

Der Einfluss von turbulenten Strömungen auf die Photodissoziation von CO in interstellaren Wolken

*Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften*

*vorgelegt beim Fachbereich Physik
der Johann Wolfgang Goethe–Universität
zu Frankfurt am Main*

von
Markus Röllig
aus Offenbach am Main

Frankfurt am Main 2001
(DF 1)

vom Fachbereich der

Johann Wolfgang Goethe-Universität als Dissertation angenommen.

Dekan :

Gutachter :

Datum der Disputation:

Die Suche nach dem Geheimnis des Universums, seiner Funktion und seinem Ursprung ist das längste und größte Abenteuer in der Geschichte der Menschheit. Es ist kaum vorstellbar, daß sich eine Handvoll Bewohner eines kleinen Planeten, der einen unbedeutenden Stern in einer kleinen Galaxis umkreist, das Ziel gesetzt hat, das gesamte Universum vollständig zu verstehen.

Da glaubt ein winziges Körnchen der Schöpfung wirklich und wahrhaftig, es sei fähig, das Ganze zu begreifen.

(Murray Gell-Mann)

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	7
1.1	CO-Häufigkeit	8
2	Mathematische Grundlagen	15
2.1	Wahrscheinlichkeitsrechnung	15
2.1.1	Zufallsgrößen und Erwartungswert	15
2.1.2	Die Wahrscheinlichkeitsdichte	16
2.1.3	Momente	17
2.1.4	Die bedingte Wahrscheinlichkeit	18
2.2	Der stochastische Prozess	19
2.2.1	Definition des stochastischen Prozesses	19
2.2.2	Der Markow-Prozess	21
2.3	Die Langevin-Gleichung	22
2.4	Die Kramers-Moyal-Entwicklung	23
2.5	Die Fokker-Planck-Gleichung	26
3	Strahlungstransport	29
3.1	Die stochastische Beschreibung von Dichte und Geschwindigkeit . .	30
3.1.1	Die stochastische Dichteverteilung	31
3.1.2	Das stochastische Geschwindigkeitsfeld	32
3.2	Die verallgemeinerte Strahlungstransportgleichung	33

3.3	Der Grenzfall der Makroturbulenz	37
3.4	Der Grenzfall der Mikroturbulenz	37
4	Das physikalische Modell	41
4.1	Modellierung des Strahlungstransports	42
4.1.1	Der Absorptionskoeffizient	43
4.1.2	Die Profilkfunktion	46
4.1.3	Der Photodissoziationsprozess	51
4.1.4	Das CO-Molekül	54
4.2	Das chemische Netz	58
4.2.1	Das Ratengleichungssystem	58
4.2.2	Die chemische Zusammensetzung	59
4.3	Allgemeine Modelleigenschaften	63
5	Ergebnisse	67
5.1	Modellrechnungen für eine Einzellinie	68
5.1.1	Abhängigkeit von σ_v und ℓ_v	68
5.1.2	Dichteabhängigkeit	75
5.1.3	Temperaturabhängigkeit	75
5.2	Rechnungen mit vollem UV-Spektrum	87
5.2.1	Ergebnisse	88
5.2.2	NGC 2024	113
6	Zusammenfassung	117
	Tabellenverzeichnis	121
	Abbildungsverzeichnis	123
A	Shieldingfaktoren	127

B	Bandenprofile	131
----------	----------------------	------------

C	Chemische Reaktionsraten	137
----------	---------------------------------	------------

Kapitel 1

Einführung

Mit einem Durchmesser von ungefähr 30000 pc^1 ist unsere Milchstraße eine durchschnittliche Spiralgalaxie. Die Masse ihrer Sterne beträgt etwa $10^{11} \mathcal{M}_\odot^2$. Der Raum zwischen den Sternen enthält das interstellare Medium (ISM), bestehend aus Gas und Staub, das insgesamt etwas $8 \times 10^9 \mathcal{M}_\odot$ umfasst. Obwohl der Massenanteil des Gases nur einige Prozent beträgt, hat das ISM wesentlichen Einfluss auf Aussehen und Entwicklung von Galaxien: Ein großer Teil des ISM besteht aus Molekülwolken. Diese Molekülwolken sind diejenigen Gebiete, in denen neue Sterne entstehen. Will man Sternentstehung, und darauf aufbauend auch die Entwicklung von Galaxien verstehen, muss man die Struktur der Molekülwolken verstehen. Vor UV-Strahlung abgeschirmt, kommt interstellares Gas vorwiegend in molekularer Form vor. Die äußeren Begrenzungen dieser Molekülwolken werden Photodissoziationsregionen (PDR) genannt³ In ihnen treten stellare UV-Photonen⁴ in Wechselwirkung mit dem interstellaren Medium und beeinflussen die Struktur der Wolke durch Pho-

¹Astronomische Entfernungen werden in Parsec oder pc gemessen. Das entspricht der Entfernung, von der aus das System Sonne-Erde einen Winkeldurchmesser von 1 Bogensekunde aufweist. $1 \text{ pc} = 3.26 \text{ Lichtjahre} \approx 3 \times 10^{18} \text{ cm}$.

² \mathcal{M}_\odot ist eine Sonnenmasse. $\mathcal{M}_\odot = 1.989 \times 10^{30} \text{ kg}$.

³PDR's sind ein Feld intensiver Studien. Siehe: Tielens & Hollenbach (1985b), Tielens & Hollenbach (1985a), Hollenbach et al. (1991), Sternberg & Dalgarno (1995), Hollenbach & Tielens (1997), Steiman-Cameron et al. (1997).

⁴Hauptproduzenten der UV-Photonen sind massive Sterne mit einer Masse von zehn- bis hundertfacher Sonnenmasse. Die Spektralklassen der Sterne werden mittels Buchstaben klassifiziert: O, B, A, F, G, K, M, R, N. Für Hauptreihensterne gilt dabei, dass ihre Masse von O nach N abnimmt.

toionisation und Photodissoziation. Seit 1988 ist bekannt⁵, dass die Photodissoziation von interstellaren CO-Molekülen durch Linienabsorption von UV-Photonen stattfindet⁶. Wie jede Linienabsorption wird damit auch die Photodissoziation von CO durch Geschwindigkeitsfelder im absorbierenden Medium beeinflusst. Die vorliegende Arbeit soll den Einfluss von turbulenten Geschwindigkeitsfeldern auf das Eindringen von UV-Hintergrundphotonen in eine Wolke und den damit verbundenen Einfluss auf die tiefenabhängige CO-Häufigkeit untersuchen.

1.1 CO-Häufigkeit

Innerhalb des interstellaren Mediums ist Wasserstoff das am häufigsten auftretende Element. Das nächsthäufigere Element ist Helium mit etwa 10% der Anzahldichte des Wasserstoffs. Sauerstoff und Kohlenstoff folgen mit Häufigkeiten relativ zu Wasserstoff von 9×10^{-4} und 4×10^{-4} , das entspricht den Elementhäufigkeiten der näheren Sonnenumgebung (Anders & Grevesse (1989)). Die Masse des in Staub gebundenen Materials beträgt ungefähr ein Prozent der Masse des Gases. Man unterscheidet interstellare Wolken grob nach ihrer visuellen Extinktion A_V ⁷:

- Diffuse Wolken (*diffuse clouds*) mit einem $A_V \leq 2$, einer Dichte von $n_H \sim 5 \times 10^2 \text{ cm}^{-3}$ und einer Temperatur von $50 \dots 100$ Kelvin.
- Durchscheinende Wolken (*translucent clouds*) mit $A_V \sim 2 - 5$, $n_H \sim 1 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ und $T \sim 20 - 50$ K.
- Dichte Wolken (*dense clouds*) mit $A_V \gg 2$, $n_H \sim 1 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ und $T \sim 10$ K. Das Gas kommt hauptsächlich in molekularer Form vor.

Obwohl CO eine viel geringere Häufigkeit aufweist als Wasserstoff, ist es doch das zweithäufigste Molekül nach H_2 . Gleichzeitig sind die Millimeterlinien seiner

⁵van Dishoeck & Black (1988)

⁶Wir betrachten dabei Energien im Bereich von $11.09 \text{ eV} < h\nu < 13.6 \text{ eV}$. Energieärmere Photonen können CO nicht dissoziieren und Photonen mit größeren Energien werden hauptsächlich durch interstellaren Wasserstoff absorbiert.

⁷Eine Extinktion von $A_V = 1$ entspricht einer Abschwächung des Strahlungsflusses um den Faktor 2.5. Geht man von einem üblicherweise konstanten Gas-Staub-Verhältnis aus, so entspricht das einer Wasserstoff-Säulendichte von $2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$.

Rotationsübergänge wesentlich leichter zu beobachten als die des H_2 , und dienen schon seit langem als indirekte Nachweismethode für molekularen Wasserstoff und für Sternentstehungsgebiete. Dabei unterstellt man, dass H_2 und CO ein konstantes Häufigkeitsverhältnis aufweisen. Wenn man dieses Verhältnis kennt⁸, kann man von der CO-Häufigkeit auf die Häufigkeit des molekularen Wasserstoffs schließen. Problematisch ist dabei die Annahme, dass dieses Verhältnis stets konstant ist. Vergleicht man beispielsweise die CO-Häufigkeit in dichten Molekülwolken, so ist sie zwei bis drei Größenordnungen höher als in diffusen Wolken, in denen die CO-Moleküle weitgehend durch UV-Photonen dissoziiert werden. Daraus kann allerdings nicht eine geringere H_2 -Häufigkeit gefolgert werden, denn die starke CO-Photodissoziation bedeutet nur, dass die verantwortlichen Absorptionslinien optisch dünn sind, UV-Photonen dementsprechend jeden Ort innerhalb der Wolke erreichen können, um dort CO zu dissoziieren.

Um Beobachtungen also korrekt deuten zu können, muss bei der Berechnung der Häufigkeiten die Photodissoziation berücksichtigt werden. Da die Photodissoziation von CO ausschließlich über Linienabsorption stattfindet, ist nur ein geringer Teil der UV-Photonen in der Lage, CO-Moleküle zu dissoziieren. Die Dichte der Photonen nimmt mit der Wolkentiefe ab. Das resultiert einerseits aus der Absorption des Staubes, andererseits durch die Absorption in den CO-Linien selbst, der sogenannten Selbstabschirmung. Vernachlässigt man turbulente Strömungen innerhalb des Gases, so werden die Absorptionslinien mit zunehmender Tiefe rasch optisch dick, d.h. alle Photonen, die eine Dissoziation bewirken können, sind aus dem Strahlungsfeld, durch Absorptionsprozesse, herausgefiltert worden. Turbulente Geschwindigkeitsfelder können durch eine Doppler-Verschiebung der Absorptionslinien bewirken, dass in Tiefen, die im mikroturbulenten Fall bereits optisch dick sind, noch eine signifikante Photodissoziation stattfinden kann.

Die Breite gemessener Linienprofile in Molekülwolken ist um ein Vielfaches höher, als eine ausschließlich thermische Dopplerverbreiterung erklären kann. Ausgedrückt in Geschwindigkeiten misst man Linienbreiten von einigen km s^{-1} , während man nur Temperaturen in der Größenordnung von 10 K ermittelt; das entspricht einer Dopplerverbreiterung von nur 0.077 km s^{-1} . Da Strahlungsdämpfung und Druck-

⁸Es gibt einige wenige Bereiche, wie beispielsweise Schockwellenfronten, in denen Rotationsübergänge von H_2 direkt beobachtet werden können.

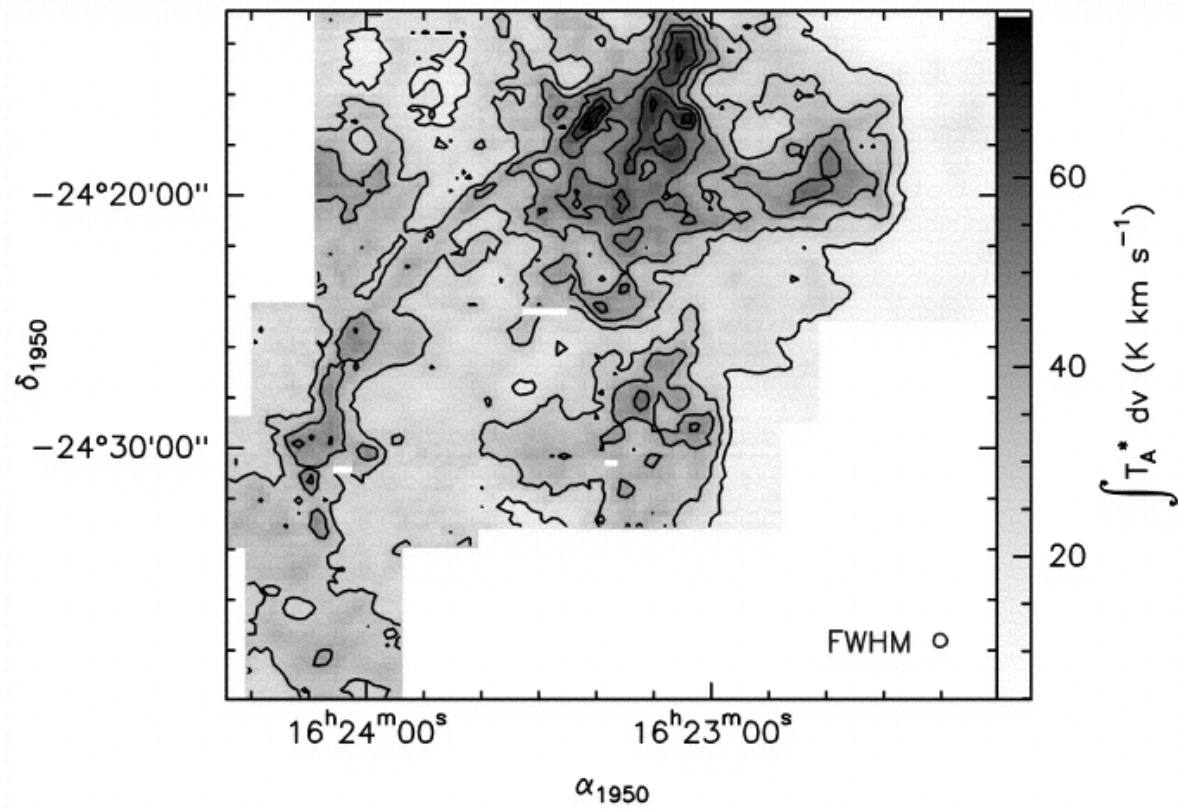


Abbildung 1.1: Karte der integrierten CO (2-1) Intensität zwischen -4 und 12 km s^{-1} in der Molekülwolke ρ Oph. (Quelle: Lis et al. (1998))

verbreiterung zu vernachlässigen sind⁹, folgt daraus das Vorhandensein eines Geschwindigkeitsfeldes. Auch zeigen Beobachtungen, dass Geschwindigkeitsfelder in Molekülwolken stark strukturiert sein können (siehe Abbildungen 1.1 und 1.2). In unserer Arbeitsgruppe wurde, basierend auf einer Idee von Gail et al. (vergleiche: Gail, H.P., Hundt, E., Kegel, W.H., Schmid-Burgk, J., Traving, G. (1974); Gail, H.-P., Sedlmayr, E., Traving, G. (1975)), ein numerisches Modell entwickelt, das es erlaubt, den Linienstrahlungstransport in einem turbulenten und dichte-fluktuierenden Medium zu untersuchen (siehe: Albrecht, M.A., Kegel, W.H. (1987); Kegel, W.H., Piehler, G., Albrecht, M.A. (1993); Hegmann, M., Kegel, W.H. (1996); Hegmann (1999). Die Bildung von Emissions- und Absorptionslinien ist damit in den

⁹Das gilt natürlich nicht allgemein. Die Lebenszeiten der Rotationsniveaus sind jedoch so klein, dass die Radio-Linien vernachlässigbar verbreitert werden. Ausserdem ist die Dichte im ISM im allgemeinen so klein, dass Druckverbreiterung nicht berücksichtigt werden muss.

letzten 10 Jahren detailliert untersucht worden (siehe Gruebner (1995)).

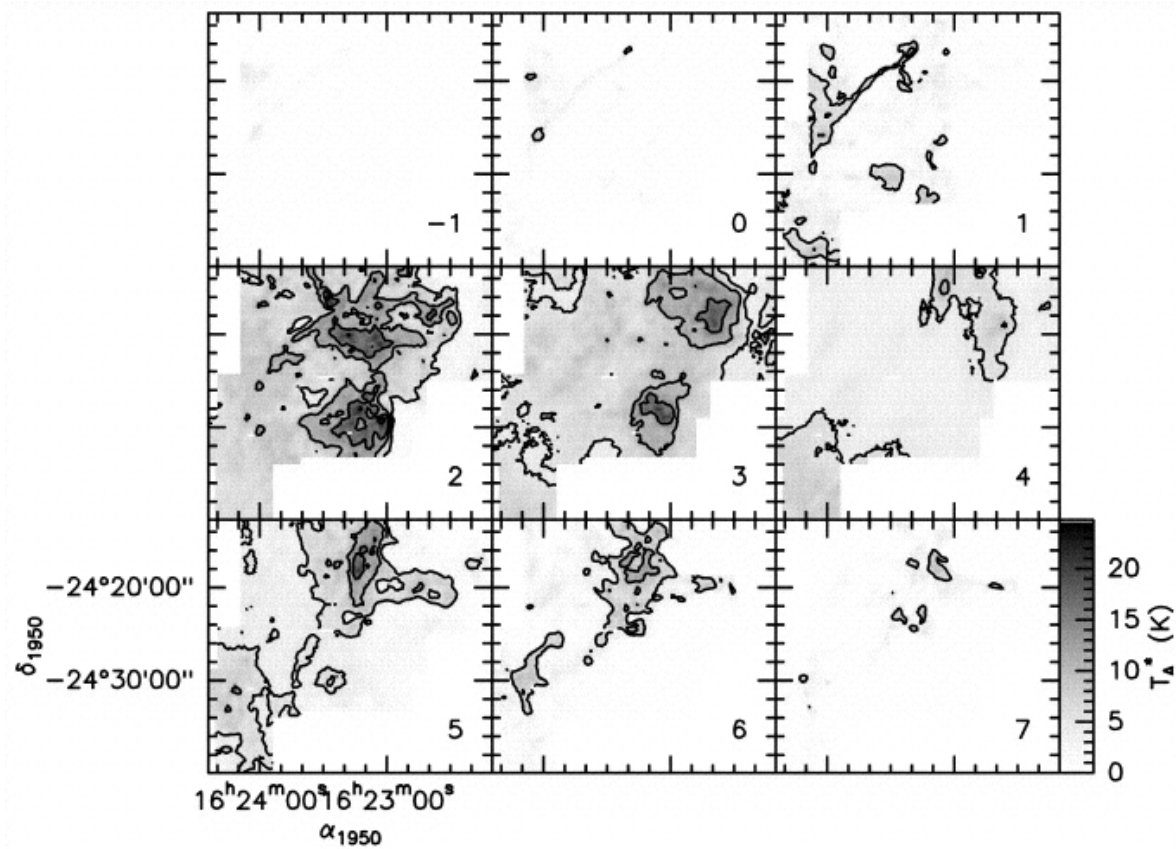


Abbildung 1.2: Karten verschiedener Geschwindigkeitskanäle der CO (2-1) Emissionen in der Molekülwolke ρ Oph. Die Zentralgeschwindigkeiten sind rechts unten in jeder Karte vermerkt. (Quelle: Lis et al. (1998))

Im Rahmen der Verfeinerung unserer Modelle in Bezug auf numerische Genauigkeit und realistischere Modellierung sind von unserer Arbeitsgruppe eine Reihe von Beobachtungen am Heinrich Hertz-Teleskop¹⁰ durchgeführt worden. Ziel war dabei die Beobachtung der CO-Emissionslinien $^{12}\text{CO}(2-1)$, $^{12}\text{CO}(3-2)$, $^{12}\text{CO}(4-3)$, $^{13}\text{CO}(2-1)$, $^{13}\text{CO}(3-2)$ und $^{13}\text{CO}(4-3)$ in sogenannten Bok-Globulen¹¹. Durch Vergleich der gewonnenen Daten mit Ergebnissen unserer Rechnungen, können

¹⁰Dabei handelt es sich um ein Teleskop für den Submillimeterbereich mit einem Durchmesser von 10 Metern. Es befindet sich auf dem Mount Graham in der Nähe von Tucson, Arizona.

¹¹Bok-Globulen sind kleine, isolierte Dunkelwolken mit mehr oder minder großer Kugelsymmetrie.

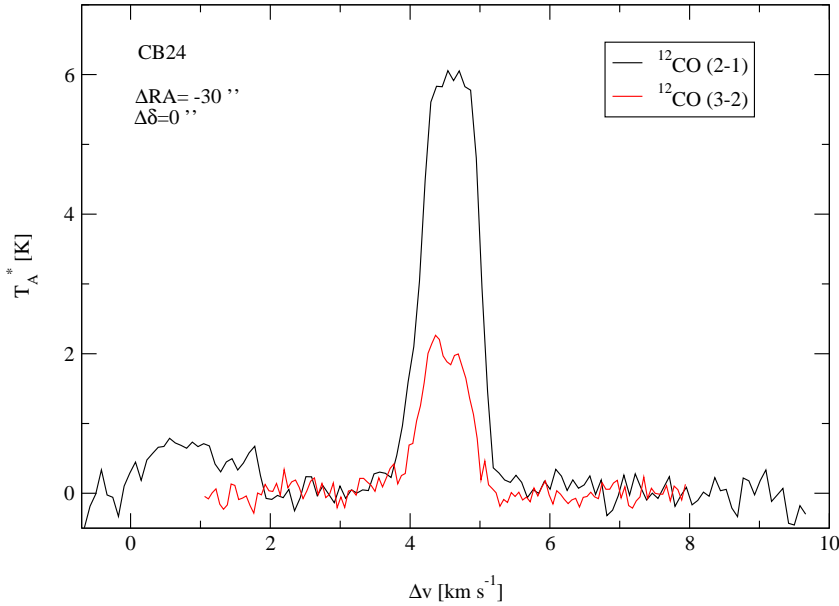


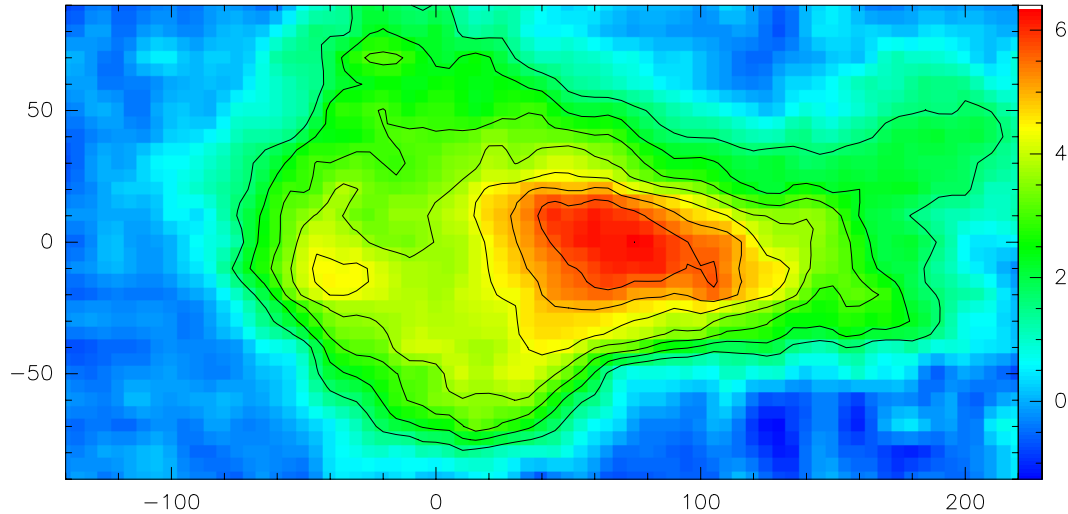
Abbildung 1.3: Linienprofil der ^{12}CO (2-1) und ^{12}CO (3-2) Emissionen in CB24

Aussagen über die physikalischen Verhältnisse innerhalb der Wolken und auch Vergleiche mit Interpretationen anderer Arbeitsgruppen gemacht werden. Am Beispiel der Bok-Globule CB24 sollen einige wenige Beobachtungsergebnisse gezeigt werden. CB24 befindet sich in einer Entfernung von ca. 360 pc und hat einen Winkeldurchmesser von ungefähr 300 Bogensekunden. Die Dichte wird auf ca. 2000 Teilchen pro cm^3 geschätzt, bei einer Temperatur von weniger als 10 Kelvin. In Abbildung 1.3 sehen wir 2 Emissionslinien, die etwa 30 Bogensekunden entfernt vom Mittelpunkt der Wolke gemessen wurden. Die Abszisse ist in Dopplergeschwindigkeiten aufgetragen. Die Ordinate zeigt die bereinigte Antennentemperatur¹². Die Halbwertsbreite der Linien ist ungefähr 0.5 km s^{-1} . In Abbildung 1.4 ist, erzeugt aus mehreren vergleichbaren Messungen, eine Karte der gesamten Globule dargestellt.

$$^{12}T_A^* = \frac{T_A}{\eta_r e^{-\tau} \eta_f}$$

T_A : gemessene Antennentemperatur; η_r : ohmsche Verluste im Empfänger;
 η_f : forward efficiency; $e^{-\tau}$: Absorption in der Atmosphäre.

