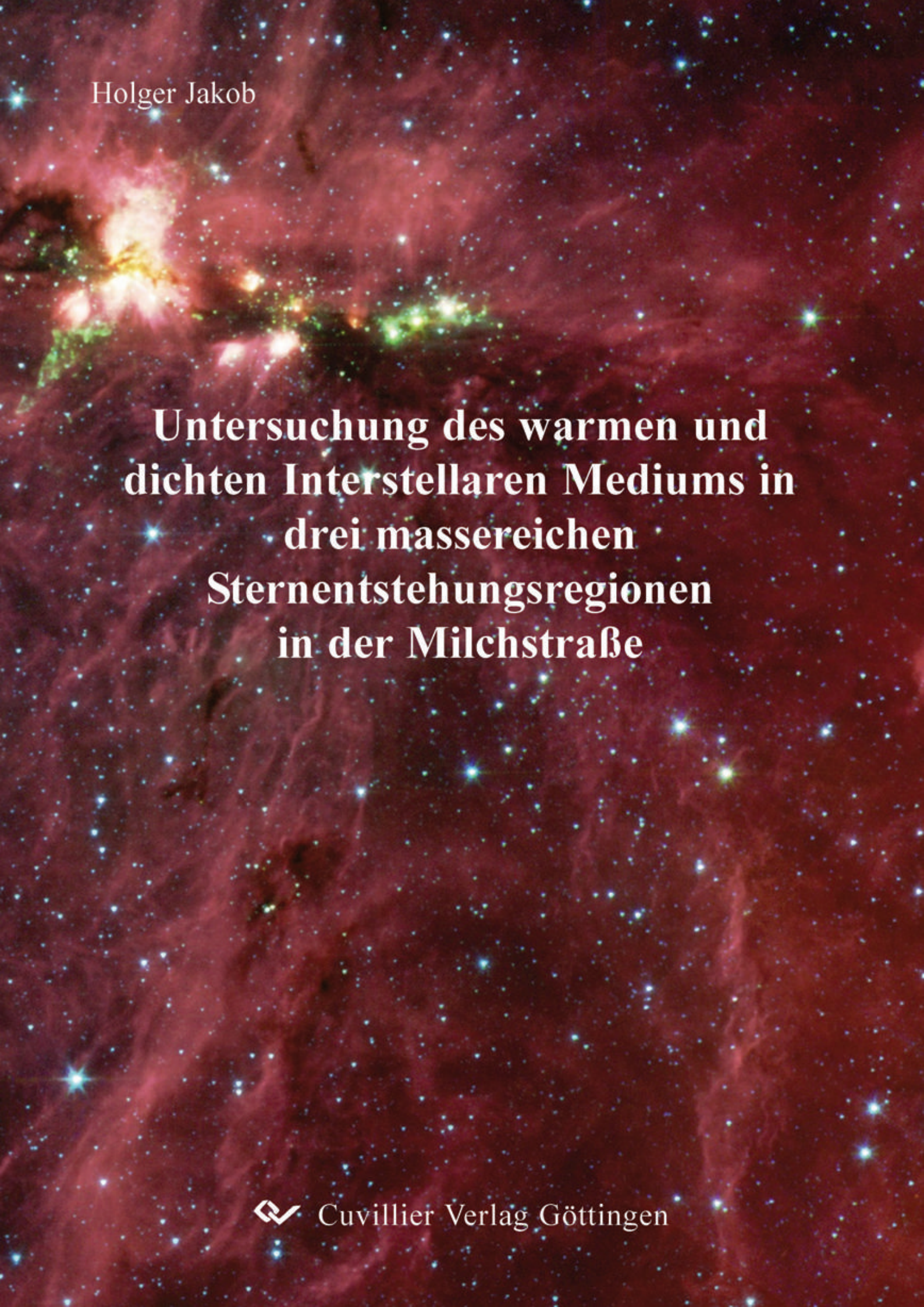

Holger Jakob

Untersuchung des warmen und dichten Interstellaren Mediums in drei massereichen Sternentstehungsregionen in der Milchstraße

Cuvillier Verlag Göttingen

Untersuchung des warmen und dichten Interstellaren Mediums in drei massereichen Sternentstehungsregionen in der Milchstraße

Inaugural-Dissertation

zur
Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Universität zu Köln

vorgelegt von

Holger Jakob

aus Jena

Köln, 2007

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek
Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über http://dnb.ddb.de abrufbar.
1. Aufl. - Göttingen : Cuvillier, 2008
Zugl.: Köln, Univ., Diss., 2007

978-3-86727-736-5

Berichterstatter : Prof. Dr. J. Stutzki
Prof. Dr. P. Reiter

Tag der letzten mündlichen Prüfung : 03.07.2007

Titelbild:

Die Sternentstehungsregion DR21 beobachtet mit dem Spitzer Weltraumteleskop.
Die Aufnahme der InfraRed Array Camera (IRAC) zeigt die Wellenlängen bei 3.6 (blau), 4.5 (grün), 5.8 (orange) und 8 Mikrometer (rot).

Quelle: NASA/JPL-Caltech/A. Marston (ESTEC/ESA)

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2008
Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen
Telefon: 0551-54724-0
Telefax: 0551-54724-21
www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.
1. Auflage, 2008
Gedruckt auf säurefreiem Papier

978-3-86727-736-5

Kurzzusammenfassung

Kontext: Massereiche Sterne liefern mit ihrer Strahlung einen großen Beitrag zur Energie im interstellaren Strahlungsfeld. Sie beeinflussen den kosmischen Materiekreislauf durch ihre stellaren Winde und der ausgesandten UV-Strahlung. Als Folge dieser Wechselwirkung bilden sich letztendlich wieder neue Sterne. Leider sind massereiche Sterne sehr kurzlebig und die Beobachtung ihrer Entstehung ist schwierig, da der überwiegende Teil ihrer Strahlung von der sie umgebenden dichten Molekülwolke verschluckt wird. Nur Kontinuumstrahlung und Linienemission im Ferninfrarotbereich kann diese Regionen beinahe ungehindert verlassen und dient daher als wichtiges Diagnoseinstrument mit dem die physikalischen und chemischen Bedingungen im interstellaren Medium untersucht werden können.

Ziele: Es wurden die physikalischen Eigenschaften der drei galaktischen Regionen W 3, DR 21 und ON 1 mit massereicher Sternentstehung untersucht. Sie alle zeigen typische Zeichen von kürzlicher massereicher Sternentstehung, d. h. eine hohe bolometrische Leuchtkraft, starke Linienemission im Ferninfrarot und eine H II-Region. Im molekularen Gas hat sich in diesen Regionen eine warme und dichte Komponente entwickelt, welche die Linienemission dominiert. Daneben gibt es eine massive kalte Komponente mit großen H_2-Säulendichten, welche durch den kalten Staub identifizierbar ist. Die Energiebilanz der Wolken (und damit indirekt auch chemische und mikrophysikalische Prozesse) kann mit der Linien- und Kontinuumstrahlung bestimmt werden.

Methoden: In dieser Arbeit werden mehrkomponentige Modelle einer Molekülwolke erstellt, an denen durch Strahlungstransportrechnung die Eigenschaften des Gases (d. h. Temperatur, Dichte, Häufigkeit und die Geschwindigkeitsverteilung) abgeleitet werden können. Wenn diese Eigenschaften gut bekannt sind, kann mit chemischen Modellen der Energieinput des Strahlungsfeldes in die Wolke abgeleitet werden.

Ergebnisse: CO wurde als zweitwichtigste Kühlspezies nach O I, dem häufigsten Element nach H und He identifiziert. C II und C I haben ebenfalls wichtige Kühllinien, welche aus verschiedenen Tiefen der Molekülwolke stammen, wo die UV-Strahlung unterschiedlich stark absorbiert wird. High-J CO Linien sind besonders hilfreich, um die Dichte, die Temperatur und den Anteil des UV-geheizten Gases zu bestimmen. Die nachgewiesene Präsenz dieser Linien deutet auf eine starke Klumpung des Gases hin.

