^0_{1+} \longrightarrow$	10^0_{1+}	$6.5 \cdot 10^{-4}$
$6.7 \cdot 10^{-4}$	11^0_{2-}			
$4 \cdot 10^{-3}$	12^0_{2+}			
$1.2 \cdot 10^{-8}$	11^0_{1-}			
$6.8 \cdot 10^{-5}$	12^0_{0+}		10^0_{0+}	$3.04 \cdot 10^{-3}$
0.147	11^1_{2+}			
0.119	12^1_{2-}			
0.044	10^1_{2-}			
$6.5 \cdot 10^{-4}$	11^0_{2+}	$\longrightarrow 10^0_{2+} \longrightarrow$	9^0_{2+}	$4.8 \cdot 10^{-4}$
$7.8 \cdot 10^{-3}$	10^0_{3-}		10^0_{1-}	$4.9 \cdot 10^{-4}$
$1.8 \cdot 10^{-3}$	11^0_{3+}			
0.057	9^1_{3-}		9^0_{1+}	$3.1 \cdot 10^{-3}$
0.153	10^1_{1+}			
0.085	9^1_{1-}		9^0_{3+}	$2.5 \cdot 10^{-5}$

Tabelle 6.6: Linien, die an die Niveaus 11^0_{1+} und 10^0_{2+} ankoppeln.

stärker. Wie bereits erwähnt, nimmt bei einem Anstieg der Säulendichte die Dominanz der Stöße gegenüber den Strahlungsübergängen zu. Dadurch steigt die relative Besetzung der höheren Niveaus. Die relevanten Eingangsniveaus der Zustände 11_{1+} und 10_{2+} werden stärker besetzt und können diese effektiver 'füttern'. Aus Tabelle (6.6) geht hervor, daß der Zustand 11_{1+} aus Niveaus der K=0,1,2 Leitern gespeist wird, wobei 10_{2+} hauptsächlich aus den K=2,3 Leitern seinen Zustrom erhält. Die Energieniveaus mit einer niedrigeren K-Quantenzahl werden durch Stöße aus den unteren Niveaus wesentlich stärker besetzt als die mit höheren K-Zahlen. Das heißt, die Eingänge in 11_{1+} sind stärker besetzt als die in 10_{2+}. Damit sind auch ihre Übergangsraten größer, was zu einem Anstieg der Inversion bis zu dem Minimum in τ_ν führt. Dieser Pumpzyklus kann jedoch nur innerhalb eines kleinen Parameterintervalls in N_{CH_3OH} aufrechterhalten werden. Eine wichtige Rolle spielt dabei das Niveau 10_{3-}, dessen Emissionslinien in das Niveau 9_{3-} bei $N_{CH_3OH} = 1.8 \cdot 10^{18}\mathrm{cm}^{-2}$ optisch dick werden. Der einzige verbleibende Strahlungsausgang aus diesem Zustand ist nun der in das Niveau 10_{2+} hinein. Damit sind bereits die Voraussetzungen für ein Aufheben der Inversion geschaffen. Steigt die Säulendichte über $4 \cdot 10^{18}\mathrm{cm}^{-2}$, so wird die Linie des Maser $11_{1+} \to 10_{2+}$ optisch dick, ebenso wie der Übergang $12_{1+} \to 11_{1+}$. Jetzt sind alle Strahlungsübergänge optisch dick geworden, und die Stoßübergänge erzeugen eine thermische Besetzung der Niveaus.

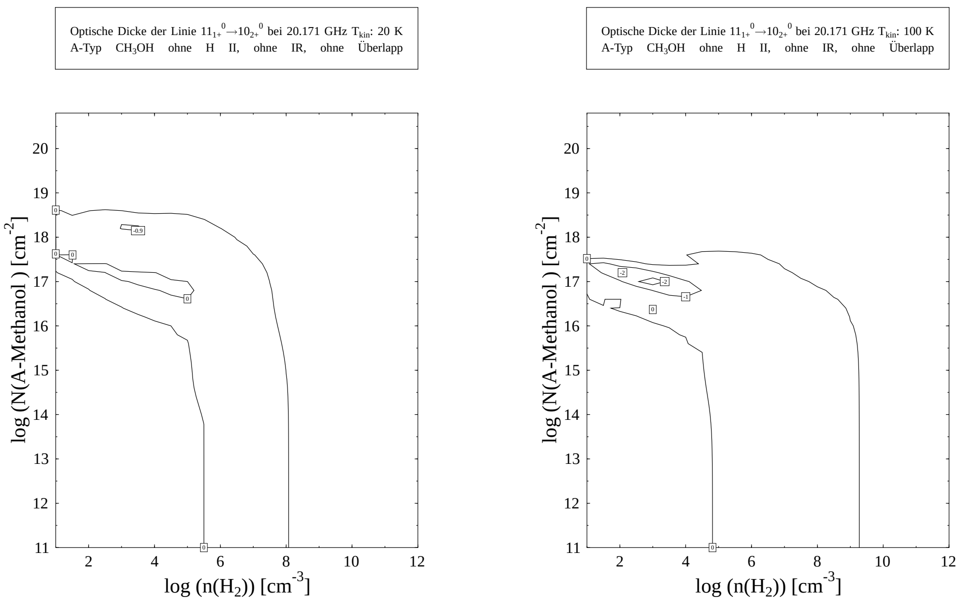

Abbildung 6.9: Optische Dicken der Linie $11^0_{1+} \to 10^0_{2+}$ bei $T = 20$K (links) und $T = 100$K(rechts)

Bei einer Temperatur von 100 K ist der Mechanismus der gleiche. Durch die höhere Temperatur, kann die starke Inversion jedoch schon bei kleineren Säulendichten erfolgen, da die Stoßraten entsprechend früher die Dominanz gewinnen. Wie bei 20 K ist von entscheidender Bedeutung, auf welcher K-Leiter die Ein-und Ausgangsniveaus der beteiligten Zustände liegen, und welche A-Werte sie haben. Besonders wichtig sind hierbei jeweils die Eingänge mit den kleineren A-Werten, da die anderen schon bei niedrigeren Säulendichten optisch dick werden, und somit keine wesentlichen Beiträge mehr leisten. Beim Niveau 11_{1+} wäre dieser Eingang das Niveau 12_{0+}. Sein A-Wert ist klein genug, um nicht zu früh optisch dick zu werden, aber gleichzeitig sichert seine

Lage innerhalb der K=0 Leiter eine starke Besetzung durch Stöße. Dadurch kann er den Zustand 11_{1+} effektiv pumpen. Der Haupteingang in das Niveau 10_{2+} ist 10_{3-}. Durch seine Lage in der K=3 Leiter ist er über große Bereiche der Säulendichte hinweg zu schwach besetzt, um viele Übergänge in das untere Maserniveau zu liefern. Doch genau bei solchen Säulendichten, bei denen die Eingänge in das obere Maserniveau langsam zu versiegen beginnen, wird 10_{3-} stark genug besetzt, um die Besetzunginversion aufzuheben.

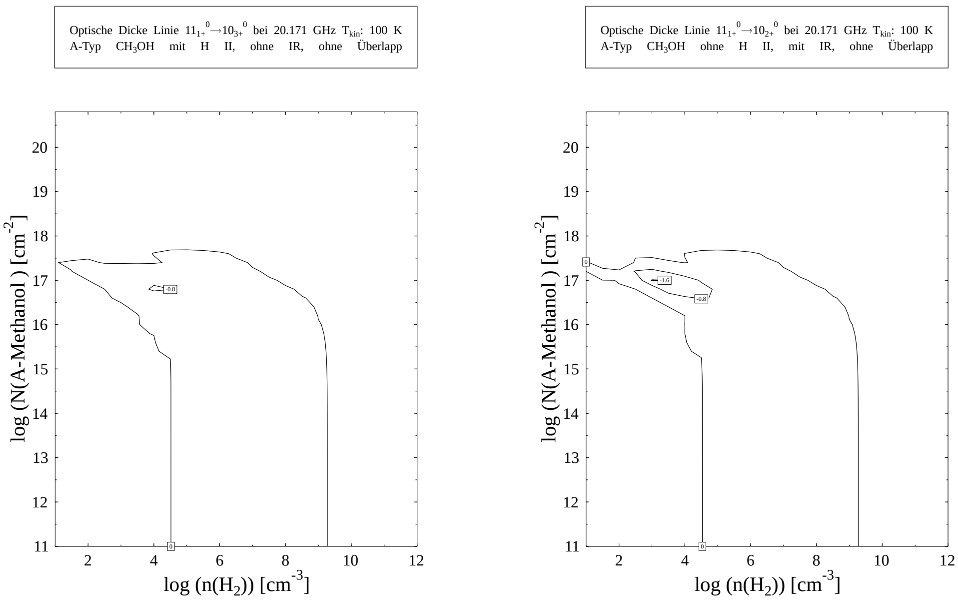

Abbildung 6.10: Optische Dicken der Linie $11^0_{1+} \rightarrow 10^0_{2+}$ bei $T = 100$K mit H II Hintergrund (links) und mit IR Hintergrund (rechts)

Durch eine zusätzliche H II-Region liefern wir unserer Wolke nun eine große Anzahl an Infrarot- und Radiophotonen. Diese erhöhen die Besetzung der einzelnen Zustände relativ zur thermischen Besetzung sehr stark. Genau wie im vorher betrachteten Maser werden nun auch Zustände mit höherer K-Quantenzahl stark besetzt. Die Stärke dieser Maserlinien rührt unter anderem daher, daß die Eingänge in das obere Termniveau stärker besetzt sind als die Eingänge in das untere Maserniveau. Nun ist die sehr niedrige Besetzung dieser Zustände korrigiert. Diese können nun auch das 10^0_{2+} Niveau effektiv pumpen. Damit ist der große Unterschied in den Besetzungszahlen der Maserniveaus behoben, und die Inversion ist nur noch sehr schwach. Anders

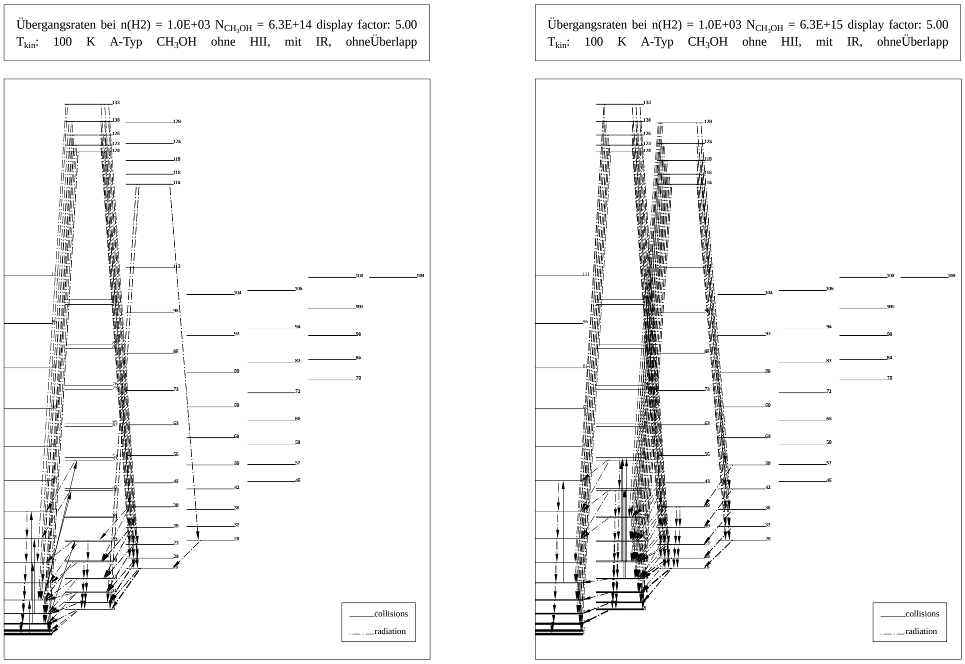

Abbildung 6.11: IR-Übergangsraten in die unteren Niveaus bei $T = 100$K bei niedrigen (links) und höheren N_{CH_3OH} (rechts)

wirkt sich hingegen eine Infrarotquelle aus. Sie sorgt für eine stärkere Besetzung der torsionsangeregten Zustände, woraufhin diese eine Vielzahl von Emissionsübergängen in die Rotationsniveaus des Torsionsgrundzustandes durchführen und zwar in die K=0 und K=2 Leitern (siehe Figur (6.11,links)), und bei höheren Säulendichten auch in die K=1 und K=3 Leitern (Figur (6.11,rechts)). Dadurch werden die unteren Grundzustände stärker besetzt, als das der Fall wäre, ohne Infrarothintergrund. Die Änderung der Besetzungsverhältnisse wirkt sich stark auf die Nettorate der Stoßübergänge aus. Selbst kleine Änderungen der Besetzungen wirken sich auf dem Stoßanregungsweg innerhalb einer K-Leiter nach oben hin potenzierend aus. Das führt dazu, daß die hauptsächlich stoßgepumpten Niveaus nun weniger stark besetzt sind. Für unseren Maser bedeutet das eine geringere Besetzung des oberen Niveaus. Das untere Niveau 10^0_{2+} ist in seiner relativen Besetzung kaum verändert. Damit ist bei gleicher Säulendichte die Inversion bei einem Infrarothintergrund schwächer als in einem Modell ohne Hintergrund. Dadurch ist der Besetzungsunterschied zwischen oberem und unterem Zustand schon sehr viel früher ausgeglichen, was dazu führt, daß der Maser um einiges schwächer ist. Grundsätzlich kann man sagen, daß ein externer Strahlungshintergrund die Besetzungszahlen immer zu einer größeren Abweichung von LTE verändert. Den grundsätzlichen Pumpmechanismus beeinflußt dies allerdings wenig. Gleiches gilt auch für Rechnungen mit Linienüberlapp. Er bewirkt eine geringe Reduzierung der relativen Besetzungszahlen, was einer Entfernung vom thermischen Gleichgewicht entspricht. Da diese Maserserie jedoch hauptsächlich von hohen Stoßraten in das obere Niveau hinein lebt, reduziert der Linienüberlapp die Inversion etwas (Figur (6.12)).

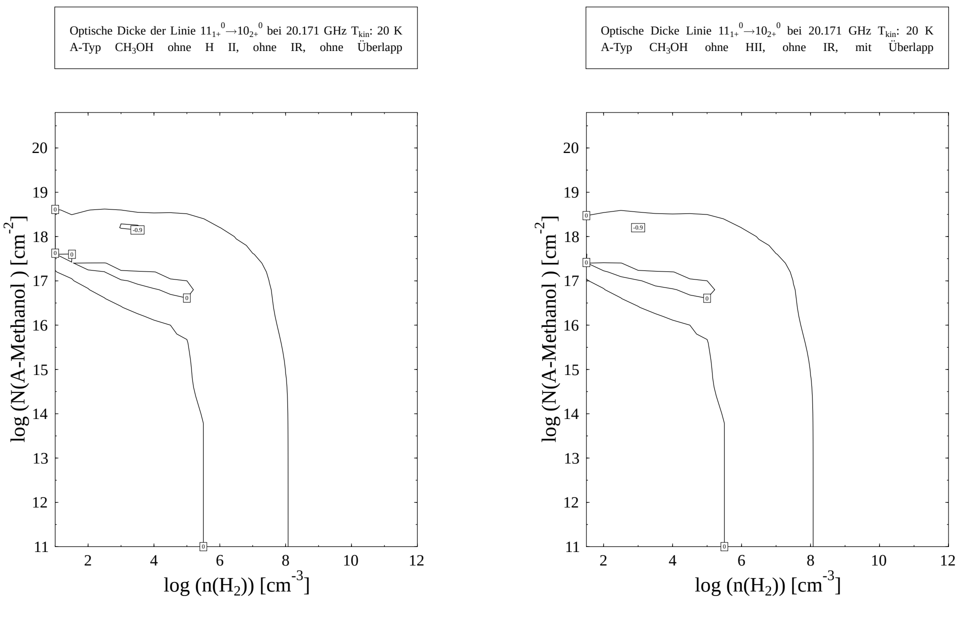

Abbildung 6.12: Optische Dicken der Linie $11^0_{1+} \rightarrow 10^0_{2+}$ bei $T = 20$ K ohne (links) und mit Linienüberlapp (rechts)

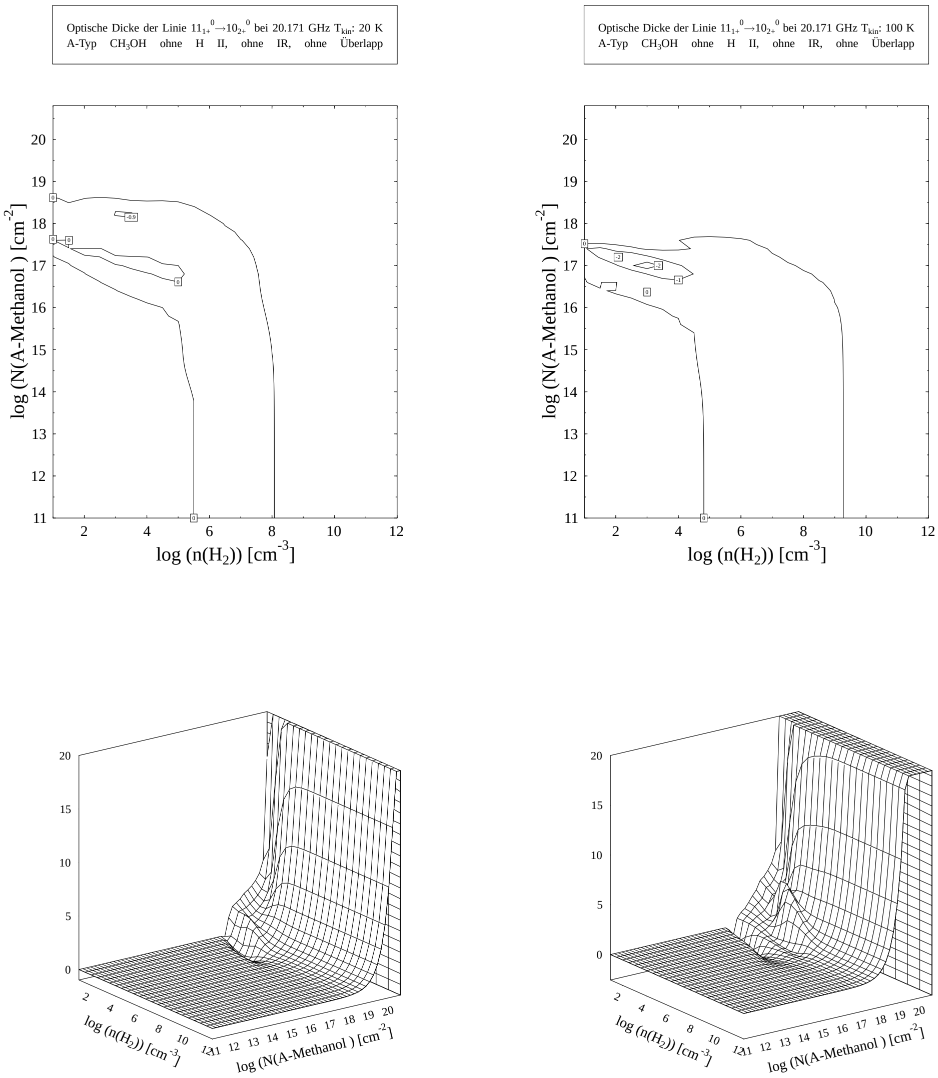

Abbildung 6.13: τ_ν der Linie $11_{1+} \rightarrow 10_{2+}$ bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts), ohne H II, ohne IR, ohne Überlapp