CB24

Abbildung 1.4: Karte der ^{12}CO (2-1) Emissionen in CB24

Ein wesentlichen Parameter der verwendeten Wolkenmodelle ist die CO-Häufigkeit. Vergleicht man berechnete Linienprofile mit Beobachtungen, so zeigt sich, dass die genaue Kenntnis des Abfalls der CO-Häufigkeit am Wolkenrand wesentlich ist für das Auftreten bzw. Nichtauftreten einer Selbstabsorption in den Emissionslinien¹³. Wie bereits erläutert, spielt für den CO-Häufigkeitsverlauf die Photodissoziation eine wesentliche Rolle. Außerdem ist es notwendig, alle chemischen Reaktionen, die, direkt oder indirekt, Einfluss auf die CO-Dichte haben, in den Rechnungen zu berücksichtigen. Untersuchungen zum Einfluss der Photodissoziation auf CO sind unter anderem von van Dishoeck & Black (1988) und Warin et al. (1996) gemacht worden. In beiden Fällen wurde eine mikroturbulente Näherung des Strahlungstransportes, bei einer detaillierten Berücksichtigung des chemischen Netzwerkes verwendet¹⁴. Ausgehend von den oben genannten Untersuchungen, haben wir eine numerische Modellierung interstellarer Wolken entwickelt, die der Kopplung zwischen chemischem Ratengleichungssystem und turbulentem Strahlungstransport Rechnung trägt. Diese ermöglicht uns die selbstkonsistente Berechnung von

¹³Die Selbstabsorption äußert sich durch eine Einsenkung in der Linienmitte.

¹⁴Da die chemischen Reaktionen durch ein System gekoppelter, nichtlinearer Gleichungen abgebildet werden, spricht man, in Anspielung auf die komplizierten gegenseitigen Abhängigkeiten, von einem chemischen Netz oder Netzwerk. Neutral formuliert handelt es sich um ein Ratengleichungssystem.

Dichte und Intensität. Es zeigt sich, dass die Berücksichtigung fluktuierender Geschwindigkeitsfelder innerhalb der Wolke einen wesentlichen Einfluss auf den CO-Dichte-Verlauf haben kann. Das ist auch insofern wichtig, als aus dem Vergleich von Modellrechnungen mit Beobachtungen auf Größen wie Dichte und Temperatur innerhalb einer Molekülwolke geschlossen wird.

Kapitel 2

Mathematische Grundlagen

2.1 Wahrscheinlichkeitsrechnung

2.1.1 Zufallsgrößen und Erwartungswert

Ein zufälliges Experiment oder ein Versuch ist ein Vorgang, bei dem verschiedene Ausgänge möglich sind, ohne daß man vorher sagen könnte, welcher Ausgang tatsächlich eintreten wird. Die möglichen, einander ausschließenden Ausgänge eines Versuchs heißen seine *elementaren Ereignisse* e . \mathcal{E} sei die Menge aller elementaren Ereignisse eines solchen Zufallsexperiments. Jede Teilmenge $A \subseteq \mathcal{E}$ heißt ein Ereignis. Ein Ereignis A tritt genau dann ein, wenn eines der Elementarereignisse, aus denen A besteht, eintritt. Sei ξ eine Zufallsvariable, die in einem stochastischen Prozeß erzeugt wird, d.h. jede mögliche Realisation des Prozesses ordnet ξ einen bestimmten Wert zu. Die wichtigste Größe zur Beschreibung einer *Zufallsvariablen* ξ oder einer von ξ abhängigen Funktion $f(\xi)$ ist ihr Erwartungswert:

$$\langle f(\xi) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} (f(\xi_1) + \dots + f(\xi_N)) . \quad (2.1)$$

Dabei ist N die Zahl der durchgeführten Zufallsexperimente, wobei es keinen Unterschied macht, ob die Realisationen $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ in N aufeinanderfolgenden Experimenten innerhalb eines Systems oder gleichzeitig in N Systemen erzeugt werden. Die sogenannte *Wahrscheinlichkeitsverteilung* $F(x) = \mathcal{P}(\xi \leq x)$ ¹ gibt die Wahr-

¹ $\lim_{x \rightarrow \infty} \mathcal{P}(\xi \leq x) = 1$

scheinlichkeit \mathcal{P}^2 dafür an, dass die Zufallsvariable ξ einen Wert kleiner oder gleich x annimmt:

$$\begin{aligned} F(x) = \mathcal{P}(\xi \leq x) &= \lim_{N \rightarrow \infty} (\Theta(x - \xi_1) + \dots + \Theta(x - \xi_N)) \\ &= \langle \Theta(x - \xi) \rangle, \end{aligned} \quad (2.2)$$

mit der Stufenfunktion :

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & : x \leq 0 \\ 0 & : x > 0 \end{cases}. \quad (2.3)$$

Die Klammern $\langle \rangle$ bedeuten dabei die Mittelung über das gesamte Ensemble³. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung wird gelegentlich auch als die Verteilungsfunktion $F(x)$ der Wahrscheinlichkeiten der Zufallsgröße ξ bezeichnet.

2.1.2 Die Wahrscheinlichkeitsdichte

Eine wichtige Klasse von Zufallsgrößen ist die, für die eine nichtnegative Funktion $p_\xi(x)$ existiert mit der Eigenschaft:

$$\begin{aligned} p_\xi(x) &= \frac{d}{dx} F(x) = \frac{d}{dx} \mathcal{P}(\xi \leq x) \\ &= \frac{d}{dx} \langle \Theta(x - \xi) \rangle \end{aligned} \quad (2.4)$$

bzw.:

$$F(x) = \int_{-\infty}^x p_\xi(z) dz. \quad (2.5)$$

Zufallsgrößen mit dieser Eigenschaft heißen *stetig*. Die Funktion $p_\xi(x)$ ist die *Dichte der Wahrscheinlichkeitsverteilung* oder kurz *Wahrscheinlichkeitsdichte*. Die Wahrscheinlichkeit, dass ξ im Intervall $[x, x + dx]$ liegt, ist durch den Ausdruck:

$$p_\xi(x) dx = \left\langle \frac{d}{dx} \Theta(x - \xi) \right\rangle dx = \langle \delta(x - \xi) \rangle dx \quad (2.6)$$

²Das kalligraphisch geschriebene \mathcal{P} soll hier allgemein für eine Wahrscheinlichkeit verwendet werden.

³Als Ensemble bezeichnen wir die Menge aller möglichen Elementarereignisse, die bei einem Zufallsexperiment eintreten können.

gegeben. Mit der Wahrscheinlichkeitsdichte sind die Eigenschaften der Zufallsgröße ξ vollständig bestimmt. Der Erwartungswert einer Funktion $f(\xi)$ kann mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichte ermittelt werden:

$$f(\xi) = \int f(x) \delta(x - \xi) dx. \quad (2.7)$$

Man mittelt:

$$\begin{aligned} \langle f(\xi) \rangle &= \left\langle \int f(x) \delta(x - \xi) dx \right\rangle \\ &= \int f(x) \langle \delta(x - \xi) \rangle dx \\ &= \int f(x) p_\xi(x) dx. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Genauso kann man auch den Erwartungswert von ξ angeben:

$$\langle \xi \rangle = \int x p_\xi(x) dx. \quad (2.9)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte⁴ hat die folgenden Eigenschaften:

$$p_\xi(x) \geq 0 \quad (2.10)$$

$$P(x_1 \leq \xi < x_2) = \int_{x_1}^{x_2} p_\xi(x) dx \quad (2.11)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p_\xi(x) dx = 1. \quad (2.12)$$

2.1.3 Momente

Das n-te Moment einer stetigen Zufallsgröße ist definiert als:

$$M_n = \langle \xi^n \rangle = \int x^n \cdot p_\xi(x) dx. \quad (2.13)$$

Vergleicht man die Definition mit den Gleichungen 2.9 und 2.12, so sieht man, dass es sich um das erste und nullte Moment von ξ handelt. Das erste Moment entspricht dem Erwartungswert und ist der 'Schwerpunkt' der durch $p_\xi(x)$ gegebenen Verteilung.

⁴Die Namen für $p_\xi(x)$ gehen in der mathematischen und physikalischen Literatur verwirrend auseinander. In Physikbüchern wird die Wahrscheinlichkeitsdichte häufig als Wahrscheinlichkeitsverteilung bezeichnet.

2.1.4 Die bedingte Wahrscheinlichkeit

Im allgemeinen ändert sich die Wahrscheinlichkeit eines zufälligen Ereignisses A , wenn bereits bekannt ist, dass ein anderes Zufallsereignis B eingetreten ist. Die Wahrscheinlichkeit von A unter der Bedingung, dass B mit $\mathcal{P}(B) \neq 0$ bereits eingetreten ist, wird mit $\mathcal{P}(A|B)$ bezeichnet und heißt die *bedingte Wahrscheinlichkeit von A unter der Bedingung von B* . Allgemein definiert man bedingte Wahrscheinlichkeiten durch folgende Beziehungen:

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(A|B) &= \frac{\mathcal{P}(A \cap B)}{\mathcal{P}(B)}; \quad \mathcal{P}(B) \neq 0, \\ \mathcal{P}(B|A) &= \frac{\mathcal{P}(A \cap B)}{\mathcal{P}(A)}; \quad \mathcal{P}(A) \neq 0.\end{aligned}\tag{2.14}$$

Daraus resultiert die *Multiplikationsregel der Wahrscheinlichkeitsrechnung*:

$$\mathcal{P}(A \cap B) = \mathcal{P}(B) \cdot \mathcal{P}(A|B) = \mathcal{P}(A) \cdot \mathcal{P}(B|A).\tag{2.15}$$

Die Wahrscheinlichkeit des Produktes zweier zufälliger Ereignisse ist also gleich dem Produkt der Wahrscheinlichkeit des einen Ereignisses mit der bedingten Wahrscheinlichkeit des anderen, unter der Bedingung, dass das erste eingetreten ist.

Zwei zufällige Ereignisse A und B heißen voneinander unabhängig, wenn das Eintreten des einen die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten des anderen in keiner Weise beeinflusst:

$$\mathcal{P}(A|B) = \mathcal{P}(A); \tag{2.16}$$

die Multiplikationsregel vereinfacht sich dann zu:

$$\mathcal{P}(A \cap B) = \mathcal{P}(A) \cdot \mathcal{P}(B), \tag{2.17}$$

in Worten: Die Wahrscheinlichkeit für das Produkt zweier unabhängiger Ereignisse ist gleich dem Produkt ihrer Wahrscheinlichkeiten. Alle vorherigen Bemerkungen zu Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion lassen sich sofort auf den Fall der bedingten Wahrscheinlichkeit übertragen. So ist die Funktion:

$$F(x|B) = \mathcal{P}(\xi < x|B) = \int_{-\infty}^x p_{\xi}(z|B) dz \tag{2.18}$$

die bedingte Verteilungsfunktion $F(x|B)$ der Zufallsgröße ξ unter der Bedingung B , und $p_{\xi}(z|B)$ ist die bedingte Dichte der Wahrscheinlichkeitsverteilung.

2.2 Der stochastische Prozess

2.2.1 Definition des stochastischen Prozesses

Wie bereits erwähnt, sei \mathcal{E} die Menge der paarweise unvereinbaren⁵ Elementarereignisse e , und t sei eine kontinuierliche Variable, beispielsweise die Zeit. Unter einem stochastischen Prozess versteht man dann eine Funktion zweier Argumente:

$$\xi(t) = \Phi(e, t) \quad \text{mit } e \in \mathcal{E}. \quad (2.19)$$

Fixiert man e , d.h. legt man den Ausgang des Zufallsprozesses fest, so hängt $\Phi(e, t)$ nur noch von t ab. Jede solche Funktion, also für jedes möglich Elementarereignis e , nennt man eine Realisation des Prozesses $\xi(t)$. Hält man den Parameter $t = t_1$ fest, hängt $\xi(t_1) = \Phi(e, t_1)$ nur noch von dem zufälligen Ereignis e ab; $\xi(t_1)$ ist also eine Zufallsvariable. Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte⁶

$$p_1(x_1, t_1) \cdot dx_1 = \mathcal{P}(\xi(t_1) \in [x_1, x_1 + dx_1]) \quad (2.20)$$

gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, dass der Wert von ξ zur Zeit t_1 im Intervall $[x_1, x_1 + dx_1]$ liegt. Dies wird noch etwas klarer, wenn wir den Ausdruck für die Wahrscheinlichkeitsdichte mit Hilfe von (2.6) formulieren:

$$p_1(x_1, t_1) = \langle \delta(x_1 - \xi(t_1)) \rangle. \quad (2.21)$$

Analog zu 2.20 erhält man die Wahrscheinlichkeit für den Fall, daß zu n verschiedenen Zeitpunkten $t_i (i = 1, \dots, n)$ die Zufallsvariablen $\xi(t_i)$ die Werte x_i annehmen⁷:

$$p_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_1 \dots dx_n = \mathcal{P}(\xi(t_i) \in [x_i, x_i + dx_i] \text{ für alle } i = 1, \dots, n) \quad (2.22)$$

Der Einfachheit halber wollen wir im weiteren Verlauf annehmen, dass für die Zeitpunkte t_i gilt: $t_{i-1} < t_i$ für alle i . Im allgemeinen kann man nicht ausschließen, dass der Zustand eines Systems zum Zeitpunkt t_i von allen vorherigen Zuständen zu den Zeitpunkten t_1, \dots, t_{i-1} abhängt. Zur vollständigen Beschreibung eines Prozesses ist

⁵Zwei Ereignisse heißen unvereinbar, wenn ihr gleichzeitiges Auftreten unmöglich ist.

⁶ $p_1(x_1, t_1)$ wird auch als Ein-Punkt-Verteilungsfunktion bezeichnet, ist aber trotzdem eine *Wahrscheinlichkeitsdichte*.

⁷Für die zugehörige Verteilungsfunktion ergibt sich:

$F(x_1, \dots, x_n) = \int_{-\infty}^{x_1} \dots \int_{-\infty}^{x_n} p_n(z_n, t_n; \dots; z_1, t_1) dz_1 \dots dz_n$

es also nötig, die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte $p_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1)$ für alle x_i, t_i für beliebig große n zu kennen. Eine andere Möglichkeit denselben Prozess zu beschreiben, verwendet die sogenannten *Übergangswahrscheinlichkeiten*. Mit Hilfe der Eigenschaften der bedingten Wahrscheinlichkeiten 2.14 und der sogenannten Randverteilung⁸ kann man Folgendes definieren:

$$\begin{aligned} p_\xi(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) &= \frac{p_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1)}{p_{n-1}(x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1)} \\ &= \frac{p_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1)}{\int p_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_n}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Anders ausgedrückt ist p die Wahrscheinlichkeitsdichte der Zufallsvariablen $\xi(t_n)$ unter der Bedingung, dass ξ zu den Zeiten t_i ($i = 1, \dots, n-1$) die Werte x_i annimmt. Stellt man Gleichung 2.23 um, so erhält man:

$$\begin{aligned} p_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) &= \\ p_\xi(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) \cdot p_{n-1}(x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Analog gilt für p_{n-1} :

$$\begin{aligned} p_{n-1}(x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) &= \\ p_\xi(x_{n-1}, t_{n-1} | x_{n-2}, t_{n-2}; \dots; x_1, t_1) \cdot p_{n-2}(x_{n-2}, t_{n-2}; \dots; x_1, t_1). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Durch wiederholtes Einsetzen von 2.25 in 2.24 folgt die *Kettenregel*:

$$\begin{aligned} p_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) &= \\ p_\xi(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) \cdot \dots \cdot p_\xi(x_2, t_2 | x_1, t_1) \cdot p_\xi(x_1, t_1). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Das heißt, im allgemeinen Fall ist das Ergebnis eines stochastischen Prozesses von allen Ergebnissen aller vorher durchgeführten Prozesse abhängig. Ohne die vollständige Kenntnis der gesamten Prozesskette ist keine Aussage über den aktuellen Prozess möglich. Der gegenteilige Fall liegt bei unkorrelierten Zufallsprozessen vor. Diese sind dadurch gekennzeichnet, dass der Wert von ξ zur Zeit t_n

⁸Gegeben sei eine n -dimensionale stetige Zufallsgröße mit der Dichte $p_n(x_1, \dots, x_n)$. Dann erhält man die Dichte des Zufallsvektors $(\xi_1, \dots, \xi_{n-1})$ als $(n-1)$ -dimensionale Randverteilung: $p_{n-1}(x_1, \dots, x_{n-1}) = \int_{-\infty}^{\infty} p_n(x_1, \dots, x_n) dx_n$.

unabhängig ist von den Werten, die die Zufallsvariable zu früheren Zeitpunkten angenommen hat. In diesem Fall ist die Wahrscheinlichkeitsdichte gleich der Dichte der Einpunktverteilungsfunktion. Entsprechend zu Gleichung 2.16 folgt:

$$p_{\xi}(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = p_1(x_n, t_n), \quad (2.27)$$

und die Dichte der Mehrpunktverteilungsfunktion faktorisiert analog zu 2.17 folgendermaßen :

$$\begin{aligned} p_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) &= p_1(x_n, t_n) \cdot \dots \cdot p_1(x_1, t_1) \\ &= \prod_{i=1}^n p_1(x_i, t_i). \end{aligned} \quad (2.28)$$

2.2.2 Der Markow-Prozess

Einen wichtigen Sonderfall stellt der sogenannte Markowsche Prozeß dar. Er beschreibt ein System, dessen Zustand zu einem Zeitpunkt t_n nicht von allen vorangegangenen Zuständen abhängt, sondern nur von dem unmittelbar vorherigen Zustand zum Zeitpunkt t_{n-1} . Das System *erinnert* sich nur an seine unmittelbare Vergangenheit und besitzt kein *Langzeitgedächtnis*. Man nennt dies auch einen *Prozess ohne Nachwirkung*. Für diesen reduziert sich die funktionale Abhängigkeit der Übergangswahrscheinlichkeiten und ihrer Dichten auf die Größen x_n, t_n, x_{n-1} , und t_{n-1} :

$$p(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = p(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}). \quad (2.29)$$

Aus 2.29 und 2.24 folgt:

$$\begin{aligned} p_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) &= p_1(x_1, t_1) \cdot \prod_{i=2}^n p(x_i, t_i | x_{i-1}, t_{i-1}) \\ &= p_2(x_2, t_2; x_1, t_1) \cdot \prod_{i=3}^n \frac{p_2(x_i, t_i; x_{i-1}, t_{i-1})}{p_1(x_{i-1}, t_{i-1})}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Dabei benutzt man

$$p_2(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \frac{p_2(x_2, t_2; x_1, t_1)}{p_1(x_1, t_1)}. \quad (2.31)$$

Man bezeichnet $p(x, t | x_0, t_0)$ allgemein als *Übergangswahrscheinlichkeit*. Es handelt sich um eine Wahrscheinlichkeitsdichte und folglich muß die Normierung

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x, t | x_0, t_0) dx = 1 \quad (2.32)$$

gelten. Für infinitesimal kleine Differenzen $t - t_0$ soll die Zufallsvariable den scharfen Wert x_0 annehmen:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} p(x, t | x_0, t_0) dx = \delta(x_0 - x) . \quad (2.33)$$

Weiterhin soll die Chapman-Kolmogoroff-Gleichung erfüllt sein. Dazu betrachten wir die Randverteilung:

$$p_1(x_3, t_3; x_1, t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_3(x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1) dx_2 . \quad (2.34)$$

Zusammen mit Gleichung 2.31 gilt für einen Markowschen Prozess:

$$p_1(x_1, t_1) p(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_1(x_1, t_1) p(x_2, t_2 | x_1, t_1) p(x_3, t_3 | x_2, t_2) dx_2 . \quad (2.35)$$

Für beliebige $p_1(x_1, t_1)$ folgt daraus die *Chapman-Kolmogoroff-Gleichung*

$$p(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x_3, t_3 | x_2, t_2) p(x_2, t_2 | x_1, t_1) dx_2 . \quad (2.36)$$

2.3 Die Langevin-Gleichung

Systeme, die sich durch stetige Markowsche Prozesse beschreiben lassen, erfüllen die folgende *stochastische* Differentialgleichung (Risken, H. (1988)):

$$\frac{d\xi}{dt} = h(\xi, t) + g(\xi, t) \cdot \Gamma(t) . \quad (2.37)$$

Sie wird in der Literatur als *allgemeine Langevin-Gleichung* bezeichnet. Im Gegensatz zu gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung, die durch einen Anfangswert vollständig determiniert sind, weist die Langevin-Gleichung einen zusätzlichen stochastischen Term $\Gamma(t)$ auf. $\Gamma(t)$ wird Langevin- oder Zufallskraft⁹ genannt und ist eine stochastische Größe mit dem Mittelwert Null. Die Werte, die $\Gamma(t)$ zu zwei verschiedenen Zeitpunkten annimmt, sind voneinander unabhängig, d.h. ihre Korrelationsfunktion zweiter Ordnung ist proportional zu einer δ -Funktion:

$$\begin{aligned} \langle \Gamma(t) \rangle &= 0 \\ \langle \Gamma(t) \Gamma(t') \rangle &= 2\delta(t - t') . \end{aligned} \quad (2.38)$$

⁹Engl.: *stochastic force* oder *Langevin force* $\Gamma(t)$.

Mit der zusätzlichen Annahme, dass $\Gamma(t)$ normalverteilt ist, sind zusammen mit den Momentengleichungen 2.38 auch Korrelationsfunktionen höherer Ordnung bestimmt¹⁰(Risken, H. (1988)):

$$\begin{aligned} \langle \Gamma(t_1) \dots \Gamma(t_{2n-1}) \rangle &= 0 \\ \langle \Gamma(t_1) \dots \Gamma(t_{2n}) \rangle &= 2^n \left[\sum_{P_d} \delta(t_{i_1} - t_{i_2}) \delta(t_{i_3} - t_{i_4}) \dots \delta(t_{i_{2n-1}} - t_{i_{2n}}) \right], \end{aligned} \quad (2.39)$$

wobei die Summe über alle $(2n)!/(2^n n!)$ Permutationen auszuführen ist, die zu verschiedenen Ausdrücken für $\delta(t_{i_1} - t_{i_2}) \dots \delta(t_{i_{2n-1}} - t_{i_{2n}})$ führen.¹¹ Aus der Tatsache, dass die Lösung einer Differentialgleichung erster Ordnung vollständig durch ihren Anfangswert bestimmt ist und dass die Langevin-Kraft δ -korreliert ist, folgt, dass die Langevin-Gleichung 2.37 Markow-Prozesse beschreibt.

Für ein System von N stochastischen Variablen $\{\xi\} = \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ hat die allgemeine Langevin-Gleichung die Form ($i = 1, 2, \dots, N$):

$$\dot{\xi}_i = h_i(\{\xi\}, t) + g_{ij}(\{\xi\}, t) \Gamma_j(t) \quad . \quad (2.40)$$

Dabei wird die Einsteinsche Summenkonvention¹² verwendet. Die Eigenschaften der N Langevin-Kräfte verhalten sich analog zu den Gleichungen 2.38:

$$\begin{aligned} \langle \Gamma_i(t) \rangle &= 0 \\ \langle \Gamma_i(t) \Gamma_i(t') \rangle &= 2\delta_{ij}\delta(t - t') \quad . \end{aligned} \quad (2.41)$$

2.4 Die Kramers-Moyal-Entwicklung

Die Langevin-Gleichungen sind ein Beispiel für die Beschreibung eines stochastischen Systems durch einen Satz von Differentialgleichungen. Dabei handelt es sich

¹⁰Allgemein ist jede Normalverteilung vollständig über ihre ersten beiden Momente bestimmt.