Schlussfolgerungen: Strahlungstransportmodelle sind eine wichtige Stütze, um physikalische Eigenschaften in einer Molekülwolke abzuschätzen, falls die modellierten Linien unterschiedliche Anregungsbedingungen aufweisen. PDR-Modelle können der-

zeit nicht die integrierten Linienintensitäten aus einer Wolke mit massereicher Sternentstehung erklären, selbst wenn eine Klumpung des Gases mit gleichförmigen Klumpen angenommen wird. Dennoch können Modelle, in denen CO- und ^{13}CO-Linien bzw. C II und O I getrennt modelliert werden, besser mit den Beobachtungen in Übereinstimmung gebracht werden. In zukünftigen Studien muss das Verständnis des Energiegleichgewichts des Gases aus Heizung und Kühlung verbessert werden, z. B. durch Beantwortung der wichtigen Frage, ob neben den Hauptkühlspezies O I, CO, C II und C I noch weitere Spezies signifikant an der Gaskühlung beteiligt sind.

Abstract

Context: Massive stars provide a major fraction of the energy in the interstellar radiation field. Their role in the cosmic matter circuit is important because they feed back energy into the natal cloud through stellar winds and UV radiation leading to the formation of new stars. Unfortunately, massive stars are short-lived and their formation cannot be observed easily. Most of the radiation from these stars is blocked by the surrounding dense cloud. Only continuum and line emission in the FIR & Submm can escape those regions unobscured and hence provide an unique diagnostic tool that allows an accurate determination of the physical and chemical conditions of the interstellar medium.
Aims: The physical properties of the three galactic high-mass star-formation sources W 3, DR 21 and ON 1 are studied in detail. All of them show typical signs of massive star formation, such as a high bolometric luminosity, strong FIR line emission and a H II-Region. The molecular gas in these regions develop a warm and dense gas component that dominates the observed line emission and thus the energy balance of the gas. It resides beside a massive colder component of large H_2 column densities that corresponds to the cold dust. The relation between these two components is studied.
Methods: The approach presented here uses multi-component models of the molecular gas by calculating the full radiative transfer to deduce the temperature, density, species abundances and the velocity field. Only if these properties are known well enough, chemical models may be used to study the energy input coming from the stellar radiation field of the nearby massive stars.
Results: CO was found to be the second most important line coolant after O I, the most abundant element after H and He. C II and C I also provide major cooling lines covering different depths of a molecular cloud where radiation from an exciting star is sub-sequentially absorbed. High-J CO lines are especially useful to determine the densities, temperatures and mass fraction of the uv-processed gas. The found presence of these lines indicate a clumpy composition of the gas.
Conclusions: Radiative transfer models are a reasonable way to deduce physical properties of a molecular cloud if different excitation conditions are covered by the modeled lines. The state-of-the-art PDR models fail to explain the full set of observed line intensities from the different parts of a cloud showing massive star-formation, even if assuming a clumpy medium of uniform clumps. However, if the line selection is limited to only CO and ^{13}CO lines, a better agreement between model and observation can be reached. Future observational studies will have to better understand the energy balance of the gas, e.g. if other cooling channels of the gas besides the main cooling lines [O I], CO, [C II], and [C I] are significant.

Inhaltsverzeichnis

Kurzzusammenfassung i

Abstract iii

1 Einleitung 1
1.1 Die Entstehung und Entwicklung massereicher Sterne 1
1.1.1 Photonen Dominierte Regionen 2
1.2 Inhalt und Ziele 5

2 Methoden 7
2.1 Die astronomische Beobachtung 7
2.1.1 Instrumentierung 7
2.1.2 Beobachtungssoftware 10
2.2 Analyse und Modellierung: Anregungsbedingungen und Strahlungstransport 10
2.2.1 Die Bedeutung der unterschiedlichen Linientracer 11
2.2.2 LTE - Lokales Thermischen Gleichgewicht 11
2.2.3 Entweichwahrscheinlichkeitsnäherungen 12
2.2.4 Simulationen 12
2.2.5 Anwendungsfall: Eine kollabierende Wolke 13

3 Das kühlende Gas in der DR21-Region 15
3.1 Einleitung 16
3.1.1 Die Cygnus X-Region 17
3.2 Beobachtungen 25
3.2.1 ... mit KOSMA 25
3.2.2 ... am FCRAO 26
3.2.3 ... und mit ISO/LWS 27
3.3 Ergebnisse 27
3.3.1 Karten der integrierten Intensität 30
3.3.2 Linienprofile und Geschwindigkeitsstruktur 33
3.3.3 ISO-Archivdaten 35
3.4 Die physikalische Struktur von DR 21 39
3.4.1 Vergleich der CO, C und C^+ Säulendichte 39

3.4.2 Modellierung des Strahlungstransports 41
3.4.3 Sauerstoff und Stickstoff 53
3.5 Effizienz der Linienkühlung 55
3.6 Zusammenfassung 56

4 Physikalische Eigenschaften der Molekülwolke von Onsala-1 59
4.1 Einleitung 59
4.2 Beobachtungen 61
4.3 Ergebnisse 64
4.3.1 Das 850 μm Kontinuum 64
4.3.2 Molekulare Linien 64
4.3.3 Die Geschwindigkeitsstruktur 75
4.4 Modellierung der Staub- und Linienemission 76
4.4.1 Einschränkungen der physikalischen Bedingungen durch die verfügbaren Linien 76
4.4.2 Escape-Probability Rechnung der Linienstrahlung 77
4.4.3 Rechnung mit vollem Strahlungstransport 79
4.4.4 Modell 1: *Das Säulendichtemodell* 80
4.4.5 Modell 1b: *Ein expandierendes Modell* 84
4.4.6 Weitere Spezies 87
4.4.7 Modell 2: *Ein expandierendes Modell II* 90
4.4.8 Modell 3: *Ein rotierendes Wolkenmodell* 91
4.5 Die physikalische Struktur des Kerns und der Umgebung 92
4.5.1 Die Geschwindigkeitsstruktur 93

5 CO, C I und C II in der Sternentstehungsregion W3 Main 95
5.1 Einleitung 96
5.1.1 W3 96
5.2 Beobachtungen 97
5.2.1 [C I] und mid-J CO 98
5.2.2 CO & ^{13}CO $J = 3 \rightarrow 2$ 99
5.2.3 ISO/LWS Daten 102
5.3 Ergebnisse 102
5.3.1 Karten der integrierten Intensität 102
5.3.2 Spektren an ausgewählten Positionen 105
5.3.3 Temperaturen und Kohlenstoffvorkommen an vier ausgewählten Positionen 107
5.3.4 Warmes Gas um IRS 5? 111
5.3.5 Säulendichte und Masse des molekularen Wasserstoffs 112
5.4 W3 Main: Die physikalische Struktur 112
5.4.1 Modellierung des FUV-Feldes und der Fern-IR Leuchtkraft . . 112
5.4.2 Kartierung der [C II] Emission 113
5.4.3 [C II]-Emission aus dem ionisierten Medium 114
5.4.4 IRS 5/W3 Main ISO/LWS Daten 115
5.4.5 PDR Modellierung der submillimeter und ferninfrarot Emission 122
5.5 Zusammenfassung 129