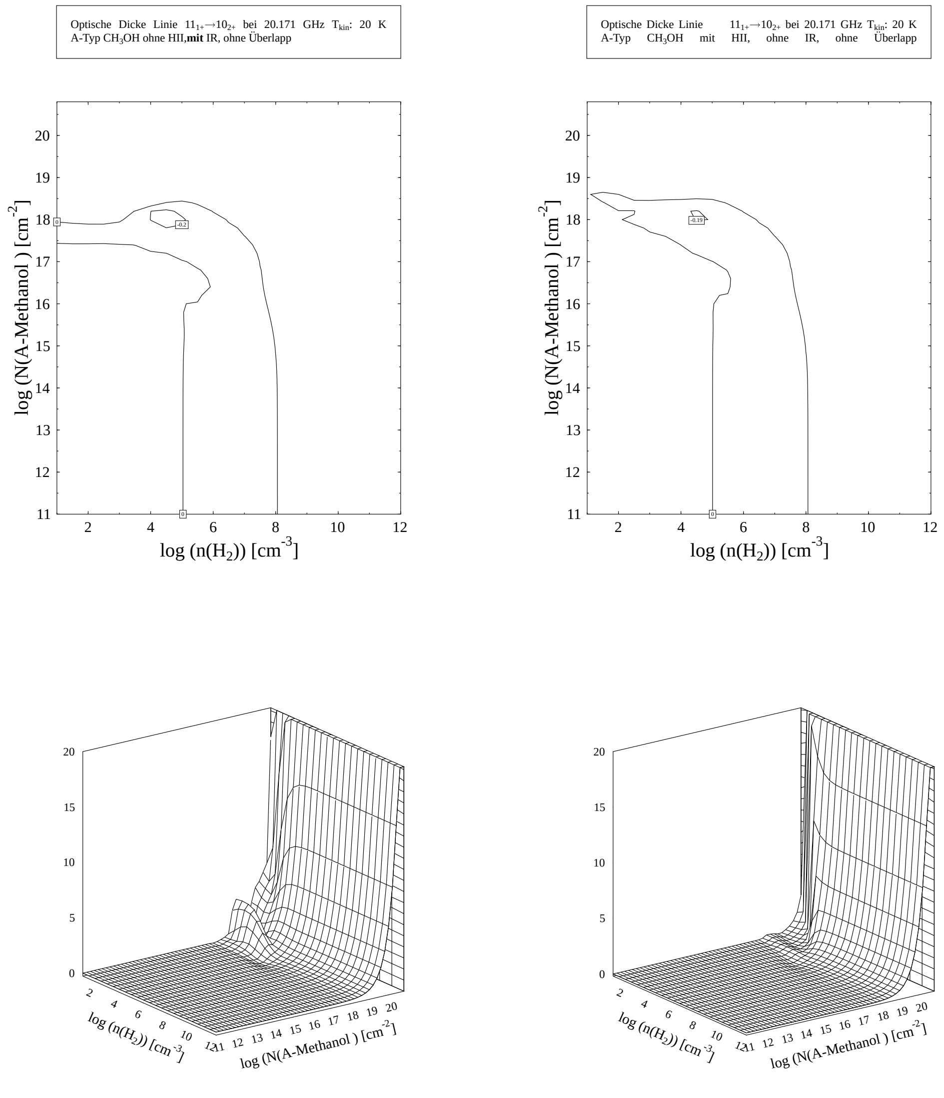

Abbildung 6.14: τ_ν der Linie $11_{1+} \rightarrow 10_{2+}$ mit IR (links) und H II (rechts), bei $T = 20$ K, ohne Überlapp

6.2 Klasse II-Maser

Klasse II-Maser findet man beispielsweise in W3(OH) und NGC 6334, ebenso wie in anderen Sternentstehungsgebieten, wo sie zusammen mit kompakten H II Regionen und OH/H_2O Maser, jedoch nicht zusammen mit OH/IR-Sternen auftreten [Cra92]. Im Gegensatz zu den Klasse I-Maser existiert bei ihnen noch kein Modell, daß alle vorkommenden Maser erklärt. Einigkeit herrscht jedoch darüber, daß sie im Gegensatz zu Klasse I-Maser strahlungsgepumpt sind, und Stöße für ihre Existenz keine dominante Rolle spielen. Zur Klasse II gehören die Serien:

$$\begin{array}{rlrcl} & J^0_{1+} \rightarrow (J+1)^0_{0+} & J & = & 4,5 \\ & J^0_{2\pm} \rightarrow (J-1)^0_{3\pm} & J & \geq & 6 \\ & J^0_{2+} \rightarrow (J+1)^0_{1+} & J & \leq & 9 \\ \text{bzw.} & J^0_{2-} \rightarrow (J+1)^0_{1-} & J & \leq & 8 \end{array}$$

6.2.1 Übergänge $J^0_{1+} \rightarrow (J-1)^0_{0+}$

Wie üblich stellen wir auch diesmal alle gefundenen Linien dieser Serie tabellarisch dar (Tabelle(6.7)). Wie man sieht, sind nur zwei Maser relevant,

Linie	T [K]	CMBR	H II	IR	H II+IR
$4_{1+} \rightarrow 5_{0+}$	**20**	> **0** [...]	> **0** [...]	-0.02[...]	> **0**[...]
	50	> **0** [...]	> **0** [...]	-0.2[...]	> **0**[...]
	100	-0.72[-0.75]	-0.63[-0.66]	-0.71[-0.75]	-0.63[-0.66]
$5_{1+} \rightarrow 6_{0+}$	**20**	-1.76[...]	-0.33[...]	-3.86[...]	-0.38[...]
	50	-2.57[-2.52]	-0.65[-0.63]	-3.86[...]	-0.64[-0.62]
	100	-5.29[-5.35]	-2.22[-2.24]	-5.32[-5.37]	-2.22[-2.24]

Tabelle 6.7: Minima der τ_ν aller invertierten Linien der Serie $J_{1+} \rightarrow (J-1)_{0+}$

wobei der erstgenannte recht schwach invertiert, aber trotzdem äußerst interessant ist. Vergleicht man die Werte, so stellt man fest, daß bei niedrigen Temperaturen keine Inversion zu finden ist, außer im Fall des Infrarotpumpens. Weder mit H II Region, noch gänzlich ohne Strahlungshintergrund ist dieser Maser in Emission zu finden. Diese Tendenz ist auch bei dem zweiten Vertreter dieser Serie zu finden. Vergleicht man die drei Modelle bei 20 K, so ist die Inversion bei Vorhandensein einer Infrarotquelle am stärksten.

Linie	Frequenz [GHz]	$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$
$4_{1+} \rightarrow 5_{0+}$	57.03	$9.12 \cdot 10^{-7}$
$5_{1+} \rightarrow 6_{0+}$	6.67	$1.49 \cdot 10^{-9}$

Tabelle 6.8: Charakteristische Werte der Serie $J_{1+} \rightarrow (J-1)_{0+}$

Linie $5_{1+} \rightarrow 6_{0+}$

Der Übergang $5_{1+} \rightarrow 6_{0+}$ produziert den zweitstärksten galaktischen Maser den man bisher überhaupt bei allen Molekülen gefunden hat. Unsere Rechnungen lassen diese Tendenz wiedererkennen. Mit Ausnahme des Übergangs $4^0_{3-} \rightarrow 5^0_{2-}$ ist die Inversion hier am stärksten (siehe Tabelle(6.7)). Wichtige Ein- und Ausgangslinien sind in der Kopplungstabelle (6.9) aufgelistet.

Eingänge			**Ausgänge**	
$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$	Niveau		Niveau	$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$
$1.7 \cdot 10^{-3}$	6^0_{2+}			
$5.6 \cdot 10^{-4}$	5^0_{2-}			
$2 \cdot 10^{-5}$	4^0_{2+}		4^0_{0+}	$9.4 \cdot 10^{-4}$
$9.9 \cdot 10^{-5}$	6^0_{1+}			
$6 \cdot 10^{-10}$	5^0_{1-}	$\longrightarrow 5^0_{1+} \longrightarrow$		
0.138	5^1_{2+}			
0.122	6^1_{2-}			
0.035	4^1_{2-}		4^0_{1+}	$5.6 \cdot 10^{-5}$
1.46	5^1_{0+}			
$1.5 \cdot 10^{-3}$	7^0_{1+}			
$3.4 \cdot 10^{-4}$	6^0_{1-}			
$1.7 \cdot 10^{-4}$	7^0_{0+}	$\longrightarrow 6^0_{0+} \longrightarrow$	5^0_{0+}	$1.1 \cdot 10^{-4}$
0.147	5^1_{2+}			
0.091	7^1_{1-}			
0.059	5^1_{1-}			

Tabelle 6.9: Linien, die an die Niveaus 5^0_{1+} und 6^0_{0+} ankoppeln.

Zur Analyse erhöhen wir wieder sukzessive die Säulendichte bei konstanter Wasserstoffdichte. Betrachten wir zuerst das obere Niveau. Bei niedrigen

N_{CH_3OH} findet hauptsächlich der Übergang $5_{1+} \rightarrow 4_{0+}$ statt, da der entsprechende A-Wert am höchsten ist, und dieser Übergang somit dem wahrscheinlichsten, also leichtesten 'Abfluß' entspricht. Ab $N_{CH_3OH} = 2.5 \cdot 10^{15}\mathrm{cm}^{-2}$ wird diese Linie optisch dick, und der nächst unwahrscheinlichere Übergang wird wirksam, hier $5_{1+} \rightarrow 4_{1+}$. Erhöht sich die Säulendichte bis zu $2.5 \cdot 10^{16}\mathrm{cm}^{-2}$ wird auch diese Linie optisch dick, und es bleibt nur noch ein Strahlungsübergang: $5_{1+} \rightarrow 6_{0+}$. Dessen A-Wert ist allerdings um 4 Größenordnungen kleiner, also unwahrscheinlicher als, sein 'Vorgänger'. Man kann sagen, es bildet sich ein 'Stau'. Hinzu kommt, daß die Zustände $4_{2+}, 6_{1+}$ beide intensiv in 5_{1+} pumpen. Gleichzeitig beginnen die Eingangslinien in das untere Niveau optisch dick zu werden, das heißt die relative Besetzung des Niveaus 6_{0+} nimmt ab, während die des Niveaus 5_{1+} zunimmt. Es entsteht eine Besetzungsinversion. Erhöht sich die Säulendichte etwas weiter, wird der Übergang $7_{0+} \rightarrow 6_{0+}$ optisch dick, wodurch die Besetzung von 6_{0+} noch weiter in Richtung thermische Besetzung abnimmt, während die relative Besetzung des oberen Niveaus noch weiter steigt. Das Minimum von τ_ν liegt bei $N_{CH_3OH} = 6.3 \cdot 10^{16}\mathrm{cm}^{-2}$. Ob der Maser bei weiterem Ansteigen der Säulendichte bestehen bleibt, hängt nun nur noch von dem oberen Niveau ab, da das untere fast thermische Besetzung erreicht hat, und Strahlungsübergänge hier im Vergleich zu den Stößen überhaupt keine Rolle mehr spielen. Steigt N_{CH_3OH} weiter an, so wird der Übergang $5_{2+} \rightarrow 4_{2+}$ optisch dick. Damit ist der 'Hauptzufluß' zu 5_{1+} unterbrochen und die Inversion müßte aufhören, aber gleichzeitig tritt $3_{3+} \rightarrow 4_{2+}$ in den Vordergrund und versorgt den Maser weiter. Hinzu kommt, das alle anderen Strahlungsausgänge aus 4_{2+} optisch dick werden, und nur noch die Linie $4_{2+} \rightarrow 5_{1+}$ übrigbleibt. Dieser Zustand kann jedoch bei einem weiteren Anstieg von N_{CH_3OH} nicht aufrechterhalten bleiben, womit die Inversion beseitigt wird.

Das Besondere an diesem Maser ist zum einen seine energetisch tiefe Position im Termschema, zum anderen jedoch auch sein sehr kleiner A-Wert. Ein Maser ist umso intensiver, je schneller seine Eingänge in das obere Niveau und umso langsamer seine Ausgänge aus dem oberen Niveau sind. Dadurch ist eine starke Inversion überhaupt erst möglich. Das impliziert ein Zustandekommen von Maserlinien nur zwischen recht nah beieinanderliegenden Niveaus im Energietermschema, da A_{ik} mit ν^3 skaliert.

Obwohl beide Niveaus fast gleiche Energien aufweisen ist der Zustand 6_{0+} vor Zustandekommen der Inversion in τ wesentlich stärker besetzt als 5_{1+}. Das liegt an ihrer Lage in den K-Leitern 0 und 1. Wie bei den Maser der Linie

$J_{0+} \rightarrow (J-1)_{1+}$ bereits erwähnt sind Stöße innerhalb der K=0 Leiter sehr viel effektiver als Stöße mit $\Delta K \neq 0$. Nur war bei dieser Serie das obere Niveau bei K=0, d.h. der Eingang des Masers war sehr stark stoßabhängig. Hier ist es nun umgekehrt. Die Eingänge sind strahlungsdominiert und Stoßraten spielen keine Rolle. Das ist das Hauptmerkmal dieses Klasse II-Masers.

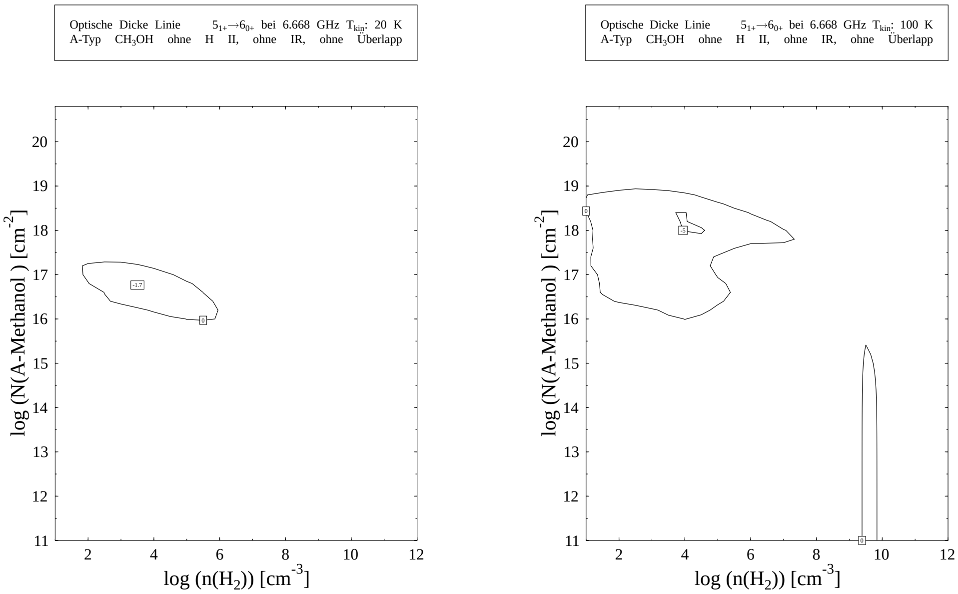

Abbildung 6.15: Optische Dicken der Linie $5^0_{1+} \rightarrow 6^0_{0+}$ ohne H II, ohne Infrarot, ohne Überlapp bei $T = 20$ K (links) und bei 100K(rechts)

Erhöht man die Temperatur auf 100K so ändern sich die Besetzungszahlenverhältnisse merklich. Durch starke Stoßübergangsraten sind alle Niveaus wesentlich stärker besetzt. Durch Strahlungsübergänge in die tiefen Niveaus hinein ist es sogar so, daß alle relevanten Zustände sehr stark überthermisch besetzt sind. Trotz der hohen relativen Besetzung ist die absolute Besetzung der Niveaus um einiges niedriger, als bei einer Temperatur von 20K (Tabelle(6.10)). Die optische Dicke einer Linie hängt bei konstanter Säulendichte von Δn_{ik}, der Differenz der absoluten Besetzung zwischen unterem und oberem Niveau, ab. Wie man deutlich sieht, ist diese Differenz bei höherer

Niveau	$n_{20\mathrm{K}}$	$n_{100\mathrm{K}}$
4_{1+}	$4.2 \cdot 10^{-2}$	$1.6 \cdot 10^{-2}$
6_{0+}	$3.3 \cdot 10^{-2}$	$1.9 \cdot 10^{-2}$
5_{1+}	$2.6 \cdot 10^{-2}$	$1.6 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 6.10: Vergleich der absoluten Besetzungszahlen bei $T = 20$ K und $T = 100$K bei $n_{H_2} = 3.2 \cdot 10^3 \mathrm{cm}^{-3}$, $N_{CH_3OH} = 1.6 \cdot 10^{16} \mathrm{cm}^{-2}$

Temperatur um einiges kleiner, als bei niedriger. Damit ist auch die optische Dicke entsprechend kleiner. Das führt dazu, daß der vorher beschriebene Pumpzyklus erst bei etwas höherer Säulendichte und Wasserstoffdichte in Kraft tritt. Außerdem bleibt er über ein größeres N_{CH_3OH}-Intervall aktiv, da die betrachteten Linien später optisch dick werden. Die Eingangslinien in das obere Niveau und die Ausgänge aus dem unteren Niveau können länger aktiv bleiben. Zum zweiten sind die torsionsangeregten Zustände bei diesen Temperaturen genügend hoch besetzt um eine Vielzahl von Strahlungsübergängen in die Rotationsniveaus des Torsionsgrundzustandes machen zu können. Auch dadurch werden die Zuflüsse in die Maserniveaus verstärkt, und zwar so sehr, daß es zu einer sehr viel stärkeren Inversion kommen kann. Das Hin-

Niveau	n_{IR+3K}	n_{3K}
5^0_{0+}	$4.9 \cdot 10^{-2}$	$7.8 \cdot 10^{-4}$
6^0_{0+}	$9.4 \cdot 10^{-3}$	$5.4 \cdot 10^{-6}$
5^0_{1+}	$1.1 \cdot 10^{-2}$	$3.6 \cdot 10^{-6}$
4^0_{2+}	$9.3 \cdot 10^{-4}$	$3.7 \cdot 10^{-8}$
3^1_{1-}	$4.3 \cdot 10^{-3}$	$3.6 \cdot 10^{-12}$

Tabelle 6.11: Vergleich der absoluten Besetzungszahlen mit und ohne IR-Quelle bei $T = 20$ K und $n_{H_2} = 1 \mathrm{cm}^{-3}$, $N_{CH_3OH} = 6.3 \cdot 10^{15} \mathrm{cm}^{-2}$

zufügen einer Infrarotquelle liefert einen enormen Effekt. Wie man in Tabelle (6.11) sieht, verändern sich die Besetzungszahlen sehr stark. Besonders stark wirkt sich das auf die torsionsangeregten Zustände aus, deren Besetzungszahlen um viele Größenordnungen größer sind. Dadurch sind sie in der Lage, viele Strahlungsübergänge zu machen, und zwar vorwiegend: $[K = 1; n = 1 \rightarrow K = 0, 2; n = 0]$ und $[K = 2; n = 1 \rightarrow K = 1, 3; n = 0]$. Die