¹¹Beispielsweise folgt für $n = 2$ (Herleitung in Risken, H. (1988)):

$$\begin{aligned} \langle \Gamma(t_1) \Gamma(t_2) \Gamma(t_3) \rangle &= 0 \\ \langle \Gamma(t_1) \Gamma(t_2) \Gamma(t_3) \Gamma(t_4) \rangle &= 4[\delta(t_{i_1} - t_{i_2})\delta(t_{i_3} - t_{i_4}) + \delta(t_{i_1} - t_{i_3})\delta(t_{i_2} - t_{i_4}) + \\ &\quad + \delta(t_{i_1} - t_{i_4})\delta(t_{i_3} - t_{i_2})] \end{aligned}$$

¹²Summation über doppelt auftauchend lateinische Indizes, hier $j = 1, \dots, N$.

um klassische Bewegungsgleichungen, die um einen stochastischen Zusatzterm erweitert werden. Kennt man $\Gamma(t)$, kann man aus ihnen die stochastischen Variablen $\{\xi\}$ direkt bestimmen. Aufgrund der stochastischen Natur von $\Gamma(t)$ ist es sinnvoll dazu überzugehen, statt nach ξ nach dem Erwartungswert $\langle \xi \rangle$ zu fragen. Um den Erwartungswert zu bestimmen, muss man die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(\xi)$ kennen. Anstelle eines Satzes deterministischer Differentialgleichungen, die die zeitliche Entwicklung eines System beschreiben, versuchen wir einen Satz von Differentialgleichungen zu finden, die die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte $p(\{x\}, t)$ beschreiben. Wenn man die Wahrscheinlichkeitsdichte zu jedem Zeitpunkt kennt, kann man jederzeit die zugehörigen Momente ermitteln und damit Aussagen über das *mögliche* Verhalten des Systems machen. Die *Kramers-Moyal-Entwicklung* ist eine allgemeine zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte und liefert uns in einem Spezialfall die sogenannte Fokker-Planck-Gleichung.

Wie bereits gezeigt, gilt für alle Markow-Prozesse die Chapman-Kolmogoroff-Gleichung 2.36. In abgewandelter Form kann man schreiben:

$$p(\{x\}, t + \tau) = \int \dots \int p(\{x\}, t + \tau | \{x'\}, t) p(\{x'\}, t) d^N x' . \quad (2.42)$$

Wir substituieren $\{x'\} = \{x\} - \{\Delta\}$ und das Differential $d^N x' = -d^N \Delta = d\Delta_1 \dots d\Delta_N$. Den Integranden entwickelt man in eine Taylor-Reihe um den Punkt $\{x\} = x_1, \dots, x_N$ und erhält:

$$\begin{aligned} p(\{x\}, t + \tau | \{x'\}, t) p(\{x'\}, t) &= \\ &= p(\{x\}, t + \tau | \{x\} - \{\Delta\}, t) p(\{x\} - \{\Delta\}, t) \\ &= p(\{x\} + \{\Delta\} - \{\Delta\}, t + \tau | \{x\} - \{\Delta\}, t) p(\{x\} - \{\Delta\}, t) \\ &= \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-1)^v}{v!} \Delta_{j_1} \Delta_{j_2} \dots \Delta_{j_v} \frac{\partial^v [p(\{x\} + \{\Delta\}, t + \tau | \{x\}, t) p(\{x\}, t)]}{\partial x_{j_1} \partial x_{j_2} \dots \partial x_{j_v}} ; \end{aligned} \quad (2.43)$$

über doppelt auftauchende lateinische Indizes wird wieder summiert, d.h. $j_i = 1, \dots, N$. Setzt man Gleichung 2.43 in 2.42 ein und vertauscht Summation und Differentiation mit der Integration, so erhält man:

$$\begin{aligned} p(\{x\}, t + \tau) &= \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-1)^v}{v!} \frac{\partial^v}{\partial x_{j_1} \dots \partial x_{j_v}} \\ &\times \int \dots \int [\Delta_{j_1} \dots \Delta_{j_v} p(\{x\} + \{\Delta\}, t + \tau | \{x\}, t) p(\{x\}, t) d^N \Delta] . \end{aligned} \quad (2.44)$$

Mit der Definition der v -ten Momente:

$$\begin{aligned} M_{j_1, j_2, \dots, j_v}^v(\{x\}, t, \tau) &= \\ &= \int \dots \int \Delta_{j_1} \dots \Delta_{j_v} p(\{x\} + \{\Delta\}, t + \tau | \{x\}, t) d^N \Delta, \end{aligned} \quad (2.45)$$

eingesetzt in Gleichung 2.44 ergibt sich¹³:

$$\begin{aligned} p(\{x\}, t + \tau) - p(\{x\}, t) &= \\ &= \sum_{v=1}^{\infty} \frac{(-1)^v}{v!} \frac{\partial^v}{\partial x_{j_1} \dots \partial x_{j_v}} M_{j_1, j_2, \dots, j_v}^v(\{x\}, t, \tau) p(\{x\}, t). \end{aligned} \quad (2.46)$$

Wir setzen voraus, dass sich die Momente 2.45 für kleine τ in eine Taylor-Reihe um t entwickeln lassen¹⁴:

$$\frac{M_{j_1, j_2, \dots, j_v}^v(\{x\}, t, \tau)}{v!} = D_{j_1, j_2, \dots, j_v}^v(\{x\}, t) \cdot \tau + O(\tau^2), \quad (2.47)$$

mit dem Operator $D_{j_1, j_2, \dots, j_v}^v$ folgendermaßen definiert:

$$D_{j_1, j_2, \dots, j_v}^v(\{x\}, t) \cdot v! = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} M_{j_1, j_2, \dots, j_v}^v(\{x\}, t, \tau). \quad (2.48)$$

Setzt man Gleichung 2.47 in 2.46 ein, dividiert durch τ , und vernachlässigt die Terme $O(\tau^2)$, folgt:

$$\frac{p(\{x\}, t + \tau) - p(\{x\}, t)}{\tau} = \sum_{v=1}^{\infty} \frac{(-\partial)^v}{\partial x_{j_1} \dots \partial x_{j_v}} D_{j_1, j_2, \dots, j_v}^v(\{x\}, t) p(\{x\}, t). \quad (2.49)$$

Nach dem Grenzübergang $\tau \rightarrow 0$ ergibt sich:

$$\frac{\partial p(\{x\}, t)}{\partial t} = L_{KM}(\{x\}, t) \quad (2.50)$$

mit dem Kramers-Moyal-Operator:

$$L_{KM} = \sum_{v=1}^{\infty} \frac{(-\partial)^v}{\partial x_{j_1} \dots \partial x_{j_v}} D_{j_1, j_2, \dots, j_v}^v(\{x\}, t). \quad (2.51)$$

¹³Dabei wurde von $M_{j_1, j_2, \dots, j_v}^{v=0} = 1$ Gebrauch gemacht. Man beachte die Summationsindizes in Glg. 2.46.

¹⁴Glg. 2.47 enthält keinen konstanten Term, da für die Übergangswahrscheinlichkeit $p(\{x\} + \{\Delta\}, t + \tau | \{x\}, t)$ gilt: $\lim_{\tau \rightarrow 0} p(\{x\} + \{\Delta\}, t + \tau | \{x\}, t) = \delta(\Delta_1) \delta(\Delta_1) \dots \delta(\Delta_1)$.

2.5 Die Fokker-Planck-Gleichung

Bricht man die Kramers-Moyal-Entwicklung 2.50 nach dem zweiten Term ab, ergibt sich eine lineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung parabolischen Typs, die man Fokker-Planck-Gleichung nennt¹⁵.

$$\frac{\partial p(\{x\}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial x_i} D_i^{(1)}(\{x\}, t) + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} D_{ij}^{(2)}(\{x\}, t) \right] p(\{x\}, t). \quad (2.52)$$

Die Koeffizienten $D_i^{(1)}$ und $D_{ij}^{(2)}$ bezeichnet man als Driftvektor und Diffusionsmatrix. Wie im vorherigen Abschnitt gezeigt, haben diese Kramers-Moyal-Koeffizienten die Form 2.48. Aus der Definition der Momente 2.45 folgt:

$$D_i^{(1)}(\{x\}, t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \langle \xi_i(t + \tau) - x_i(t) \rangle \Big|_{\xi_k(t) = x_k} \quad (2.53)$$

$$D_{ij}^{(2)}(\{x\}, t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \langle [\xi_i(t + \tau) - x_i(t)] [\xi_j(t + \tau) - x_j(t)] \rangle \Big|_{\xi_k(t) = x_k} \quad (2.54)$$

mit $k = 1, 2, \dots, N$.

Gleichung 2.52 ist eine Bewegungsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(\{x\}, t)$ der fluktuierenden, makroskopischen Variable x . Für eine strenge Bestimmung von $p(\{x\}, t)$ wäre es erforderlich, mit einer mikroskopischen Beschreibung des Systems zu beginnen und die gekoppelten Bewegungsgleichungen für alle Komponenten des Systems aufzustellen.¹⁶ Das ist nur in den seltensten Fällen möglich. Stattdessen bedient man sich häufig eines heuristischen Ansatzes. Dabei fängt man bei dem deterministischen Problem an und benutzt *vernünftige* Argumente, um das stochastische Verhalten zu beschreiben.¹⁷

Die Fokker-Planck-Gleichung ist allerdings nicht die einzige Bewegungsgleichung, die man für die Wahrscheinlichkeitsdichte aufstellen kann. Sie ist jedoch die einfachste Gleichung für kontinuierliche makroskopische Variablen. Andere mögliche Bewegungsgleichungen sind die Boltzmann-Gleichung und die sogenannte Master-Gleichung.

¹⁵In der mathematischen Literatur wird auch der Name Kolmogorov-Gleichung verwandt.

¹⁶In der Größenordnung $\approx 10^{23}$.

¹⁷In der heuristischen Behandlung fügt man häufig eine Langevin-Kraft zu einer deterministischen Gleichung hinzu und erhält so eine stochastische Differentialgleichung. Hat man $\Gamma(t)$ gut gewählt, erhält man so eine Fokker-Planck-Gleichung.

Durch das Lösen der Fokker-Planck-Gleichung erhält man die Wahrscheinlichkeitsdichten, aus denen man die Mittelwerte der Variablen durch Integration bestimmt. Um die Gleichung 2.52 zu lösen, muss man die Kramers-Moyal-Koeffizienten bestimmen. Dazu benötigt man einen Ausdruck für die Größe $\xi_i(t + \tau) - x_i$. Man gewinnt diesen aus der Langevin-Gleichung

$$\frac{d\xi_i}{dt} = h_i(\{\xi\}, t) + g_{ij}(\{\xi\}, t) \Gamma_j(t) \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.55)$$

Die Umformung in die Integralform ergibt:

$$\xi_i(t + \tau) - x_i = \int_t^{t+\tau} [h_i(\{\xi(t')\}, t') + g_{ij}(\{\xi(t')\}, t') \Gamma_j(t')] dt'. \quad (2.56)$$

Wenn man nun $h_i(\{\xi(t')\}, t')$ und $g_{ij}(\{\xi(t')\}, t')$ in eine Taylor-Reihe um $\{x\}$ entwickelt:

$$h_i(\{\xi(t')\}, t') = h_i(\{x\}, t') + \left[\frac{\partial}{\partial x_k} h_i(\{x\}, t') \right] (\xi_k(t') - x_k) + \dots \quad (2.57)$$

$$g_{ij}(\{\xi(t')\}, t') = g_{ij}(\{x\}, t') + \left[\frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij}(\{x\}, t') \right] (\xi_k(t') - x_k) + \dots \quad (2.58)$$

und in Gleichung (2.56) einsetzt, folgt:

$$\begin{aligned} \xi_i(t + \tau) - x_i = & \quad (2.59) \\ & \int_t^{t+\tau} h_i(\{x\}, t') dt' + \int_t^{t+\tau} \frac{\partial}{\partial x_k} h_i(\{x\}, t') [\xi_k(t + \tau) - x_k] dt' + \dots + \\ & + \int_t^{t+\tau} g_{ij}(\{x\}, t') \Gamma_j(t') dt' + \int_t^{t+\tau} \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij}(\{x\}, t') [\xi_k(t + \tau) - x_k] \Gamma_j(t') dt' + \dots \end{aligned}$$

Für den Ausdruck $\xi_i(t') - x_i$ im Integranden setzen wir erneut (2.56) ein. Durch weiteres iteratives Einsetzen erhält man einen Ausdruck, in dem auf der rechten Seite nur noch Langevin-Kräfte und die bekannten Größen $g_{ij}(\{x\}, t')$ und $h_i(\{x\}, t')$ auftauchen. Bildet man nun den Mittelwert über Gleichung 2.59¹⁸, erhält man mit Hilfe von Gleichung 2.38¹⁹

$$\langle \xi_i(t + \tau) - x \rangle = \quad (2.60)$$

¹⁸Da $g_{ij}(\{x\}, t')$ und $h_i(\{x\}, t')$ keine stochastischen Größen sind, muss nur über die Γ gemittelt werden.

¹⁹Man benutzt $\int_t^{t'} g_{ij}(x, t'') 2\delta(t'' - t') dt'' = g_{ij}(x, t') \int_t^{t'} 2\delta(t'' - t') dt'' = g_{ij}(x, t')$ für die Mittelung von Γ .

$$\begin{aligned}
 & \int_t^{t+\tau} h_i(\{x\}, t') dt' + \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} \left[\frac{\partial}{\partial x_k} h_i(\{x\}, t') \right] h_i(\{x\}, t') dt'' dt' + \dots \\
 & + \int_t^{t+\tau} \left[\frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij}(\{x\}, t') \right] g_{ij}(\{x\}, t') dt' + \dots .
 \end{aligned}$$

Um $D_i^{(1)}$ aus $\langle \xi_i(t + \tau) - x \rangle$ zu bestimmen, muss nach 2.53 der Grenzwert $\tau \rightarrow 0$ gebildet werden. Alle Integrale, die in Gleichung 2.60 nicht explizit auftauchen, tragen zum Grenzwert $\tau \rightarrow 0$ nicht bei, d.h.:

$$D_{i_1, i_2, \dots, i_v}^{(v)}(\{x\}, t) = 0 \quad \text{für } v \geq 3 . \quad (2.61)$$

Das ist der Grund, weshalb die Kramers-Moyal-Entwicklung bei der Herleitung der Fokker-Planck-Gleichung nach dem zweiten Term abbricht. Für die Kramers-Moyal Koeffizienten folgen also die Beziehungen:

$$D_i^{(1)}(\{x\}, t) = h_i(\{x\}, t) + g_{kj}(\{x\}, t) \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij}(\{x\}, t) \quad (2.62)$$

$$D_{ij}^{(2)}(\{x\}, t) = g_{ik}(\{x\}, t) g_{jk}(\{x\}, t) . \quad (2.63)$$

Kapitel 3

Strahlungstransport

Die Ausbreitung von Strahlung innerhalb eines Mediums entlang eines Sehstrahls s wird in der konventionellen Beschreibung des Strahlungstransport durch die *Strahlungstransportgleichung* beschrieben:

$$\frac{dI_V(s)}{ds} = -\kappa_V(s)I_V(s) + \epsilon_V(s) . \quad (3.1)$$

Der *Absorptionskoeffizient* κ_V und der *Emissionskoeffizient* ϵ_V beschreiben alle, die Intensität betreffenden, Abschwächungs- und Verstärkungsmechanismen. Für den Fall von UV-Photonen, die eine interstellare Molekülwolke passieren, kann man Gleichung 3.1 vereinfachen. Wir vernachlässigen alle Prozesse, die UV-Photonen reemittieren. Diese Näherung betrifft vor allem die Streuung an Staub, die die Rechnungen jedoch wesentlich erschweren würde. Auch ist der Fehler dieser Vereinfachung kleiner als man annehmen könnte, denn trotz einer relative hohen Albedo von ca. 0.5 findet Streuung vorwiegend in Vorwärtsrichtung statt. Wir erhalten also die Strahlungstransportgleichung für reine Absorption:

$$\frac{dI_V(s)}{ds} = -\kappa_V(s)I_V(s) . \quad (3.2)$$

Generell fasst $\kappa_V(s)$ alle Effekte zusammen, die zu einer Abschwächung der Intensität entlang des Sehstrahls führen können. Je nach physikalischem Modell muss man dabei folgende Einzeleffekte berücksichtigen:

- Photoionisation

- Photodissoziation
- Linienabsorption
- Staubextinktion

3.1 Die stochastische Beschreibung von Dichte und Geschwindigkeit

Der Absorptionskoeffizient κ_ν ist eine Funktion der Frequenz ν und der Dichte $n(s)$ am Ort s . Betrachtet man beispielsweise eine stationäre Wolke homogener Dichte, lässt sich Gleichung 3.2 bei gegebenen Randbedingungen einfach analytisch lösen. Dieser Fall ist natürlich sehr idealisiert. Alle Prozesse, die Einfluß auf die dichte- oder die frequenzabhängigen Absorptionsprozesse haben, machen die Berechnung von $I_\nu(s)$ komplizierter. Zwei mögliche Abweichungen vom oben beschriebenen Idealfall sind zum Beispiel Variationen der Gasdichte entlang des Sehstrahls oder Strömungen innerhalb der Wolke. Kennt man den genauen Zustand der Gaswolke, kann man wie gewohnt mit Gleichung 3.2 die Intensität bestimmen. Um die Dichte und Geschwindigkeit innerhalb der Wolke präzise zu bestimmen, wäre es notwendig, diese direkt aus den magnetohydrodynamischen Gleichungen zu bestimmen. Dabei entsteht ein System von gekoppelten, nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen, das extrem aufwendig zu lösen ist. Abgesehen davon, dass man die Anfangs- und Randbedingungen nicht wirklich gut kennt, sind hydrodynamische Rechnungen empfindlich gegenüber der Wahl der berücksichtigten Dimensionen. Ein anderer Ansatz zur Vereinfachung der Rechnungen ist der, dass man über Dichte und Geschwindigkeit innerhalb der Wolke nur statistische Aussagen in Form von Wahrscheinlichkeitsdichten macht.

Prinzipiell ist natürlich zu berücksichtigen, dass Dichte und Geschwindigkeit miteinander korreliert sind. Beispielsweise muss die Kontinuitätsgleichung erfüllt sein. Wir werden im Folgenden nur Zeitskalen betrachten, die klein gegen die hydrodynamische Zeitskala sind, und können somit die Zeitabhängigkeit von \mathbf{v} und n vernachlässigen. Weiterhin setzen wir Dichte und Geschwindigkeit als statistisch

unabhängig an.¹ Als letztes fordern wir, dass beide Größen entlang des Sehstrahls durch einen Markowschen-Prozess beschrieben werden können. Dieser wird bereits durch die Angabe von Übergangswahrscheinlichkeitsdichten vollständig beschrieben.

3.1.1 Die stochastische Dichteverteilung

Um den Wertebereich der Dichte auf die positiven reellen Zahlen zu beschränken, transformieren wir die Dichte auf eine logarithmische Skala:

$$\tilde{n}(s) = \ln \left(\frac{n(s)}{n_{ref}} \right). \quad (3.3)$$

Die Ein-Punkt-Wahrscheinlichkeitsdichte und die Übergangswahrscheinlichkeitsdichten werden als normalverteilt angenommen und sind gegeben durch:

$$p_n(\tilde{n}) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma_n^2}} \cdot \exp \left(-\frac{\tilde{n}^2}{2\sigma_n^2} \right) \quad (3.4)$$

$$p_n(\tilde{n}, s | \tilde{n}_0, s_0) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma_n^2(1-f^2)}} \cdot \exp \left(-\frac{(\tilde{n} - \tilde{n}_0 f)^2}{2\sigma_n^2(1-f^2)} \right) \quad (3.5)$$

mit der Korrelationsfunktion f :

$$f(\Delta s) = \exp \left(-\frac{|s - s_0|}{\ell_n} \right) = \exp \left(-\frac{\Delta s}{\ell_n} \right). \quad (3.6)$$

Die Größe ℓ_n ist die sogenannte Korrelationslänge und ein Maß dafür, wie schnell sich die Übergangswahrscheinlichkeit $p_n(\tilde{n}, s | \tilde{n}_0, s_0)$ der Wahrscheinlichkeitsdichte $p_n(\tilde{n})$ mit wachsendem $|s - s_0|$ annähert. Betrachtet man die beiden Grenzfälle 0 und ∞ , gilt:

$$\lim_{\Delta s \rightarrow 0} p_n(\tilde{n}, s | \tilde{n}_0, s_0) = \lim_{f \rightarrow 1} p_n(\tilde{n}, s | \tilde{n}_0, s_0) = \delta(\tilde{n} - \tilde{n}_0) \quad (3.7)$$

$$\lim_{\Delta s \rightarrow \infty} p_n(\tilde{n}, s | \tilde{n}_0, s_0) = \lim_{f \rightarrow 0} p_n(\tilde{n}, s | \tilde{n}_0, s_0) = p_n(\tilde{n}). \quad (3.8)$$

¹Ohne ein hydrodynamisches Modell der Wolke kann man keine Aussagen über die Kopplung von Dichte- und Geschwindigkeitsfluktuationen machen. Da in die Strahlungstransportgleichungen nur die Geschwindigkeitskomponente entlang des Sehstrahls eingeht (über die Profilkfunktion Φ), betrachten wir die Dichte und die Geschwindigkeitskomponente entlang des Sehstrahls näherungsweise als unabhängig. Da die tatsächlichen Dichte- und Geschwindigkeitsfelder einer Molekülwolke völlig unbekannt sind, ist das eine vernünftige Näherung.

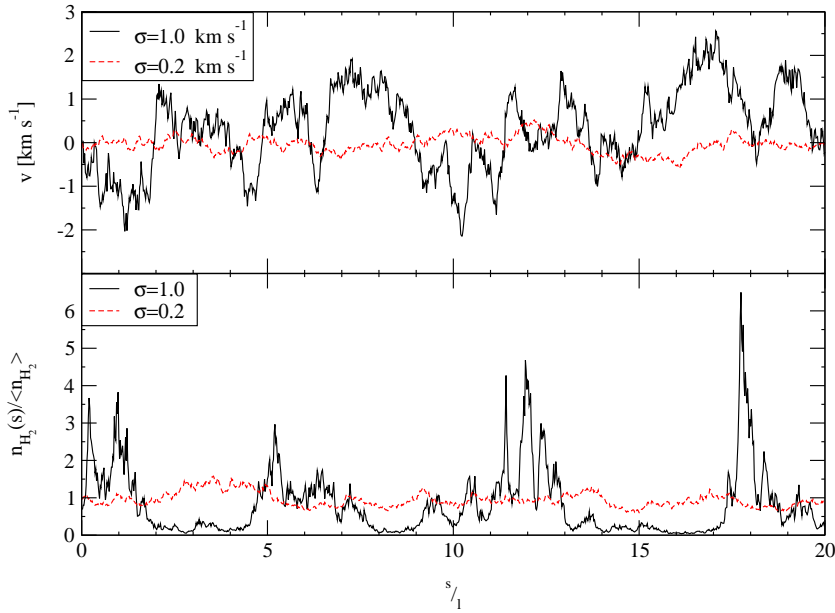


Abbildung 3.1: Beispielhafter Verlauf von Geschwindigkeits- und Dichtefluktuationen für $\sigma = 0.2$ und $\sigma = 1.0$ entlang des Sehstrahls

Durch die Gleichungen 3.4, 3.5 und 3.6 wird die stochastische Dichteverteilung entsprechend der Definition des Markow-Prozesses vollständig beschrieben. Wie bereits gezeigt, kann man denselben Prozeß auch durch eine Langevin-Gleichung darstellen. Die entsprechende Gleichung lautet²:

$$\frac{d\tilde{n}}{ds} = -\frac{\tilde{n}}{\ell_n} + \frac{\sigma_n}{\sqrt{\ell_n}} \Gamma_n(s) . \quad (3.9)$$

3.1.2 Das stochastische Geschwindigkeitsfeld

Analog zu dem Fall der stochastischen Dichteverteilung beschreiben wir das Geschwindigkeitsfeld folgendermaßen:

$$p_v(v) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma_v^2}} \cdot \exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma_v^2}\right) \quad (3.10)$$

²Zur Herleitung siehe Hegmann (1999).

$$p_v(v, s | v_0, s_0) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma_v^2(1-f^2)}} \cdot \exp\left(-\frac{(v-v_0f)^2}{2\sigma_v^2(1-f^2)}\right) \quad (3.11)$$

und

$$f(\Delta s) = \exp\left(-\frac{\Delta s}{\ell_v}\right). \quad (3.12)$$

Die zugehörige Langevin-Gleichung lautet:

$$\frac{dv}{ds} = -\frac{v}{\ell_v} + \frac{\sigma_v}{\sqrt{\ell_v}} \Gamma_v(s). \quad (3.13)$$

Dabei ist v die Geschwindigkeitskomponente entlang des Sehstrahls und $\sigma_v = \sqrt{\langle v^2 \rangle}$ die mittlere quadratische Turbulenzgeschwindigkeit, ebenfalls entlang des Sehstrahls.