6 Analyse der physikalischen Bedingungen mit Hilfe von PDR-Modellen 133
6.1 Das Fern-UV Feld . . . 134
6.1.1 Welche Eigenschaften haben die möglichen Heizquellen? . . . 134
6.2 Die PDR als Ursprung der high-*J* CO-Emission? . . . 136
6.2.1 Warum CO? . . . 136
6.2.2 Das PDR-Modell . . . 136
6.2.3 Ein klumpiges CO-Modell: DR21 C . . . 137
6.2.4 Andere Positionen in DR 21 . . . 146
6.2.5 Kühleffizienz . . . 148
6.2.6 Ein klumpiges CO-Modell: ON-1 . . . 154
6.2.7 Diskussion . . . 157
6.2.8 Vergleich zu plan-parallelen PDR-Modellen . . . 160
6.3 Zusammenfassung . . . 161

A Neue Softwarekonzepte am KOSMA-3m-Teleskop 163
A.1 Die neue Kontrollsoftware: Kosma-Control . . . 164
A.1.1 Die Sub-Systeme . . . 167
A.2 Kalibration . . . 169
A.2.1 Rohdatenaufbereitung . . . 169
A.2.2 Kalibrationsschemata . . . 170
A.2.3 Graphische Darstellung der Messdaten . . . 170
A.3 Graphische Beobachterunterstützung . . . 170
A.3.1 Konzept . . . 171
A.3.2 Umsetzung . . . 172
A.3.3 Projekte . . . 175
A.3.4 Queue – Warteschlange . . . 176
A.4 Datenbank . . . 177
A.4.1 Datenbank-Struktur . . . 177
A.4.2 Datenabgleich . . . 178
A.4.3 Webinterface . . . 179
A.5 Ausblick . . . 180

B Die stellare UV-Strahlung 181

C LTE-Methoden 185

D Theorie des Strahlungstransports 189

E Korrekturverfahren zur Minimierung der Referenz-Beam-Emission 193

Literaturverzeichnis 197

Danksagung 207

Erklärung 209

Lebenslauf 211

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Die Entstehung und Entwicklung massereicher Sterne

Massereiche Sterne produzieren einen großen Teil der Energie im interstellaren Strahlungsfeld der Milchstraße und greifen tief in die Abläufe des kosmischen Kreislaufs der Materie[1] ein. Während ihrer kosmologisch kurzen Lebenszeit ($\sim 10^6$ Jahre) senden sie sehr intensive ultraviolette Strahlung aus und geben einen erheblichen Teil ihrer Masse durch Sternenwinde oder am Ende durch eine Supernova-Explosion an die Wolke zurück, in der sie sich gebildet haben. Sie beeinflussen die weitere Sternentstehung in den Überresten der Wolke und bereiten die Grundlage für einen neuen Zyklus.

Im Interstellaren Medium (ISM) spiegelt sich die Vergangenheit der galaktischen Entwicklung wieder. Als Beispiele seien Dichtewellen im neutralen Medium innerhalb der galaktischen Scheibe oder lokale Phänomene wie Sternentstehung oder Supernova-Explosionen erwähnt (z. B. de Jong et al. 1980; Blitz & Shu 1980; Hunter et al. 1986; Wolfire et al. 2003; Mac Low & Klessen 2004; Ballesteros-Paredes 2006). Im neutralen Medium stellt sich ein Gleichgewicht zu etwa gleichen Teilen aus atomarem und molekularem Gas (den H_2-Molekülwolken) ein. Etwa 1 % der Masse einer H_2-Molekülwolke steckt in Staubteilchen. Mit dem Staub sind Kühlprozesse verbunden, die den Gasdruck der Wolke verringern und eine langsame (fragmentierte) Kontraktion und Abkühlung der Wolke ermöglichen (siehe z. B. Simulationen von Koyama & Inutsuka 2002; Vázquez-Semadeni et al. 2006). Unterhalb von ~ 50 K wird das Medium überwiegend neutral und liegt, wie spätestens seit Absorptionsmessungen von Carruthers (1970) bekannt ist, durch die Bildung von H_2 auf Stauboberflächen praktisch vollständig in molekularer Form vor. Die atomare Form des Wasserstoffs kann hingegen nur in Anwesenheit von UV-Strahlung gebildet werden. Der quantitative Nachweis des molekularen Gases gelingt wegen der hohen Energie im ersten angeregten Niveau und des fehlenden Dipolmoments von H_2 nur indirekt: Durch das CO-Molekül. Seit den ersten Messungen des $J = 1 \rightarrow 0$-Rotationsübergangs von Wilson et al. (1970) hat sich CO zum meist verwendeten Molekül zur Untersuchung des molekularen Gases

[1] Zyklischer Prozess, bei dem die Materie abwechselnd im Zustand eines heißen Plasmas in den Sternen oder als kaltes Gas im Interstellaren Medium vorliegt.

entwickelt (siehe z. B. Review von Combes 1991) und ergänzt Staub-Kontinuum-Messungen für den Nachweis des sehr kalten Staubes. Aus all diesen Messungen ist, dank immer besserer Winkelauflösung und neuer Beobachtungstechniken, ein gutes Verständnis über die verschiedenen Phasen bei der Bildung *normaler* Sterne (Kollaps, Protostern, Ausbildung einer Scheibe, Übergang zum Hauptreihestern) hervorgegangen (Review Shu et al. 1987). In unserer solaren Nachbarschaft gibt es zahlreiche Regionen, wo die normalen Sterne anscheinend ohne massereiche Sterne entstehen (z. B. in ρ Ophiuchus, Perseus, Serpens, Taurus, Lupus oder Chameleon).

Deutlich weiter entfernt liegen die weniger gut verstandenen Sternentstehungsregionen mit *massereichen* OB-Sternen (z. B. Garay & Lizano 1999; Beuther et al. 2007). In der Milchstraße sind die massereichen Sterne nicht überall anzutreffen, sondern treten hauptsächlich in Sternhaufen (Clustern) auf. Entsprechend der Masseverteilung aller Sterne in einem Sternhaufen nach der *Initial Mass Function* (IMF) ($\mathrm{d}N \sim M^{-\alpha}\mathrm{d}M$, Salpeter 1955, siehe auch Review von Corbelli et al. 2005) haben einige der Sterne eine besonders große Masse ($M \geq 10\,\mathrm{M}_\odot$). Ihr Einfluss auf die Umgebung ist schon während der Bildungsphase nachweisbar. Die UV Strahlung dieser Sterne ist so stark, dass sie das molekulare Gas in der Gashülle um den Stern zerstören kann. Reine Scheibenakkretion von Gas, wie sie bei normalen Sternen auftritt, wird dadurch vermutlich frühzeitig unterbunden, so dass ihre Massezunahme und damit ihre Gesamtmasse nach oben hin begrenzt sein sollte. Eine weitere Massezunahme kann durch Interaktion und Verschmelzung von Sternen geschehen. Gleichzeitig können sie in ihrer kurzen Lebensdauer Gas in benachbarten Wolken über die stellaren Winde und die UV-Strahlung verdichten und eine sukzessive Sternentstehung auslösen. Beobachtbare Indizien auf massereiche Sternentstehung sind: Eine dichte Molekülwolke mit mehreren $100\,\mathrm{M}_\odot$ und hoher visueller Extinktion, eine hohe Infrarotleuchtkraft ($10^3 - 10^6\,\mathrm{L}_\odot$), eine vom Stern ionisierte Region (sichtbar als H II-Region im Radiokontinuum) und möglicherweise auch CH_3OH- und H_2O-Maser in der Umgebung.

Neben umfangreichen Untersuchungen mit bis zu 150 *high-mass star-forming* Regionen aus unserer Galaxie (z. B. Plume et al. 1997; Hunter et al. 2000; Peeters et al. 2002; Mueller et al. 2002; Shirley et al. 2003) gibt es zahlreiche genauere Fallstudien einzelner Regionen, von denen hier nur wenige genannt sein sollen, wie z. B. Ori IRC 2 (Lerate et al. 2006), W 3 (OH), W 75 N, S 106 (Schneider et al. 2002, 2003), S 140 (Poelman & Spaans 2005, 2006), Cep A (van den Ancker et al. 2000; Froebrich et al. 2002), NGC 2024 (Giannini et al. 2000). Eine wichtige Bedeutung kommt in diesen Untersuchungen den Photonen-Dominierten-Regionen zu (siehe nächster Abschnitt), welche die Grenzschichten zwischen der H II-Region eines OB-Sterns und der Molekülwolke bilden. Sie sind ein weiteres Indiz auf massereiche Sternentstehung, da das Interstellare Medium aus Gas und Staub in den benachbarten Molekülwolken vorwiegend durch UV-Photonen geheizt wird und sich eine warme und dichte Komponente im Interstellaren Medium mit leicht beobachtbarer Linienemission ausbildet (Peeters et al. 2005).