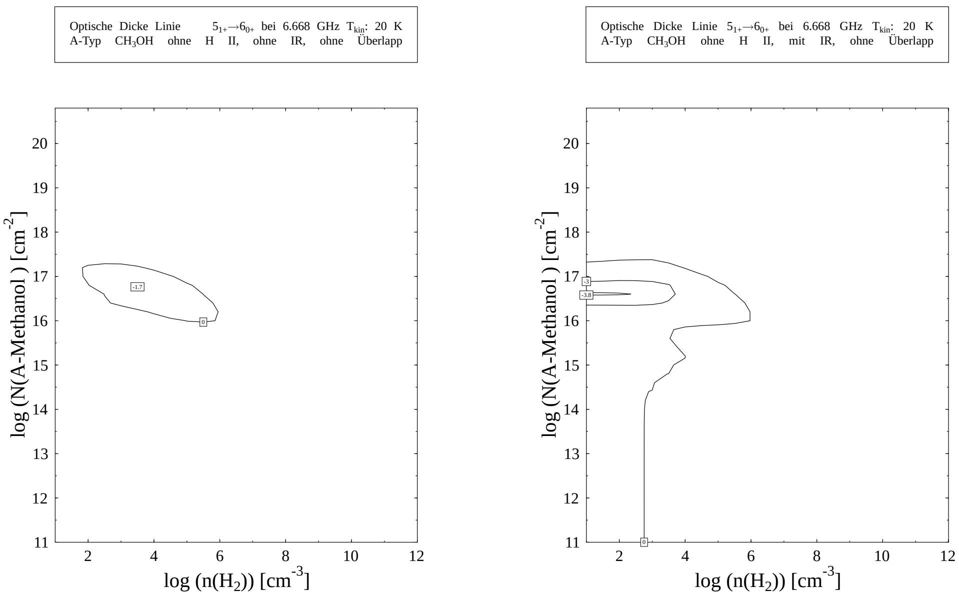

Abbildung 6.16: Optische Dicken der Linie $5^0_{1+} \rightarrow 6^0_{0+}$ bei $T = 20$K ohne (links) und mit Infrarothintergrund (rechts)

besetzten Niveaus mit höheren K-Werten kaskadieren dann zu immer kleiner werdenden J und K Werten. Dadurch werden das obere Maserniveau und seine Zulieferer sehr intensiv gepumpt. Durch den niedrigen A-Wert von 5_{1+} bildet sich ein sehr großer 'Stau' in Form der Besetzungsinversion. Dies ist am stärksten bei niedrigen Wasserstoffdichten ausgeprägt, da dort die Stoßbesetzung derjenigen oberen Niveaus, die zur Besetzung von 6_{0+} beitragen, noch sehr schwach ist. Vergleicht man die Konturplots der optischen Dicke mit und ohne IR-Hintergrund, so sieht man eine Inversion bei niedrigen Wasserstoff- und Säulendichten. Verantwortlich dafür ist der gleiche Effekt, der bereits beim Übergang $7_{0+} \rightarrow 6_{1+}$ beschrieben wurde: Strahlungsübergänge aus den n=1 Zuständen finden intensiver in die K=1 Leiter als in die K=0 Leiter statt. Im Unterschied zur Linie $7_{0+} \rightarrow 6_{1+}$ ist jetzt allerdings das obere Maserniveau in der K=1 Leiter angesiedelt, wodurch eine Besetzungsinversion vorkommen kann, wo es ohne IR-Quelle keine gibt.

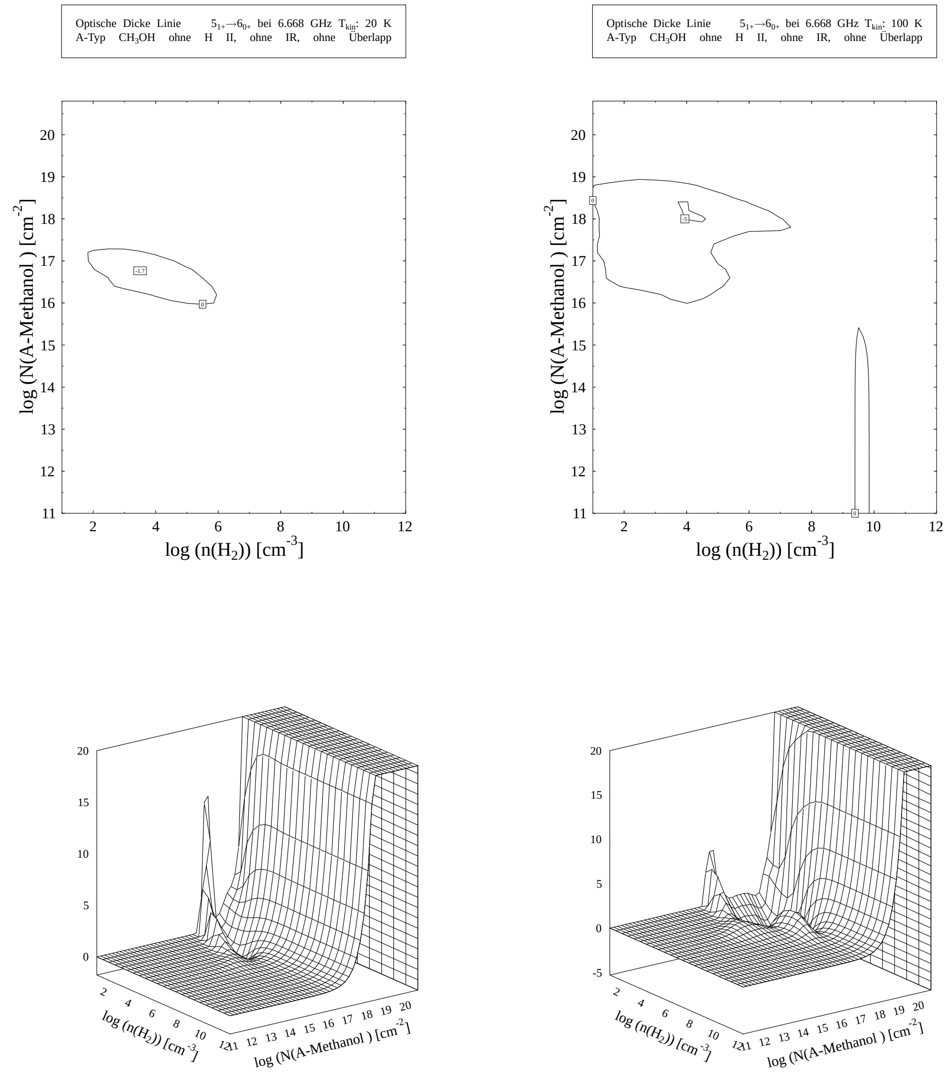

Abbildung 6.17: τ_ν der Linie $5_{1+} \rightarrow 6_{0+}$ bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts), ohne H II, ohne IR, ohne Überlapp

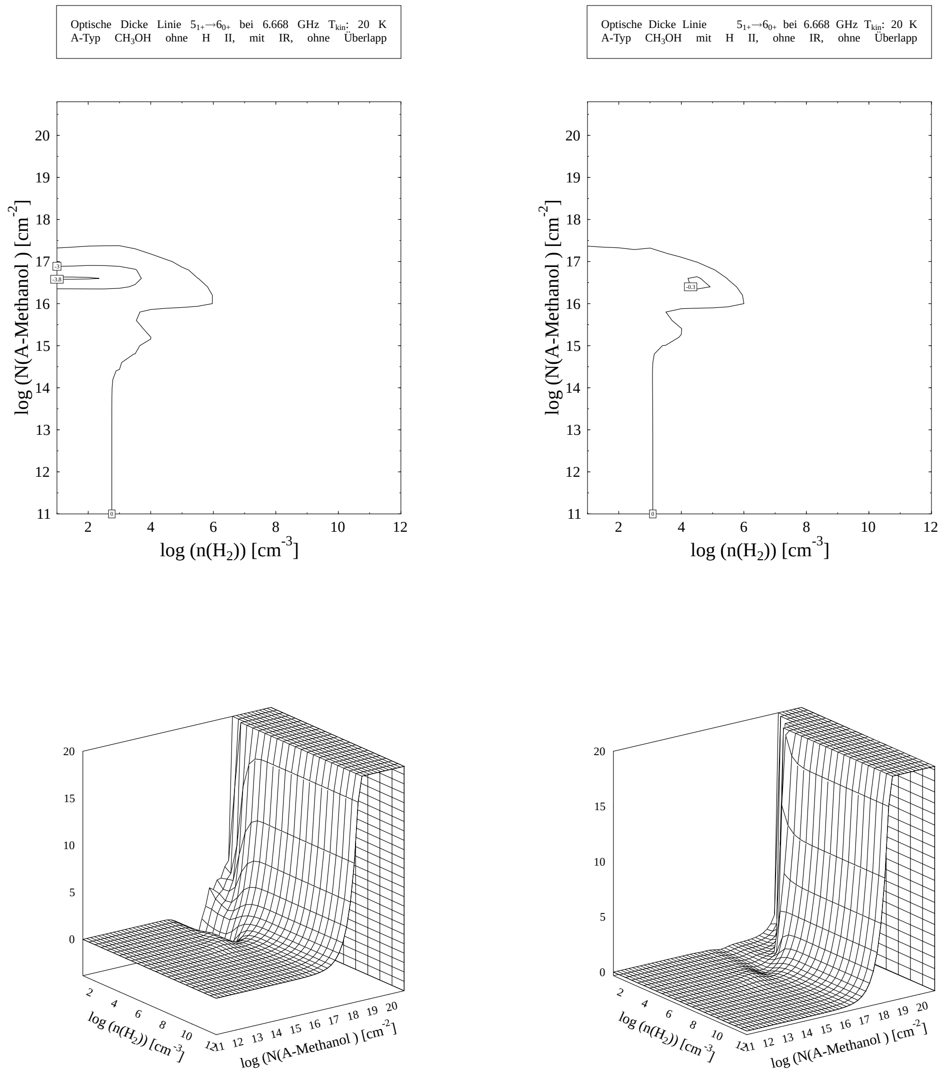

Abbildung 6.18: τ_ν der Linie $5_{1+} \rightarrow 6_{0+}$ mit IR (links) und H II (rechts), bei $T = 20$ K, ohne Überlapp

6.2.2 Übergänge $J^0_{2\pm} \rightarrow (J+1)^0_{1\pm}$

In Tabelle (6.12) sind die minimalen optischen Dicken bei den verschiedenen Modellrechnungen aufgeführt. Bei niedrigen Temperaturen finden wir so gut wie keine Inversion, es sei denn man berücksichtigt einen Strahlungshintergrund in Form einer H II Region oder einer Infrarotquelle. Deren Strahlung verstärkt die Inversion um einiges. Die Berücksichtigung eines Linienüber-

Linie	T [K]	CMBR	H II	IR	H II+IR
$8_{2-} \rightarrow 9_{1-}$	**20**	$-1.7 \cdot 10^{-9}$[.]	-0.14[...]	-0.94[-0.89]	-0.23[...]
	50	$-2.6 \cdot 10^{-8}$[.]	-0.11[-0.13]	-0.88[-0.85]	-0.25[-0.24]
	100	-1.57[-1.62]	-1.17[-1.2]	-1.57[-1.62]	-1.17[-1.2]
$9_{2+} \rightarrow 10_{1+}$	**20**	$-6 \cdot 10^{-7}$[.]	-0.07[...]	-0.99[-0.95]	-0.18[...]
	50	$-1 \cdot 10^{-6}$[-0.14]	-0.07[-0.06]	-0.83[-0.8]	-0.17[...]
	100	-1.45[-1.5]	-1.06[-1.09]	-1.46[-1.51]	-1.06[-1.09]

Tabelle 6.12: Minima der τ_ν aller invertierten Linien der Serie $J_{2\pm} \rightarrow (J+1)_{1\pm}$

lapps spielt so gut wie keine Rolle, und wird im weiteren außer Acht gelassen. Einen Grund für die schwächere Inversion kann man aus Tabelle (6.13) entnehmen. Beide Maser dieser Serie haben A-Werte, die größer sind, als zum Beispiel die des Masers $5_{1+} \rightarrow 6_{0+}$. Diese höheren A-Werte erleichtern den 'Abfluß' aus dem oberen Maserniveau und verhindern somit eine starke Inversion.

Linie	Frequenz [GHz]	$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$
$8_{2-} \rightarrow 9_{1-}$	28.97	$4.52 \cdot 10^{-8}$
$9_{2+} \rightarrow 10_{1+}$	23.12	$2.38 \cdot 10^{-8}$

Tabelle 6.13: Charakteristische Werte der Serie $J_{2\pm} \rightarrow (J+1)_{1\pm}$

Linie $8_{2-} \rightarrow 9_{1-}$

Bei niedrigen Temperaturen betrachtet (siehe Figur (6.19), links), geschieht eine Inversion nur bei sehr kleinen Wasserstoffdichten und geringen Säulendichten. Der Grund für diese Inversion ist eine stärkere Stoßbesetzung des oberen Maserniveaus. Das ist möglich, da beide Niveaus, energetisch fast gleich hoch liegen, das obere Maserniveau jedoch einen kleineren J-Wert aufweist. Die Stoßraten sind derart, daß Stöße mit kleinerem ΔJ stärker sind. Energieniveaus, die das obere Maserniveau durch Stöße anregen können liegen innerhalb jeder K-Leiter jeweils tiefer als jene, die das untere Maserniveau besetzen können. Bei niedrigen Temperaturen bzw. niedrigen Wasserstoffdichten sind die tiefsten Niveaus des Termschemas viel stärker besetzt, als die unmittelbar darüber liegenden, was zu einer stärkeren Stoßbesetzung des Niveaus 8_{2-} führt. Da dieser Zustand jedoch einen höheren K-Wert hat, als sein Maserpartner, fällt diese Stoßinversion weniger stark aus. Fügt man

<table>
<tr><th colspan="2">Eingänge</th><th></th><th colspan="2">Ausgänge</th></tr>
<tr><th>$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$</th><th>Niveau</th><th></th><th>Niveau</th><th>$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$</th></tr>
<tr><td>$1.3 \cdot 10^{-3}$</td><td>9^0_{3-}</td><td rowspan="9">$\longrightarrow 8^0_{2-} \longrightarrow$</td><td rowspan="2">$7^0_{1-}$</td><td rowspan="2">$2.1 \cdot 10^{-3}$</td></tr>
<tr><td>$3.5 \cdot 10^{-4}$</td><td>9^0_{2-}</td></tr>
<tr><td>$7.7 \cdot 10^{-5}$</td><td>8^0_{3+}</td><td rowspan="2">8^0_{1+}</td><td rowspan="2">$6.1 \cdot 10^{-4}$</td></tr>
<tr><td>0.216</td><td>8^1_{3+}</td></tr>
<tr><td>0.216</td><td>9^1_{3+}</td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>0.05</td><td>7^1_{3+}</td><td rowspan="2">7^0_{2+}</td><td rowspan="2">$2.4 \cdot 10^{-4}$</td></tr>
<tr><td>0.152</td><td>8^1_{1-}</td></tr>
<tr><td>0.063</td><td>9^1_{1+}</td><td rowspan="2">7^0_{3-}</td><td rowspan="2">$4.6 \cdot 10^{-6}$</td></tr>
<tr><td>0.096</td><td>7^1_{1+}</td></tr>
<tr><td>$2.7 \cdot 10^{-3}$</td><td>10^0_{2-}</td><td rowspan="6">$\longrightarrow 9^0_{1-} \longrightarrow$</td><td rowspan="2">$8^0_{1-}$</td><td rowspan="2">$3.7 \cdot 10^{-4}$</td></tr>
<tr><td>$5.1 \cdot 10^{-4}$</td><td>10^0_{1+}</td></tr>
<tr><td>$5 \cdot 10^{-4}$</td><td>9^0_{2+}</td><td rowspan="2">9^0_{0+}</td><td rowspan="2">$3.7 \cdot 10^{-4}$</td></tr>
<tr><td>0.142</td><td>9^1_{2-}</td></tr>
<tr><td>0.116</td><td>10^1_{2+}</td><td rowspan="2">9^0_{1+}</td><td rowspan="2">$5.5 \cdot 10^{-9}$</td></tr>
<tr><td>0.042</td><td>8^1_{2+}</td></tr>
</table>

Tabelle 6.14: Linien, die an die Niveaus 8^0_{2-} und 9^0_{1-} ankoppeln.

nun einen starken Strahlungshintergrund in Form ein H II Region hinzu, so erhöht man die Besetzung der hohen, torsionsangeregten Niveaus, und durch Strahlungsabregung auch die Besetzung der tieferen Niveaus. Vergleicht man die Konturplots von τ_ν in Figur (6.19,links) und Figur (6.20,links) kann man ein weiteres Masergebiet bei gleicher Wasserstoffdichte, aber höherer Säulendichte erkennen. Bei $N_{CH_3OH} \geq 2.5 \cdot 10^{17}\mathrm{cm}^{-2}$ kommt die Tatsache zum Tragen, daß wichtige Zuflüsse des unteren Maserniveaus optisch dick wer-

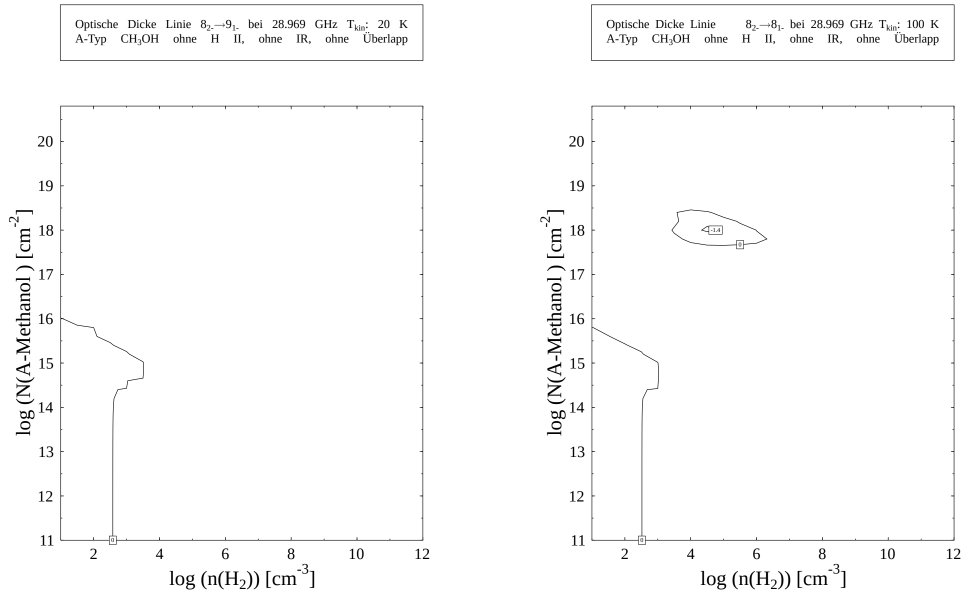

Abbildung 6.19: Optische Dicken der Linie $8^0_{2-} \rightarrow 9^0_{1-}$ ohne H II-Region, ohne IR Quelle, ohne Linienüberlapp, bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts)

den. Dadurch kann sich erneut ein Inversionsgebiet ausbilden. Hinzu kommen stark überthermisch besetzte Torsionszustände, die aufgrund des Verhältnisses zwischen Absorptions- und Emissionskoeffizienten, Absorptionsübergänge aus den Maserniveaus heraus durchführen, also nicht mehr als Eingangsniveaus, sondern als Ausgänge fungieren. Da das Niveau 8_{2-} den Eingang mit dem kleinsten A-Wert besitzt, kann sich ein neues Minimum der optische Dicke bei einem Parameterbereich bilden, bei dem alle anderen Eingangslinien bereits optisch dick geworden sind. Wie man in Figur (6.20) sehen kann, geschieht das auch, wenn man die H II Region durch einen entsprechenden Infrarotstrahler ersetzt. Bei hohen Temperaturen kommt ein weiterer Effekt hinzu. Abbildung (6.19) läßt eine neue Region mit negativer optischer Dicke bei relativ hohen Säulendichten und kleiner bis mittlerer Wasserstoffdichte erkennen. An der Struktur der bisher betrachteten Inversionsregion, im un-