Sowohl für die Dichte als auch für die Geschwindigkeit gilt, dass die Beschreibung über einen Markowschen-Prozess nur eine grobe Näherung ist. Trotzdem ist es eine sehr nützliche Formulierung, und man ist in der Lage, genauere Aussagen über Korrelationseffekte zu machen als bisher möglich.

3.2 Die verallgemeinerte Strahlungstransportgleichung

Wenn man die Dichte und die Geschwindigkeit innerhalb der Wolke mittels stochastischer Variablen beschreibt, wird auch aus der Intensität eine stochastische Variable, für die sich im Allgemeinen kein exakter Wert, sondern nur eine n -Punkt Wahrscheinlichkeitsdichte angeben läßt. Diese ist eine Funktion von \tilde{n}, v, I, s , also $p(\tilde{n}, v, I, s)$. Um eine Evolutionsgleichung für $p(\tilde{n}, v, I, s)$ aufzustellen, greifen wir die Aussagen auf, die in den vorherigen Kapiteln gemacht wurden. Wir betrachten \tilde{n} und v als von I_v unabhängig und nehmen ein System von drei Langevin-Gleichungen für die Variablen \tilde{n}, v , und I_v :

$$\begin{aligned} \frac{dI_v}{ds} &= -\kappa_v(I_v - S_v) + 0 \cdot \Gamma_I(s) \\ \frac{d\tilde{n}_v}{ds} &= -\frac{\tilde{n}}{\ell_n} + \frac{\sigma_n}{\sqrt{\ell_n}} \Gamma_n(s) \\ \frac{dv}{ds} &= -\frac{v}{\ell_v} + \frac{\sigma_v}{\sqrt{\ell_v}} \Gamma_v(s). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Daraus folgt, dass $p(\tilde{n}, v, I, s)$ einer Fokker-Planck-Gleichung folgender Form genügen muss:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial s} = & -\frac{\partial}{\partial \tilde{n}}(D_n \cdot p) - \frac{\partial}{\partial v}(D_v \cdot p) - \frac{\partial}{\partial I}(D_I \cdot p) + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{n} \partial I}(D_{nI} \cdot p) \\ & + \frac{\partial^2}{\partial I \partial \tilde{n}}(D_{In} \cdot p) + \frac{\partial^2}{\partial v \partial I}(D_{vI} \cdot p) + \frac{\partial^2}{\partial I \partial v}(D_{Iv} \cdot p) + \frac{\partial^2}{\partial v \partial \tilde{n}}(D_{vn} \cdot p) \\ & + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{n} \partial v}(D_{nv} \cdot p) + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{n}^2}(D_{nn} \cdot p) + \frac{\partial^2}{\partial v^2}(D_{vv} \cdot p) + \frac{\partial^2}{\partial I^2}(D_{II} \cdot p) . \end{aligned} \quad (3.15)$$

Mit Hilfe von 2.62 und 2.63 ergibt sich:

$$\begin{aligned} D_n &= -\frac{\tilde{n}}{\ell_n} \\ D_v &= -\frac{v}{\ell_v} \\ D_I &= -\kappa_v(I_v - S_v) \\ D_{nn} &= \frac{\sigma_n^2}{\ell_n} \\ D_{vv} &= \frac{\sigma_v^2}{\ell_v} \\ D_{II} &= 0 \\ D_{ij} &= 0 \quad \text{für } i \neq j ; \end{aligned} \quad (3.16)$$

eingesetzt in Gleichung 3.15 ergibt das:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial s} &= \frac{\partial}{\partial \tilde{n}} \left(\frac{\tilde{n}}{\ell_n} p \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{v}{\ell_v} p \right) + \frac{\partial}{\partial I} (\kappa_v(I_v - S_v) p) \\ &+ \frac{\partial^2}{\partial \tilde{n}^2} \left(\frac{\sigma_n^2}{\ell_n} p \right) + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left(\frac{\sigma_v^2}{\ell_v} p \right) \\ &= \frac{1}{\ell_n} \frac{\partial}{\partial \tilde{n}} \left(\tilde{n} p + \sigma_n^2 \frac{\partial p}{\partial \tilde{n}} \right) + \frac{1}{\ell_v} \frac{\partial}{\partial v} \left(v p + \sigma_v^2 \frac{\partial p}{\partial v} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial I} (\kappa_v(I_v - S_v) p) . \end{aligned} \quad (3.17)$$

Gleichung 3.17 ist also die Fokker-Planck-Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(\tilde{n}, v, I, s)$. Vor allem sind wir aber an dem Erwartungswert der Intensität interessiert. Mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichte und der Momentendefinition kann man schreiben:

$$Q_v(\tilde{n}, v, s) = \int_0^{+\infty} I_v p(\tilde{n}, v, I, s) dI_v . \quad (3.18)$$

Der Erwartungswert der Intensität $\langle I_V(s) \rangle$ wird durch Integration über \tilde{n} und v ermittelt:

$$\langle I_V(s) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} Q_V(\tilde{n}, v, s) d\tilde{n} dv. \quad (3.19)$$

Entsprechend Gleichung 3.18 multiplizieren wir nun Gleichung 3.17 mit I_V und integrieren anschließend ebenfalls über I_V ; wir erhalten:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_V}{\partial s} = & \frac{1}{\ell_n} \frac{\partial}{\partial \tilde{n}} \left(\tilde{n} Q_V + \sigma_n^2 \frac{\partial Q_V}{\partial \tilde{n}} \right) + \frac{1}{\ell_v} \frac{\partial}{\partial v} \left(v Q_V + \sigma_v^2 \frac{\partial Q_V}{\partial v} \right) \\ & + (\kappa_v (Q_V - S_v p_n(\tilde{n}) p_v(v))). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Eine Möglichkeit zur Lösung von Gleichung 3.20 besteht darin, diese direkt numerisch zu integrieren. Dazu sind noch einige Umformungen zweckmäßig. Wir substituieren:

$$Q_V(\tilde{n}, v, s) = q_V(\tilde{n}, v, s) \cdot p_n(\tilde{n}) p_v(v). \quad (3.21)$$

Dabei ist

$$p_n(\tilde{n}) p_v(v) = \frac{1}{2\pi\sigma_n\sigma_v} \cdot \exp\left(-\frac{\tilde{n}^2}{2\sigma_n^2} - \frac{v^2}{2\sigma_v^2}\right). \quad (3.22)$$

Eingesetzt in Gleichung 3.20 erhält man damit schließlich (Hegmann (1999), Hegmann, M., Kegel, W.H. (2000)):

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_V}{\partial s} = & \frac{1}{\ell_n} \left(-\tilde{n} \frac{\partial q_V}{\partial \tilde{n}} + \sigma_n^2 \frac{\partial^2 q_V}{\partial \tilde{n}^2} \right) + \frac{1}{\ell_v} \left(-v \frac{\partial q_V}{\partial v} + \sigma_v^2 \frac{\partial^2 q_V}{\partial v^2} \right) \\ & - (\kappa_v (q_V - S_v)). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Gleichung 3.23 ist die *verallgemeinerte Strahlungstransportgleichung*. Die Variable $q_V(\tilde{n}, v, s)$ kann man folgendermaßen veranschaulichen: Dichte und Geschwindigkeit sind entlang des Sehstrahls unabhängig voneinander, und deren Wahrscheinlichkeitsdichten sind durch $p_n(\tilde{n})$ und $p_v(v)$ gegeben. Aus der Definition der bedingten Wahrscheinlichkeit ergibt sich der Quotient:

$$p_I(I_V, s | \tilde{n}, v) := \frac{p(\tilde{n}, v, I, s)}{p_n(\tilde{n}) p_v(v)}, \quad (3.24)$$

der einer bedingten Wahrscheinlichkeit, die Intensität I_V bei gegebener Dichte \tilde{n} und Geschwindigkeit v am Ort s vorzufinden, entspricht. Aus Gleichung 3.18 folgt dann:

$$\begin{aligned} q_V(\tilde{n}, v, s) &= \frac{Q_V(\tilde{n}, v, s)}{p_n(\tilde{n}) p_v(v)} = \int_0^\infty I_V \frac{p_V(\tilde{n}, v, I, s)}{p_n(\tilde{n}) p_v(v)} dI_V \\ &= \int_0^\infty I_V p_I(I_V, s | \tilde{n}, v) dI_V. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Wie man anhand von Gleichung 3.25 sieht, lässt sich $q_v(\tilde{n}, v, s)$ als bedingter Erwartungswert der Intensität am Ort s auffassen, also als Mittelwert $\langle I_v \rangle$ unter der Bedingung, dass die logarithmierte Dichte \tilde{n} und die Geschwindigkeit v vorliegen.

Um Gleichung 3.23 zu lösen, muss man einen Anfangswert für $q_v(\tilde{n}, v, s)$ am Ort $s = 0$ und Randwerte für $v \rightarrow \pm\infty$ und $\tilde{n} \rightarrow \pm\infty$ vorgeben. Wenn $s = 0$ den Rand der Molekülwolke kennzeichnet, dann ist der Anfangswert einfach gegeben durch:

$$q_v(\tilde{n}, v, s = 0) = I_{v,0} , \quad (3.26)$$

wobei $I_{v,0}$ das interstellare Strahlungsfeld ist, das auf den Rand der Wolke auftrifft³.

Aus der Forderung, dass bei großen Dichten die Intensität gegen die Quellfunktion geht und dass sich für Dichten nahe Null, also $\tilde{n} \rightarrow -\infty$, der bedingte Erwartungswert der Intensität dem Anfangswert $I_{v,0}$ annähert, folgt:

$$\lim_{\tilde{n} \rightarrow -\infty} q_v(\tilde{n}, v, s) = I_{v,0} \quad (3.27)$$

$$\lim_{\tilde{n} \rightarrow +\infty} q_v(\tilde{n}, v, s) = S_v . \quad (3.28)$$

Da wir weiterhin Linienstrahlung mit einer endlich ausgedehnten Profilkfunktion betrachten, ergeben sich die Randbedingungen für $v \rightarrow \pm\infty$ sinnvollerweise durch das umgebende Strahlungsfeld:

$$\lim_{v \rightarrow -\infty} q_v(\tilde{n}, v, s) = I_{v,0} \quad (3.29)$$

$$\lim_{v \rightarrow +\infty} q_v(\tilde{n}, v, s) = I_{v,0} . \quad (3.30)$$

Wie in Abschnitt 4 weiter erläutert wird, beschränken wir uns im Folgenden auf den Fall der reinen Absorption⁴ mit Turbulenz ohne Dichtefluktuationen⁵. Dadurch vereinfacht sich die verallgemeinerte Strahlungstransportgleichung 3.23 wesentlich:

$$\frac{\partial q_v}{\partial s} = \frac{1}{\ell_v} \left(-v \frac{\partial q_v}{\partial v} + \sigma_v^2 \frac{\partial^2 q_v}{\partial v^2} \right) - \kappa_v \cdot q_v . \quad (3.31)$$

³Je nach gewünschtem Modell kann es sich hierbei zum Beispiel um die 3K-Hintergrundstrahlung oder das interstellare UV-Feld handeln.

⁴Reine Absorption, also keine Emissionen, daher $S_v = 0$.

⁵Eine konstante Dichte entspricht dem Grenzfall $\ell_n \rightarrow +\infty$.

3.3 Der Grenzfall der Makroturbulenz

Den Grenzübergang zu beliebig hohen Korrelationslängen $l_v \rightarrow +\infty$ nennt man den makroturbulenten Grenzfall. Die Korrelationsfunktion $f(\Delta s)$ nimmt für die Dichte bzw. die Geschwindigkeit den Wert Eins an, das heißt Dichte und/oder Geschwindigkeit bleiben entlang des gesamten Sehstrahls konstant. Trotzdem bleibt die Geschwindigkeit eine stochastische Variable. Aus Gleichung 3.31 verschwindet also der erste Term und es folgt:

$$\frac{\partial q_v}{\partial s} = -\kappa_v \cdot q_v \quad (3.32)$$

mit der Definition der optischen Dicke $d\tau_v = \kappa_v ds$ folgt die Lösung

$$q_v(v, s) = I_{v,0} \exp(-\tau(v, s)) . \quad (3.33)$$

Der Erwartungswert der Intensität ergibt sich aus der Lösung 3.33 durch einfache Integration:

$$\langle I_v(s) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} q_v(v, s) \cdot p_v(v) dv . \quad (3.34)$$

Dieser Grenzfall impliziert, dass die mittlere freie Weglänge der Photonen $\frac{1}{\kappa_v}$ klein im Vergleich zur Korrelationslänge des Geschwindigkeitsfeldes ist. Das Verhältnis der Korrelationslänge zur freien Weglänge der Photonen ist:

$$\tau_{v,l_v} = \kappa_v \cdot l_v . \quad (3.35)$$

3.4 Der Grenzfall der Mikroturbulenz

Im mikroturbulenten Grenzfall, also $l_v = 0$, ergibt sich keine so offensichtliche Lösung der verallgemeinerten Strahlungstransportgleichung. Ein Lösungsvorschlag von Gail, H.P., Hundt, E., Kegel, W.H., Schmid-Burgk, J., Traving, G. (1974) besteht darin, die Größe $Q_v(v, s)$ in ein vollständiges System von Funktionen der Form

$$\phi_k(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi k!}} \frac{\partial^k}{\partial v^k} \exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma_v^2}\right) \quad \text{mit } k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.36)$$

zu entwickeln.⁶ Die ϕ_k sind Eigenfunktionen des Differentialoperators

$$\hat{L}_v = \frac{\partial}{\partial v} \left(v + \sigma_v^2 \frac{\partial}{\partial v} \right) \quad (3.37)$$

⁶ $\phi_0(v)$ ist identisch mit der Ein-Punkt-Wahrscheinlichkeitsdichte $p_v(v)$.

zu den Eigenwerten $k = 0, -1, -2, \dots$ und lösen die Gleichung

$$\hat{L}_n \phi_k + k \cdot \phi_k = 0 . \quad (3.38)$$

Die Funktionen $\phi_k(v)$ sind orthogonal zu dem Skalarprodukt

$$\langle \phi_k, \phi_l \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (\phi_0(v))^{-1} \phi_k(v) \phi_l(v) dv = \delta_{kl} \quad (3.39)$$

und bilden die orthogonalen Basisvektoren eines Hilbertraumes. Wenn man $Q_v(v, s)$ nach dieser Basis entwickelt, erhält man

$$Q_v(v, s) = \sum_{k=0}^{\infty} T_k(s) \cdot \phi_k(v) . \quad (3.40)$$

Setzt man dies in die verallgemeinerte Strahlungstransportgleichung für $Q_v(v, s)$ ein, erhält man

$$\sum_{k=0}^{\infty} \phi_k \frac{\partial T_k}{\partial s} = - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k}{\ell_v} T_k \phi_k(v) - \kappa_v \sum_{k=0}^{\infty} T_k \phi_k(v) . \quad (3.41)$$

Nach Multiplikation mit ϕ_l erhält man daraus ein System gekoppelter Differentialgleichungen⁷

$$\frac{\partial T_l}{\partial s} = - \frac{l}{\ell_v} T_l - \sum_{k=0}^{\infty} H_{lk} T_k \quad \text{mit } l = 0, 1, \dots \quad (3.42)$$

H_{lk} ist eine symmetrische Matrix mit den Elementen

$$H_{kl} = H_{lk} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_0(v)^{-1} \phi_l(v) \kappa_v \phi_k(v) dv . \quad (3.43)$$

Im Grenzfall $\ell_v \rightarrow 0$ reduziert sich Gleichung 3.42 auf

$$\frac{\partial T_0}{\partial s} = -H_{00} T_0 \quad \text{und} \quad T_l \equiv 0 \quad \text{für } l \neq 0 , \quad (3.44)$$

da alle Terme T_l mit $l \neq 0$ wegen $-\frac{l}{\ell_v} T_l$ für $T_l \neq 0$ gegen $-\infty$ konvergieren. Damit besitzt Gleichung 3.44 die Form der einfachen Strahlungstransportgleichung 3.32 für homogene Geschwindigkeiten mit

$$H_{00} = \int_{-\infty}^{+\infty} \kappa_v \phi_0(v) dv = \langle \kappa_v \rangle . \quad (3.45)$$

⁷Eine Herleitung für den Fall von Geschwindigkeits- **und** Dichtefluktuationen siehe Hegmann (1999).

H_{00} entspricht also dem über alle Geschwindigkeiten gemittelten Absorptionskoeffizienten $\langle \kappa_v \rangle_v$. Der Erwartungswert der Intensität beträgt damit:

$$\begin{aligned}
 \langle I_v(s) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} Q_v(v, s) dv \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} T_k(s) \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_k(v) dv = T_0(s) \\
 &= I_{v,0} \exp(-H_{00}s) q_v(\tilde{n}, v, s) .
 \end{aligned} \tag{3.46}$$

Zusammenfassend erhält man den mikroturbulenten Grenzfall durch Faltung von κ_v mit $p_v(v)$. Im Gegensatz dazu wird bei Makroturbulenz die Intensität I_v mit $p_v(v)$ gefaltet.

Kapitel 4

Das physikalische Modell

Kohlenmonoxid ist nach H_2 das zweithäufigste interstellare Molekül. Man findet CO in einer großen Vielfalt von astrophysikalischen Umgebungen. In fast jeder interstellaren Wolke, von warmen diffusen Wolken bis hin zu dichten, kälteren Wolken¹, lässt sich CO nachweisen. Diese weite Verbreitung macht CO zu einem geeigneten Hilfsmittel, um zum Beispiel molekularen Wasserstoff indirekt nachzuweisen². Eine wichtige Rolle in der Häufigkeitsverteilung von interstellarem CO spielt die Intensität des jeweils vorherrschenden interstellaren UV-Feldes. Ultraviolette Photonen können das sehr stabile CO-Molekül dissoziieren und spielen damit eine wichtige Rolle in der gesamten chemischen Evolution des interstellaren Mediums. Seit den 80'er Jahren ist bekannt, dass der Photodissoziationsprozess des CO keine Kontinuumsabsorption ist, sondern das CO durch Linienabsorption von UV-Photonen dissoziiert wird (van Dishoeck & Black (1986), van Dishoeck & Black (1988)). Bei einer Linienabsorption spielt eine Variation der Geschwindigkeit entlang des Sehstrahls eine wichtige Rolle. Stark fluktuierende Geschwindigkeitselemente können durch die entsprechende Dopplerverschiebung den UV-Photonen gestatten, tiefer in die Wolke einzudringen, als das in einem Medium ohne Geschwindigkeitsvariationen möglich wäre. Das hat zur Folge, dass auch in tieferen Schichten einer Wolke noch freie C und O Moleküle vorhanden sind und für viele

¹Zum Beispiel in kalten, annähernd kugelsymmetrischen Dunkelwolken, den sogenannten Bok-Globulen.

²Dabei unterstellt man allerdings ein *bekanntes* Verhältnis von CO zu H_2 . Unsere Ergebnisse zeigen jedoch, dass es keine einfache Relation zwischen Wasserstoff- und CO-Dichte gibt.

chemische Reaktionen zur Verfügung stehen.

Eine übliche Vorgehensweise bei der theoretischen Modellierung von Strahlungstransportrechnungen in interstellaren Molekülwolken ist die feste Kopplung der CO-Dichte an eine vorgegebene Verteilung von n_{H} , zum Beispiel proportional zu $\frac{1}{r}$. Um diese Dichteverteilung praktisch handhaben zu können, muss ein Radius gewählt werden, bei dem die Dichte abgeschnitten, d.h. gleich Null gesetzt, wird. Dieser Radius entspricht dem modellierten Rand der Molekülwolke. Bei der Wahl dieses Radius kann man auf numerische Rechnungen zurückgreifen, die zeigen, ab welcher Wolkentiefe keine UV-Photonen mehr dominanten Einfluss auf die CO-Dichte haben.

Dazu ist es nötig, die Gleichungen der chemischen Reaktionsmatrix und die des Strahlungstransports gekoppelt zu lösen. Aufgrund der enormen numerischen Anforderungen war es bis vor kurzem nötig bei der Behandlung solcher Probleme wesentliche Vereinfachungen in der Modellierung zu machen. Aus diesem Grund wurden nur sehr einfache Strahlungstransportmodelle verwendet, um diese photochemischen Rechnungen durchzuführen. Erst seit wenigen Jahren kann man versuchen realistischere Modelle zu rechnen. Das in Kapitel 3 beschriebene Verfahren wird im Folgenden verwendet, um die Modellierung von turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen innerhalb einer Molekülwolke zu realisieren.

4.1 Modellierung des Strahlungstransports

Wir beschränken uns in der Beschreibung des Strahlungstransports auf den Fall der reinen Absorption³ mit stochastischem Geschwindigkeitsfeld. Das bedeutet, dass sich die Strahlungstransportgleichung 3.23

$$\frac{\partial q_{\text{v}}}{\partial s} = \frac{1}{\ell_{\text{n}}} \left(-\tilde{n} \frac{\partial q_{\text{v}}}{\partial \tilde{n}} + \sigma_{\text{n}}^2 \frac{\partial^2 q_{\text{v}}}{\partial \tilde{n}^2} \right) + \frac{1}{\ell_{\text{v}}} \left(-v \frac{\partial q_{\text{v}}}{\partial v} + \sigma_{\text{v}}^2 \frac{\partial^2 q_{\text{v}}}{\partial v^2} \right) - (\kappa_{\text{v}}(q_{\text{v}} - S_{\text{v}}))$$

wesentlich vereinfacht:

$$\frac{\partial q_{\text{v}}}{\partial s} = \frac{1}{\ell_{\text{v}}} \left(-v \frac{\partial q_{\text{v}}}{\partial v} + \sigma_{\text{v}}^2 \frac{\partial^2 q_{\text{v}}}{\partial v^2} \right) - \kappa_{\text{v}} \cdot q_{\text{v}} . \quad (4.1)$$

³Eine detaillierte Begründung für diese Wahl findet sich für den ansonsten analogen Fall der H₂-Absorption in Gruebner (1995).

Die Vernachlässigung von Dichtefluktuationen findet aus Gründen der limitierten Rechenkapazität statt. Der zusätzliche Aufwand würde die Rechenzeit quadratisch ansteigen lassen.

4.1.1 Der Absorptionskoeffizient

Der Absorptionskoeffizient κ_v setzt sich zusammen aus den Anteilen der Absorption in CO und der Absorption durch Staub:

$$\kappa_v = \kappa_{\text{Staub}} + \kappa_{\text{CO}} , \quad (4.2)$$

mit κ_{CO} gleich dem Absorptionsquerschnitt mal der Anzahlichte an CO-Molekülen. Unter interstellaren Bedingungen befinden sich praktisch alle CO-Moleküle im elektronischen- und Vibrations-Grundzustand. Die Rotationszustände werden in unseren Rechnungen als thermisch besetzt⁴ angenommen und bis zu einem $J = 4$ berücksichtigt. Detaillierte Rechnungen zur Rotationsbesetzung von Warin et al. (1996) zeigen, dass auch bei höheren Temperaturen des Gases die Rotationsniveaus unterthermisch besetzt sind⁵.