1.1.1 Photonen Dominierte Regionen

In frühen chemischen Modellen (z. B. Glassgold & Langer 1974; Black & Dalgarno 1976) und H_2-Photodissoziationsmodellen (siehe Review von van Dishoeck 1987)

wurde erkannt, dass in den Oberflächen von Molekülwolken durch UV-Strahlung in der Gasphase und auf den Stauboberflächen viele (photo)chemische Reaktionen ablaufen. Verschiedene Mechanismen in diesen Photonen Dominierten Regionen (PDRen) bewirken dabei eine Heizung des Gases (de Jong et al. 1980; Tielens & Hollenbach 1985; Sternberg & Dalgarno 1989; Bourlot et al. 1993, siehe Zusammenfassungen von Sternberg & Dalgarno 1995; Hollenbach & Tielens 1997; Hollenbach & Tielens 1999). Ab ~ 6 eV liegt die Energie der Photonen hoch genug, um einzelne Elektronen aus den Oberflächen von Staubteilchen zu lösen, die ihre kinetische Energie an das Gas abgeben (photoelektrisches Heizen), oder um molekularen Wasserstoff in einen angeregten Zustand zu versetzen, bei dem H_2 entweder zerstört werden kann oder seine kinetische Energie an das Gas abgeben kann (Photodissoziation bzw. UV-Pumpen). Auch die Temperatur des Staubes steigt durch UV-Absorption in einem geringeren Maße an. An der Lyman-Kante, oberhalb der Ionisierungsenergie von atomaren Wasserstoff H I von 13.6 eV, verursacht die Absorption durch H I eine rapide Abnahme der Anzahl der höherenergetischen Photonen, noch bevor diese die PDR erreichen können. Zudem wirkt die stark erhöhte Temperatur des molekularen Gases aktivierend auf viele chemische Reaktionen in der Gasphase. Kohlenstoff spielt in der Chemie der PDR eine wichtige Rolle. Seine am häufigsten vorkommende Form ändert sich mit fortschreitender Absorption der UV-Strahlung in die Wolke hinein von ionisierten Kohlenstoff (C II), zu atomaren Kohlenstoff (C I, Ionisationsenergie 11.26 eV) und weiter zu Kohlenmonoxid (CO, Dissoziationsenergie 11.09 eV). Die drei Spezies eignen sich damit als Tracer für einen großen Teil des molekularen Gases. Andere Atome, wie der atomare Sauerstoff oder Stickstoff (Ionisierungsenergie 13.62 eV bzw. 14.53 eV), sind auch in der H II-Region stabil oder rekombinieren, wie z. B. Schwefel, erst tief in der Wolke.

Die Heizung des Gases und des Staubes durch UV-Photonen steht in einem Gleichgewicht mit der Kühlung im Fern-Infrarotbereich. Die Kühlung läuft über zwei getrennte Wege ab: Für den Staub durch die Kontinuumstrahlung der Staubteilchen und für das Gas durch Emission einiger starker Linien wie [O I], [C II], mid- und high-J CO sowie durch [C I], OH, H_2O, [Si II] und einiger weiterer Linien, die nicht im Fern-IR liegen. Die Linienkühlung kann einige Prozent der Staubkühlung ausmachen. Die Gas- und Staubtemperaturen können bei hohen Dichten aneinander gekoppelt sein.

Ein reges Interesse an PDRen belegen mehr als 230 Publikationen[2] in den letzten 10 Jahren, allein zum Begriff *PDR*. Aktuelle Untersuchungen umfassen PDRen in den Kernen von aktiven Galaxien, in den Akkretionsscheiben von Protosternen, in Supernovaüberresten oder in Planetarischen Nebeln, d. h. auch da wo Sternentstehung nicht unmittelbar beteiligt ist. Ein Spezialfall sind XDRen, in denen die Röntgenstrahlung einer Röntgenquelle nicht nur an der Oberfläche heizt (z. B. Maloney et al. 1996; Meijerink & Spaans 2005; Meijerink et al. 2006). Auch sind neben den Kohlenstoffspezies C II, C I und CO auch Hydride untersucht worden, um die Lücken in den chemischen Reaktionsnetzwerken der Modelle durch Beobachtungen schließen zu können (z. B. CH, CH^+, OH, H_2O oder HCO^+). Zeitabhängige chemische Modelle (z. B. von Störzer et al. 1997; Bertoldi & Draine 1996; Gorti & Hollenbach 2002) simulieren eine wandernde Ionisationsfront oder einen verdampfenden Wolkenklumpen. Umgekehrt sehen Kamegai et al. (2003) in der [C I]-Verteilung in ρ Oph Anzeichen für eine evo-

[2] Ergebnis einer Suchanfrage in der *Astrophysics Data System*-Publikationsdatenbank (ADS).

lutionäre Entwicklung von C I hin zu CO, nachdem die Anregung durch das UV-Feld und einer Supernova-Stoßfront abgeklungen ist. Auch im Rahmen des SFB 494[3] wurde in den letzten Jahren intensiv an PDR-Modellen gearbeitet und mit PDR-Modellen die Linienemission von PDRen untersucht, u. a. Kramer et al. (2005, M 83 und M 51), Röllig et al. (2006, zur Rolle der Metallizität), Bensch (2006, B 5) und Mookerjea et al. (2006, Cep B). Die Untersuchungen der letzten Jahre zeigen allerdings auch, dass die von verschiedenen Gruppen publizierten PDR-Modelle sich etwas divergent entwickelt haben und sich widersprechende Aussagen abgeleitet werden konnten. Vor dem Hintergrund der in naher Zukunft verfügbaren Sub-mm- und Fern-IR-Observatorien wurden deshalb in einem *PDR-Benchmark* (Roellig et al. 2007) alle derzeit genutzten Modelle verglichen und auf Unterschiede untersucht.

Auch wenn die Theorie überprüfbare Aussagen macht, ist die direkte Beobachtung der Zonen einer PDR eine nicht einfache Aufgabe. Denn nur im mm-, Sub-mm- und Fern-IR-Bereich kann die Strahlung diese Gebiete weitgehend ungehindert verlassen und erlaubt Rückschlüsse auf die physikalischen und chemischen Bedingungen in diesen Grenzschichten. Oft steht die gewünschte Winkel- oder die spektrale Auflösung in diesem Wellenlängenbereich nicht zur Verfügung. Selbst im am besten untersuchten Fall, im nahegelegenen *Orion Bar* (z. B. Tielens et al. 1993; Herrmann et al. 1997; Le Petit et al. 2002; Gorti & Hollenbach 2002; Ikeda et al. 2002; Fuente et al. 2003; Marrone et al. 2004; Pardo et al. 2005), ist die geschichtete Struktur nicht klar als PDR-Schichtung (d. h. C II/C I/CO) identifizierbar. Zudem ist die Situation nicht immer so eindeutig, dass die PDR weder nur von einer Seite beschienen wird und daher im Querschnitt beobachtbar ist, noch dürfte die Molekülwolke so homogen wie im Modell strukturiert sein. Statt dessen sind die Wolken fraktal strukturiert, d. h. auf großen und kleinen Skalen selbstähnlich und fragmentiert, und bieten dank eines stark erhöhten Verhältnisses von Oberfläche zu Volumen eine große Angriffsfläche für die UV-Strahlung (z. B. Modelle von Meixner & Tielens 1993). Die UV-Strahlung kann somit durch Streuung sehr *tief* in die Wolke vordringen und dort, im Gegensatz zum homogenen Fall, mehr Gas anregen. Die Schlussfolgerung von Hollenbach & Tielens (1997), dass *praktisch das gesamte atomare und ein Großteil des molekularen Gases in der Milchstraße durch die allgegenwärtige UV-Strahlung prozessiert wird* liegt dann nicht mehr fern (vgl. auch Einleitung zu Zielinsky 1999, „PDRen sind überall“).