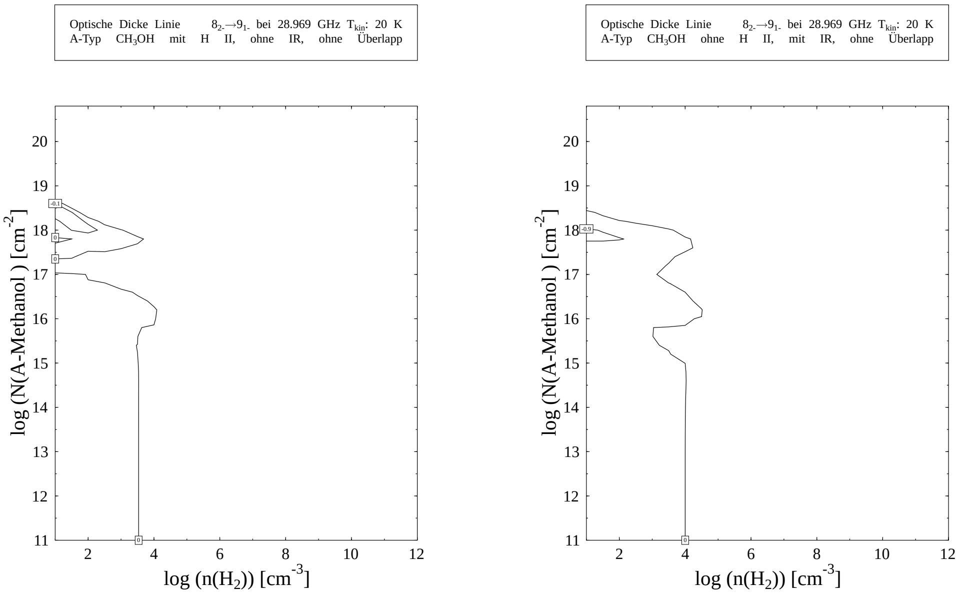

Abbildung 6.20: Optische Dicken der Linie $8^0_{2-} \rightarrow 9^0_{1-}$ bei $T = 20$ K mit H II-Region (links) und Infrarothintergrund (rechts)

teren linken Teil des Diagramms ändert sich bei hohen Temperaturen nichts. Das neue Inversionsgebiet resultiert aus einer hohen Stoßbesetzung der Torsionsgrundzustände aus den torsionsangeregten Niveaus. Diese Stoßabregung ist in das Niveau 8_{2-} hinein etwas effektiver, als in das Niveau 9_{1-}. Außerdem sind Strahlungsübergänge in das obere Maserniveau etwas intensiver als in das untere. Zusammen mit der starken Pumpwirkung des Zustandes 7_{3-} bei hohen Säulendichten, die bereits bei Vorhandensein eines Strahlungshintergrundes eine tragende Rolle gespielt hat, erhöht sich die Besetzung des oberen Zustandes stärker, als die des unteren. Da dieser Mechanismus von einer hohen Besetzung der torsionsangeregten Zustände, sowie der höheren Niveaus des Torsionsgrundzustandes abhängt, findet man ihn nur bei hohen Temperaturen, und/oder einem Strahlungshintergrund.

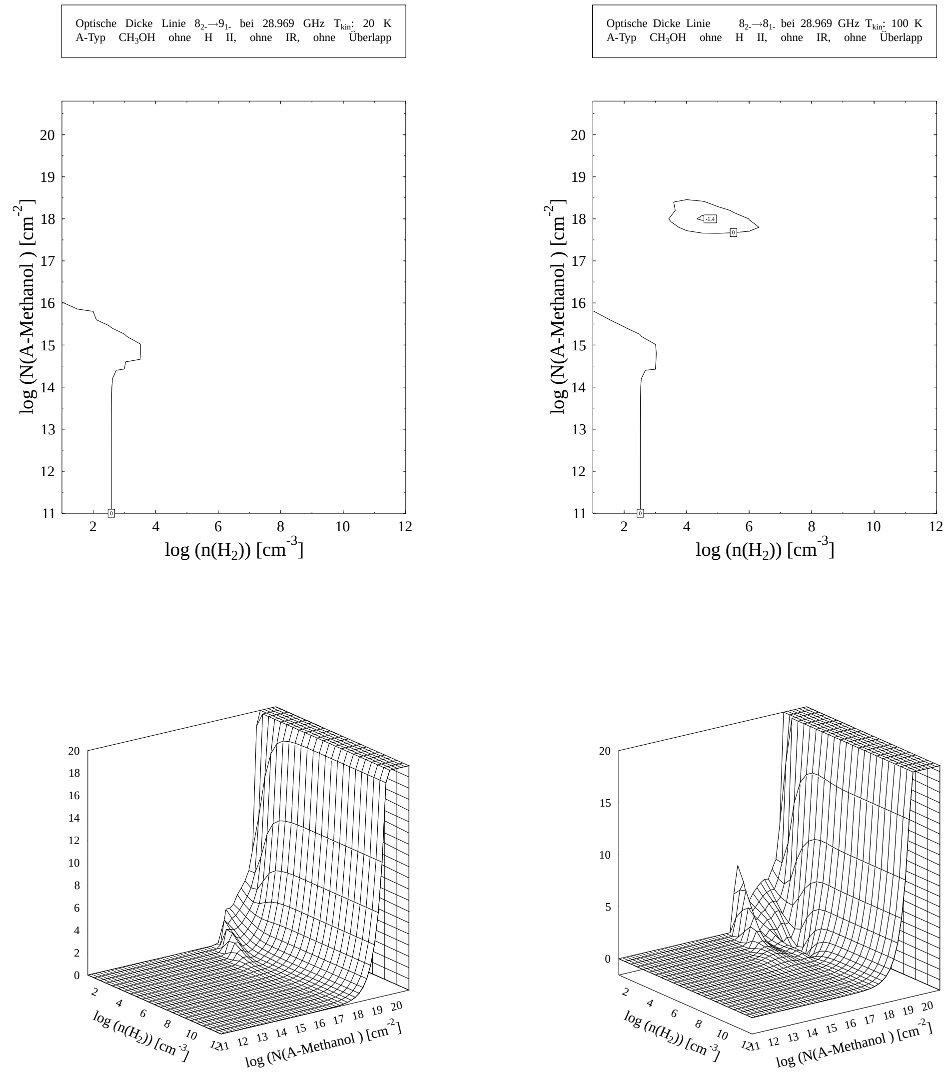

Abbildung 6.21: τ_ν der Linie $8_{2-} \to 9_{1-}$ bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts), ohne H II, ohne IR, ohne Überlapp

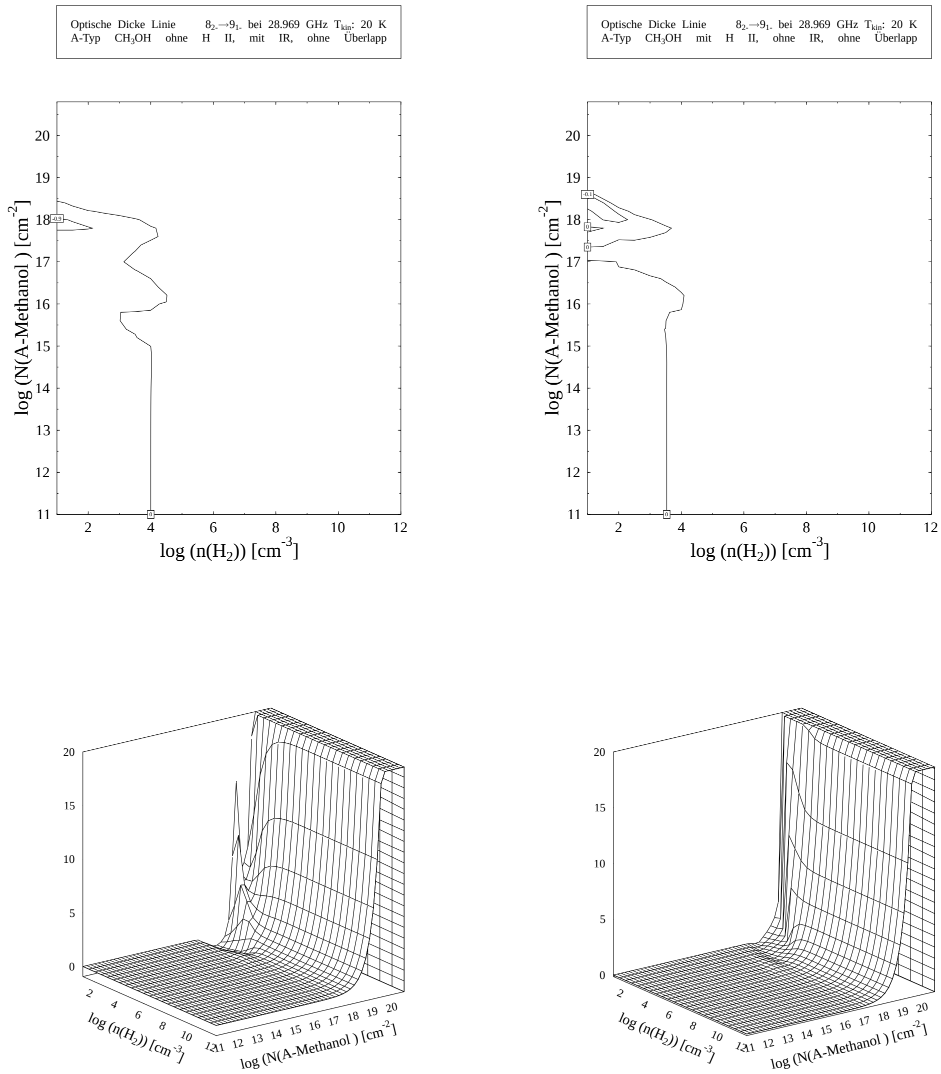

Abbildung 6.22: τ_ν der Linie $8_{2-} \rightarrow 9_{1-}$ mit IR (links) und H II (rechts), bei $T = 20$ K, ohne Überlapp

6.2.3 Übergänge $J^0_{2\pm} \rightarrow (J-1)^0_{3\pm}$

Wie man in Tabelle (6.15) erkennt, sind die Maser dieser Serie relativ schwach invertiert. Ein Grund dafür sind die recht hohen K-Werte der einzelnen Niveaus, denn Stoßübergänge mit hohen ΔK sind sehr selten. Genauer analysieren werden wir wieder den Übergang mit der intensivsten Inversion. Diese

Linie	T [K]	CMBR	H II	IR	H II+IR
$6_{2-} \rightarrow 5_{3-}$	**20**	-0.52[-0.22]	-0.16[-0.1]	-0.21[-0.13]	-0.08[...]
	50	-0.79[-0.5]	-0.33[-0.28]	-0.43[-0.33]	-0.31[-0.27]
	100	-0.84[-0.5]	-0.36[-0.34]	-0.48[-0.38]	-0.35[-0.34]
$6_{2+} \rightarrow 5_{3+}$	**20**	-0.52 [-0.21]	-0.14[-0.09]	-0.19[-0.11]	-0.07[...]
	50	-0.61[-0.4]	-0.31[-0.25]	-0.39[-0.31]	-0.29[-0.24]
	100	-0.62[-0.41]	-0.34[-0.33]	-0.42[-0.35]	-0.33[...]
$7_{2-} \rightarrow 6_{3-}$	**20**	-0.08[-0.06]	-0.02[-0.01]	-0.06[-0.03]	$>$ **0**[...]
	50	-0.35[-0.26]	-0.19[-0.16]	-0.25[-0.21]	-0.18[-0.14]
	100	-0.42[-0.29]	-0.25[-0.21]	-0.29[-0.25]	-0.23[-0.21]
$7_{2+} \rightarrow 6_{3+}$	**20**	-0.07[-0.05]	-0.02[-0.01]	-0.04[-0.02]	$>$ **0**[...]
	50	-0.3[-0.24]	-0.18[-0.16]	-0.22[-0.19]	-0.17[-0.14]
	100	-0.32[-0.27]	-0.21[-0.2]	-0.28[-0.24]	-0.22[-0.19]
$8_{2-} \rightarrow 7_{3-}$	**20**	$-2.3 \cdot 10^{-4}$[.]	$>$ **0**[...]	$>$ **0**[...]	$>$ **0**[...]
	50	-0.09[-0.07]	-0.05[-0.03]	-0.07[-0.05]	-0.04[-0.02]
	100	-0.15[-0.12]	-0.1[-0.09]	-0.12[-0.09]	-0.1[-0.08]
$8_{2+} \rightarrow 7_{3+}$	**20**	$-2.3 \cdot 10^{-4}$[.]	$>$ **0**[...]	$>$ **0**[...]	$>$ **0**[...]
	50	-0.09[-0.07]	-0.05[-0.03]	-0.07[-0.05]	-0.03[-0.02]
	100	-0.14[-0.12]	-0.1[-0.09]	-0.11[-0.09]	-0.18[...]

Tabelle 6.15: Minima der τ_ν aller invertierten Linien der Serie $J_{2\pm} \rightarrow (J-1)_{3\pm}$

Maserserie fällt nach unseren bisherigen Überlegungen etwas aus dem Rahmen. Die Serie ist durch ein oberes Niveau mit *kleinerem* K-Werte als das untere Niveau ausgezeichnet. Vergleicht man dies mit den bisher behandelten, so sieht man, daß dies eine Eigenschaft der Klasse I Maser zu sein scheint. Soll ein Maser stoßgepumpt werden, so bietet sich ein niedriger K-Eingang an, da diese durch Stöße einfacher besetzt werden können. Möchte man einen Maser strahlungspumpen, bzw. ihn von Stoßpumpen unabhängig machen, so ist die umgekehrte Konfiguration besser. Stoßunempfindlichkeit kann man jedoch auch durch möglichst hohe K-Werte in beiden Niveaus erreichen. Stöße präferieren dann zwar immer noch das obere Maserniveau, jedoch ist ihr Einfluß nicht mehr so stark, wie bei kleinen K-Werten. Da die Klassifikation in I und II eher von der Beobachterseite stattfindet, also durch die den Maser umgebenden beobachteten Bedingungen, und nicht durch molekulare Klassifikation, was Angesichts des damals noch sehr geringen Verständnisses der Pumpmechanismen auch durchaus vernünftig ist, ist diese Serie eher eine Mischform zwischen Klasse I und II. Hinzu kommt, daß diese Serie ohne Beachtung des Linienüberlapps schon relativ schwach invertiert ist. Berücksichtigt man diesen bei der Rechnung, so wird die Inversion um ca. 50% reduziert. Wenn man bedenkt, daß so etwas wie ein Linienüberlapp in Wirklichkeit immer vorkommt, muß man feststellen, daß dieser Maser durch die geringe Inversion nicht sehr leicht zu beobachten sein wird, obwohl seine Existenz vorhergesagt wurde [Cra92].

Linie	Frequenz [GHz]	$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$
$6_{2-} \rightarrow 5_{3-}$	38.29	$8.78 \cdot 10^{-8}$
$6_{2+} \rightarrow 5_{3+}$	38.45	$8.89 \cdot 10^{-8}$
$7_{2-} \rightarrow 6_{3-}$	86.62	$1.13 \cdot 10^{-6}$
$7_{2+} \rightarrow 6_{3+}$	86.90	$1.14 \cdot 10^{-6}$
$8_{2-} \rightarrow 7_{3-}$	134.90	$4.59 \cdot 10^{-6}$
$8_{2+} \rightarrow 7_{3+}$	135.38	$4.64 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 6.16: Charakteristische Werte der Serie $J_{2\pm} \rightarrow (J-1)_{3\pm}$

Linie $6_{2-} \rightarrow 5_{3-}$

Betrachtet man in Tabelle (6.17) Ein- und Ausgänge, sowie deren A-Werte, so sieht man sofort einen der Gründe für die geringe Stärke dieses Masers. Das obere Niveau hat wenige, relativ langsame Eingänge und 'viele' Ausgänge, während das untere Niveau zum einen viele, recht schnelle Eingänge und immerhin einige langsamere Ausgänge. Das bedeutet, daß sich eine Besetzungsinversion nur schwach ausbilden kann, da es zum einen auch auf dem unteren Niveau zu einem Besetzungsstau kommen kann, zum anderen kann das obere Niveau über genügend andere Kanäle 'entleert' werden. Der Grund dafür, daß es doch zu einer einigermaßen hohen Inversion kommt ist der, daß ab einer Säulendichte von $2.5 \cdot 10^{16}\mathrm{cm}^{-2}$, einer der Ausgänge aus 6_{2-}, nämlich

Eingänge			Ausgänge	
$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$	Niveau		Niveau	$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$
$9.2 \cdot 10^{-4}$	7^0_{3-}		7^0_{1-}	$3.9 \cdot 10^{-6}$
$1.6 \cdot 10^{-4}$	7^0_{2-}			
$7.2 \cdot 10^{-5}$	6^0_{3+}		5^0_{1-}	$1.7 \cdot 10^{-3}$
0.202	6^1_{3-}			
0.231	7^1_{3+}	$\longrightarrow 6^0_{2-} \longrightarrow$		
0.038	5^1_{3+}		6^0_{1+}	$5.8 \cdot 10^{-4}$
0.149	6^1_{1-}			
0.053	7^1_{1+}		5^0_{2-}	$9.4 \cdot 10^{-5}$
0.115	5^1_{1+}			
$5.1 \cdot 10^{-3}$	4^0_{4-}		4^0_{2-}	$6.4 \cdot 10^{-4}$
$8.6 \cdot 10^{-4}$	5^0_{4+}			
$7.9 \cdot 10^{-5}$	7^0_{0+}			
$1.5 \cdot 10^{-5}$	4^0_{4-}	$\longrightarrow 5^0_{3-} \longrightarrow$	5^0_{2+}	$6.7 \cdot 10^{-5}$
$4.4 \cdot 10^{-3}$	4^1_{4+}			
0.063	5^1_{2-}		4^0_{3-}	$3.8 \cdot 10^{-5}$
0.014	6^1_{2+}			
0.086	4^1_{2+}			

Tabelle 6.17: Linien, die an die Niveaus 6^0_{2-} und 5^0_{3-} ankoppeln.