Bei einem Übergang in einen anderen elektronischen Zustand lassen die quantenmechanischen Auswahlregeln eine ganze Reihe von Einzelübergängen zu, die in der Summe eine Bande von Spektrallinien produzieren. Je nachdem, wie sich die Rotationsquantenzahl J bei dem Übergang ändert, spricht man von dem P , Q oder R -Ast der Bande (siehe Abbildung 4.1):

$$\Delta J = -1 \rightarrow \text{P-Ast}$$

$$\Delta J = 0 \rightarrow \text{Q-Ast}$$

$$\Delta J = +1 \rightarrow \text{R-Ast} .$$

Für Übergänge der Art $\Sigma \rightarrow \Pi$ existieren P, Q und R-Äste, für $\Sigma \rightarrow \Sigma$ Übergänge ist der Übergang $\Delta J = 0$ verboten, und es zeigen sich nur P und R-Äste. In unserer

⁴ $T_{\text{ex}} = 15 \text{ K}$

⁵Die Anregungstemperaturen T_{ex} variieren je nach Modell und J-Niveau zw. 5 und 15 Kelvin bei Gesamttemperaturen von 20 bis 50 Kelvin. In diffusen Wolken haben die Übergänge $5 \rightarrow 4$ und $4 \rightarrow 3$ die höchsten Anregungstemperaturen. Von durchscheinenden zu dichten Wolken hin wird die Anregungstemperatur des $1 \rightarrow 0$ Übergangs im Vergleich zu den übrigen Übergängen immer größer. Detaillierter nachzulesen unter: Warin et al. (1996)

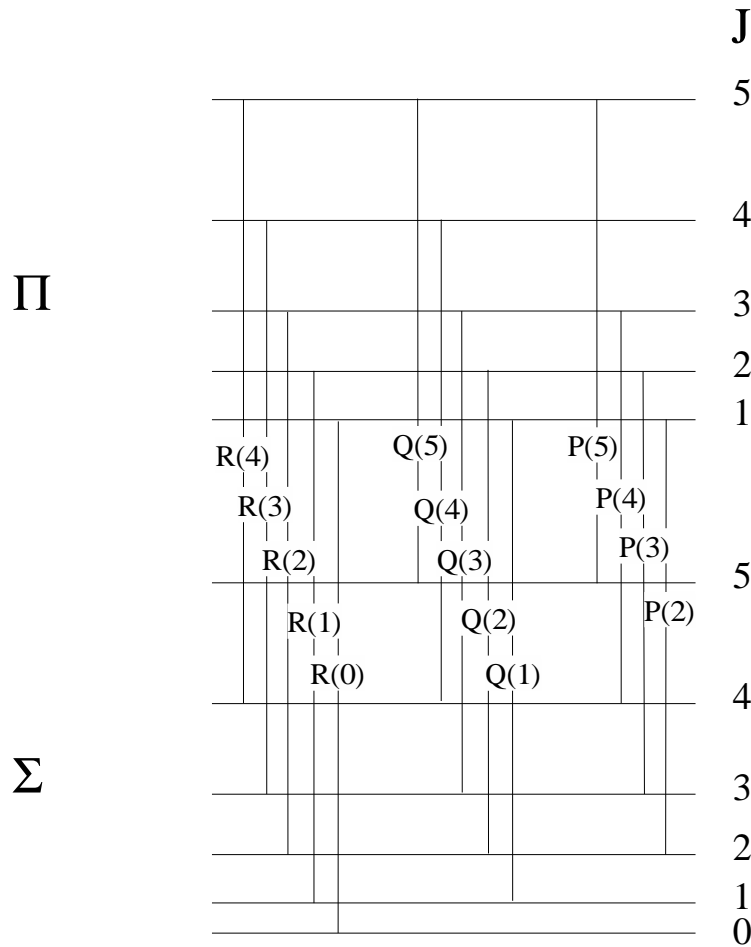


Abbildung 4.1: Schematisches Energie-Level-Diagramm für eine $\Sigma \rightarrow \Pi$ -Bande

Notation sollen einfach gestrichene Quantenzahlen ($v'J'$) den oberen Elektronenzustand und doppelt gestrichene Werte den unteren Zustand einer Bande kennzeichnen. Der Absorptionsquerschnitt pro Molekül für einen einzelnen Rotationsübergang hat dann die Form:

$$k_{v'J',0J''}(v, v) = \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{v'J',0J''} \Phi(v, v) \quad (4.3)$$

mit der Elektronenmasse m_e , der Elementarladung e in elektrostatischen Einheiten und der Linienoszillatorstärke $f_{v'J',0J''}$.⁶ Da die individuellen Rotationslinien jeder

⁶Der Bruch $\frac{\pi e^2}{m_e c}$ nimmt in cgs-Einheiten den numerischen Wert $2.654 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ an.

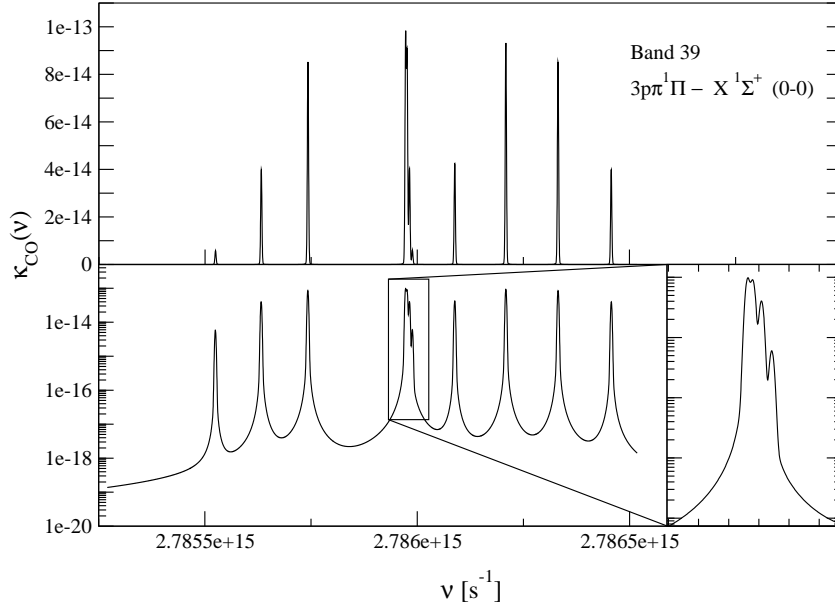


Abbildung 4.2: Absorptionskoeffizient des elektronischen Übergangs $3p\pi^1\Pi - X^1\Sigma^+ (0-0)$ in linearer (oben) und logarithmischer (unten) Darstellung. Die eng überlappenden Linien des Q-Astes sind rechts unten vergrößert dargestellt.

CO-Bande teilweise überlappen, kann man sie nicht isoliert in den Rechnungen berücksichtigen. Stattdessen muss ein frequenzabhängiger Absorptionskoeffizient für jede Bande durch Summieren über alle möglichen Ein- und Ausgangsniveaus berechnet werden (siehe Abbildung 4.2):

$$\kappa_{CO} = \kappa_{\nu',0}(\nu, \nu) = n_{CO} \sum_{J''} \tilde{n}_{J''} \sum_{J'} k_{\nu'J',0J''}(\nu, \nu). \quad (4.4)$$

Alle spektroskopischen Größen entstammen den Arbeiten von Eidelsberg & Rostas (1990) und Eidelsberg et al. (1992). Die Linienoszillatorstärken $f_{\nu'J',0J''}$ können aus den Bandenoszillatorenstärken $f_{\nu',\nu''}$ berechnet werden:

$$f_{\nu'J',0J''} = f_{\nu',\nu''} \frac{\nu_{\nu'J',0J''}}{\nu_0} \frac{S_J}{2J'' + 1}, \quad (4.5)$$

mit dem Hönl-London-Faktor S_J :

$$S_{J_{\Sigma \rightarrow \Pi}} = \begin{cases} (J'' - 1)/2 & \text{P-Ast} \\ (2J'' + 1)/2 & \text{Q-Ast} \\ (J'' + 2)/2 & \text{R-Ast} \end{cases} \quad S_{J_{\Sigma \rightarrow \Sigma}} = \begin{cases} J'' & \text{P-Ast} \\ J'' + 1 & \text{Q-Ast} \end{cases} . \quad (4.6)$$

Die Wellenzahl des Übergangs $\nu_{v', J', 0, J''}$ und der Bandenkopf ν_0 sind ebenfalls dem CO-Atlas von Eidelsberg & Rostas (1990), Eidelsberg et al. (1991) und Eidelsberg et al. (1992) entnommen.

4.1.2 Die Profilfunktion

In der Profilfunktion $\Phi(\nu, \nu)$ sind alle Prozesse zusammengefasst, die Einfluss auf die spektrale Form des Absorptionskoeffizienten haben. Unter interstellaren Bedingungen sind das vor allem Dopplerverbreiterung und Strahlungsdämpfung.

Doppler-Profil

Infolge der thermischen Geschwindigkeiten der CO-Moleküle wird eine scharfe Absorptionslinie etwas verbreitert. Nach der Maxwell-Boltzmann-Verteilung wird diese Verbreiterung durch das auf Eins normierte Gaußprofil beschrieben:

$$\Phi_G(\Delta\nu) = \frac{1}{\Delta\nu_D \sqrt{\pi}} \exp \left[-(\Delta\nu / \Delta\nu_D)^2 \right] , \quad (4.7)$$

mit einer ganzen Halbwertsbreite $2\Delta\nu_D \sqrt{\ln 2}$. Die Dopplerbreite $\Delta\nu_D$ ist gegeben durch

$$\frac{\Delta\nu_D}{\nu_0} = \frac{\Delta\lambda_D}{\lambda_0} = \frac{b}{c} . \quad (4.8)$$

Bei rein thermischer Verbreiterung ist b gegeben durch die wahrscheinlichste Geschwindigkeit der Maxwellschen Geschwindigkeitsverteilung

$$b = v_{\text{th}} = \sqrt{2kT/m_{\text{CO}}} \quad (4.9)$$

mit der Boltzmannkonstante k^7 und der Masse eines CO-Moleküls m_{CO}^8 .

⁷ $k = 1.3807 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1} = 1.3807 \cdot 10^{-16} \text{ erg K}^{-1}$.

⁸ $m_{\text{CO}} = 4.6496181 \cdot 10^{-23} \text{ g}$

Betrachtet man den Grenzfall der Mikroturbulenz, berücksichtigt man die Turbulenz⁹ mit der mittleren turbulenten Geschwindigkeit σ auf die gleiche Weise wie die thermische Geschwindigkeit. Durch die Faltung der beiden Gaußverteilungen für thermische und turbulente Verbreiterung gilt für den Dopplerparameter

$$b = \sqrt{v_{\text{th}}^2 + 2\sigma^2}. \quad (4.10)$$

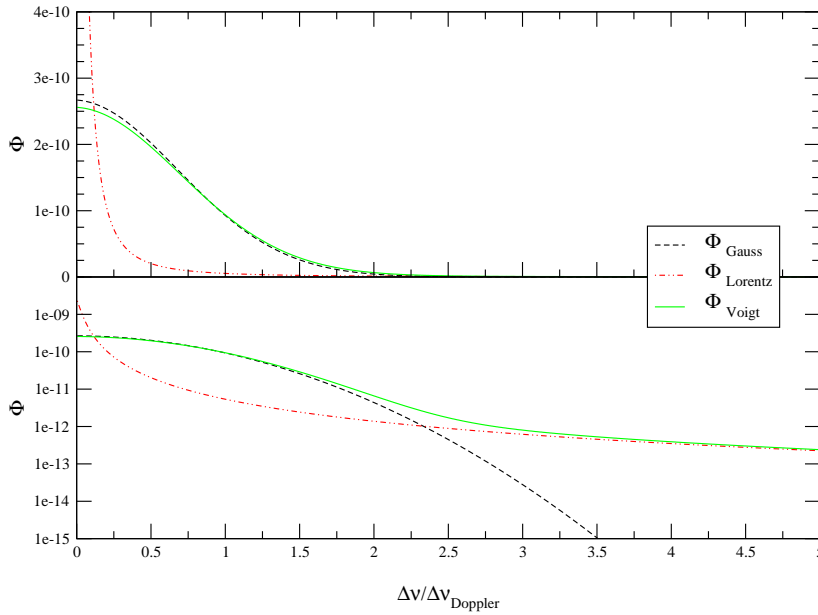


Abbildung 4.3: Vergleich verschiedener Profilkfunktionen bei $T=75$ K in linearer (oben) und logarithmischer (unten) Darstellung. Es gilt die Normierung $\int \Phi dv = 1$.

Lorentz-Profil

Aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation ist jedem Zustand mit endlicher Lebensdauer τ eine endliche Linienbreite (\rightarrow Energieunschärfe) zugeordnet. Die

⁹Die Verteilungsfunktion der Turbulenzgeschwindigkeit entlang des Sehtrahls $p(v) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp[-(v/2\sigma)^2]$.

Form dieser Linienverbreiterung ist durch ein Lorentz-Profil gegeben:

$$\Phi_L(\Delta\nu) = \frac{\gamma}{(2\pi\Delta\nu)^2 + (\gamma/2)^2}, \quad (4.11)$$

mit der *Dämpfungskonstante* $\gamma = \frac{1}{\tau} [\text{s}^{-1}]$ und dem Abstand $\Delta\nu = \nu - \nu_0$ von der Linienmitte.

Voigt-Profil

Das Zusammenwirken von Dopplereffekt und Dämpfung wird durch das Faltungsintegral

$$\Phi(\Delta\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_G(\Delta\nu') \Phi_L(\Delta\nu - \Delta\nu') d\Delta\nu' \quad (4.12)$$

gegeben. Die Faltung der beiden Profilkfunktionen liefert das sogenannte *Voigt-Profil*¹⁰

$$\Phi(\Delta\nu) \equiv V(\alpha, \nu) = \frac{\alpha}{\Delta\nu_D \pi^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-y^2} dy}{\alpha^2 + (\nu - y)^2} \quad (4.13)$$

mit

$$\alpha = \frac{\gamma}{4\pi\Delta\nu_D} \quad \text{und} \quad \nu = \frac{\Delta\nu}{\Delta\nu_D}. \quad (4.14)$$

In Abbildung 4.3 kann man sehr schön die Zusammensetzung des Voigt-Profiles aus dem Dopplerkern ($\alpha \rightarrow 0$) in der Linienmitte und dem Dämpfungsflügel ($\alpha \rightarrow \infty$) für den Linienrand erkennen.

Spektroskopische Parameter

In Tabelle 4.1 sind die spektroskopischen Parameter aller berücksichtigten elektronischen Übergänge von CO zusammengefasst. Die Daten sind der Arbeit von Warin et al. (1996) entnommen worden. Die kursiv abgedruckten Werte sind diejenigen, die von van Dishoeck & Black (1988) verwendet wurden. Der Vollständigkeit halber sind in Tabelle 4.2 die gleichen Größen für die Isotopomere $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ und $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ angegeben. Dabei wird davon ausgegangen, dass τ und $P_{\nu'}$ für alle Isotopomere identisch sind.

¹⁰Das Integral $V(\alpha, \nu)$ hat keine geschlossene Lösung. Man kann V auch mit Hilfe der Fehlerfunktion für komplexe Argumente $\text{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt$ darstellen: $V(\alpha, \nu) = \text{Re}[\exp(z^2) \text{erfc}(z)]$ mit $z = \alpha + i\nu$.

			$^{12}\text{C}^{16}\text{O}$			
Identifikation	v'		ν_0 (cm^{-1})	$f_{\nu\nu'}$	τ (s^{-1})	$P_{\nu'}$
7A	$^1\Pi$	0 [n.a.]	109564.90 [109457.0]	3.38(-3) [3.4(-2)]	1.0(-10) [3.3(-12)]	1.00
7B	$5p\sigma^1\Sigma$	1	109481.58	1.68(-3)	1.0(-10)	1.00
7C	$5p\pi^1\Pi$	1	109478.00	1.69(-3)	1.0(-10)	1.00
7D	$^1\Sigma$	2	109449.40	2.69(-2)	1.0(-10)	1.00
8A	$6p\pi^1\Pi$	0	109203.00	1.98(-3)	1.0(-11)	1.00
8B	$6p\sigma^1\Sigma$	0 [0]	109173.79 [109174.1]	7.92(-3) [9.9(-3)]	1.0(-11) [3.3(-12)]	1.00
9A	$^1\Pi$	2 [0]	109018.90 [109050.0]	2.27(-2) [1.8(-2)]	1.0(-11) [3.3(-12)]	1.00
9B	$6s\sigma^1\Sigma$	0 [0]	108789.00 [108789.1]	2.82(-3) [5.0(-3)]	1.0(-11) [3.3(-12)]	1.00
9C	$5s\sigma^1\Sigma$	1 [n.a.]	108679.00 [108678.7]	2.82(-3) [5.0(-3)]	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
10	$5d\sigma^1\Sigma$	0 [0]	108371.00 [108378.0]	6.32(-3) [6.3(-3)]	3.0(-12) [1.0(-11)]	1.00
11	$0^1\Sigma$	1 [0]	108151.26 [108150.8]	5.15(-3) [5.2(-3)]	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
12	$3s\sigma^1\Pi$	3 [n.a.]	108013.60 [108013.2]	1.63(-2) [1.6(-2)]	3.0(-12) [3.3(-12)]	1.00
13	$^1\Pi$	2 [0]	107682.20 [107681.5]	6.68(-3) [6.7(-3)]	1.0(-11) [2.0(-11)]	1.00
14	$^1\Pi$	2 [0]	107519.82 [107520.0]	6.35(-3) [3.2(-3)]	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
15A	$5p\pi^1\Pi$	0 [n.a.]	107402.80 [107434.5]	6.04(-3) [3.2(-3)]	1.0(-11) [3.3(-12)]	1.00
15B	$5p\pi^1\Pi$	0 [0]	107335.90 [107354.0]	1.21(-2) [2.0(-2)]	1.0(-11) [3.3(-12)]	1.00
15C	$5p\sigma^1\Sigma$	0 [0]	107170.00 [107170.0]	2.21(-2) [2.0(-2)]	1.0(-10) [3.3(-12)]	1.00
16	$^1\Sigma$	2 [0]	106876.00 [106872.0]	3.77(-3) [2.9(-3)]	3.0(-12) [3.3(-12)]	1.00
	$^1\Sigma$	0	106612.40	1.28(-3)	3.0(-12)	1.00
17	$5s\sigma^1\Sigma$	0 [0]	106361.00 [106287.8]	2.13(-2) [2.1(-2)]	1.0(-12) [1.0(-12)]	1.00
18	$3s\sigma^1\Pi$	2 [n.a.]	106250.80 [106250.3]	2.58(-2) [2.6(-2)]	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
19	$4d\sigma^1\Sigma$	0 [0]	105676.40 [105676.4]	7.62(-3) [7.6(-3)]	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
20	$4p\pi^1\Pi$	1 [1]	105442.30 [105453.0]	2.79(-3) [2.8(-3)]	1.0(-10) [1.0(-11)]	1.00
21	$4p\sigma^1\Sigma$	1 [0]	105259.00 [105258.4]	2.20(-2) [2.2(-2)]	1.0(-12) [1.0(-12)]	1.00
22	$3s\sigma^1\Pi$	1 [n.a.]	104576.60 [104603.0]	1.35(-2) [1.4(-2)]	3.0(-12) [1.0(-12)]	1.00
23	$^3\Pi$	3	104135.00	2.57(-4)	3.0(-12)	1.00
24	$4s\sigma^1\Sigma$	1 [1]	103691.70 [103695.7]	2.79(-3) [2.8(-3)]	3.0(-12) [3.3(-12)]	1.00
25	$4p\pi^1\Pi$	0 [0]	103271.90 [103271.7]	7.74(-3) [8.6(-3)]	1.0(-10) [1.0(-10)]	1.00
26	$3d\pi^1\Pi$	1 [0]	103211.80 [103211.5]	1.24(-2) [1.8(-2)]	3.0(-12) [1.0(-11)]	1.00
27	$4p\sigma^1\Sigma$	0 [0]	103054.67 [103054.6]	2.10(-2) [1.5(-2)]	1.0(-10) [1.0(-10)]	1.00
28	$3s\sigma^1\Pi$	0 [0]	102807.00 [102806.5]	1.21(-2) [1.2(-2)]	1.0(-10) [1.0(-10)]	1.00
29	$^3\Pi$	2 [0]	102311.00 [102310.6]	1.82(-3) [1.8(-3)]	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
30	$3d\sigma^1\Sigma$	1 [1]	101771.70 [101773.9]	4.80(-4) [4.8(-4)]	3.0(-12) [1.0(-12)]	1.00
31	$4s\sigma^1\Sigma$	0 [0]	101461.00 [101456.0]	1.54(-2) [1.5(-2)]	1.0(-12) [3.3(-12)]	1.00
32	$3d\pi^1\Pi$	0 [0]	101031.00 [101031.0]	4.61(-4) [4.6(-4)]	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
	$^3\Pi$	1	100651.90	1.14(-5)	1.0(-10)	1.00
	$3p\sigma^1\Sigma$	4	100391.00	2.28(-4)	1.0(-12)	1.00
33	$3d\sigma^1\Sigma$	0 [0]	99741.70 [99739.7]	7.94(-3) [7.9(-3)]	3.0(-12) [1.0(-11)]	1.00
34	$^3\Pi$	0	98919.70	4.42(-5)	1.0(-09)	1.00
35	$3p\sigma^1\Sigma$	3	98244.45	4.36(-5)	1.0(-09)	1.00
36	$3p\pi^1\Pi$	2	97153.86	4.27(-5)	1.0(-10)	1.00
	$3p\sigma^1\Sigma$	2	96176.94	1.05(-5)	1.0(-10)	1.00
37	$3p\pi^1\Pi$	1 [1]	95082.86 [95083.8]	2.47(-3) [2.5(-3)]	1.0(-10) [1.0(-11)]	0.98
38	$3p\sigma^1\Sigma$	1 [1]	94065.57 [94065.6]	2.77(-3) [2.8(-3)]	1.0(-09) [2.0(-09)]	0.60
39	$3p\pi^1\Pi$	0 [0]	92929.98 [92930.0]	3.65(-2) [3.7(-2)]	1.0(-09) [1.0(-09)]	0.89
41	$3s\sigma^1\Sigma$	2	90988.13	3.74(-5)	3.0(-12)	1.00

Tabelle 4.1: Spektroskopische Parameter der $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ Linien

			$^{13}\text{C}^{16}\text{O}$		$^{12}\text{C}^{18}\text{O}$			
Identifikation	v'		ν_0 (cm^{-1})	$f_{\nu\nu'}$	ν_0 (cm^{-1})	$f_{\nu\nu'}$	τ (s^{-1})	$P_{v'}$
7A	$^1\Pi$	0 [n.a.]	109611.70	2.65(-3)	109564.39	3.38(-3)	1.0(-10) [3.3(-12)]	1.00
7B	$5p\sigma^1\Sigma$	1	109433.08	1.68(-3)	109429.02	1.68(-3)	1.0(-10)	1.00
7C	$5p\pi^1\Pi$	1	109431.50	1.87(-2)	109428.40	1.87(-2)	1.0(-10)	1.00
7D	$^1\Sigma$	2	109351.50	2.63(-3)	109346.25	2.69(-2)	1.0(-10)	1.00
8A	$6p\pi^1\Pi$	0	109203.50	4.72(-3)	109202.49	198(-3)	1.0(-11)	1.00
8B	$6p\sigma^1\Sigma$	0 [0]	109173.50	1.89(-2)	109173.28	7.92(-3)	1.0(-11) [3.3(-12)]	1.00
9A	$^1\Pi$	2 [0]	108905.50	3.00(-2)	108901.00	3.00(-2)	1.0(-11) [3.3(-12)]	1.00
9B	$6s\sigma^1\Sigma$	0 [0]	108788.53	2.82(-3)	108788.49	2.82(-3)	1.0(-11) [3.3(-12)]	1.00
9C	$5s\sigma^1\Sigma$	1 [n.a.]	108630.50	2.81(-3)	108626.44	2.81(-3)	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
10	$5d\sigma^1\Sigma$	0 [0]	108371.50	1.09(-2)	108371.00	1.09(-2)	3.0(-12) [1.0(-11)]	1.00
11	$0^1\Sigma$	1 [0]	108093.50	3.30(-3)	108093.00	3.30(-3)	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
12	$3s\sigma^1\Pi$	3 [n.a.]	107845.30	1.87(-2)	107834.30	1.87(-2)	3.0(-12) [3.3(-12)]	1.00
13	$^1\Pi$	2 [0]	107593.34	7.85(-3)	107585.69	7.85(-3)	1.0(-11) [2.0(-11)]	1.00
14	$^1\Pi$	2 [0]	107404.10	6.17(-3)	107394.05	6.17(-3)	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
15AB	$5p\pi^1\Pi$	0 [n.a.]	107288.50	1.68(-2)	107280.91	1.68(-2)	1.0(-11) [3.3(-12)]	1.00
15C	$5p\sigma^1\Sigma$	0 [0]	107174.10	1.68(-2)	107173.00	1.68(-2)	1.0(-10) [3.3(-12)]	1.00
16	$^1\Sigma$	2 [0]	106787.80	3.31(-3)	106780.20	3.31(-3)	3.0(-12) [3.3(-12)]	1.00
	$^1\Sigma$	0	106611.93	1.28(-5)	106611.89	1.28(-5)	3.0(-12)	1.00
17	$5s\sigma^1\Sigma$	0 [0]	106341.30	2.38(-2)	106341.50	2.38(-2)	1.0(-12) [1.0(-12)]	1.00
18	$3s\sigma^1\Pi$	2 [n.a.]	106196.40	2.79(-2)	106192.40	2.79(-2)	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
19	$4d\sigma^1\Sigma$	0 [0]	105636.70	1.51(-2)	105635.30	1.51(-2)	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
20	$4p\pi^1\Pi$	1 [I]	105311.30	2.88(-3)	105311.50	2.88(-3)	1.0(-10) [1.0(-11)]	1.00
21	$4p\sigma^1\Sigma$	1 [0]	105182.60	2.19(-2)	105181.50	2.19(-2)	1.0(-12) [1.0(-12)]	1.00
22	$3s\sigma^1\Pi$	1 [n.a.]	104573.30	1.61(-2)	104572.20	1.61(-2)	3.0(-12) [1.0(-12)]	1.00
23	$^3\Pi$	3	103989.00	2.44(-4)	103981.00	2.44(-4)	3.0(-12)	1.00
24	$4s\sigma^1\Sigma$	1 [I]	103616.30	4.37(-3)	103605.50	4.37(-3)	3.0(-12) [3.3(-12)]	1.00
25	$4p\pi^1\Pi$	0 [0]	103260.90	1.28(-2)	103249.70	1.28(-2)	1.0(-10) [1.0(-10)]	1.00
26	$3d\pi^1\Pi$	1 [0]	103157.00	1.14(-2)	103152.60	1.14(-2)	3.0(-12) [1.0(-11)]	1.00
27	$4p\sigma^1\Sigma$	0 [0]	103054.50	1.83(-2)	103054.20	1.83(-2)	1.0(-10) [1.0(-10)]	1.00
28	$3s\sigma^1\Pi$	0 [0]	102775.10	1.32(-2)	102773.05	1.32(-2)	1.0(-10) [1.0(-10)]	1.00
29	$^3\Pi$	2 [0]	102211.20	1.77(-3)	102203.40	1.77(-3)	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
30	$3d\sigma^1\Sigma$	1 [I]	101656.00	4.67(-4)	101650.00	4.67(-4)	3.0(-12) [1.0(-12)]	1.00
31	$4s\sigma^1\Sigma$	0 [0]	101433.30	2.19(-2)	101434.80	2.19(-2)	1.0(-12) [3.3(-12)]	1.00
32	$3d\pi^1\Pi$	0 [0]	101030.70	4.84(-4)	101030.20	4.84(-4)	1.0(-11) [1.0(-11)]	1.00
	$^3\Pi$	1	100573.20	1.14(-5)	100568.00	1.14(-5)	1.0(-10)	1.00
	$3p\sigma^1\Sigma$	4	100240.00	2.27(-4)	100230.00	2.27(-4)	1.0(-12)	1.00
33	$3d\sigma^1\Sigma$	0 [0]	99713.90	7.30(-3)	99712.30	7.30(-3)	3.0(-12) [1.0(-11)]	1.00
34	$^3\Pi$	0	98835.10	4.42(-5)	98829.50	4.42(-5)	1.0(-09)	1.00
35	$3p\sigma^1\Sigma$	3	98109.11	4.35(-5)	98097.81	4.35(-5)	1.0(-09)	1.00
36	$3p\pi^1\Pi$	2	97066.21	4.26(-5)	97058.66	4.26(-5)	1.0(-10)	1.00
	$3p\sigma^1\Sigma$	2	96092.03	1.04(-5)	96076.47	1.04(-5)	1.0(-10)	1.00
37	$3p\pi^1\Pi$	1 [I]	95035.94	2.47(-3)	95033.59	2.47(-3)	1.0(-10) [1.0(-11)]	0.98
38	$3p\sigma^1\Sigma$	1 [I]	94018.55	2.70(-3)	94014.39	2.70(-3)	1.0(-09) [2.0(-09)]	0.60
39	$3p\pi^1\Pi$	0 [0]	92929.91	3.65(-2)	92929.61	3.65(-2)	1.0(-09) [1.0(-09)]	0.89
41	$3s\sigma^1\Sigma$	2	90906.45	3.74(-5)	990899.15	3.74(-5)	3.0(-12)	1.00