Trotz der genannten Einschränkungen bei der Beobachtung können die an der Heizung und Kühlung der Wolke beteiligten Spezies mittels der Linienstrahlung untersucht werden. Insbesondere eignen sich bestimmte Verhältnisse zwischen zwei Linienflüssen als gute *Thermometer* für die vorherrschenden Temperaturen, wenn die Anregungsenergien der Linienniveaus unterschiedlich sind und die notwendigen Dichten erreicht werden, um diese Niveaus thermisch zu besetzen. Ein Beispiel ist das Verhältnis [C I] $^3P_2 \rightarrow {}^3P_1 / {}^3P_1 \rightarrow {}^3P_0$, welches für Temperaturen bis ~ 100 K und Dichten ab 10^3 cm^{-3} besonders empfindlich ist. CO $J = 7 \rightarrow 6$/[C I] $^3P_2 \rightarrow {}^3P_1$ dagegen eignet sich als *Dichteindikator* des warmen Gases ab 10^5 cm^{-3}. Diese drei Linien lassen sich mit dem SMART-Empfänger am KOSMA[4] 3m-Teleskop, welcher in Hinblick auf bo-

[3] Sonderforschungsbereich 494: Die Entwicklung der Interstellaren Materie: Terahertz-Spektroskopie in Weltall und Labor. Die vorliegende Arbeit wurde durch diese Förderung unterstützt.

[4] KOSMA – Kölner Observatorium für SubMillimeter Astronomie

dengebundene PDR-Beobachtungen entwickelt wurde, gleichzeitig detektieren (siehe nächstes Kapitel). Die Bedeutung von mid-J ^{13}CO wurde bereits von Graf (1991) erkannt. Die ^{13}CO $J = 8 \rightarrow 7$ Linie, ebenfalls im Abstimmbereich von SMART, erweist sich als nützlich, um eine obere Grenze für Dichte und Temperatur zu erhalten. Die Daten von anderen Observatorien wie dem *Kuiper Airborne Observatory* (KAO), dem ISO-Satelliten, dem *Five College Radio Astronomy Observatory* (FCRAO) oder dem *James Clerk Maxwell Telescope* (JCMT) ergänzen die anders nicht beobachtbaren Wellenlängen – oder die mangelnde Winkelauflösung. So existiert bereits eine Vielzahl an PDR-Linienbeobachtungen von massereichen Sternentstehungsregionen. Insbesondere wurden mit dem LWS-Instrument von ISO eine Fülle an (wenn auch spektral nicht aufgelösten) Linien gemessen, welche eine vergleichbare räumliche Auflösung wie die KOSMA-Daten haben und deshalb zu einer Multilinien-PDR-Analyse kombiniert werden können, die in diesem Umfang bisher nicht möglich war.

1.2 Inhalt und Ziele

Diese Arbeit verfolgt zwei grundlegende Ziele:

1. Untersuchung der Wechselwirkung bei der Entstehung massereicher Sterne mit dem molekularen Gas in einer Phase, in der die Sterne noch in die Wolke eingebettet sind und nur indirekt nachweisbar sind. Dazu sollen drei unterschiedlich komplexe massereiche Sternentstehungsregionen untersucht werden. Ein wichtiges Anliegen dieser Arbeit ist der Vergleich der PDR-Linienemission in diesen aktiven Regionen mit Modellen. Hierzu finden im Detail verschiedene Analysemethoden Anwendung, welche im folgenden **Kapitel 2** kurz vorgestellt werden. Ausserdem wird auf die verwendete Instrumentierung eingegangen, zu der auch die Beobachtungssoftware gehört.

   Kapitel 3 widmet sich der DR 21/DR 21 (OH)-Sternentstehungsregion, in der von Lane et al. (1990) starke PDR-Linienemission im atomaren und molekularen Gas gefunden wurde. Die neuen Beobachtungen von CO-Rotationslinien von KOSMA, FCRAO und ISO werden mit Strahlungstransportrechnungen für zwei klumpige Gaskomponenten, eine dicht und kalt und die andere dicht und warm, modelliert. Da auch die integrierten Intensitäten von [C II], [C I] und [O I] bekannt sind, kann die Kühleffizienz des Gases abgeschätzt werden.

   Die Region Onsala 1 (Israel & Wootten 1983; Kumar et al. 2004) wird in **Kapitel 4** mit einer Vielzahl von Spektrallinien, beobachtet am JCMT, untersucht. Aufgrund der höheren Winkelauflösung der Daten kann die Quellstruktur genauer als bei DR 21 analysiert werden. Verschiedene Strahlungstransport-Simulationen werden durchgeführt, um die Temperaturen und Dichten einzugrenzen, sowie um die kinematischen Eigenschaften des Gases besser zu verstehen.

   Die Molekülwolke und H II-Region W3 Main (z. B. Tieftrunk et al. 1997; Ruch et al. 2007) in **Kapitel 5** bietet dank der über die Region verteilten und gut untersuchten OB-Sterne die Möglichkeit, das Fern-UV-Feld in der Molekülwolke zu studieren. Insbesondere wird die Korrelation vom FUV-Feld zum UV-Tracer

[C II] und zum FIR-Kontinuum untersucht und mit einem plan-parallelen PDR-Modell verglichen. Aus den [C II]- und [O I]-Linienintensitäten lässt sich die Gaskühleffizienz berechnen, mit der, wenn sie sich durch ein Modell reproduzieren lässt, indirekt etwas über die PDR-Physik hinzugelernt werden kann. Angesichts der erwarteten hohen Dichten wird die Klumpigkeit des Medium abgeschätzt.

In **Kapitel 6** werden die Eigenschaften des molekularen Gases (Masse und Dichte der Klumpen, das äußere UV-Feld und die Klumpenanzahl) in DR 21 und in Onsala 1 mit Ensembles aus gleichförmigen sphärischen PDR-Klumpen untersucht. Die Verteilung des CO-Gesamtflusses auf die low-J, mid-J und high-J Übergänge wird als diagnostisches Mittel vorgestellt und die Bedeutung für die Gaskühlung diskutiert.

In naher Zukunft werden mit SOFIA[5], mit ALMA[6] und mit Herschel[7] äußerst effektive Observatorien zur Verfügung stehen, für die die hier vorgestellten Analysemethoden sehr nützlich sein werden.

2. Die Neu- und Weiterentwicklung einer Observatoriums-Steuersoftware. Dank neuer Empfänger mit vielen simultan messenden Pixeln, neuen hochauflösenden Spektrometern und neuen Beobachtungsmodi mit hohen Datenraten muss die Software an einem Observatorium immer neuen Anforderungen genügen. Zudem erzwingt die rasante Entwicklung der Rechner- und Betriebsystemarchitekturen eine regelmäßige Überarbeitung. So entstand aus der Notwendigkeit das Ziel, eine auf die Bedürfnisse eines modernen Submillimeter-Radioteleskops zugeschnittene Kontrollsoftware zu entwickeln mit dem Schwerpunkt auf der Gestaltung einer Benutzerschnittstelle.