der Zustand 7_{1-} durch Absorptionsübergänge in 6_{2-} hinein zu einem weiteren Eingang wird. Dieser neue Eingang hat einen K-Wert von 1 und kann durch Stöße noch recht stark besetzt werden. Diese hohe Besetzung macht ihn zu einem recht effektiven Zufluß des Masers und erhöht die relative Besetzung des oberen Niveaus. Hinzu kommt, daß der Übergang $7_{2-} \rightarrow 7_{1+}$ optisch dick wird, und die Linie $7_{2-} \rightarrow 6_{2-}$ stärker wird. Da das Niveau 5^0_{3-} jedoch über sehr starke Eingänge verfügt, kann die Inversion nicht stark werden. Erst bei einer Säulendichte von $10^{17}\mathrm{cm}^{-2}$ verändert sich das Schema etwas. Der Hauptabfluß aus 6_{2-}, die Linie $6_{2-} \rightarrow 5_{2-}$ wird optisch dick. Die oben beschriebene Absorptionslinie $7_{1-} \rightarrow 6_{2-}$ geht in Emission über, und wird zu einem neuen Ausgang. Damit ist noch nichts verändert. Jedoch wird bei gleicher Säulendichte der Übergang $8_{2-} \rightarrow 7_{2-}$ um einiges stärker. Dadurch ist ein weiterer Eingang in 6_{2-} stärker geworden und die relative Besetzung erhöht sich sprunghaft. Dieser Zustand ist jedoch nur über ein kurzes Intervall in N_{CH_3OH} existent. Bei einer weiteren Erhöhung werden die Eingänge in das obere Niveau optisch dick, und neue Eingänge in das untere Niveau nehmen an Stärke zu wodurch die Inversion beendet wird. Bei einer

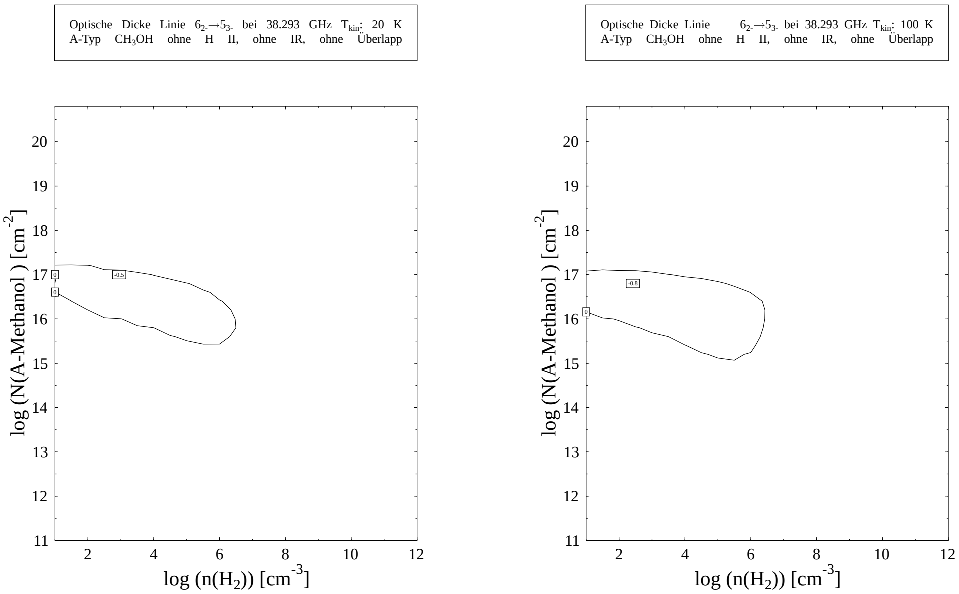

Abbildung 6.23: Optische Dicken der Linie $6^0_{2-} \to 5^0_{3-}$ ohne H II-Region, ohne IR Quelle und ohne Linienüberlapp bei $T = 20$ K (links) und $T =$ 100K(rechts)

Temperatur von $T = 100\,\mathrm{K}$ ändert sich qualitativ wenig. Durch die höhere Temperatur sind Zustände mit größeren J und K Quantenzahlen stärker besetzt. Dadurch werden beide Maserniveaus stärker besetzt. Die Eingänge in das obere Niveau sind effektiver, und das untere Niveau kann nun auch von den Niveaus 'Zuflüsse' erhalten, die vorher zu schwach besetzt waren, so zum Beispiel 6^0_{4-} und 4^1_{2+}. Beide Effekte sind einander einigermaßen ausgleichend. Daß die optische Dicke trotzdem etwas kleiner ist, liegt daran, daß sich die absolute Differenz der Besetzungszahlen Δn_{ik} etwas vergrößert hat, obwohl sich an den relativen Besetzungsverhältnissen nicht viel geändert hat.

Um den starken Einfluß des Linienüberlapps auf die optische Dicke dieser

Linie zu verstehen, muß man sich Tabelle (4.1) auf Seite 52 anschauen. Man stellt fest, daß eine der Ausgangslinien des unteren Niveaus $5_{3-} \rightarrow 4_{3-}$ am Linienüberlapp teilnimmt. Viel wichtiger ist allerdings, daß auch die Linie $4_{3-} \rightarrow 3_{3-}$ überlappt. Beide Linien überlappen jeweils mit ihren K_+ Partnern. Dieser Überlapp hat zur Folge, daß sich die Intensität der Linienstrah-

Linie	B_{ik}	B_{ki}
$5_{3-} \rightarrow 4_{3-}$	$2.53 \cdot 10^{17}$	$2.99 \cdot 10^{17}$
$4_{3-} \rightarrow 3_{3-}$	$2.94 \cdot 10^{17}$	$3.78 \cdot 10^{17}$

Tabelle 6.18: Koeffizienten für induzierte Emission und Absorption

lung innerhalb der jeweiligen Linien ungefähr verdoppelt. Damit erhöhen sich jedoch auch die Übergangsraten für induzierte Emission und für Absorption. Vergleicht man die Werte der entsprechenden Koeffizienten in Tabelle (6.18), sieht man, daß bei beiden Linien die Einsteinkoeffizienten für induzierte Absorption größer sind, als die für Emission. Hinzu kommt, der Übergang $4_{3-} \rightarrow 3_{3-}$ ist in dem für uns relevanten Parameterbereich optisch dick. Beide Aspekte führen zu einer merklichen Erhöhung der Besetzung des Niveaus 4_{3-}. Der gleiche Mechanismus kommt auch bei der Ausgangslinie $5_{3-} \rightarrow 4_{3-}$ zum tragen. Wie gerade erläutert, ist die Besetzung des unteren Niveaus 4_{3-} höher als im Fall ohne Überlapp. Das führt zu einer häufigeren Absorption in das obere Niveau 5_{3-} (siehe Gleichung (2.10)). Zusätzlich ist auch die Linienintensität, bedingt durch den Überlapp, höher. Auch bei dieser Linie ist der Einsteinkoeffizient für induzierte Absorption größer als der entsprechende Koeffizient der induzierten Emission. All dies zusammengenommen

Niveau	$n_{H\ II+3K}$	n_{3K}
5^0_{3-}	$3.6 \cdot 10^{-3}$	$3.2 \cdot 10^{-3}$
6^0_{2-}	$4.9 \cdot 10^{-3}$	$4.7 \cdot 10^{-3}$
Δn_{ik}	$-6.5 \cdot 10^{-4}$	$-9.2 \cdot 10^{-4}$

Tabelle 6.19: Vergleich der absoluten Besetzungszahlen mit und ohne H II-Region bei $T = 100$ K und $n_{H_2} = 1 \cdot 10^4 \mathrm{cm}^{-3}$, $N_{CH_3OH} = 2.5 \cdot 10^{16} \mathrm{cm}^{-2}$

resultiert in einer erhöhten Besetzung des Niveaus 5_{3-}, womit sich die Inversion durch den Überlapp um einiges vermindert. Auch die Existenz einer

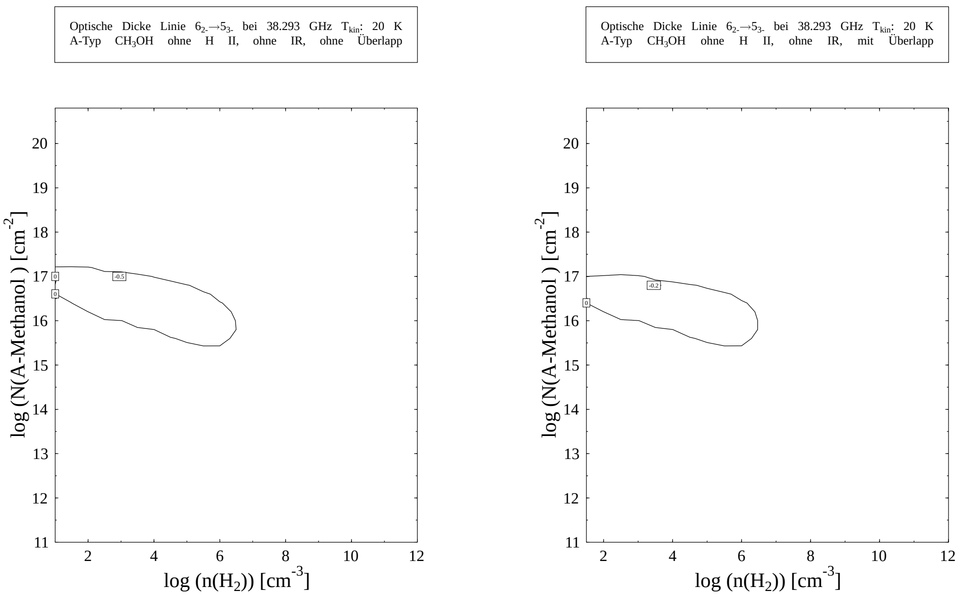

Abbildung 6.24: Optische Dicken der Linie $6^0_{2-} \rightarrow 5^0_{3-}$ ohne H II-Region, ohne IR Quelle bei $T = 20$ K ohne (links) und mit Linienüberlapp (rechts)

H II-Region erhöht die Besetzungszahlen der betrachteten Niveaus. Die hohen Niveaus werden durch die intensive Strahlung der H II-Region besetzt und erhöhen die Besetzungszahlen der tieferen Niveaus durch kaskadeartige Emissionsübergänge. Davon sind zwar beide Maserniveaus betroffen, doch die Besetzung des unteren Niveaus wird etwas stärker erhöht. Die explizite Gestalt des Termschemas präferiert Strahlungsübergänge die nach links unten im Termschema laufen. Das ergibt sich einfach aus den Auswahlregeln und der Struktur. Dadurch werden innerhalb einer Leiter die Niveaus mit den tieferen K-Werten stärker besetzt. Das gilt auch für das Niveau 5_{3-}. In Tabelle (6.19) sieht man die Veränderung der absoluten Besetzungszahlen, und die resultierende Auswirkung auf die optische Dicke. Die Inversion wird auch hier abgeschwächt.

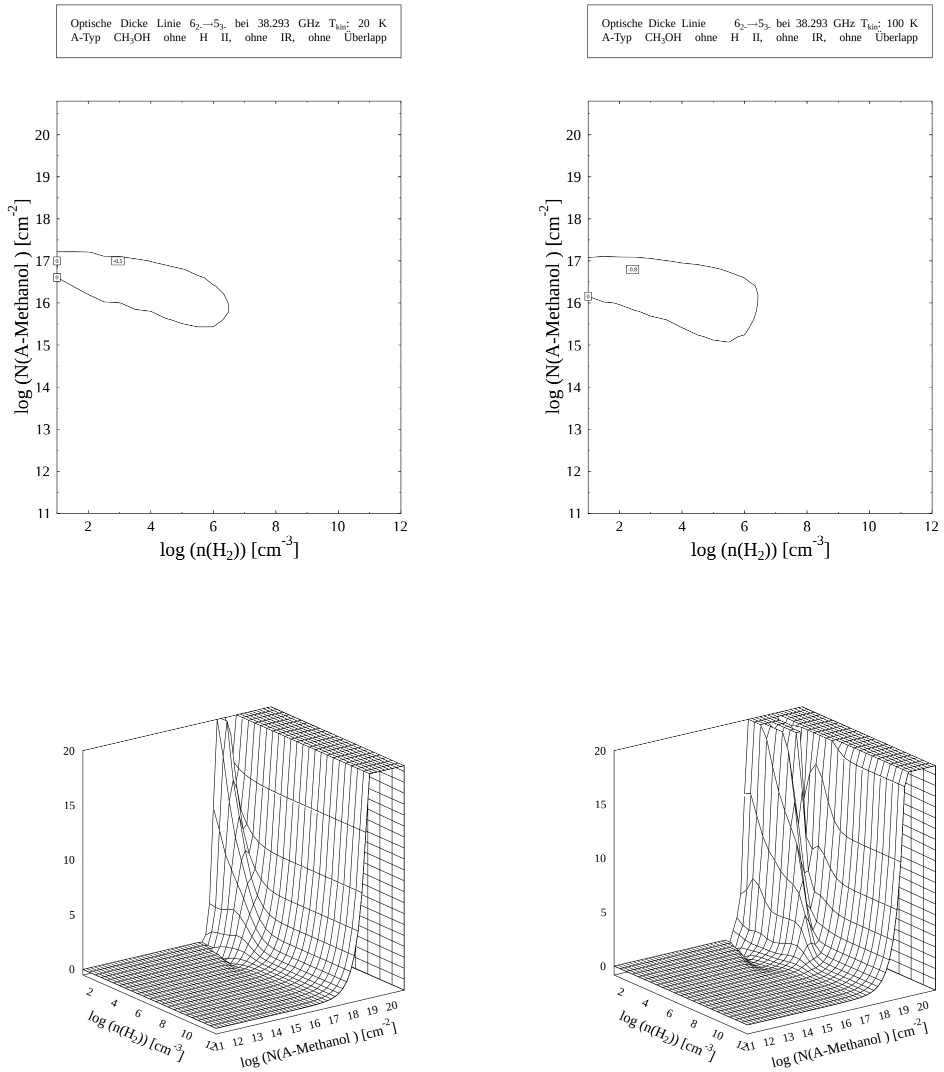

Abbildung 6.25: τ_ν der Linie $6_{2-} \rightarrow 5_{3-}$ bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts), ohne H II, ohne IR, ohne Überlapp

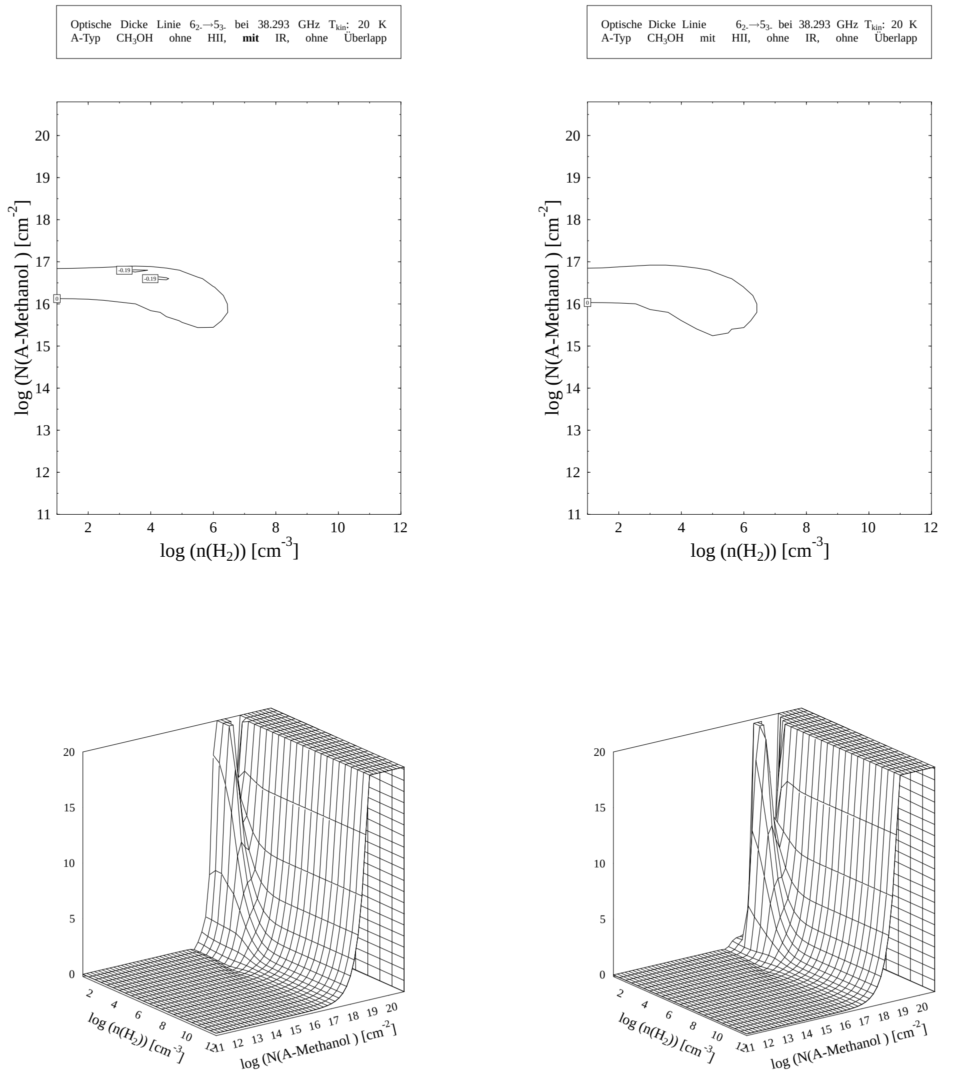

Abbildung 6.26: τ_ν der Linie $6_{2-} \to 5_{3-}$ mit IR (links) und H II (rechts), bei $T = 20$ K, ohne Überlapp

6.3 Übergänge $J^0_{3\pm} \rightarrow (J+1)^0_{2\pm}$

Besonders bemerkenswert ist die Tatsache, daß bei unseren Rechnungen mit erweitertem Termschema eine außergewöhnlich starke Maserserie auftrat, die bisher nicht in der Literatur erwähnt worden ist. Es handelt sich um die Übergänge:

$$J_{3\pm} \rightarrow (J+1)_{2\pm}$$

Wir behandeln diese Serie absichtlich außerhalb der Klassifikation in Klasse I und II-Maser. Betrachtet man die optischen Dicken in Tabelle (6.20), sieht man sowohl eine starke Abhängigkeit der Inversion von der Temperatur, sowie von dem Vorhandensein eines Strahlungshintergrundes. Ein Ansteigen der Inversion zu immer höheren Temperaturen hin, kann zwar auf einen Stoßgepumpten Klasse I Maser hindeuten, ist aber auch bei Klasse II-Maser wie zum Beispiel $5_{1+} \rightarrow 6_{0+}$ anzutreffen. Bei niedrigen Temperaturen scheint das Hinzufügen einer H II/IR Quelle die Inversion enorm zu steigern, was auf einen Klasse II-Maser hindeutet. Betrachtet man die Werte von τ_ν bei hohen Temperaturen, so sieht man einen genau entgegenwirkenden Effekt. Bie den

Linie	T [K]	CMBR	H II	IR	H II+IR
$3_{3-} \rightarrow 4_{2-}$	**20**	$3.9 \cdot 10^{-5}$[.]	-0.03[$-2 \cdot 10^{-5}$]	-0.06[$-1 \cdot 10^{-4}$]	$-1.7 \cdot 10^{-5}$[.]
	50	$-9 \cdot 10^{-4}$[$-6 \cdot 10^{-4}$]	-0.01[$-6 \cdot 10^{-4}$]	-0.04[$-8 \cdot 10^{-4}$]	-0.04[$-9 \cdot 10^{-3}$]
	100	-3.19[-3.22]	-2.8[...]	-3.23[-3.22]	-2.77[...]
$3_{3+} \rightarrow 4_{2+}$	**20**	$-4.1 \cdot 10^{-5}$[...]	-0.03[$-2 \cdot 10^{-5}$]	-0.09[$-1 \cdot 10^{-4}$]	$-1.8 \cdot 10^{-5}$[.]
	50	$-9 \cdot 10^{-4}$[$-6 \cdot 10^{-4}$]	-0.03[$-6 \cdot 10^{-4}$]	-0.08[$-2 \cdot 10^{-3}$]	-0.05[-0.01]
	100	-3.29[...]	-2.8[...]	-3.28[-3.29]	-2.8[...]
$4_{3-} \rightarrow 5_{2-}$	**20**	-0.06[$-4 \cdot 10^{-4}$]	-0.15[-0.07]	-1.29[-1.79]	-0.12[...]
	50	-1.45[-1.32]	-0.72[-0.71]	-2.06[-2.24]	-0.73[-0.7]
	100	-6.32[-6.34]	-3.05[-3.07]	-6.35[-6.36]	-3.1[...]
$4_{3+} \rightarrow 5_{2+}$	**20**	-0.05[$-4 \cdot 10^{-4}$]	-0.16[-0.07]	-1.3[-1.79]	-0.12[...]
	50	-1.45[-1.33]	-0.73[-0.71]	-2.05[-2.17]	-0.73[-0.7]
	100	-6.31[-6.30]	-3.03[-3.06]	-6.34[-6.33]	-3.0[...]