Tabelle 4.2: Spektroskopische Parameter der $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ und $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ Linien

4.1.3 Der Photodissoziationsprozess

Ein kontinuierliches Molekülspektrum (Beispielspektrum A in Abbildung 4.4) resultiert im Allgemeinen aus einem Übergang zwischen zwei Zuständen von denen mindestens einer einen kontinuierlichen Bereich von Energiewerten annehmen kann. Das entspricht bei einem atomaren System immer einer aperiodischen Bewegung, in der sich Teile des Systems einander nähern oder voneinander entfernen. Im Fall von Molekülen kommt dafür sowohl Ionisation wie auch Dissoziation in Frage.

Betrachtet man das UV-Absorptionsspektrum von CO, so findet sich zwischen 885 und 1150 Å keinerlei Kontinuum (Letzelter et al. (1987)). Stattdessen sieht man eine große Anzahl diskreter Banden, die bei geringer spektraler Auflösung als Kontinuum fehlinterpretiert werden können. Es zeigte sich, dass die Photodissoziation¹¹ von CO im interstellaren Medium ausschließlich durch Absorption in diskrete Banden von *prädissoziierten* angeregten Elektronenzuständen hinein abläuft. Von einem prädissoziierten Zustand spricht man dann, wenn ein Energieniveau eines angeregten Zustandes mit dem dissoziativen Kontinuum eines niedrigeren Zustandes überlappt und dadurch ein *strahlungsloser* Übergang von dem diskreten Zustand in einen kontinuierlichen Zustand gleicher Energie möglich ist.¹²

¹¹Dissoziation durch Absorption eines Photons.

¹²Bsp. Auger-Prozeß in Abb. 4.4: Der Überlapp von kontinuierlichen und diskreten Zuständen führt zu einer Überlagerung der Eigenfunktionen. In den resultierenden Hybridzuständen befindet sich das System zeitweise in dem einen und zeitweise in dem anderen Ausgangszustand. Ist einer der beiden Ausgangszustände Teil eines Kontinuums, wird das System dissoziiert; es findet eine strahlungslose Zerlegung nach einer bestimmten Lebensdauer τ statt.

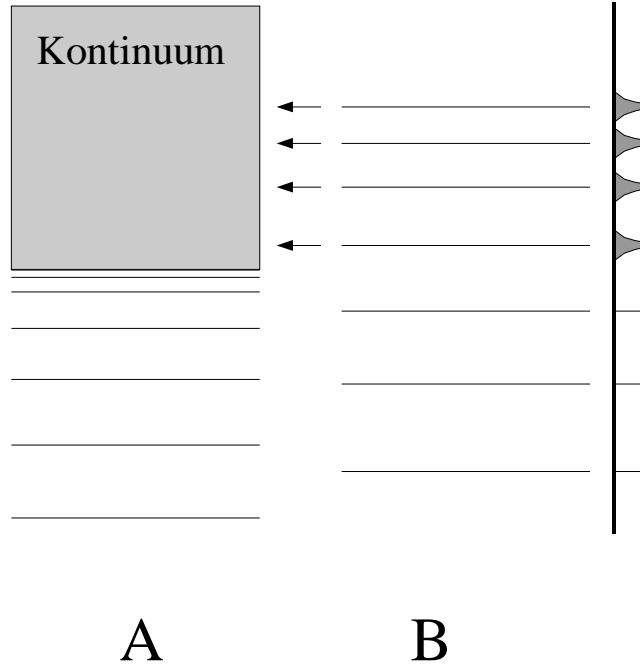


Abbildung 4.4: Termschema für einen Auger-Prozess. Die vier oberen Zustände der Serie B überlappen mit dem Kontinuum der Serie A, und der zugehörige Energiewert wird unscharf (rechte Seite).

Die Photodissoziationsrate

Der Photodissoziationsratenkoeffizient¹³ eines Übergangs von $(0J'') \rightarrow (v'J')$, auch Photodissoziationswahrscheinlichkeit genannt, ist gegeben durch den Ausdruck:

$$\zeta_{J''J'}(r) = p_{v'J'} \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{v''J'',0,J'} \int_{Linie} \Phi_{v''J'',0,J'}(v) J(r,v) dv . \quad (4.15)$$

wobei $p_{v'J'}$ die Wahrscheinlichkeit dafür angibt, dass der obere Zustand nach der Anregung dissoziiert. Die Strahlungsflussdichte $4\pi J(r,v)$ (in Einheiten von $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}\text{Hz}^{-1}$)

¹³Wir folgen der allgemeinen Konvention bei der Unterscheidung von Rate und Ratenkoeffizient. Der Ratenkoeffizient bezeichnet die Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses pro Sekunde und pro Teilchen [s^{-1}]. Multipliziert man diesen mit der Teilchendichte erhält man die Zahl der Ereignisse pro Sekunde und Einheitsvolumen, die sogenannte Rate [$\text{s}^{-1}\text{cm}^{-3}$]. Unglücklicherweise wird im internationalen Sprachgebrauch diese Unterscheidung oft vernachlässigt. Das allgemein verwendete *photodissociation rate* meint fast immer den Photodissoziationsratenkoeffizienten. Im weiteren Verlauf meint ζ stets den Photodissoziationsratenkoeffizienten.

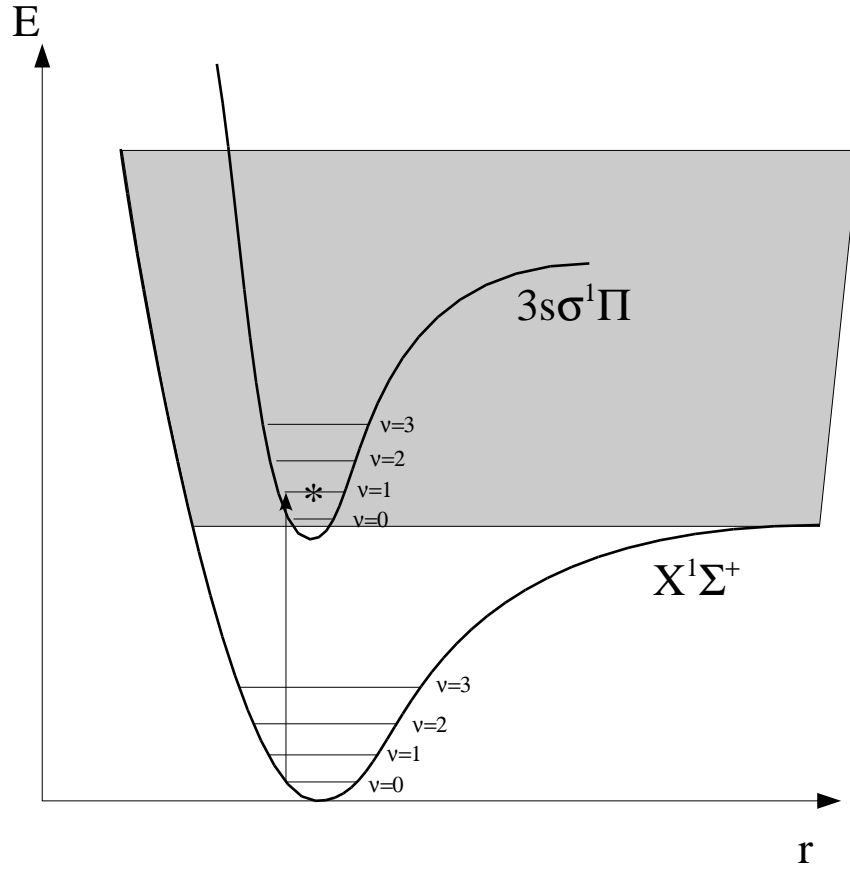


Abbildung 4.5: Prädissoziation durch den elektronischen Übergang $3p\sigma^1\Pi - X^1\Sigma(1-0)$. Der durch * gekennzeichnete Zustand zerfällt mit der Wahrscheinlichkeit $P_{v'}$ nach einer mittleren Lebenszeit von $1/\tau$ [s] strahlungslos.

ist dabei eine Funktion des Ortes innerhalb der Wolke r und der Frequenz ν . Der gesamte Photodissoziationsratenkoeffizient von CO errechnet sich aus Gleichung 4.15 durch Summieren über alle Zielniveaus J' eines Ausgangszustandes J'' und anschließendes Summieren über alle Ausgangsniveaus unter Berücksichtigung des Besetzungszahlverhältnisses $\eta_{J''}$:

$$\zeta_{CO} = \sum_{J''} \eta_{J''} \sum_{J'} \zeta_{J''J'}(r) . \quad (4.16)$$

4.1.4 Das CO-Molekül

Bei der detaillierten Untersuchung des Beitrags einzelner CO-Linien zur ortsabhängigen Photodissoziationsrate spielen eine Reihe von Abschirmungsprozessen eine wichtige Rolle:

Selbstabschirmung

Am Rand der Wolke tragen die Absorptionsbanden mit starken und engen Linien dominant zur Photodissoziationsrate bei. In größeren Tiefen tragen jedoch die Lini-
enflügel stärker zur Photodissoziationsrate bei als die Linienmitte, da die teilweise sehr engen Linien der UV-Absorptionsbanden in der Linienmitte schneller optisch dick werden als in den Flügeln. D.h. Banden, die am Rand der Wolke vernachlässigbare Beiträge zur Photodissoziationsrate leisten, können im Wolkeninneren dominieren (siehe Abbildung 4.6).

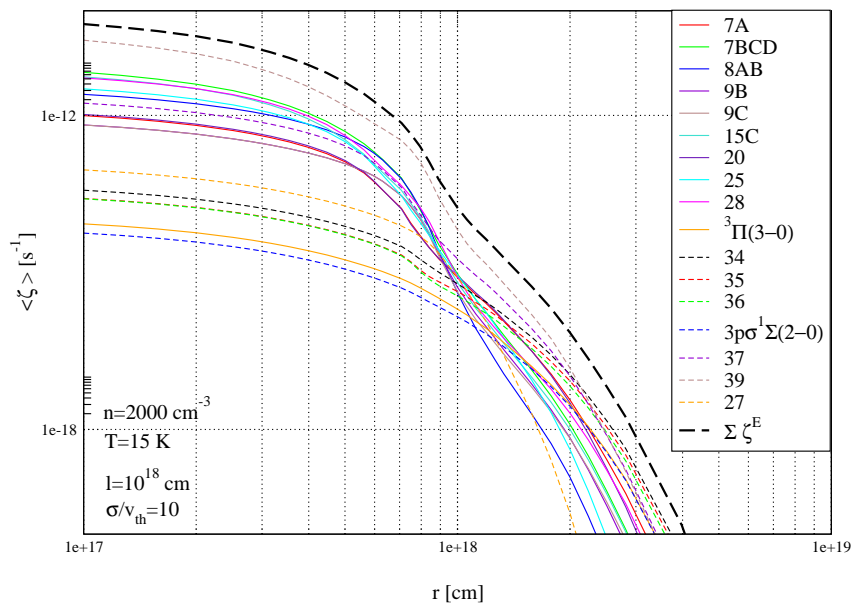


Abbildung 4.6: $\langle \zeta \rangle$ einzelner enger Banden

Gegenseitige Abschirmung

Linien der CO-Isotopomere können mit den korrespondierenden Linien des sehr viel häufigeren ^{12}CO -Moleküls überlappen. Wie man in den Tabellen 4.1 und 4.2 und aus Abbildung 4.7 sieht, liegen einige Banden der verschiedenen Isotopomere bei fast identischen Wellenlängen. Durch die geringere Häufigkeit¹⁴ sind die Linien von ^{13}CO und C^{18}O viel schwächer als die des Hauptisotopomers. Warin et al. (1996) konnten zeigen, dass die Abschirmung durch Isotopomere keine wesentliche Rolle für die Photodissoziation des Hauptisotopomers spielt¹⁵. Da die Zahl der zu berücksichtigenden Absorptionslinien allerdings wesentlichen Einfluss auf die Rechenzeit hat, ist in den vorliegenden Ergebnissen die Absorption von ^{13}CO und C^{18}O nicht berücksichtigt.

Wasserstoffabschirmung

Die Abbildung 4.7 zeigt deutlich die starken Absorptionslinien des sehr viel häufigeren Wasserstoffs. Die Abschirmung durch übereinstimmende Linien von H und H_2 ist so groß, dass einige CO-Banden zum Teil oder auch vollständig abgeschirmt werden und nicht zur Photodissoziation beitragen können. Im Hinblick auf die enorme Rechenzeit verzichten wir auf eine detaillierte Berücksichtigung des Strahlungstransports in den Wasserstofflinien. Stattdessen betrachten wir alle CO-Linien, die mit denen des Wasserstoffs überlappen als vollständig abgeschirmt und setzen ihren Beitrag zur gesamten Photodissoziationsrate gleich Null. Die relevanten Banden sind: **7D, 9A, 13, 14, 15A, 15B, 19, 24, 31, 33, 38**.

Staubabschwächung

Staub spielt in unserem Modell zwei wichtige Rollen. Zum einen sorgt es für eine kontinuierliche Absorption (Gleichung 4.2) und damit für eine generelle Abschwächung der UV-Intensität mit zunehmender Eindringtiefe. Nach Tielens & Hollenbach (1985b) gilt:

$$\kappa_{\text{Staub}} = n_{\text{Staub}} \sigma_{\text{Staub}} = 5 \cdot 10^{-22} n_0 \delta_{uv} \delta_d, \quad (4.17)$$

¹⁴Isotopenhäufigkeiten nach Warin et al. (1996) $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 90$ und $^{16}\text{O}/^{18}\text{O} = 500$.

¹⁵Interessiert man sich jedoch für die chemische Fraktionierung der Isotopomere, müssen deren Absorptionslinien natürlich berücksichtigt werden.

mit dem Verhältnis der geometrischen Absorptionsquerschnitte des Staubs im UV relativ zum visuellen δ_{uv} , dem Verhältnis der Staubhäufigkeiten in der betrachteten Region relativ zum diffusen interstellaren Medium δ_d und der Anzahldichte von Wasserstoffkernen n_0 . Zum anderen geschieht die Bildung von H_2 vorwiegend auf der Oberfläche von Staubkörnern und beeinflusst damit die H_2 -Dichte und somit die gesamte chemische Evolution der Wolke.

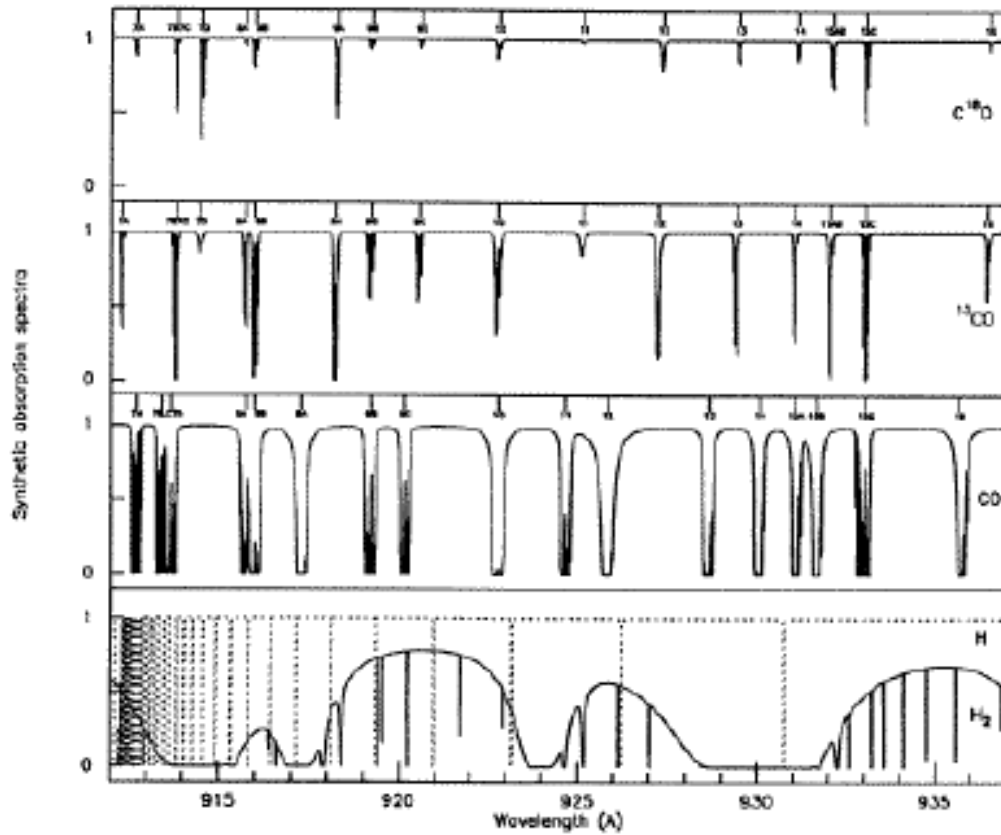


Abbildung 4.7: Absorptionsspektrum von C^{18}O , ^{13}CO , CO , H_2 und H im Zentrum einer Wolke bei $\tau = 2$ nach einer Rechnung von Warin et al. (1996) Man beachte wie die breiten Absorptionslinien von H_2 mit vielen Linien der anderen Spezies überlappen.

4.2 Das chemische Netz

Interessiert man sich für die Häufigkeit einer Spezies in einer stationären Molekülwolke, so entspricht das in der numerischen Modellierung einem Gleichgewichtszustand zwischen allen Erzeugungs- und Vernichtungsprozessen dieser Spezies¹⁶.

4.2.1 Das Ratengleichungssystem

Für jede Spezies, die man in dem Wolkenmodell berücksichtigen möchte, lässt sich auf diese Weise eine sogenannte *Ratengleichung* aufstellen, in der die relevanten Erzeugungsprozesse den jeweiligen Vernichtungsprozessen gegenübergestellt werden. Das beinhaltet sowohl physikalische wie auch chemische Prozesse, die die Häufigkeit einer Molekül- oder Atomsorte beeinflussen. Prinzipiell gilt also für jede Spezies i eine Gleichung der Form:

$$n_i \left\{ \tilde{\zeta}_i + \sum_q n_q k_{qi} \right\} = \sum_r \sum_s k_{rs} n_r n_s + \sum_t n_t \tilde{\zeta}_{ti}, \quad (4.18)$$

mit den Dichten n_q, n_r, n_s von Spezies, die an allen chemischen Reaktionen beteiligt sind, welche zur Bildung q oder Vernichtung r, s von i führen. Rechts stehen die Erzeugungs-, links die Vernichtungsprozesse. k_{qi} und k_{rs} sind die chemischen Ratenkoeffizienten der Reaktionen $X_i + X_q \rightarrow \dots$ und $X_r + X_s \rightarrow X_i + \dots$. In $\tilde{\zeta}$ sind Photodissoziation ζ^{diss} und Photoionisation $\tilde{\zeta}^{ion}$ zusammengefasst. Dabei beinhaltet $\tilde{\zeta}_i$ alle Prozesse, die zur Ionisation und Dissoziation von i führen, während $\tilde{\zeta}_{ti}$ alle relevanten Prozesse erfasst, die durch Ionisation oder Dissoziation von t zur Bildung von i führen.

Zusätzlich zu den $N_{Spezies}$ Ratengleichungen¹⁷ muss zur Sicherstellung der *Teilchenzahlerhaltung* je Element M eine Erhaltungsgleichung

$$n_M = \sum_i n_i c_i^M \quad (4.19)$$

gelten. Dabei ist c_i^M die Anzahl der Atome des Elements M in Spezies i .¹⁸ Eine

¹⁶Stationarität ist eine Modellannahme.

¹⁷ $N_{Spezies}$ ist die Zahl der berücksichtigten Spezies

¹⁸Für ein fiktives chemisches Netz könnte die Erhaltungsgleichung für das Element Kohlenstoff lauten: $n_C = n(C^+) + n(CO) + 2n(C_2) + n(CN) + 5n(HC_5N) + \dots$. Vergleiche auch: Duley & Williams (1984).

analoge Gleichung läßt sich zur *Ladungserhaltung* aufstellen:

$$n_e = \sum_i n_i c_i^e, \quad (4.20)$$

mit der Ladung c_i^e (positiv oder negativ) von i in Einheiten der Elementarladung.¹⁹ Damit ergeben sich insgesamt $N = N_{\text{Spezies}} + N_{\text{Elemente}}$ Gleichungen für N_{Spezies} unbekannte Größen.

4.2.2 Die chemische Zusammensetzung

Das chemische Netzwerk unseres Wolkenmodells setzt sich aus folgenden Elementen zusammen:

H	He
C	O

Tabelle 4.3: Liste aller Elemente, die in dem Wolkenmodell berücksichtigt wurden.

Aus der UMIST-Datenbank für Astrochemie (Millar et al. (1997)²⁰) wurden alle Reaktionen selektiert, an denen Elemente aus Tabelle 4.3 beteiligt sind. Dadurch reduzierte sich die Zahl der Reaktionsgleichungen von 3864 auf nur noch 434. Diese verbleibenden Reaktionen setzen sich aus den folgenden Reaktanden und Reaktionsprodukten zusammen:

Eine vollständige Aufstellung aller Reaktionsgleichungen des chemischen Netzwerkes sind in Anhang C zu finden.