   Idealerweise fließen die mit den vorherigen Systemen gesammelten Erfahrungen in die Entwicklung eines neuen Konzepts ein. Da an einem Observatorium viele hochspezialisierte Systeme vorhanden sind, ist eine Modularisierung in unabhängige Komponenten mit genau spezifizierten Schnittstellen gegenüber eigenen Softwarelösungen an anderen Observatorien von Vorteil. Das KOSMA-Teleskop bietet sich als Testumgebung an und vereinfacht die Anpassung an andere Observatorien wie NANTEN2[8] und SOFIA. Aus der Perspektive der Beobachter vereinfacht sich die Bedienung dank Automatisierung und reduziert die Fehlerquellen, wenn eine vertraute Software zum Einsatz kommt. Deshalb wird in **Anhang A** ein Einblick gegeben, der etwas zum Verständnis und zur Klärung der grundlegenden Fragen beitragen soll und die Arbeiten dokumentiert.

In den weiteren Anhängen werden zudem noch vertiefende Erläuterungen zum UV-Strahlungsfeld von OB-Sternen (**Anhang B**), zur LTE-Methode (**Anhang C**), sowie zum Strahlungstransport (**Anhang D**) im molekularen Gas gegeben. **Anhang E** beschreibt schließlich das Korrekturverfahren, mit dem die Spektren des SMART-Empfängers in dieser Arbeit bearbeitet wurden.

[5] SOFIA – *Stratospheric Observatory For Infrared Astronomy* (z. B. Review Krabbe & Röser 1999)
[6] ALMA – *Atacama Large Millimeter Array*
[7] Herschel – *Herschel Space Observatory*
[8] NANTEN2 – SubMillimeter-Teleskop in der Atacama-Wüste in Chile.

Kapitel 2

Methoden

Für die praktische Untersuchung der Emission aus interstellaren Molekülwolken werden eine Reihe von Beobachtungs- und Analysetechniken benötigt, die während der Beobachtung bis zur Herleitungen von physikalischen Erklärungsmodellen angewendet werden.

2.1 Die astronomische Beobachtung

Beginnend mit spektroskopischen Beobachtungen in den frühen 80er Jahren des 20. Jahrhunderts wurde die *Terahertz-Lücke*, ein Bereich im elektromagnetischen Spektrum oberhalb der klassischen Radio- und Mikrowellen, erstmals erschlossen. Seit mehr als einem Jahrzehnt kann dieser Teil des Spektrums (fortan FIR-Bereich) beinahe lückenlos mit bodengebundenen, mit Ballon-, Flugzeug- und Satelliten-Teleskopen untersucht werden. Insbesondere die Instrumente des KAO (bis 1995) und von ISO (Flugdauer von 1995 bis 1998) waren auf die Bereiche, die von innerhalb der Erdatmosphäre nicht zugänglich sind, spezialisiert. Der benachbarte Submm-Bereich kann noch in verschiedenen atmosphärischen Fenstern (siehe Abb. 2.1) vom Erdboden aus genutzt werden, die Messdaten müssen dann um die atmosphärische Transmission korrigiert werden.

2.1.1 Instrumentierung

Die Fortschritte bei den Beobachtungen gehen mit einer stetigen Weiterentwicklung der Instumentierung einher. Im Rahmen dieser Arbeit werden Daten von verschiedenen Observatorien ausgewertet. Von den hierzu verwendeten Empfängern sollen an dieser Stelle zwei näher vorgestellt werden (die anderen Empfänger, u.a. DualSIS/KOSMA und SCUBA/JCMT sind natürlich nicht minder wichtig für die gemeinsame Datenanalyse!).

2.1.1.1 SMART

SMART[1] (Graf et al. 2002) ist ein Heterodyn-Zweikanal-Arrayempfänger und ausgestattet mit acht SIS-Mischern für die atmosphärischen Fenster bei 650 und 350 μm (siehe Abb. 2.1). Dabei werden die beiden Frequenzbereiche (455 – 495 GHz, bzw. 795 – 882 GHz) von jeweils einem Array aus jeweils 4 Pixeln abgedeckt. Die Zwischenfrequenz-Signale werden in zwei Akusto-Optischen Array-Spektrometern (AOS) mit jeweils 4 Kanälen analysiert. Jeder Kanal besitzt eine Frequenzauflösung von 1.5 MHz (Horn et al. 1999). Die Zwischen-Frequenz (ZF) beträgt 1.5 GHz und wurde so gewählt, dass die C I] 2→1 Linie bei 810 GHz im Signal-Seitenband und die CO 7→6 Linie bei 806 GHz im Image-Seitenband gleichzeitig beobachtet werden können. Die linear angeordneten Pixel der Arrays der beiden Frequenzbereiche überlappen sich am Himmel und haben einen Abstand von jeweils ca. 115″. Viele der im Verlauf der Arbeit vorgestellten [C I] 1→0, 2→1 und CO 7→6 Beobachtungen wurden daher gleichzeitig ausgeführt und erlauben ein sehr genaues relatives Pointing. Auch die Kalibrationsfehler können deutlich reduziert werden, was sehr präzise Messungen von Linienverhältnissen ermöglicht (wie z. B. an den [C I]-Linien in Stutzki et al. (1997) an M 82 demonstriert wurde). Die Empfängerrauschtemperatur in der Bandmitte liegt bei 150 K bei 492 GHz und zwischen 500 und 600 K bei 810 GHz. Die Empfängeroptik enthält einen Bildfeldrotator in K-Konfiguration sowie zwei Martin-Puplett Diplexer und Lokaloszillatoren (Gunndioden), deren Ausgangsleistung durch Fourier-Gitter auf die Pixel verteilt wird (Heyminck 2003). Der Rotator de-rotiert das Sichtfeld des Empfängers während der Messung, sodass das Array in jeder beliebigen Orientierung genutzt werden kann. Bis Mitte 2007 wird SMART in der Endausbaustufe mit 2×8 Pixeln für den Einsatz an NANTEN2 modifiziert.

2.1.1.1.1 Atmosphärische Transmission Auch bei Messungen mit den rauschärmsten Empfängern kann das Rauschen der Erdatmosphäre nicht unterdrückt werden. Das Signal der astronomischen Quelle wird zum Teil absorbiert und von der Eigenemission der Atmosphäre überlagert. Messungen im submm-Bereich sind von bodengebundenen Teleskopen daher nur unter guten Wetterbedingungen und in sehr trockenen Gebieten in großen Höhen möglich. Die mittlere atmosphärische Transmission kann bei bekannter Temperatur der Atmosphäre direkt durch eine Kalibration korrigiert werden. Das Eigenrauschen der Atmosphäre und das, aufgrund des konstant gebliebenen Empfängerrauschens, geringere Signal-zu-Rausch Verhältnis muss dagegen durch eine längere Integrationszeit kompensiert werden. Üblicherweise wird die ausfällbare Wasserdampfmenge in Millimetern in Zenitrichtung angegeben. 1 mm Wasser entspricht in etwa einer Zenittransmission von 20 % bei 492 GHz. Da die Atmosphäre lokal nahezu eine planparallele Schichtung hat, kann die Transmission entlang des Sehstrahles sehr genau über den Blickwinkel (der Elevation) in eine Zenittransmission umgerechnet werden. Ein Atmosphärenmodell (z. B. ATM von Pardo et al. 2001) hilft bei der genauen Bestimmung des Seitenbandfaktors und der ausfällbaren Wasserdampfmenge. Bei breitbandigen Messungen lässt sich außerdem die Variation der Transmission innerhalb des Signal-Bandes korrigieren. Werden mehrere Frequenzen gleichzeitig be-

[1] SMART – SubMillimeter Array Receiver for Two frequencies.