Tabelle 6.20: Minima der τ_ν aller invertierten Linien der Serie $J_{3\pm} \rightarrow (J+1)_{2\pm}$

Maser $4_{3\pm} \rightarrow 5_{2\pm}$ scheint die Kombination von Infrarothintergrund und Linienüberlapp die Inversion noch zu verstärken. Bei den beiden anderen Maser der Serie, ist davon allerdings nichts zu merken.

Linie	Frequenz [GHz]	$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$
$3_{3-} \rightarrow 4_{2-}$	5.842	$7.45 \cdot 10^{-8}$
$3_{3+} \rightarrow 4_{2+}$	5.839	$7.44 \cdot 10^{-8}$
$4_{3-} \rightarrow 5_{2-}$	10.06	$7.1 \cdot 10^{-10}$
$4_{3+} \rightarrow 5_{2+}$	9.98	$6.93 \cdot 10^{-10}$

Tabelle 6.21: Charakteristische Werte der Serie $J_{3\pm} \rightarrow (J+1)_{2\pm}$

Linie $4_{3-} \rightarrow 5_{2-}$

Obwohl diese Maserlinie mit einer Frequenz von 10.5 GHz und einer zugehörigen Wellenlänge von $3cm$ in Radiofenster der Atmosphäre liegt, und somit bodengestützten Beobachtungen zugänglich sein müßte, findet man in der Literatur keinerlei Hinweise auf ihre Beobachtung. Ein Grund dafür könnte sein, daß erst seit [And90] die korrekten Werte der Übergangsfrequenz veröffentlicht wurden. Untersuchen wir nun das Verhalten der Linie bei $T =$ 20 K ohne besondere Strahlungsquellen. In Figur (6.27,links) sehen wir 2 Bereiche einer Besetzungsinversion, einmal bei $n_{H_2} < 3.2 \cdot 10^8 \mathrm{cm}^{-3}$; $N_{CH_3OH} < 10^{16} \mathrm{cm}^{-2}$, sowie bei einer Säulendichte von $N_{CH_3OH} = 1.6 \cdot 10^{17} \mathrm{cm}^{-2}$ und einer Wasserstoffdichte von $10^3 \ldots 10^4 \mathrm{cm}^{-3}$. Das Inversionsgebiet in der linken unteren Ecke des Konturplots ist relativ einfach zu verstehen. Beide Niveaus der Maserlinie werden hauptsächlich durch Stöße besetzt. Die Stoßraten sind relativ hoch, da die niedrigen Terme des Energietermschemas durch Strahlungsabregung stark überthermisch besetzt sind. Aufgrund der Modellierung der Stoßraten ist eine Stoßanregung in das Niveau 5_{2-} hinein, der niedrigeren K Werte wegen, zwar effektiver als in das Niveau 4_{3-}, aber der Übergang $5_{2-} \rightarrow 4_{1-}$ ist ein wesentlich schnellerer Ausgang, als $4_{3-} \rightarrow 3_{2-}$. Das untere Niveau wird effektiver entvölkert, als das obere, wodurch eine Besetzungsinversion entsteht. Bei ansteigender Säulendichte bleiben die Ausgangslinien aus 5_{2-} jeweils schneller, als die aus 4_{3-}. Dadurch kann die Inversion über ein großes Intervall in N_{CH_3OH} aufrechterhalten werden. Die Werte der optischen Dicke bewegen sich dabei in einer Größenordnung von $-10^{-11} \ldots -10^{-6}$. Erreicht die Säulendichte eine bestimmte Grenze (zwischen $10^{15} \ldots 10^{16} \mathrm{cm}^{-2}$) so passieren zwei Dinge. Zum einen wird der Hauptausgang aus dem unteren Niveau , die Linie $5_{2-} \rightarrow 4_{1-}$, optisch dick, zum anderen sind die Eingangsniveaus inzwischen ausreichend besetzt, um genügend intensive Emissionsübergänge ausführen zu können. Durch beide Effekte wird die Besetzungs-

Eingänge			**Ausgänge**	
$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$	Niveau		Niveau	$A_{ik}[\mathrm{s}^{-1}]$
$5 \cdot 10^{-3}$	5^0_{4-}	$\longrightarrow 4^0_{3-} \longrightarrow$	3^0_{2-}	$5.4 \cdot 10^{-4}$
$5.8 \cdot 10^{-4}$	4^0_{4+}			
$3.8 \cdot 10^{-5}$	5^0_{3-}		4^0_{2+}	$1.3 \cdot 10^{-5}$
0.043	4^1_{4-}			
0.056	4^1_{2-}			
$9.9 \cdot 10^{-3}$	5^1_{2+}		3^0_{3-}	$1.3 \cdot 10^{-5}$
0.106	3^1_{2+}			
$7.7 \cdot 10^{-4}$	6^0_{3-}	$\longrightarrow 5^0_{2-} \longrightarrow$	4^0_{1-}	$1.5 \cdot 10^{-3}$
$9.4 \cdot 10^{-5}$	6^0_{2-}			
$6.7 \cdot 10^{-5}$	5^0_{3+}		5^0_{1+}	$5.6 \cdot 10^{-4}$
0.189	5^1_{3-}			
0.244	6^1_{3+}			
0.029	4^1_{3+}		5^0_{2+}	$6.7 \cdot 10^{-5}$
0.146	5^1_{1-}			
0.046	6^1_{1+}		4^0_{3-}	$3.8 \cdot 10^{-5}$
0.129	4^1_{1+}			

Tabelle 6.22: Linien, die an die Niveaus 4^0_{3-} und 5^0_{2-} ankoppeln.

zahl des unteren Maserniveaus stark erhöht, und überholt die seines Maserpartners, was die Inversion beseitigt. Das kleine Inversionsgebiet bei höheren Säulendichten kommt dadurch zustande, daß gleichzeitig beide noch verbleibenden Eingangslinien in das untere Niveau, $6_{2-} \rightarrow 4_{2-}$ und $5_{3+} \rightarrow 5_{2-}$, optisch dick werden. Dadurch kann der Zustand 4_{3-} seinen Partner nocheinmal kurz bezüglich der Besetzungszahlen überflügeln. Da auch die Eingänge in das obere Niveau jetzt optisch dick werden, ist diese Inversion nur in diesem kleinen Parameterbereich zu erfüllen. Erhöht man die Temperatur auf $T = 100$ K, bietet sich qualitativ kein sehr verschiedenes Bild dar. In Figur (6.27, rechts) sieht man, daß das vormals kleine Inversionsgebiet bei höheren Säulendichten nun einen wesentlich größeren Bereich umfaßt. Durch die hohe Temperatur sind alle relevanten Niveaus sehr viel stärker besetzt, was die Intensität und optischen Dicken der entsprechenden Übergänge erhöht. Im Unterschied zum Niedertemperaturbereich sind jetzt auch die torsionsangeregten Niveaus von genügend hoher Besetzung um starke Übergänge zu

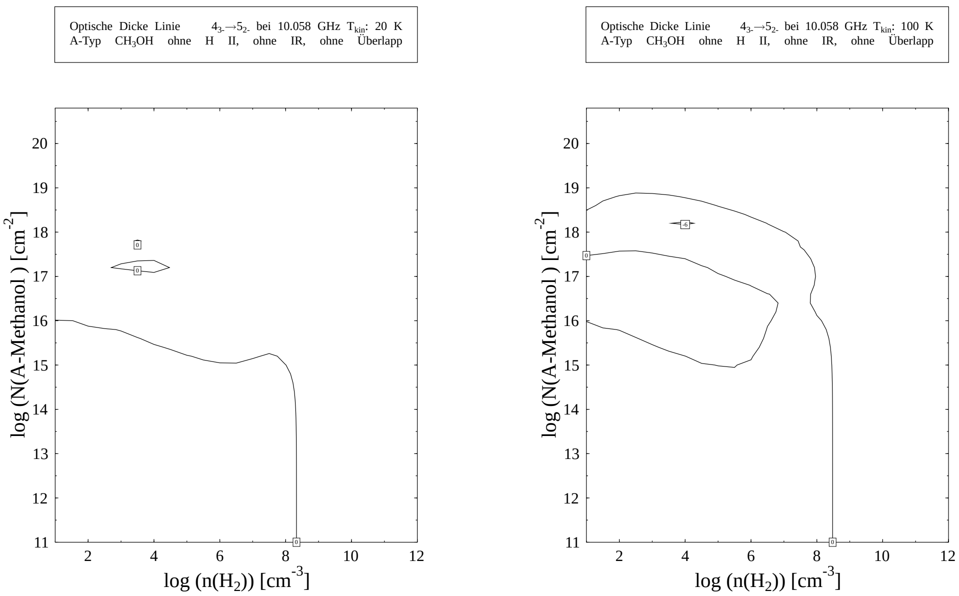

Abbildung 6.27: Optische Dicken der Linie $4^0_{3-} \rightarrow 5^0_{2-}$ ohne H II-Region, ohne IR Quelle, ohne Linienüberlapp bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts)

machen. Beides äußert sich in einer starken Vergrößerung des invertierten Bereichs im Parameterraum. Hinzu kommt eine wesentliche Verstärkung der Inversion des oberen Gebietes. Der minimale Wert der optischen Dicke ist $\tau_\nu = -6.33$ bei $n_{H_2} = 10^4 \mathrm{cm}^{-3}$, $N_{CH_3OH} = 1.6 \cdot 10^{18} \mathrm{cm}^{-2}$. Das ist die stärkste Inversion, die bei unseren Rechnungen auftritt. Zu dem prinzipiellen Mechanismus der oben bereits erklärt wurde, kommt nun noch die Tatsache hinzu, daß sich die Torsionszustände nun an den Pumpzyklen beteiligen können. Aufgrund der Auswahlregeln erfolgt eine Emission mit $\Delta n = 1$ nur für $\Delta K = \pm 1$. Daraus folgt, daß das untere Maserniveau hauptsächlich aus der torsionsangeregten K=1 Leiter gepumpt wird, während das obere Niveau vorwiegend über die K=2 Leiter besetzt wird. Die Übergänge aus der K=1 Leiter weisen aufgrund der höheren Frequenz einen größeren A-Wert auf, als die Linien der K=2 Leiter. Linien mit größeren A-Werten werden jedoch bei

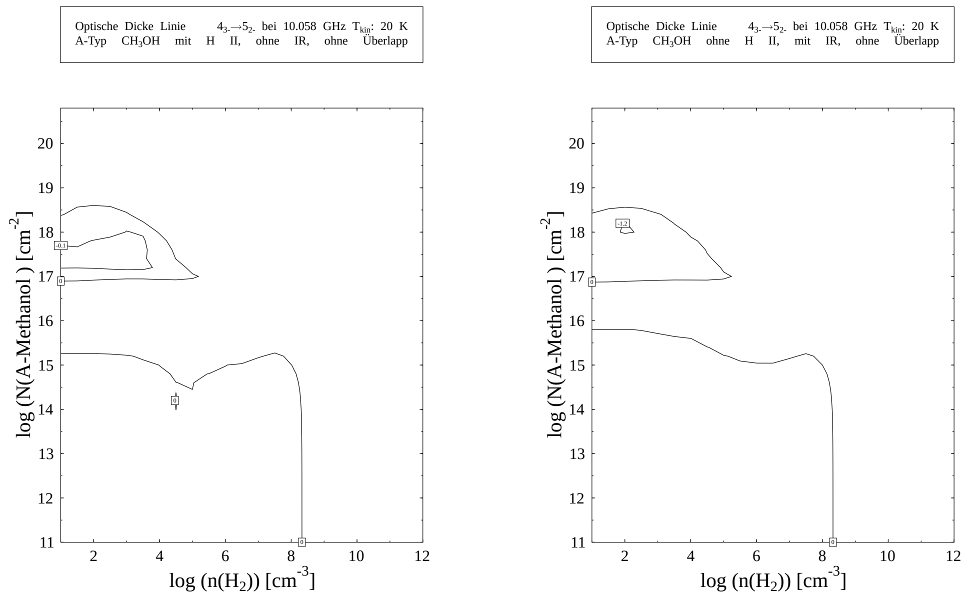

Abbildung 6.28: Optische Dicken der Linie $4^0_{3-} \rightarrow 5^0_{2-}$ ohne Überlapp bei $T = 20$ K mit H II-Region (links) und mit IR Quelle (rechts)

niedrigeren Säulendichten optisch dick als solche mit kleineren A_{ik}. Für unseren Pumpzyklus bedeutet das ein Versiegen der Zuflüsse des unteren Niveaus bei Werten von N_{CH_3OH}, bei denen das obere Maserniveau noch stark aus den Torsionszuständen, vorwiegend über die Linie $5^1_{2+} \rightarrow 4^0_{3-}$, besetzt werden kann. Zusammen mit dem äußerst kleinen A-Wert des Maserübergangs kann sich so eine sehr starke Besetzungsinversion ausbilden. Diese wird erst beendet, wenn die Säulendichte so groß ist, daß auch die Emissionsübergänge aus den n=1 Zuständen heraus optisch dick werden. Ergänzt man das Modell um einen IR Strahlungshintergrund, so verändert sich die Situation um einiges. Die torsionsangeregten Niveaus sind durch die externe Strahlungsquelle zwar sehr stark überthermisch besetzt, jedoch ist ihre absolute Besetzungszahl immer noch so gering, daß fast alle, in Tabelle (6.22) aufgeführten Linien, in Absorption auftreten. Die einzigen Ausnahmen bilden die Linien $4^1_{2-} \rightarrow 4^0_{3-}$, $3^1_{2+} \rightarrow 4^0_{3-}$ und ab einer absoluten Besetzungszahl von ca. $1.5 \cdot 10^{-7}$ auch noch die Linie $5^1_{2+} \rightarrow 4^0_{3-}$. Alle genannten Übergänge sind Eingangslinien in das obere Niveau des Masers. Daraus resultiert eine entsprechend effektive Besetzung dieses Niveaus im Vergleich zum untern Maserniveau 5^0_{2-}. Bis zu einer Säulendichte von $N_{CH_3OH} = 6.3 \cdot 10^{17}\mathrm{cm}^{-2}$ sind die beiden erstgenannten Eingänge primär für die Besetzungsinversion verantwortlich. Steigt die Säulendichte weiter, so werden beide Linien optisch dick. Inzwischen ist jedoch die Besetzung des Niveaus 5^1_{2+} genügend hoch, um in Emission überzugehen. Dadurch kann die Inversion aufrechterhalten werden, bis auch dieser Eingang bei $N_{CH_3OH} = 4 \cdot 10^{18}\mathrm{cm}^{-2}$ optisch dick wird.

Ersetzt man die IR Quelle durch eine H II Region, ändert sich kaum etwas. Das Spektrum der H II Region ist derart, daß die oberen Torsionszustände sehr viel stärker besetzt werden, als die unteren, da die Intensität zu höheren Frequenzen hin zunimmt. Die IR Quelle ist nicht in der Lage, die ganz hohen Niveaus zu besetzen, dafür aber die tieferen Torsionszustände. Im Resultat sind die eben besprochenen Eingänge bei einer H II-Region schwächer besetzt, und können auch nicht so effektiv pumpen. Das prinzipielle Verhalten ist jedoch das gleiche.