Wasserstoff

Wasserstoff ist das mit Abstand häufigste Element im interstellaren Medium. Am Rand einer Molekülwolke wird der größte Teil des Wasserstoffs durch die Photodissoziationsreaktion:



¹⁹Man beachte, daß auch für die Elektronen als separate Spezies eine Ratengleichung des Typs 4.18 aufgestellt werden muß.

²⁰Inzwischen ist eine neuere Version der Datenbank erschienen: Le Teuff et al. (2000).

Berücksichtigte Spezies							
CO	C	O	CH	H	H ₂	OH	H ₂ O
O ₂	CH ₂	CH ₃	CO ⁺	C ⁺	O ⁺	CH ⁺	H ⁺
H ₂ ⁺	OH ⁺	H ₂ O ⁺	O ₂ ⁺	CH ₂ ⁺	CH ₃ ⁺	H ₃ ⁺	H ₃ O ⁺
HCO ⁺	He	He ⁺	CH ₄	CH ₄ ⁺	e ⁻	CH ₅ ⁺	H ₂ CO
H ₂ CO ⁺	HCO	C ⁻	H ⁻	O ⁻	OH ⁻		

Tabelle 4.4: Übersicht aller Spezies, die an Reaktionen des chemischen Netzwerkes beteiligt sind.

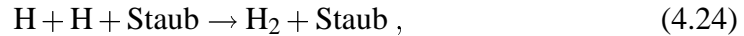
zerstört. Nach Lee et al. (1996) ist die Photodissoziationswahrscheinlichkeit von H₂ am Rand einer einseitig beschienenen Wolke

$$\zeta_{\text{H}_2}(0) = 2.54 \cdot 10^{-11} \text{ s}^{-1} . \quad (4.22)$$

Um den Häufigkeitsverlauf von ζ_{H_2} innerhalb der Wolke nicht durch detaillierte Strahlungstransportrechnungen bestimmen zu müssen, benutzen wir eine Parametrisierung des H₂-Photodissoziationsratenkoeffizienten durch sogenannte *Abschirmungsfaktoren*²¹ $\Theta(\text{H}_2)$, wie sie auch schon von van Dishoeck & Black (1988) eingeführt wurde, um die verschiedenen Einflüsse auf ζ , wie Selbstabschirmung, Linienüberlapp, kontinuierliche Absorption und sonstige Effekte, an der Säulendichte zu skalieren:

$$\zeta_{\text{H}_2}[N(\text{H}_2)] = G_0 \cdot \zeta_{\text{H}_2}(0) \cdot \Theta[N(\text{H}_2)] . \quad (4.23)$$

Die Faktoren $\Theta[N(\text{H}_2)]$ stammen von Lee et al. (1996) und sind in Tabelle (A.1) im Anhang aufgeführt. In Abbildung 4.8 sind die Abschirmungsfaktoren für H₂ und CO zu sehen. Wasserstoffmoleküle bilden sich durch die Anlagerung von Wasserstoffatomen auf der Oberfläche von Staubkörnern



und die H₂-Dichte steigt mit zunehmender Wolkentiefe an, während die Reaktionsrate der Reaktion 4.21 durch die zunehmende Selbstabschirmung und die steigende Staubopazität reduziert wird. Die Reaktion 4.24 läuft mit einer Rate von $R_{\text{nnH}}[s^{-1}\text{cm}^{-3}]$ ab.²² R ist der *Ratenkoeffizient für die Bildung von H₂ auf Staub*

²¹Englisch: *shielding factor*

²²Mit der gesamten Wasserstoffteilchendichte $n = n_{\text{H}} + 2n_{\text{H}_2}$ und der Dichte atomaren Wasserstoffs n_{H} .

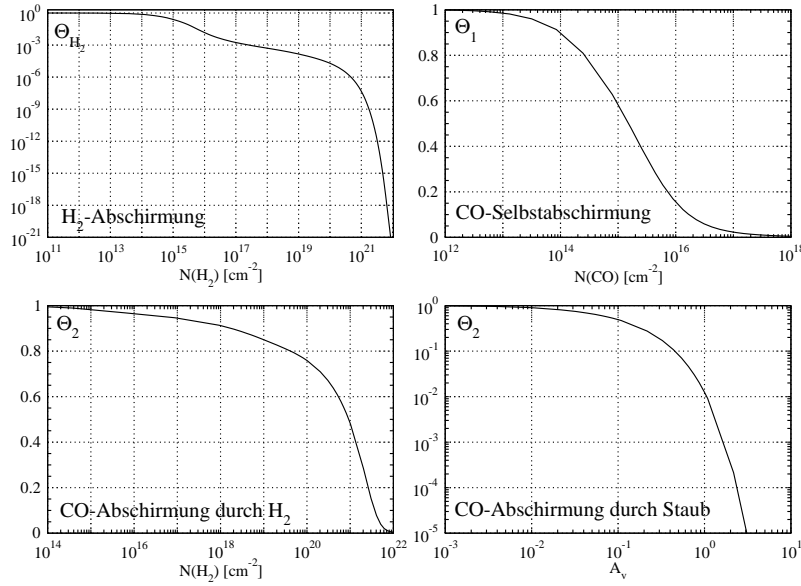


Abbildung 4.8: Abschirmungsfaktoren zur Parametrisierung der Photodissoziation von H_2 und CO von Lee et al. (1996).

(siehe auch Sternberg & Dalgarno (1995)):

$$R = 3 \cdot 10^{-18} f_a S T^{1/2} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (4.25)$$

In diesem Ausdruck ist T die Gastemperatur, S ist der sogenannte *Gas-Staub- 'sticking'-Koeffizient* und f_a ist der Anteil an Wasserstoffatomen, die nicht von der Stauboberfläche verdampfen, bevor die Molekülbildung einsetzt. Nach Burke & Hollenbach (1983) gilt:

$$S = [1 + 0.04(T + T_{Staub})^{1/2} + 2 \cdot 10^{-3}T + 8 \cdot 10^{-6}T^2]^{-1} \quad (4.26)$$

sowie

$$f_a = \frac{1}{1 + 10^4 \exp(-600/T_{Staub})}. \quad (4.27)$$

Um die Zahl der zusätzlichen Parameter möglichst gering zu halten, haben wir uns bei all unseren Rechnungen auf eine Staubtemperatur von $T_{Staub} = 30$ Kelvin beschränkt.

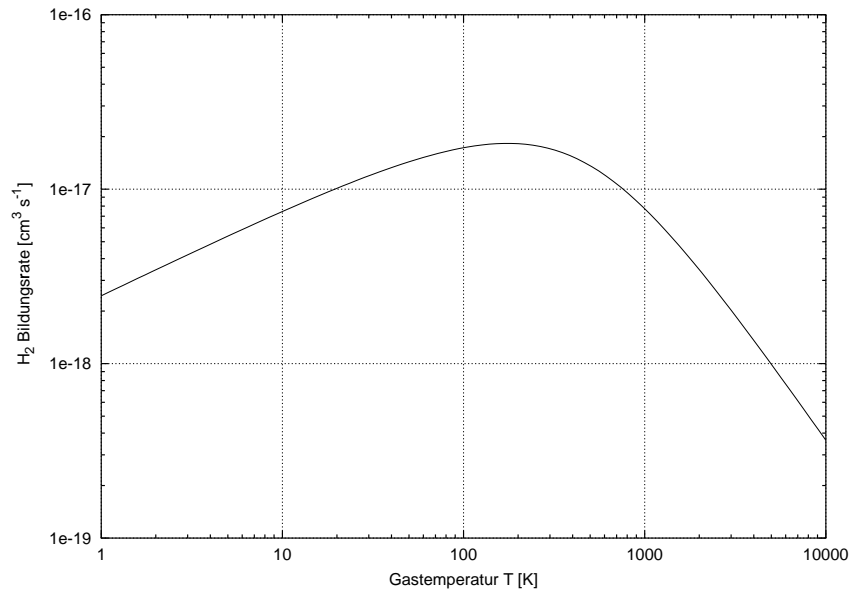
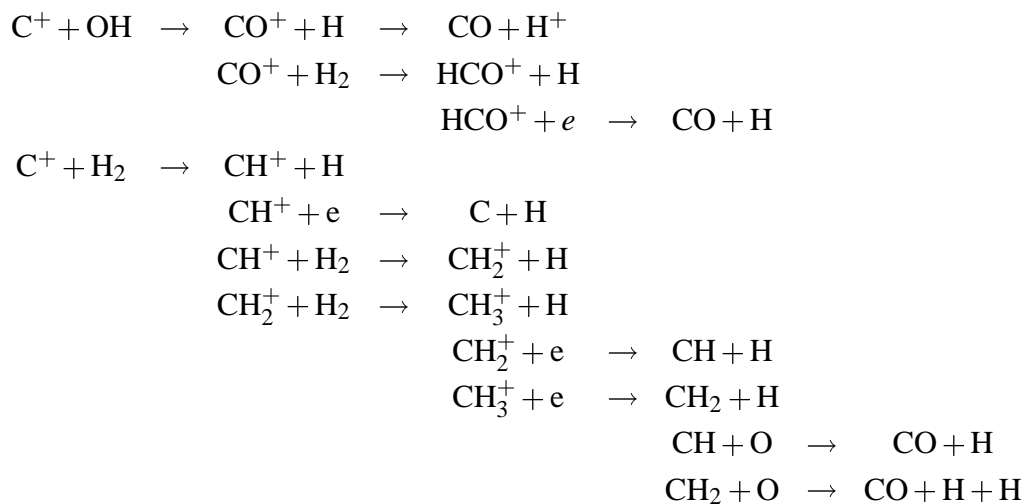


Abbildung 4.9: H_2 -Bildungsratenkoeffizient auf Stauboberflächen bei einer Staubtemperatur von $T_{\text{Staub}} = 30 \text{ K}$

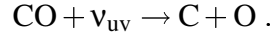
CO-Chemie

Nach van Dishoeck & Black (1988) und Tielens & Hollenbach (1985b) existieren für die Bildung von CO verschiedene wichtige Reaktionskanäle.



Da die Häufigkeiten der verschiedenen Reaktanden mit der Wolkentiefe variieren, dominieren in unterschiedlichen Tiefe jeweils andere Bildungsreaktionen. Als do-

minante Zerstörungsreaktion wirkt, vor allem am Rand der Wolke, die Photodissoziation von CO durch UV-Photonen.



Im Gegensatz zu unseren Untersuchungen hat sich in der Literatur die Parametrisierung der CO-Photodissoziation über Abschirmungsfaktoren durchgesetzt. Im Unterschied zu den Faktoren des Wasserstoffs unterteilt man die Abschirmung von CO in drei separate Faktoren. Man unterscheidet die Selbstabschirmung Θ_1 , die Abschirmung durch H_2 -Linien sowie die Staubabschirmung (siehe Abbildung 4.8):

$$\zeta_{\text{CO}}[N(\text{CO}), N(\text{H}_2, A_v)] = \zeta_{\text{CO}}(0) \cdot \Theta_1[N(\text{CO})] \cdot \Theta_2[N(\text{H}_2)] \cdot \Theta_3[N(A_v)] \quad (4.28)$$

Hier ist $\zeta_{\text{CO}}(0)$ die Photodissoziationswahrscheinlichkeit von CO am Rand der Wolke, und N bezeichnet jeweils die Säulendichte.

4.3 Allgemeine Modelleigenschaften

Die Rechnungen sollen dazu dienen, den äußeren Rand einer mit UV-Strahlung beschienenen Wolke besser zu verstehen. Da wir von einem Wolkenradius ausgehen, der groß gegenüber dem betrachteten Randgebiet ist, beschränken wir uns in der Modellierung auf eine planparallele Schicht, die von einer Seite mit ultravioletter Strahlung beschienen wird. Die Gesamtwasserstoffdichte $n_{\text{H}} = n(\text{H}) + 2 \cdot n(\text{H}_2)$ wird innerhalb der gesamten Wolke als konstant angesetzt. Auch die Temperatur soll innerhalb der Wolke nicht variieren. Wir machen weiter die Annahme, dass alle Parameter, die das Geschwindigkeitsfeld beschreiben, also die Korrelationslänge und die Breite der Ein-Punkt-Wahrscheinlichkeitsdichte, konstant sind. Das auftretende Strahlungsfeld haben wir nach Mezger et al. (1982) durch ein Potenzgesetz der Form

$$4\pi J = 38.57 \cdot \lambda_{\mu\text{m}}^{3.4172} \frac{\text{erg}}{\text{cm}^2 \cdot \text{s} \cdot \mu\text{m}} \quad (4.29)$$

angenähert, für $912\text{\AA} \leq \lambda \leq 1101\text{\AA}$ ²³. Zusätzlich führen wir noch den Faktor G_0 ein, um den die Strahlung, die auf die Wolke auftrifft, stärker ist als das mittlere

²³Die Dissoziationsenergie von CO im Grundzustand beträgt 11.09 eV. Entsprechend kann nur das UV-Feld unterhalb 1118 Å zur Photodissoziation beitragen. Unterhalb 912 Å schwächt die Absorption des interstellaren atomaren Wasserstoffs das interstellare Strahlungsfeld so stark ab, dass es für die CO-Photodissoziation vernachlässigbar ist.

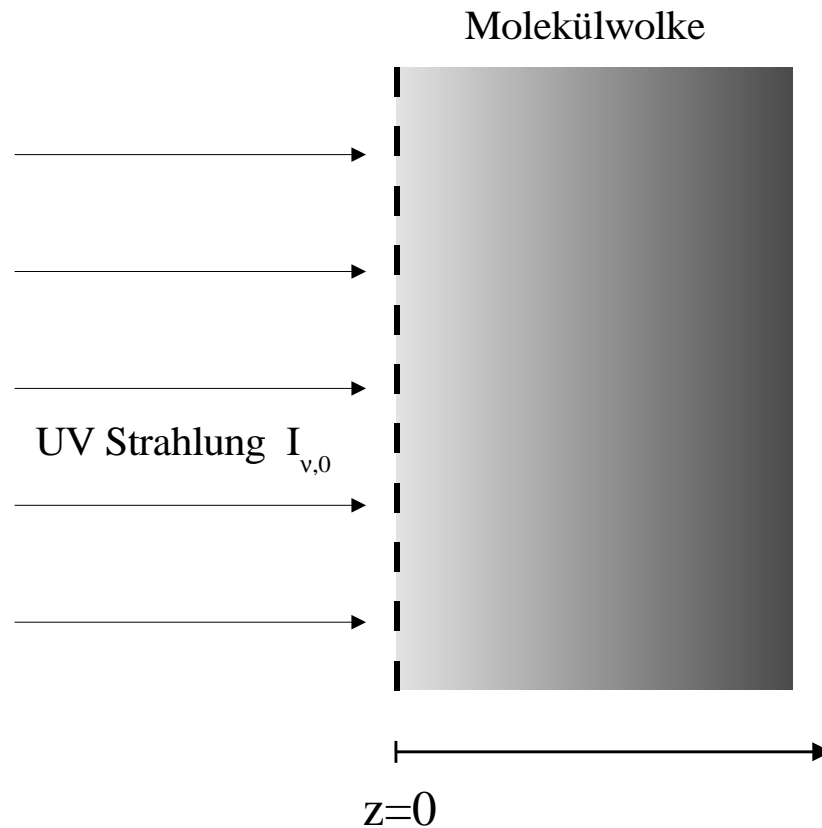


Abbildung 4.10: Schematischer Aufbau des Molekülwolkenmodells

Strahlungsfeld in der Sonnenumgebung. Tabelle 4.5 gibt einen Überblick über die wichtigsten Modellparameter.

Bei der numerischen Lösung der Strahlungstransportgleichung wird der mögliche Wertebereich im Geschwindigkeitsraum diskretisiert. Absorptionslinien, die enger als einige σ beieinander liegen, dürfen nicht isoliert berücksichtigt werden, sondern es muss der überlagerte Absorptionskoeffizient betrachtet werden. Das numerische Geschwindigkeitsgitter muss derart konstruiert werden, dass das gesamte Absorptionsprofil abgedeckt wird. Aus diesem Grund mussten die Absorptionsbanden in zwei Gruppen aufgeteilt werden. Alle Banden, deren Linien so stark miteinander überlappen, dass keine Aufteilung in isolierte Profile möglich war, werden nicht mit Hilfe der verallgemeinerten Strahlungstransportgleichung ausgewertet. Stattdessen wird mittels der gewöhnlichen Strahlungstransportgleichung die Absorption in den Banden berechnet. Da die Berücksichtigung der Turbulenz zu einem *Verschmie-*

Parameter	Modellwerte
n_0	$500 \dots 10000 \text{cm}^{-3}$
T	15K, 50K, 75K
T_{Staub}	30K
G_0	1
σ/v_{th} . . .	$1 \dots 10$
l	$1 \times 10^{15} \dots 1 \times 10^{20} \text{cm}$
\mathcal{A}_{He}	0.1
\mathcal{A}_{C}	3.6×10^{-4}
\mathcal{A}_{O}	8.5×10^{-4}
δ_d	1.0
δ_{uv}	1.8

Tabelle 4.5: Modellparameter

ren des Linienprofils im Frequenzraum in der Größenordnung von σ führt, ist der Einfluss von Turbulenz auf extrem breite Absorptionsprofile sehr gering, da die Turbulenzeffekte den quantitativen Verlauf des Profils nur unwesentlich verändern. Bei engen Absorptionsprofilen ist der Einfluss der Turbulenz hingegen wesentlich. Daher wurden alle Absorptionsbanden, die nicht durch H₂-Linien abgeschirmt sind, in die folgenden zwei Gruppen aufgeteilt²⁴:

- Banden mit engen, separierbaren Linien gehen in die verallgemeinerte Strahlungstransportgleichung ein: 7A, 7BC, 8AB, 9B, 9C, 15C, 20, 25, 27, 28,³ $\Pi(3-0)$, 34, 35, 36, $3\text{p}\sigma^1\Sigma(2-0)$, 37, 39.
- Banden mit großem Überlapp werden nicht mit Hilfe des turbulenten Strahlungstransports, sondern stattdessen über die klassische Strahlungstransportgleichung berücksichtigt: 10, 12, 16,¹ Σ , 17, 18, 21, 22, 23, 26, 29, 30, 32, $3\text{p}\sigma^1\Sigma(4-0)$, 41.²⁵

²⁴Die Profile aller Banden sind im Anhang abgebildet.

²⁵Bei stark prädissoziierten Übergängen entsprechen die Prädissoziationswahrscheinlichkeiten von $10^{11} - 10^{12} \text{s}^{-1}$ einer natürlichen Linienbreite von 2-20 km s⁻¹ in Dopplergeschwindigkeitseinheiten, und sind damit größer als thermische und turbulente Verbreiterungen in beobachteten interstellaren Wolken

Es sei noch erwähnt, dass bei der Berechnung der Photodissoziationswahrscheinlichkeit in Gleichung 4.15 die über den Raumwinkel gemittelte Intensität eingeht. Aus Zeitgründen nähern wir die über den Raumwinkel gemittelte Intensität durch die Intensität entlang eines einzelnen repräsentativen Sehstrahls mit dem Einfallswinkel von 55° .

Kapitel 5

Ergebnisse

Das zentrale Ziel dieser Arbeit ist es, den Einfluss stochastischer Geschwindigkeitsfluktuationen auf die Photodissoziationsrate und damit auf den Häufigkeitsverlauf von CO am Rand einer interstellaren Molekülwolke zu untersuchen. Seit bekannt ist, dass die Photodissoziation von CO ausschließlich durch Linienabsorption in prädissoziierte, elektronisch angeregte Banden geschieht, gab es eine Reihe von Untersuchungen, die sich mit dem CO-Dichteprofil in interstellaren Molekülwolken beschäftigten (van Dishoeck & Black (1986), van Dishoeck & Black (1988), van Dishoeck & Black (1990), Abgrall et al. (1992), Warin et al. (1996)). Bis heute sind weit über 40 UV-Absorptionsbanden von CO bekannt, von denen jede Bande zu der gesamten Photodissoziationsrate beiträgt. Für jede betrachtete Frequenz wird an jedem Ortspunkt entlang des berechneten Sehstrahls in einem selbstkonsistenten Verfahren die erwartete Intensität und die daraus resultierende Anzahldichte von CO so lange iterativ berechnet, bis weitere Iterationen keine weiteren Änderungen von $I_{\nu}(u)$ und $n_{\text{CO}}(u)$ liefern.¹

Bei den Modellrechnungen haben wir zwei unterschiedliche Ansätze gewählt. Um das qualitative Verhalten unseres Modells bei der Variation der Modellparameter zu untersuchen, haben wir uns in Abschnitt 5.1 zuerst auf einen kleinen Ausschnitt des UV-Spektrums beschränkt und nur eine einzige Absorptionslinie berücksichtigt.² Der hieraus resultierende Photodissoziationsratenkoeffizient wurde anschließend auf einen in der Literatur üblichen Randwert von $\zeta_{\text{CO}} = 2 \cdot 10^{-10} \text{s}^{-1}$ normiert,

¹Die geforderte Genauigkeit für den Abbruch der Iteration liegt in der Größenordnung von 10^{-4} .

²Es wurde die Linie $3p\pi^1\Pi(0-0)R(0)$ gewählt.

um die Dichteberechnungen nicht zu beeinflussen. Besonderes Augenmerk liegt dabei auf dem Einfluss der Turbulenz, im Einzelnen auf der Korrelationslänge ℓ_v und der Geschwindigkeitsstreuung σ_v . In allen folgenden Rechnungen beschränken wir uns auf ein $\sigma_v \geq 1$. Das hat vor allem numerische Gründe: Das benutzte Geschwindigkeitsgitter reicht nicht aus, um Linienprofile mit kleinem σ_v voll zu erfassen³. Aus Beobachtungen kann man weiterhin auf Turbulenzgeschwindigkeiten in der Größenordnung von einigen km s^{-1} schließen. Bei einer Temperatur von 15 Kelvin liegt die thermische Geschwindigkeit eines CO-Moleküls bei $v_{\text{th}} \approx 0.1 \text{ km s}^{-1}$. Ein σ_v unterhalb der thermischen Geschwindigkeit ist daher im Hinblick auf Vergleiche mit Beobachtungen weniger interessant.

Anschließend diskutieren wir Ergebnisse, die auf einer vollen Berücksichtigung des UV-Absorptionsspektrums beruhen (Abschnitt 5.2). Dabei konzentrieren wir uns auf den Randbereich der Wolke und die quantitativen Abweichungen von vergleichbaren Rechnungen anderer Autoren.

5.1 Modellrechnungen für eine Einzellinie

5.1.1 Abhängigkeit von σ_v und ℓ_v

Betrachtet man in Abbildung 5.1 die Abhängigkeit der CO-Photodissoziationswahrscheinlichkeit von den Parametern der Turbulenz, so erkennt man sofort einige auffällige Zusammenhänge. Wie erwartet, spielt die turbulente Geschwindigkeit, repräsentiert durch die Breite der stochastischen Geschwindigkeitsverteilung σ_v , eine wesentliche Rolle für die Eindringtiefe der UV-Strahlung in die Wolke. Bei *gegebener Korrelationslänge* ist die Absorption der UV-Strahlung umso schwächer, je größer das angenommene σ_v ist. Das ist nicht weiter verwunderlich: Je größer σ_v ist, umso stärker kann die lokale Geschwindigkeit eines Turbulenzelements der Wolke entlang des Sehstrahls variieren. Dadurch reduziert sich die Wahrscheinlichkeit, dass bei einer gegebenen Eindringtiefe die Wolke optisch dick wird, da es immer Elemente entlang des Sehstrahls geben kann, die stark dopplerverschoben absorbieren und nicht zu der optischen Dicke in der Linienmitte beitragen. In den Linienprofilen drückt

³Zur Berechnung des Geschwindigkeitsgitters verwenden wir die η -Transformation (genauer unter Hegmann (1999))

sich dieser Sachverhalt in einem breiteren, aber nicht so stark gesättigten Linienprofil aus. Bei hohen Turbulenzgeschwindigkeiten fällt die Intensität also nicht so schnell ab wie bei geringen Geschwindigkeiten. Gleiches gilt für die Ratenkoeffizienten, da ζ_{CO} eine Funktion der Intensität ist.