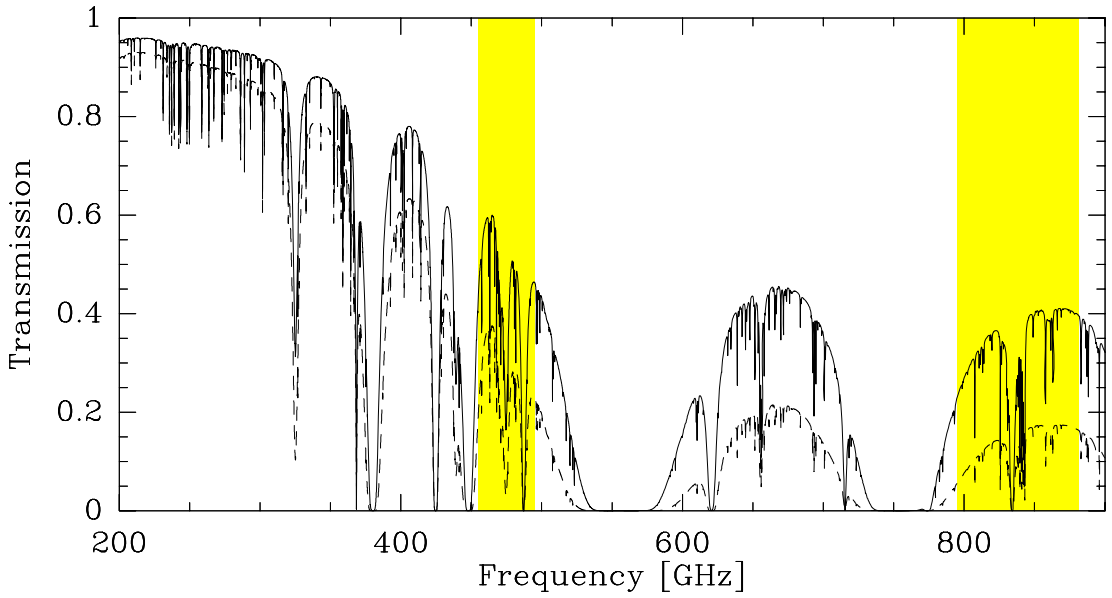

Abbildung 2.1: Atmosphärische Transmission für 1 mm (gestrichelt) und 0.5 mm (durchgezogen) Wasserdampf am KOSMA-Standort (ATM-Modell, Pardo et al. 2001). Die Frequenzbänder des SMART-Empfängers sind hervorgehoben.

obachtet, so können zur Erhöhung der Messgenauigkeit die frequenzabhängigen Transmissionen über einen gemeinsamen Wasserdampfwert gekoppelt werden. In Abb. 2.1 ist ein Beispiel für die Transmission im sub-mm Band bei verschiedenen Wasserdampfwerten dargestellt.

2.1.1.2 Das ISO/LWS-Instrument

In dieser Arbeit werden Daten von DR 21 und W 3 in Kapiteln 3 und 5 des *Long Wavelength Spectrometer* (ISO/LWS Clegg et al. 1996) vorgestellt. ISO (The Infrared Space Observatory mission, Kessler et al. 1996) war als Satellit im Erdorbit nicht durch die Atmosphäre beeinträchtigt und konnte den mittleren und fernen IR-Bereich (kurz MIR bzw. FIR) erstmals mit hoher spektraler und räumlicher Auflösung erkunden. Das Spektrometer deckte den Wellenlängenbereich zwischen 43 bis 197 μm ab, bei spektralen Auflösungen zwischen $\Delta\lambda/\lambda = 150 - 9700$. Ausgestattet war es mit einem Gitterspektrometer und zwei Fabry-Pérot Spektrometern für die höheren Auflösungen. Als Detektoren kamen Halbleiterdetektorelemente aus Ge:Be und Ge:Ga zum Einsatz.

Die Aufbereitung der Rohdaten geschieht weitgehend automatisch in einer Pipeline[2]. Im Endprodukt können jedoch noch Artefakte aus der Datenbearbeitung vorhanden sein. Zu den wichtigsten gehören *Fringes* und *Glitches*. Fringes sind systematische Wellen in den kalibrierten Daten, welche von Interferenz innerhalb des LWS-Instruments herrühren. Da deren Wellenlänge recht gut bekannt ist, lassen sich diese nachträglich fast vollständig herausrechnen. Glitches werden durch hochenergetische

[2]Die Messdaten von ISO sind frei im Internet im *ISO Data Archive* (IDA) abrufbar unter: `http://www.iso.vilspa.esa.es/`.

Parikel verursacht, die auf den Detektor treffen und sich als Spikes bemerkbar machen. Am besten lassen sich Glitches von echter Emission trennen, wenn mehrere Scans hintereinander gemessen wurden, weil sie dann als vereinzelte Ausreißer auffallen und aussortiert werden können. Für eine ausführliche Beschreibung dieser und anderer Effekte sei auf das ISO/LWS Handbuch Vol. III (Gry et al. 2003) verwiesen.

2.1.2 Beobachtungssoftware

Ein Teil der in dieser Arbeit vorgestellten Messungen wurden am KOSMA 3m-Teleskop auf dem Gornergrat bei Zermatt durchgeführt. Eine wichtige Aufgabe bei den radioastronomischen Beobachtungen hatte dabei der SMART-Empfänger, da ein Grossteil der hier vorgestellten Daten auf Beobachtungen mit diesem Empfänger beruhen. Aus diesem Grund ist einer der Schwerpunkte in dieser Arbeit, ein Beobachtungssoftwarepaket für Submm-Teleskope wie KOSMA zu gestalten, welches speziell für den Einsatz mit Mehrkanal-Empfängern konzipiert ist. Die Software wurde zusammen mit SMART im Zeitraum dieser Arbeit installiert und hat wesentlich zum Gelingen der Beobachtungen beigetragen. Die Aufgaben der Software erstrecken sind von der Ansteuerung der Hardware, über die automatische Abarbeitung verschiedener Beobachtungsmodi, zur Datenaufnahme und -kalibration und einem übersichtlichen Statusdisplay. Wegen des modularen Aufbaus ist sie weitgehend flexibel auch an die Subsysteme anderer Observatorien anpassbar. Darum werden zukünftige Beobachtungen an verschiedenen Teleskopen hiervon profitieren, wie z. B. bereits geschehen mit NANTEN2 im Jahr 2006, oder später auf dem Stratosphären-Flugzeug SOFIA.

Es sei an dieser Stelle auf den Anhang A verwiesen, der die neue Kontroll-Software am KOSMA-Teleksop vorstellt und nebenbei einen Einblick in die Systeme an einem Radio-Observatorium gewährt.

2.2 Analyse und Modellierung: Anregungsbedingungen und Strahlungstransport

Mit der Kontinuum- und Linienstrahlung im Infrarot können die physikalischen Eigenschaften des ISMs gemessen werden. Mit der thermischen Emission des Staubs kann unter Zuhilfenahme von Staubmodellen auf die Temperatur und die Säulendichte geschlossen werden (siehe in 3.3.3.1, 4.4.4.1 und 5.4.4.1). Die Linienstrahlung gibt Auskunft über den Zustand des Gases (Temperatur und Teilchendichte) und dessen Geschwindigkeit. Die Modellierung der Emission von Atomen und Molekülen ist daher ein wichtiger Bestandteil in allen Analysemethoden. Mit den hier vorgestellten Modellen lassen sich – je nach der Genauigkeit, mit der die physikalischen Bedingungen einer Wolke berücksichtigt werden sollen – Vergleiche mit beobachteten integrierten Linienintensitäten bis hin zur Modellierung von vollständigen Linienprofilen mit unterschiedlichen Gaskomponenten anstellen.