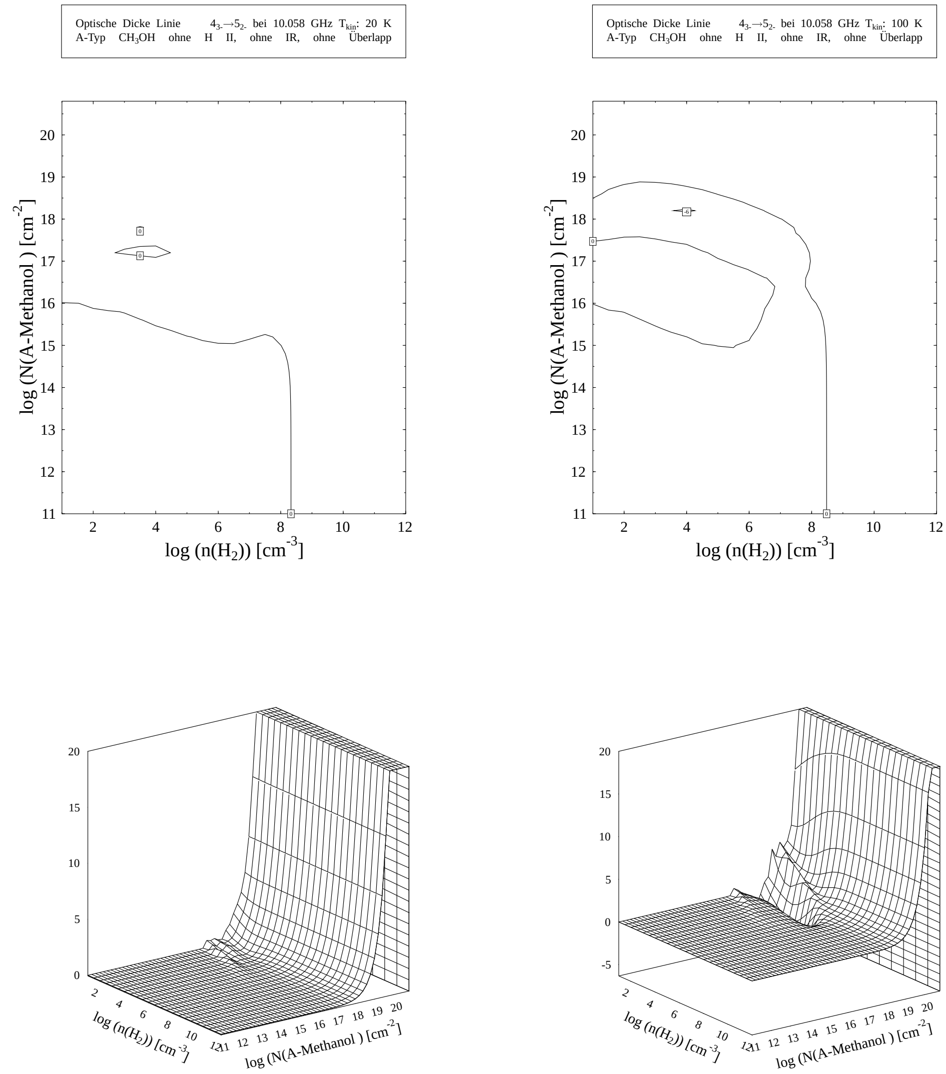

Abbildung 6.29: τ_ν der Linie $4_{3-} \rightarrow 5_{2-}$ bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts), ohne H II, ohne IR, ohne Überlapp

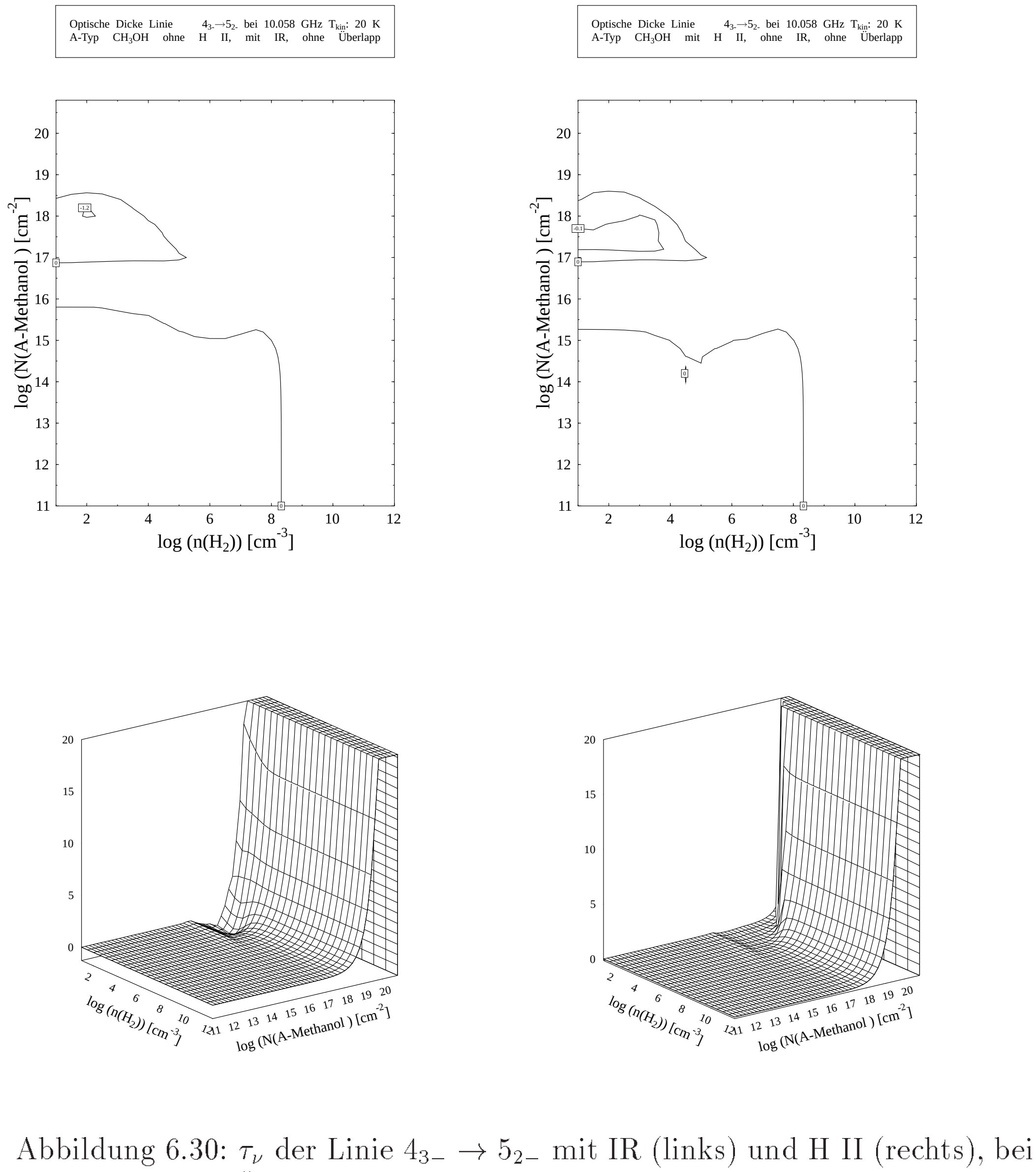

Abbildung 6.30: τ_ν der Linie $4_{3-} \rightarrow 5_{2-}$ mit IR (links) und H II (rechts), bei $T = 20$ K, ohne Überlapp

Kapitel 7

Zusammenfassung

Im Verlauf dieser Arbeit wurde in einer *on-the-spot* Approximation eine interstellare A-Methanol Wolke modelliert und ihr Verhalten in Bezug auf Strahlungstransport und Besetzungszahlenverhältnissen simuliert. Besonderen Wert wurde auf die Untersuchung von Maser-Emission gelegt. Dabei variierten wir sowohl die Parameter der internen physikalischen Bedingungen, wie Dichte und Temperatur, wie auch die äußeren Einflüsse auf die Wolke. Es wurden drei verschiedene Strahlungshintergründe bei der Simulation berücksichtigt. Der kosmische Mikrowellenhintergrund wurde bei jeder Rechnung mitberücksichtigt, was aufgrund seiner bemerkenswerten Homogenität und Isotropie vernünftig erscheint. Da man Methanolmaser in der unmittelbaren Nähe von H II Regionen und starken Infrarotquellen findet, erschien es naheliegend, auch deren Einfluß auf die Strahlungstransporteigenschaften des Wolkenmodells zu untersuchen. Da ihre exakte Strahlungsspektrum schwer zu bestimmen und lokal unterschiedlich ist, haben wir bei der Modellierung ihres Spektrums auf relativ einfache Überlegungen zurückgegriffen - auch in Hinblick auf einen geringeren numerischen Aufwand.

Bei der molekularen Modellstruktur legten wir großen Wert auf eine möglichst hohe Genauigkeit. Im Gegensatz zu früheren Untersuchungen des Methanols wurden nicht nur 113 Rotationsniveaus des Torsionsgrundzustandes des Moleküls berücksichtigt, sondern auch die untersten 76 Rotationsniveaus des ersten angeregten Torsionszustandes. Es erschien notwendig, diese Erweiterung mit in die Rechnungen einzubeziehen, da die zusätzlichen Hintergrundstrahlungsquellen ein Spektrum aufweisen, das in der Lage ist, genau diese angeregten Torsionszustände anzuregen. Wie sich im Verlauf der Untersuchung zeigte, erzielten wir unter Berücksichtigung des erweiterten

Termschemas, qualitativ andere Ergebnisse, als dies mit dem nicht erweiterten Termschema der Fall war. Sogar ohne infrarotwirksames Strahlungsfeld beteiligen sich die Torsionszustände, abhängig von der Temperatur, durch Stoßübergänge an den Pumpzyklen. Weiterhin wurde ein Linienüberlapp der Spektrallinien berücksichtigt. Dabei ist der Abstand zweier Moleküllinien kleiner als ihre spektrale Breite. Durch den Überlapp von Linien werden die zugehörigen Energieniveaus über ihr gemeinsames Strahlungsfeld miteinander verkoppelt. Das kann wesentlichen Einfluß auf optische Dicken und Intensitäten haben. Bei den Linienprofilen sind wir der Einfachheit halber von reinen Kastenprofilen, bei vollständigem Linienüberlapp, ausgegangen.

Ein kritischer Punkt der Modellierung sind die verwendeten Stoßraten C_{ik} des Methanolmoleküls mit molekularem Wasserstoff H_2. Diese sind nicht bekannt. Sie sind jedoch unerläßlich zur Berechnung der Ratengleichung. Es gibt verschiedene Möglichkeiten die Werte von C_{ik} zu nähern. Einige Autoren verwenden das *hard-sphere* Modell. Es setzt alle abregenden Stöße $C_{ik} \sim 1.5 \cdot 10^{-10} \cdot n_{H_2} \cdot T_{kin}^{\frac{1}{2}} \cdot Q^{-1}$, mit der Zustandsfunktion Q. Die anregenden Stöße folgen mittels eines detaillierten Gleichgewichts. Diese Modellierung stellt einen extremen Fall unselektiver Stöße dar [Cra92]. Im Unterschied dazu gingen wir bei der Modellierung der C_{ik} analog zu [Lee74] vor, die bei der Berechnung der Stoßraten die energetische Struktur des Methanolmoleküls mitberücksichtigen. Dabei werden Stöße mit kleinen ΔK und ΔJ gegenüber großen favorisiert.

Ergebnisse

Bei unseren Rechnungen gelang es uns, eine große Anzahl invertierten Linien des A-Typ CH_3OH zu reproduzieren. Diese Inversion war über unseren gesamten Temperaturraum zu beobachten. Aufgrund empirischer Befunde unterscheidet man zwischen Klasse I- und Klasse II-Masern. Dabei interpretiert man den Inversionsmechanismus der Klasse I-Maser als stark stoßdominiert und unabhängig von äußeren Strahlungsquellen. Die Maser der Klasse II werden größtenteils als stoßunempfindliche, strahlungsgepumpte Maser erklärt, die in der Nähe starker externer Strahlungsquellen in Erscheinung treten. Häufig findet man bei einem emissiven Klasse I-Maser Linien der Klasse II in Absorption und umgekehrt.

Aufgrund der großen Anzahl an Maserlinien, die bei unseren Rechnungen auftraten, haben wir uns bei der Analyse darauf beschränkt, eine explizite Linie jeder Maserserie genauer zu untersuchen. Wir benutzten dazu unter anderem die Darstellung der optischen Dicke τ_ν in Abhängigkeit der Wasserstoffdichte n_{H_2} und der Methanolsäulendichte N_{CH_3OH}. Die Klasse I-Maser unserer Modellrechnungen stellten sich, entsprechend dem allgemeinen Verständnis, als stoßgepumpt heraus. Die allgemein akzeptierte Erklärung beruht auf dem Vergleich der Einsteinkoeffizienten der einzelnen Übergänge, welche die Population der K=0 Leiter gegenüber der K=1 Leiter, sowie der K=1 und K=3 gegenüber der K=2 Leiter favorisieren [Cra92]. Diese Verhalten konnten wir in unsere Analyse wiederfinden.

Bei den Masern der Klasse II geht man von einer Überpopulation der K=2 Leiter gegenüber ihren Nachbarn aus. Damit lassen sich die Serien $J_{2\pm} \to (J+1)_{1\pm}$ und $J_{2\pm} \to (J-1)_{3\pm}$ gut erklären. Der stärkste A-Typ Methanolmaser $5_{1+} \to 6_{0+}$ entzieht sich jedoch dieser Begründung. Es zeigt sich, daß sich keine allgemeingültige Erklärung der Klasse II Maser finden läßt. Es bleibt jeweils im einzelnen zu klären, welche Prozesse zur Inversion führen. Bemerkenswert ist die Tatsache, daß der stärkste bekannte Maser $5_{1+} \to 6_{0+}$ auch bei unseren Rechnungen die intensivste Inversion zeigte. Das ist ein Hinweis auf die physikalische Relevanz der Ergebnisse.

Das wechselseitige Absorptions/Emissionverhalten der Klasse I und II Maser ließ sich nur schlecht reproduzieren. In Anhang A sind die Intensitätsprofile zweier Klasse I Maser denen der Klasse II gegenübergestellt. Absorptionsgebiete sind durch Regionen mit $I_\nu < 0$ gekennzeichnet. Man kann zwar immer Parameterbereiche finden, in denen beide Klassen wechselseitig Absorption und Emission zeigen, doch die Ergebnisse sind unbefriedigend. Man muß jedoch bedenken, daß der von uns abgedeckte Parameterraum eventuell eingeschränkt werden kann. Die relative Häufigkeit von CH_3OH zu H_2 liegt nach [Irv87] in der Größenordnung von $\frac{n_{CH_3OH}}{n_{H_2}} \approx 10^{-9} \ldots 10^{-8}$. Häufig wird eine Relation der Art

$$n_{H_2} \propto R^{-1} \tag{7.1}$$

unterstellt [Lar81], mit dem Radius R. Es folgt mit $n_{H_2} \propto n_{CH_3OH}$:

$$n_{CH_3OH} \cdot R = N_{CH_3OH} \sim const. \tag{7.2}$$

Das entspräche in unserer doppellogarithmischen Darstellung einer horizontalen Gerade, und wäre die einzige Parameterkombination, bei der Molekülwolken existieren. Die Glaubwürdigkeit der Relation (7.1) ist jedoch fragwürdig

[Keg89], da sie eine sehr fragwürdige Definition des Radius beinhaltet (beobachtungstechnisch und nicht physikalisch).

Eine Besonderheit, die bei unseren Simulationen auftrat, war die Inversion des Masers $4_{3-} \to 5_{2-}$. Sie erwies sich als die stärkste gefundene Inversion unseres Modells. Trotz dieses auffälligen Verhaltens konnten wir keine weiteren Verweise auf seine Existenz finden. Das einzige Radioteleskop, das zur Zeit in diesem Frequenzband beobachtet, ist das 100m Teleskop in Effelsberg. Es verfügt über einen Empfänger für die Frequenz von 10.7 GHz, der sich jedoch nicht durchstimmen läßt, da er in unmittelbarer Nähe des Frequenzbandes eines Telekommunikationssatelliten (ASTRA D) mißt. Eine theoretische Möglichkeit, diese Linie mit den vorhandenen Empfängern doch noch zu messen, wäre ein entsprechend rotverschobenes Beobachtungsobjekt zu finden:

$$z = \frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0} = \frac{2.98\text{cm} - 2.8\text{cm}}{2.8\text{cm}} = 0.064 \tag{7.3}$$

Die Berücksichtigung des Linienüberlapps zeigte bei unseren Rechnungen, im Gegensatz zu E-Methanol [Doe93], keine wesentlichen Effekte. Eine Möglichkeit, die Untersuchung des Überlapps weiterzuführen, wäre die Berücksichtigung von mehr überlappenden Linien. Aufgrund des numerischen Aufwands entschlossen wir uns dazu, Übergänge mit $A_{ik} < 10^{-10}$ nicht zu berücksichtigen. Bezöge man sie in die Rechnungen mit ein, so würde das die Zahl der überlappenden Linien erhöhen, und eventuell ihren Einfluß steigern.

Abgesehen von der Erweiterung des Termschemas sowohl im Grund- wie auch im Torsionszustand, könnte man versuchen, die Modellierung der Stoßraten zu verfeinern. Das Problem dabei ist die extrem schwierige Messung. Es war bis heute nicht möglich, auf diesem Gebiet wesentliche Fortschritte zu machen. Desweiteren ist es nötig, die möglichen Einfüße einer IR-Quelle genauer zu untersuchen, zum Beispiel, indem man die Staubtemperatur variiert. Die Wirkung einer 30 K heißen Staubschicht auf eine 100 K heiße Wolke ist eine nicht sehr plausible Modellierung, auf die wir uns aufgrund der begrenzten Zeit beschränken mußten. Physikalisch sinnvoller wäre eine Staubschicht, deren Temperatur nicht wesentlich unter der kinetischen Temperatur der Molekülwolke liegt. Eine weitere Möglichkeit der Weiterführung wäre die Aufgabe der *on-the-spot* Annahme zugunsten einer Modellierung mit Dichte- und/oder Geschwindigkeitsfeldern, da man die Existenz von Methanolmasern in Stoßfronten und zirkumstellaren Scheiben vermutet [Ell96].

Anhang A

Intensitäten der Klasse I & II Maser

Maser der Klasse I werden häufig zusammen mit in Absorption auftretenden Masern der Klasse II gefunden, und umgekehrt. Um diese Verhalten nachzuweisen, haben wir in Abbildung (A.1) die Intensitätsprofile zweier Klasse I Maser auf der linken Seite, denen der Klasse II auf der rechten Seite gegenübergestellt. Dabei ist die Intensität I_ν normiert auf eine Strahlungstemperatur von 100 K (siehe [Neb96]). Die Gebiete der Absorption zeichnen sich durch $I_\nu < 0$ aus. In den Konturplots erkennt man die $I_\nu = 0$ Kontur, welche die Absorptionsgebiete umschließt. Die Linie $7_{0+} \rightarrow 6_{1+}$ finden wir nur in Emission. Versucht man, Parameterbereiche zu identifizieren, in denen sich die Maser Klasse I in Emission und gleichzeitig die der Klasse II in Absorption befinden, kommt man zu keinem allgemeinen Ergebnis. Die Gegenüberstellung einzelner Linien miteinander läßt immerhin einige kleine Parameterkombinationen erkennen, die oben genannte Bedingung erfüllen. Trotzdem ist das Ergebnis unbefriedigend.