2.2.1 Die Bedeutung der unterschiedlichen Linientracer

Die zu untersuchenden Linientracer stammen aus verschiedenen Regionen der Molekülwolke und liefern indirekt Auskunft über die physikalischen Eigenschaften des Gases dort. Anregung von Linienstrahlung erfolgt hauptsächlich durch Stöße mit H_2-Molekülen (oder anderen häufig vorkommenden Spezies, z. B. H-Atomen, Helium oder auch freien Elektronen). Zusätzlich wechselwirkt das umgebene Strahlungsfeld mit den Teilchen, sei es in Form von Kontinuum- oder Linienstrahlung. Die Teilchendichte des Stoßpartners in der Wolke und die relative Häufigkeit des Moleküls sind also entscheidend. Erst oberhalb einer kritischen Dichte kann von einem thermisch angeregten Übergang gesprochen werden. Die Anregung hängt von der Energie des oberen Niveaus ab.

Im Falle von CO ist die kritische Dichte des $J \rightarrow J-1$ Übergangs proportional zu $4 \cdot J_{\rm up}^3 \cdot 10^3 {\rm cm}^{-3}$ und der obere Energiezustand entspricht $E_{\rm up}/k = 2.8 \cdot J_{\rm up}(J_{\rm up}+1)$ Kelvin. Die mid-J Übergänge von CO sind damit besonders empfindlich auf Temperaturen von 30 bis 200 K, bei Dichten zwischen $n_{\rm Kr} = 10^5$ und 10^6 cm^{-3} (siehe Tabelle D.1 im Anhang). Die high-J Linien, die mit dem ISO/LWS-Instrument gemessen wurden, gehen sogar bis $n_{\rm Kr} \simeq 10^7$ cm^{-3} und 650 K. Ganz ähnlich verhält sich die Anregung der [O I] Linien bei 145 μm und 63 μm mit Dichten von $n_{\rm Kr} > 10^5$ cm^{-3} bei hohen Temperaturen von > 200 K. Die Übergänge von atomaren Kohlenstoff sind bei $\sim 10^3$ cm^{-3} bei 24 K für [C I] 1→0 und $1.4 \cdot 10^3$ cm^{-3} mit 62 K für 2→1 angeregt. Ionisierter Kohlenstoff ist dagegen schon bei geringen Dichten von $3 \cdot 10^3$ cm^{-3} thermalisiert und benötigt Temperaturen von knapp weniger als 100 K.

2.2.2 LTE - Lokales Thermischen Gleichgewicht

Im einfachsten Fall, dem Lokalen Thermischen Gleichgewicht (LTE), wird die Anregung als gegeben betrachtet, d. h. die Energiezustände der stossenden Teilchen folgen einer Besetzung nach der Boltzmann-Verteilung mit einer Anregungstemperatur $T_{\rm ex}$ (vgl. Gleichung (C.4) im Anhang). Die Zustände sind dann thermisch besetzt.

Die LTE-Annahme erweist sich als äußerst nützliche Näherung, denn mit ihr lassen sich zwei wichtige Eigenschaften des molekularen Gases abschätzen: Die *Gesamtsäulendichte N*, d. h. die Anzahl der Gasteilchen im Teleskopbeam, und die kinetische *Temperatur* des Gases $T_{\rm kin}$. Letztere ist bei LTE gleich der Anregungstemperatur $T_{\rm ex}$ für alle Übergänge. Trägt man die Säulendichten von zwei (oder mehr) optisch dünnen Linien des gleichen Moleküls logarithmisch gegen die Energie auf, so verhält sich die Steigung dieses sog. *Boltzmann-Diagramms* proportional zum Inversen der Anregungstemperatur (vgl. Kapitel 4 und Anhang C für die Behandlung des einfachsten Falls mit zwei Übergängen). Die Gesamtsäulendichte ist proportional zur integrierten Linienintensität eines optisch dünnen Übergangs ($\tau << 1$) und abhängig von dessen Anregungstemperatur. Linien mit hoher optischer Tiefe ($\tau >> 1$) eignen sich ebenfalls zur Abschätzung der kinetischen Temperatur, da die beobachtete Linien*peak*temperatur sich dieser – nach Rayleigh-Jeans-Korrektur – annähert. Die Emission muss dazu homogen über den Beam verteilt sein.

Die LTE-Näherung hat klare Grenzen. Ist die Anregung nicht thermisch, kann N und $T_{\rm ex}$ unter- bzw. überschätzt werden. Im ISM gibt es neben Stößen mit Molekülen

verschiedene lokale Prozesse, die einen Zustand an- und abregen können und damit seine Besetzungszahl verändern können. Hierfür wurden andere non-LTE Methoden entwickelt. LTE ist dennoch als Standardverfahren in vielen Fällen ausreichend.

2.2.3 Entweichwahrscheinlichkeitsnäherungen

In Situationen wo die LTE-Annahme die physikalischen Bedingungen im ISM zu ungenau beschreibt, kann ein vereinfachter Strahlungstransport verwendet werden. Hier ist die Annahme einer konstanten Anregungstemperatur zwar noch räumlich gegeben, aber T_{ex} kann für jeden Übergang verschieden sein. Jedes Energieniveau kann mit dem lokalen Strahlungsfeld wechselwirken, eine Kopplung mit der Strahlung von weit entfernten Gebieten der Wolke wird dagegen ausgeschlossen. Üblicherweise haben sich in der Literatur Näherungsmethoden zur Modellierung der Anregung als praktisch erwiesen (*Large Velocity Gradient* und *Escape Probability Approximation*, z. B. Sobolev 1958; Scoville & Solomon 1974; Deguchi & Fukui 1977; Stutzki 1984), welche nicht auf die Extremfälle $\tau << 1$ bzw. $\tau >> 1$ beschränkt sind, aber eine plan-parallele oder sphärische Geometrie voraussetzen. Diese Methoden definieren eine Entweichwahrscheinlichkeit β als Funktion von τ, mit der ein Photon die Wolke verlassen kann. Diese Methoden unterscheiden sich in den gemachten Annahmen und Ergebnissen nur geringfügig. Mit ihnen lassen sich ausser der kinetischen Temperatur T_{kin} und der optischen Tiefe bzw. Säulendichte über Linienbreite $N/\Delta v$ nun auch die Gasdichte $n(\mathrm{H}_2)$ in einer homogenen Wolke ableiten. Viele PDR-Modelle nutzen diesen Formalismus zur Berechnung mikrophysikalischer Prozesse, wie zum Beispiel für die Bestimmung der Abschirmung der CO-Linienstrahlung innerhalb der PDR.

2.2.4 Simulationen

Auch nicht-lokale numerische Simulationen für das Strahlungstransport- und Anregungsproblem wurden entwickelt (z. B. Leung 1975; Bernes 1979; Gierens et al. 1992; Hogerheijde & van der Tak 2000; Ossenkopf et al. 2001, siehe auch Benchmark in van Zadelhoff et al. 2002). Der Einfachheit halber wird eine sphärische Geometrie der Quelle gewählt und die Anregung durch Stöße und durch das Strahlungsfeld entlang der radialen Achse berechnet. Dabei wird das Problem diskretisiert, d. h. an den lokalen Gitterpunkten wird mit konstanten Parametern für Dichte, Temperatur, Molekülhäufigkeit, Turbulenz- und Radialgeschwindigkeit gerechnet. Beobachtungen zeigen für viele dieser Parameter, dass diese einem Potenzgesetz folgen. Deshalb wird beispielsweise für die Dichte eine Verteilung nach $n(r) = n_0(r/r_0)^{-p}$ angesetzt.

Nach einer iterativen Annäherung der Levelbesetzung an jedem Gitterpunkt aufgrund der vorgegebenen Stoßraten und des lokalen Strahlungsfeldes lassen sich die nun bekannten Besetzungszahlen der Energiezustände einer Spezies nutzen, um die Linienemission der Gesamtwolke zu berechnen. Hierbei geht der Abstand vom Beobachter sowie die Größe des Teleskopbeams in die Berechnung ein. Das Ergebnis, ein Linienprofil, kann so direkt mit den Beobachtungsdaten verglichen werden und erlaubt die Eingrenzung der eingangs erwähnten Parameter.