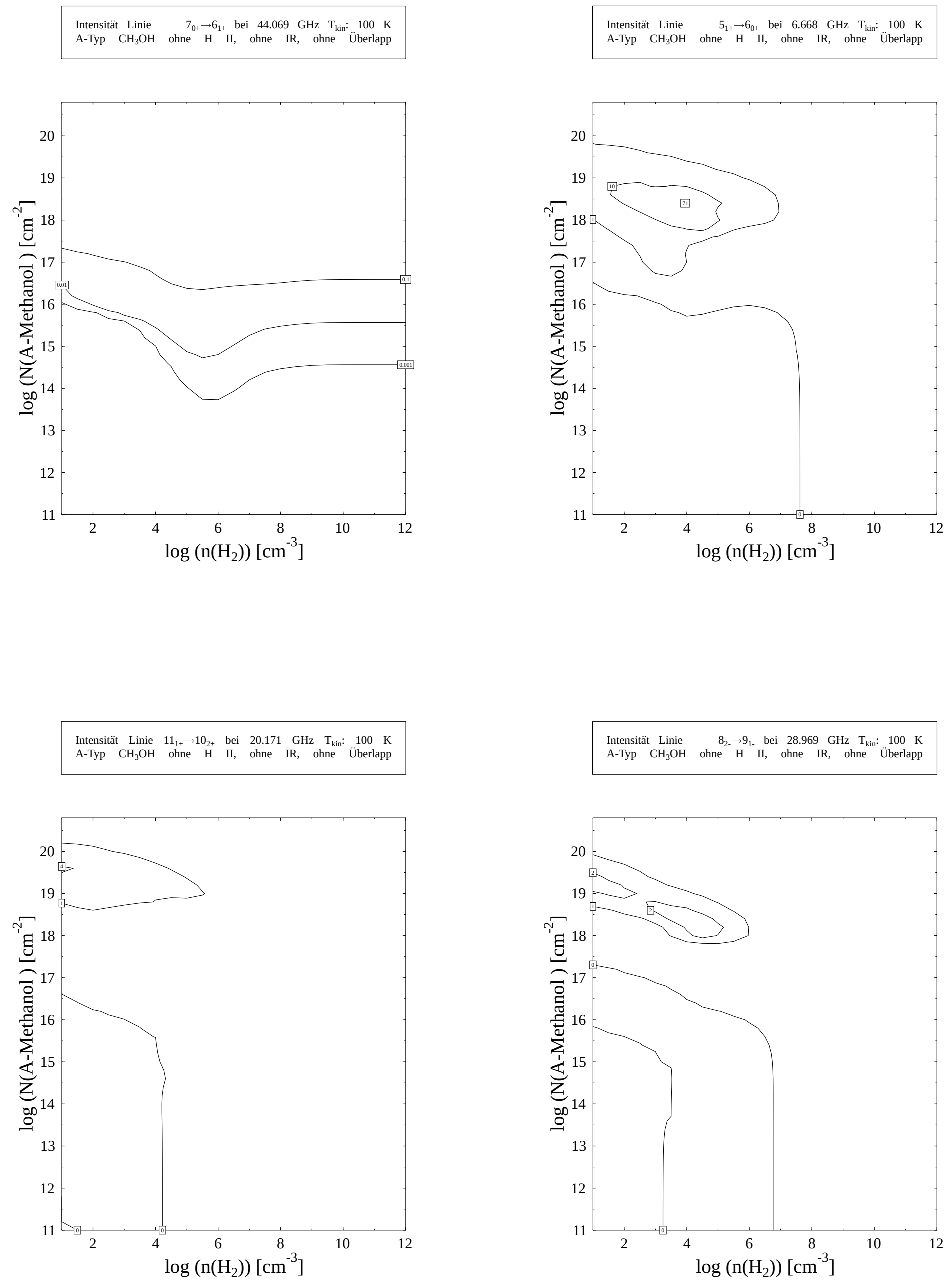

Abbildung A.1: Intensitäten der Klasse I (links) & II (rechts) im Vergleich bei $T = 100$ K

Tabellenverzeichnis

4.1 Liste aller überlappenden Linien mit $A_{ik} > 10^{-10}$ 52
4.2 Liste aller überlappenden Linien mit $A_{ik} > 10^{-10}$ (Fortsetzung) 53
4.3 Liste aller überlappenden Linien mit $A_{ik} > 10^{-10}$ (Fortsetzung) 54
4.4 Linien mit Dreifachüberlapp 55

6.1 Minima der τ_ν aller invertierten Linien der Serie $J_{0+} \to (J-1)_{1+}$ 73
6.2 Charakteristische Werte der Serie $J_{0+} \to (J-1)_{1+}$ 73
6.3 Linien, die an die Niveaus 7^0_{0+} und 6^0_{1+} ankoppeln. 74
6.4 Minima der τ_ν aller invertierten Linien der Serie $J_{1\pm} \to (J-1)_{2\pm}$ 83
6.5 Charakteristische Werte der Serie $J_{1\pm} \to (J-1)_{2\pm}$ 84
6.6 Linien, die an die Niveaus 11^0_{1+} und 10^0_{2+} ankoppeln. 85
6.7 Minima der τ_ν aller invertierten Linien der Serie $J_{1+} \to (J-1)_{0+}$ 92
6.8 Charakteristische Werte der Serie $J_{1+} \to (J-1)_{0+}$ 93
6.9 Linien, die an die Niveaus 5^0_{1+} und 6^0_{0+} ankoppeln. 93
6.10 Vergleich der absoluten Besetzungszahlen bei $T = 20$ K und $T = 100$K bei $n_{H_2} = 3.2 \cdot 10^3 \mathrm{cm}^{-3}$, $N_{CH_3OH} = 1.6 \cdot 10^{16} \mathrm{cm}^{-2}$. 96
6.11 Vergleich der absoluten Besetzungszahlen mit und ohne IR-Quelle bei $T = 20$ K und $n_{H_2} = 1 \mathrm{cm}^{-3}$, $N_{CH_3OH} = 6.3 \cdot 10^{15} \mathrm{cm}^{-2}$ 96
6.12 Minima der τ_ν aller invertierten Linien der Serie $J_{2\pm} \to (J+1)_{1\pm}$ 100
6.13 Charakteristische Werte der Serie $J_{2\pm} \to (J+1)_{1\pm}$ 100
6.14 Linien, die an die Niveaus 8^0_{2-} und 9^0_{1-} ankoppeln. 101
6.15 Minima der τ_ν aller invertierten Linien der Serie $J_{2\pm} \to (J-1)_{3\pm}$ 106
6.16 Charakteristische Werte der Serie $J_{2\pm} \to (J-1)_{3\pm}$ 107
6.17 Linien, die an die Niveaus 6^0_{2-} und 5^0_{3-} ankoppeln. 108
6.18 Koeffizienten für induzierte Emission und Absorption 110
6.19 Vergleich der absoluten Besetzungszahlen mit und ohne H II-Region bei $T = 100$ K und $n_{H_2} = 1 \cdot 10^4 \mathrm{cm}^{-3}$, $N_{CH_3OH} = 2.5 \cdot 10^{16} \mathrm{cm}^{-2}$ 110

6.20 Minima der τ_ν aller invertierten Linien der Serie $J_{3\pm} \to (J+1)_{2\pm}$ 114
6.21 Charakteristische Werte der Serie $J_{3\pm} \to (J+1)_{2\pm}$ 115
6.22 Linien, die an die Niveaus 4^0_{3-} und 5^0_{2-} ankoppeln. 116

Abbildungsverzeichnis

2.1 Schematische Darstellung des Wolkenmodells 14
2.2 Gaußsche Glockenkurve 20
2.3 partieller Überlapp von Linienprofilen 21

3.1 Schematische Darstellung von CH_3OH 25
3.2 Draufsicht auf das CH_3OH-Molekül 27
3.3 Behinderungspotential für Torsionsschwingungen 28
3.4 Termschema des CH_3OH-Moleküls im Torsionsgrundzustand $\nu_t = 0$ 32
3.5 Ausschnittsvergrößerung des schraffierten Bereichs der Abbildung (3.4) 33

4.1 Verlauf der Kastenprofilfunktion 39
4.2 Spektrum des kosmischen Mikrowellenhintergrunds 41
4.3 Modellierte Anordnung der H II Region 43
4.4 Intensität des Strahlungshintergrundes mit einer H II Region mit $T_{HII} = 10000$K, $W = 0.5$, $EM = 10^8$pc cm^{-6} 44
4.5 Modell des Staubmantels einer H II Region 45
4.6 Termschema des CH_3OH-Moleküls mit Torsionszuständen $n = 0, 1$ 46
4.7 Verlauf der optische Dicke der Staubschicht 47
4.8 Intensität des Strahlungshintergrundes mit einer IR Region, bei $T_{IR} = 30$K, $\tau_{30\mu m} = 0.5$ und $W = 0.5$ 48
4.9 Intensität des Strahlungshintergrundes mit einer IR & H II Region, $T_{HII} = 10000$K, $T_{IR} = 30$K, $\tau_{30\mu m} = 0.5$ und $EM = 10^8$pc cm^{-6}, $W = 0.5$ 48
4.10 Vergleich der Intensitäten von IR & H II Region, $T_{HII} = 10000$K, $T_{IR} = 30$K, $\tau_{30\mu m} = 0.5, W = 0.5, EM = 10^8$pc cm^{-6} . 51

6.1 Vergleich der optischen Dicken bei altem (oben) und neuem (unten) Termschema bei $T = 20$ K (Konturen: $\tau = 0, -1$) . . . 70
6.2 Vergleich der optischen Dicken bei altem (oben) und neuem (unten) Termschema bei $T = 100$ K (Konturen: $\tau = 0, -3, -5$) 71
6.3 Optische Dicken der Linie $7^0_{0+} \rightarrow 6^0_{1+}$ bei $T = 20$K (links) und $T = 100$K (rechts) 75
6.4 Optische Dicken der Linie $7^0_{0+} \rightarrow 6^0_{1+}$ bei $T = 100$K mit H II Region (links) und mit IR Region (rechts) 76
6.5 Vergleich der Übergangsraten bei $T = 100$K, $N_{CH_3OH} = 2.5 \cdot 10^{15}$cm^{-2}, $n_{H_2} = 100$cm^{-3} mit H II Hintergrund (links) und ohne (rechts) 78
6.6 Stoß- und Strahlungsübergänge bei $T = 100$K$, n_{H_2} = 3.2 \cdot 10^6$cm^{-3}, $N_{CH_3OH} = 1.6 \cdot 10^{17}$cm^{-2}, ohne H II Region, ohne IR und ohne Überlapp 80
6.7 τ_ν der Linie $7_{0+} \rightarrow 6_{1+}$ bei $T = 20$ K(links) und $T = 100$ K(rechts), ohne H II, ohne IR, ohne Überlapp 81
6.8 τ_ν der Linie $7_{0+} \rightarrow 6_{1+}$ mit IR (links) und H II (rechts), bei $T = 20$ K, ohne Überlapp 82
6.9 Optische Dicken der Linie $11^0_{1+} \rightarrow 10^0_{2+}$ bei $T = 20$K (links) und $T = 100$K(rechts) 86
6.10 Optische Dicken der Linie $11^0_{1+} \rightarrow 10^0_{2+}$ bei $T = 100$K mit H II Hintergrund (links) und mit IR Hintergrund (rechts) . . . 87
6.11 IR-Übergangsraten in die unteren Niveaus bei $T = 100$K bei niedrigen (links) und höheren N_{CH_3OH} (rechts) 88
6.12 Optische Dicken der Linie $11^0_{1+} \rightarrow 10^0_{2+}$ bei $T = 20$ K ohne (links) und mit Linienüberlapp (rechts) 89
6.13 τ_ν der Linie $11_{1+} \rightarrow 10_{2+}$ bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts), ohne H II, ohne IR, ohne Überlapp 90
6.14 τ_ν der Linie $11_{1+} \rightarrow 10_{2+}$ mit IR (links) und H II (rechts), bei $T = 20$ K, ohne Überlapp 91
6.15 Optische Dicken der Linie $5^0_{1+} \rightarrow 6^0_{0+}$ ohne H II, ohne Infrarot, ohne Überlapp bei $T = 20$ K (links) und bei 100K(rechts) . . . 95
6.16 Optische Dicken der Linie $5^0_{1+} \rightarrow 6^0_{0+}$ bei $T = 20$K ohne (links) und mit Infrarothintergrund (rechts) 97
6.17 τ_ν der Linie $5_{1+} \rightarrow 6_{0+}$ bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts), ohne H II, ohne IR, ohne Überlapp 98

6.18 τ_ν der Linie $5_{1+} \rightarrow 6_{0+}$ mit IR (links) und H II (rechts), bei $T = 20$ K, ohne Überlapp 99
6.19 Optische Dicken der Linie $8^0_{2-} \rightarrow 9^0_{1-}$ ohne H II-Region, ohne IR Quelle, ohne Linienüberlapp, bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts) 102
6.20 Optische Dicken der Linie $8^0_{2-} \rightarrow 9^0_{1-}$ bei $T = 20$ K mit H II-Region (links) und Infrarothintergrund (rechts) 103
6.21 τ_ν der Linie $8_{2-} \rightarrow 9_{1-}$ bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts), ohne H II, ohne IR, ohne Überlapp 104
6.22 τ_ν der Linie $8_{2-} \rightarrow 9_{1-}$ mit IR (links) und H II (rechts), bei $T = 20$ K, ohne Überlapp 105
6.23 Optische Dicken der Linie $6^0_{2-} \rightarrow 5^0_{3-}$ ohne H II-Region, ohne IR Quelle und ohne Linienüberlapp bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$K(rechts) 109
6.24 Optische Dicken der Linie $6^0_{2-} \rightarrow 5^0_{3-}$ ohne H II-Region, ohne IR Quelle bei $T = 20$ K ohne (links) und mit Linienüberlapp (rechts) 111
6.25 τ_ν der Linie $6_{2-} \rightarrow 5_{3-}$ bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts), ohne H II, ohne IR, ohne Überlapp 112
6.26 τ_ν der Linie $6_{2-} \rightarrow 5_{3-}$ mit IR (links) und H II (rechts), bei $T = 20$ K, ohne Überlapp 113
6.27 Optische Dicken der Linie $4^0_{3-} \rightarrow 5^0_{2-}$ ohne H II-Region, ohne IR Quelle, ohne Linienüberlapp bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts) 117
6.28 Optische Dicken der Linie $4^0_{3-} \rightarrow 5^0_{2-}$ ohne Überlapp bei $T =$ 20 K mit H II-Region (links) und mit IR Quelle (rechts) . . . 118
6.29 τ_ν der Linie $4_{3-} \rightarrow 5_{2-}$ bei $T = 20$ K (links) und $T = 100$ K (rechts), ohne H II, ohne IR, ohne Überlapp 120
6.30 τ_ν der Linie $4_{3-} \rightarrow 5_{2-}$ mit IR (links) und H II (rechts), bei $T = 20$ K, ohne Überlapp 121

A.1 Intensitäten der Klasse I (links) & II (rechts) im Vergleich bei $T = 100$ K 128

Literaturverzeichnis

[Alb81] M. Albrecht (1981) *Strahlungstransporteffekte bei Bildung interstellarer* ^{12}C^{32}S-*Linien*
Diplomarbeit, J. W. Goethe–Universität Frankfurt a.M.

[And90] T. Anderson und F.C. De Lucia (1990) Astrophys. J. Suppl. Ser. **72**, 797-814

[Cra92] D.M. Cragg , K.P. Johns , P.D. Godfrey und R.D. Brown (1992) Mon. Not. R. Astron. Soc. **259** 203-208

[Dam85] T.M. Dame , B.G. Elmegreen , R.S. Cohen und P.Thaddeus, (1985) Astrophys. J. **305** 892-908

[Doe93] C. Doerr (1993) *E-Typ Methanol CH_3OH Maser in interstellaren Molekülwolken unter Berücksichtigung des Linienüberlapps*
Diplomarbeit, J. W. Goethe-Universität Frankfurt a.M.

[Eli92] M. Elitzur (1992) *Astronomical Masers*
Kluwer Academic Publishers, Dordrecht

[Ell96] S.P. Ellingsen , R.P. Norris , P.M. McCulloch (1996) Mon. Not. R. Astron. Soc. **279**, 101-107

[Her60] G. Herzberg (1960) *Molecular Spectra and Molecular Structure* neunte Auflage, D. van Nostrand Company, Princeton, New Jersey

[Irv87] W.M. Irvine , P.F. Goldsmith , Å. Hjalmarson (1987) *Interstellar Processes*,561-609, ed. D.J. Hollenbach , H.A. Thronson D.Reidel Publishing Comp., Dordrecht, Holland

[Keg79] W.H. Kegel (1979) A & A Suppl. Ser. **38**, 131-150

[Keg79] W.H. Kegel (1979) Physik in unserer Zeit **2**, 53-63

[Keg82] W.H. Kegel (1982) *Kosmische Maser* Unveröffentlichtes Vorlesungsskript

[Keg89] W.H. Kegel (1989) A & A **225**, 517-520

[Keg91] W.H. Kegel (1991) *Interstellare Materie* Unveröffentlichtes Vorlesungsskript

[Koe40] J.S. Koehler und D.M. Dennison (1940) Phys. Rev. **57**, 1006-1021

[Lar81] R.B. Larson (1981) Mon. Not. R. Astron. Soc. **194**, 809

[Lee68] R.M. Lees , J.G. Baker (1968) J. Chem. Phys. **48**, 5299-5319

[Lee74] R.M. Lees und S.S. Haque (1974) Can. J. Phys. **52**, 2250

[Men86] K.M. Menten , C.M. Walmsley , C. Henkel , T.L. Wilson , J.M. Hollis und F.J. Lovas (1986) A & A **169**, 271-280

[Mor95] G. Moruzzi , B.P. Winnewisser , M. Winnewisser , I. Mukhopadhyay , F. Strumia , (1995) *Microwave, Infrared and Laser Transitions of Methanol,*
CRC Press, Boca Raton, Florida

[Nag79] Tsugunobu Nagai , Norio Kaifu (1979) Publ. Astron. Soc. Japan **31**, 317-327

[Neb96] V. Nebel (1996) *Pumpprozesse der 18 cm-OH-Maser in interstellaren Molekülwolken mit kaltem Staub und Linienüberlapp*
Diplomarbeit, J. W. Goethe-Universität Frankfurt a.M.

[Pei88] C.C. Pei , Q. Zeng , Q.Q. Gou (1988) A & A Suppl. Ser. **76**, 35-52

[Qua93] M. Quaiser (1993) *Einfluß eines IR-Linienüberlapps aus Strahlungstransporteffekte in interstellaren OH-Molekülwolken*
Diplomarbeit, J. W. Goethe-Universität Frankfurt a.M.

[Sch93] A.J. Schutte , D.J. van der Walt , M.J. Gaylard und G.C. MacLeod (1993) Mon. Not. R. Astron. Soc. **261**, 783-794

[Uns68] A. Unsöld (1968) *Physik der Sternatmosphären*
Springer-Verlag, Berlin

[Uns81] A. Unsöld , B. Baschek (1981) *Der neue Kosmos*
Springer-Verlag, Berlin Heidelberg

[Wil93] T.L. Wilson , S. Hüttemeister , G. Dahmen und C. Henkel (1993), A & A **268**, 249-254

[Zen90] Q. Zeng und G.F. Lou (1990) A & A **228**, 480-482

Danksagung

Ich möchte mich herzlich bei Herrn Professor W.H. Kegel für die interessante Themenstellung, die sehr gute Betreuung der Arbeit, die sehr hilfreichen Gespräche und das gute Klima innerhalb der Arbeitsgruppe bedanken.

Besonders möchte ich mich bei Herrn Dr. T. Hertenstein, Herrn Dr. B. M. Deiss und Herrn Dipl.-Phys. V. Nebel bedanken, die mir bei Fragen immer mit Rat und Tat zur Seite standen und mir in vielen Diskussion eine geduldige und große Hilfe waren.

Gleiches gilt auch für die restlichen Mitarbeiter der Arbeitsgruppe, die sich immer die Zeit für Gespräche nahmen. Ihnen möchte ich ganz besonders für das sehr angenehme Betriebsklima danken.

Für die Betreuung der Rechenanlage und Hilfestellung bei programmiertechnischen Problemen danke ich Herrn Dipl.-Phys. C. Doerr.

Die numerischen Rechnungen wurden auf SUN-*Workstations in Fortran 77 durchgeführt. Gesetzt wurde die Arbeit mit* LaTeX. *Die graphische Auswertung der Daten erfolgte mit* ASW, *einem Programm, das auf* GLE *aufsetzt, und von Herrn Dipl.-Phys. V. Nebel entwickelt wurde. Die übrigen Grafiken wurden mit Corel Draw 4.0 und mit* GLE *erstellt. Die Berechnung der Ableitungen innerhalb der vollständigen Linearisierung erfolgte mit* Mathematica 2.0.

Hiermit erkläre ich, daß ich die vorliegende Arbeit eigenständig verfaßt und keine anderen Hilfsmittel als die angegebenen benutzt habe. Ich erkläre ferner, daß diejenigen Stellen der Diplomarbeit, die anderen Werken wörtlich oder sinngemäß entnommen sind, in jedem einzelnen Fall unter Angabe der Quelle kenntlich gemacht sind.

Frankfurt a.M., den 26. März 1997