Betrachtet man die Abhängigkeit der Photodissoziationsrate von der Korrelationslänge bei festem σ_v , ist das Ergebnis weniger intuitiv, obwohl die Argumentation ähnlich verläuft. Kleine Korrelationslängen entsprechen grob gesprochen kurzen Strecken⁴ entlang des Sehstrahls mit annähernd gleicher Turbulenzgeschwindigkeit. Innerhalb eines solchen Turbulenzelements erfolgt die Absorption von Photonen über das mit der Turbulenzgeschwindigkeit dopplerverschobene Absorptionsprofil. Je kleiner ℓ_v ist, umso geringer ist die optische Dicke jedes einzelnen Elementes. Durch die geringe Korrelationslänge ergeben sich entlang des Sehstrahls also viele verschiedene Turbulenzgeschwindigkeiten, allerdings mit lokal jeweils geringen Säulendichten. Die bedingte Intensität und damit auch die bedingte CO-Dichte werden somit unabhängig von der lokalen Turbulenzgeschwindigkeit. Das Linienprofil jeder Einzelrealisation entspricht in sehr guter Näherung dem über das Ensemble gemittelten Intensitätsprofil. Der Erwartungswert der Intensität ergibt sich durch Integration über das Produkt aus bedingter Intensität mal der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Turbulenzgeschwindigkeit (siehe Gleichung 3.10). Einzelne Realisationen des UV-Feldes werden entsprechend der Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens zum lokalen Erwartungswert der Intensität überlagert. Vergrößert man die Korrelationslänge, so verringert sich für jede mögliche Realisation die Zahl der Turbulenzelemente entlang des Sehstrahls, und damit steigt die lokale optische Dicke. Für eine große Korrelationslänge existieren daher große Bereiche, in denen sich die Turbulenzgeschwindigkeit kaum ändert. Innerhalb dieser Bereiche wird die Linie schnell optisch dick, und es treten früher als für $\ell_v \ll 1$ hohe CO-Dichten auf. Nach der Mittelung über aller möglichen Realisationen steigt daher die CO-Dichte früher an, als im mikroturbulenten Fall (Abbildung 5.1). Andererseits bedeutet $\ell_v \gg 1$ auch, dass für einzelne Realisationen entlang des Sehstrahls nur Geschwindigkeiten auftreten, die einen kleinen Bereich im Geschwindigkeits-Raum abdecken. Gleichzeitig sinkt die Photodissoziationsrate jedoch mit geringerer Steigung als im mikroturbulenten Fall, da immer die Wahrscheinlichkeit besteht, dass entlang des Sehstrahls lokal große Turbulenzgeschwindigkeiten auftreten und die UV-Photonen insgesamt wei-

⁴In der Größenordnung von ℓ_v .

ter in die Wolke eindringen können.

Zum genaueren Verständnis betrachten wir die Photodissoziationsrate von CO etwas detaillierter. Für eine Korrelationslänge von $\ell_v = 10^{20}$ cm sind die relevanten Kenngrößen in Abbildung 5.2 dargestellt. Im obersten Diagramm ist der Photodissoziationsratenkoeffizient über die Eindringtiefe aufgezeichnet. Die gestrichelte Linie stellt zum Vergleich den mikroturbulenten Fall dar. Man erkennt bei einer Tiefe von $r_x = 4.5 \times 10^{17}$ cm deutlich einen Knick in der Kurve für $\ell_v = 10^{20}$ cm. In den beiden mittleren Diagrammen sind links die Säulendichte sowie der Erwartungswert der optische Dicke in der Linienmitte dargestellt und rechts die Wachstumskurve. Die Werte von r_x und N_x sind jeweils gekennzeichnet. Man erkennt, dass der Abknickpunkt mit dem Wendepunkt in der Wachstumskurve korrespondiert. Dieser Wendepunkt kennzeichnet den *Übergang von der Absorption im Dopplerkern zur Absorption in den Dämpfungsflügeln*. Um diesen Sachverhalt genauer zu verdeutlichen, betrachte man die beiden unteren Darstellungen. Links sieht man das Linienprofil an der Stelle r_x , gekennzeichnet durch die gestrichelte Linie. Die Profile darüber entsprechen Ortspunkten innerhalb der Wolke mit $r < r_x$, die Profile darunter Ortspunkten mit $r > r_x$. Im rechten Diagramm ist der Erwartungswert der Größe $I_v \cdot \Phi_v$ dargestellt. Nach Gleichung 4.15 ist der Ratenkoeffizient im Prinzip das Produkt der Intensität mit der Profilfunktion. Beide Größen hängen in umgekehrter Weise von der Frequenz ab. In der Linienmitte ist die Intensität durch Absorption am niedrigsten und die Profilfunktion natürlich am stärksten. Bewegt man sich aus der Linienmitte in Richtung Linienflügel, so steigt die Intensität an und Φ sinkt. Das Produkt von I_v und Φ in Abhängigkeit von der Frequenz gibt darüber Auskunft, an welchen Punkten im Frequenzraum die Photodissoziation dominiert. Man erkennt deutlich, wie der Erwartungswert für alle Orte $r > r_x$ in der Linienmitte gegen Null geht, das bedeutet, Photodissoziation findet nur noch in den Linienflügeln statt. Betrachtet man die Fläche unter der Kurve, erkennt man deutlich, dass der Betrag des Gradienten von $\int I\Phi dv$ für $r < r_x$ kleiner wird: Das spiegelt sich natürlich in dem langsameren Abfall der Photodissoziationswahrscheinlichkeit in der obersten Grafik wieder.

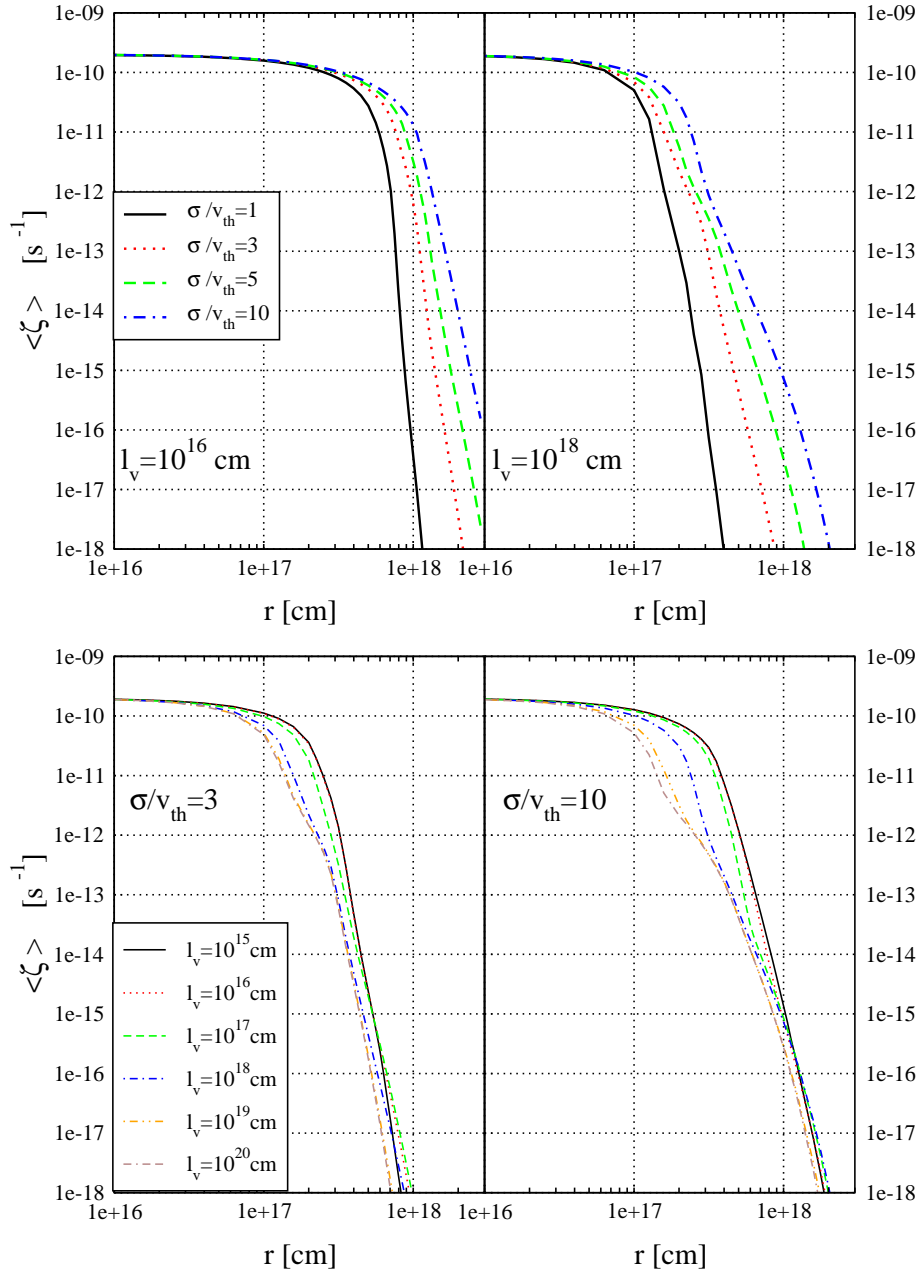
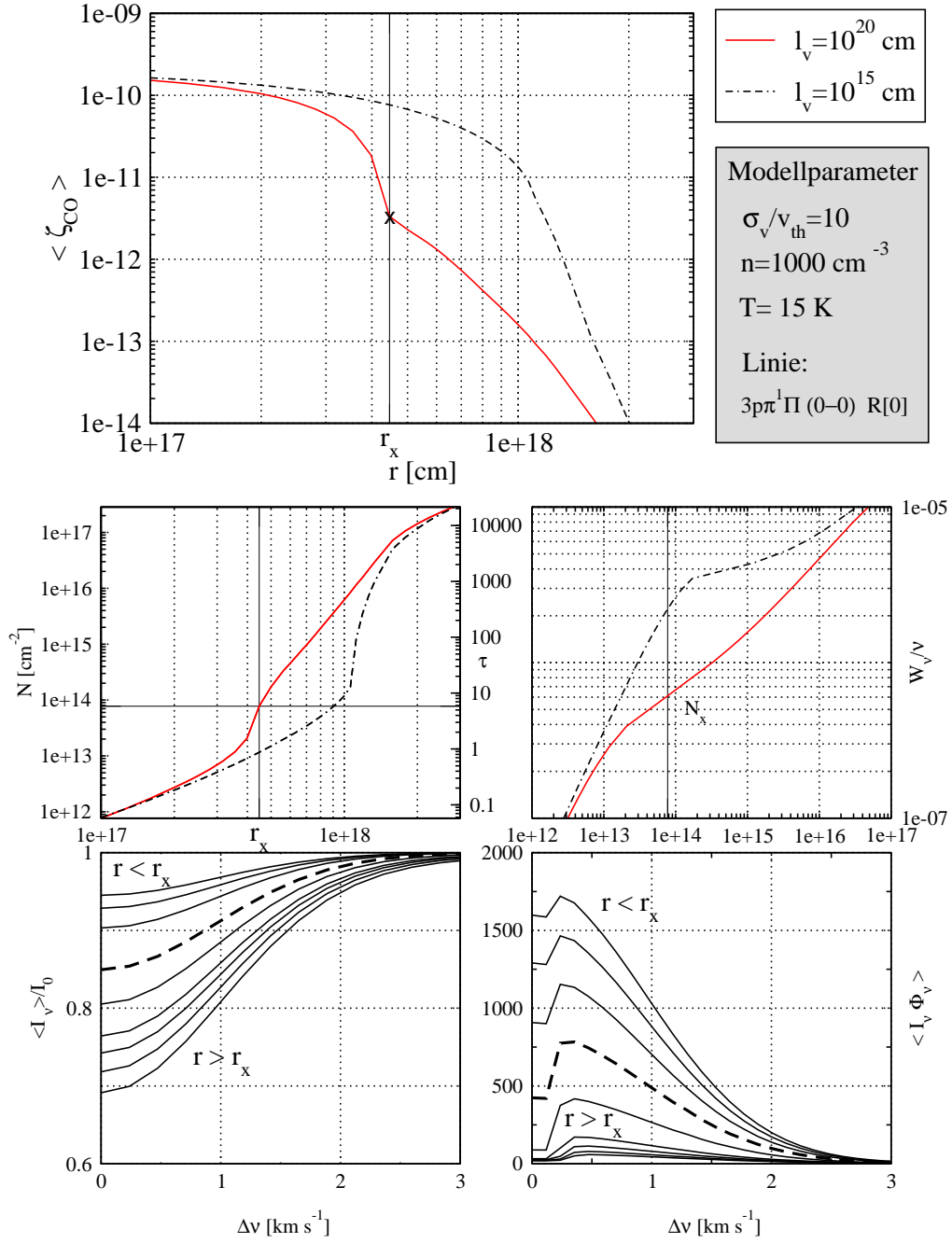


Abbildung 5.1: $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für verschiedene σ_v und ℓ_v . Die Dichte ist $n = 1000 \text{ cm}^{-3}$ und die Temperatur $T = 15 \text{ K}$.

Abbildung 5.2: Abknickpunkt von $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $\sigma/v_{\text{th}} = 10$

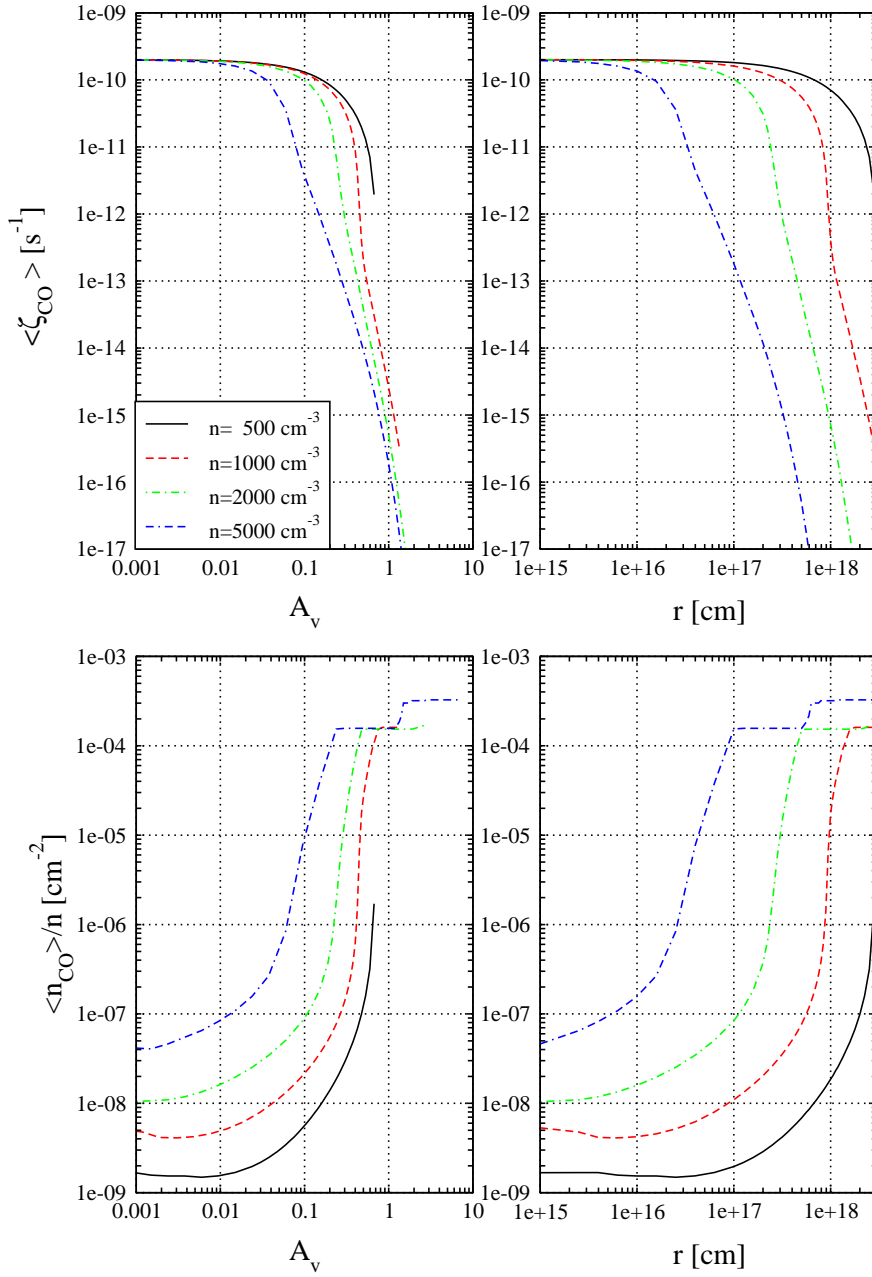


Abbildung 5.3: $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ und $\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 500 \dots 5000 \text{ cm}^{-3}$. Die Korrelationslänge ist 10^{18} cm , $\sigma_v / v_{\text{th}} = 10$ und die Temperatur ist $T = 15 \text{ K}$.

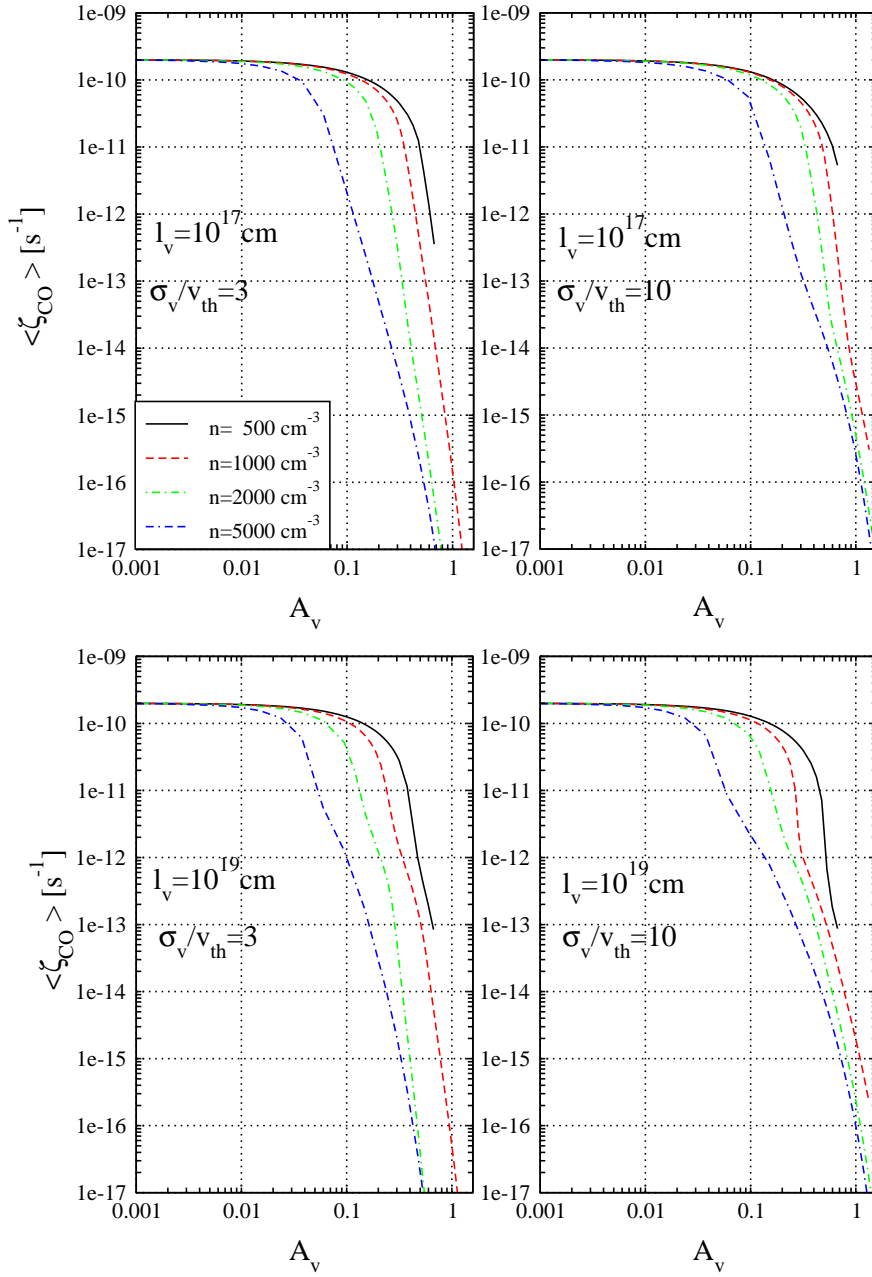


Abbildung 5.4: Dichteabhängigkeit der $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für verschiedene Korrelationslängen und Turbulenzgeschwindigkeiten bei einer Temperatur von $T = 15 \text{ K}$.

5.1.2 Dichteabhängigkeit

Für eine vorgegebene relative CO-Häufigkeit skaliert das Strahlungsfeld mit der Wasserstoffdichte. Nur die Säulendichte $n_{\text{H}} \cdot r$ ist wesentlich. Daher bietet es sich an, anstatt des Ortes r die Extinktion A_{v} auf der Abszisse aufzutragen. Damit verschwinden lineare Abhängigkeiten von der Säulendichte, und nichtlineare Effekte sind leichter zu identifizieren. In Abbildung 5.3 sind Erwartungswerte der Photodissoziationswahrscheinlichkeit und der Häufigkeit für verschiedene Gesamtdichten sowohl über A_{v} als auch über r aufgetragen⁵. Die unterschiedlichen Verläufe in den beiden linken Diagrammen lassen sich auf den Einfluss des chemischen Netzes zurückführen und des variierenden Verhältnisses von Korrelationslänge zu freier Weglänge der Photonen. Alternativ bietet es sich an, die Ergebnisse über $\tau_{\text{v}, \ell_{\text{v}}}$ aufzutragen. In vergleichbarer Literatur ist jedoch die Darstellung über A_{v} üblich, daher haben wir uns ebenfalls darauf beschränkt. In Abbildung 5.4 sind bei verschiedenen Korrelationslängen und Turbulenzgeschwindigkeiten die Photodissoziationswahrscheinlichkeiten für unterschiedliche Gesamtdichten n dargestellt. Durch eine höhere Gesamtdichte ist die Staubabsorption ebenso stärker wie die chemischen Reaktionsraten. Beides sorgt am Rand der Wolke für eine höhere CO-Anzahldichte bei höherer Gesamtdichte. Gleichzeitig wird $\tau_{\text{v}, \ell_{\text{v}}}$ größer, was bei konstantem ℓ_{v} einer Verminderung der freien Weglänge entspricht. Durch die höhere CO-Dichte sind die CO-Absorptionslinien bei niedrigeren A_{v} optisch dick, und damit ist auch die Ratenkoeffizienten kleiner.

5.1.3 Temperaturabhängigkeit

Der Einfluss der Temperatur bei konstantem σ/v_{th} ist in Abbildung 5.5 gezeigt. Durch eine höhere thermische Geschwindigkeit verbreitert sich die Profilkfunktion und wird gleichzeitig flacher. Die Wachstumskurve zeigt eine höhere Äquivalentbreite bei höheren Temperaturen, und gleichzeitig ist die Photodissoziationsrate an jedem Ort bei hohen Temperaturen größer. Dieser profilwirksame Effekt einer Temperaturerhöhung ist in etwa mit einer größeren Turbulenzgeschwindigkeit vergleichbar. Gleichzeitig wirkt sich eine höhere Temperatur in den größeren chemi-

⁵In großen Tiefen ergibt sich ein stufiger Verlauf bei den Erwartungswerten der Dichte. Das ist eine numerische Ungenauigkeit.

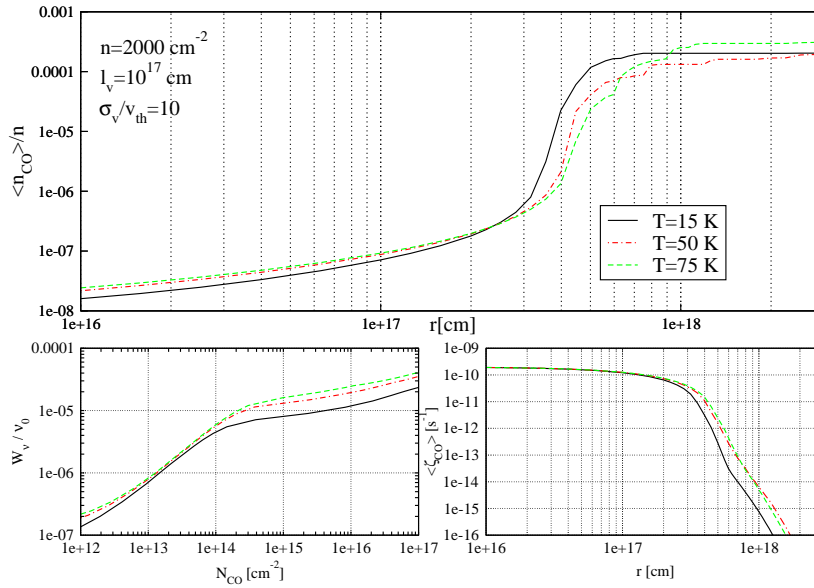


Abbildung 5.5: Temperaturabhängigkeit der CO-Dichte für $\ell_v = 10^{17}\text{ cm}$, $\sigma_v / v_{\text{th}} = 10$, und einer Dichte $n = 2000\text{ cm}^{-3}$.

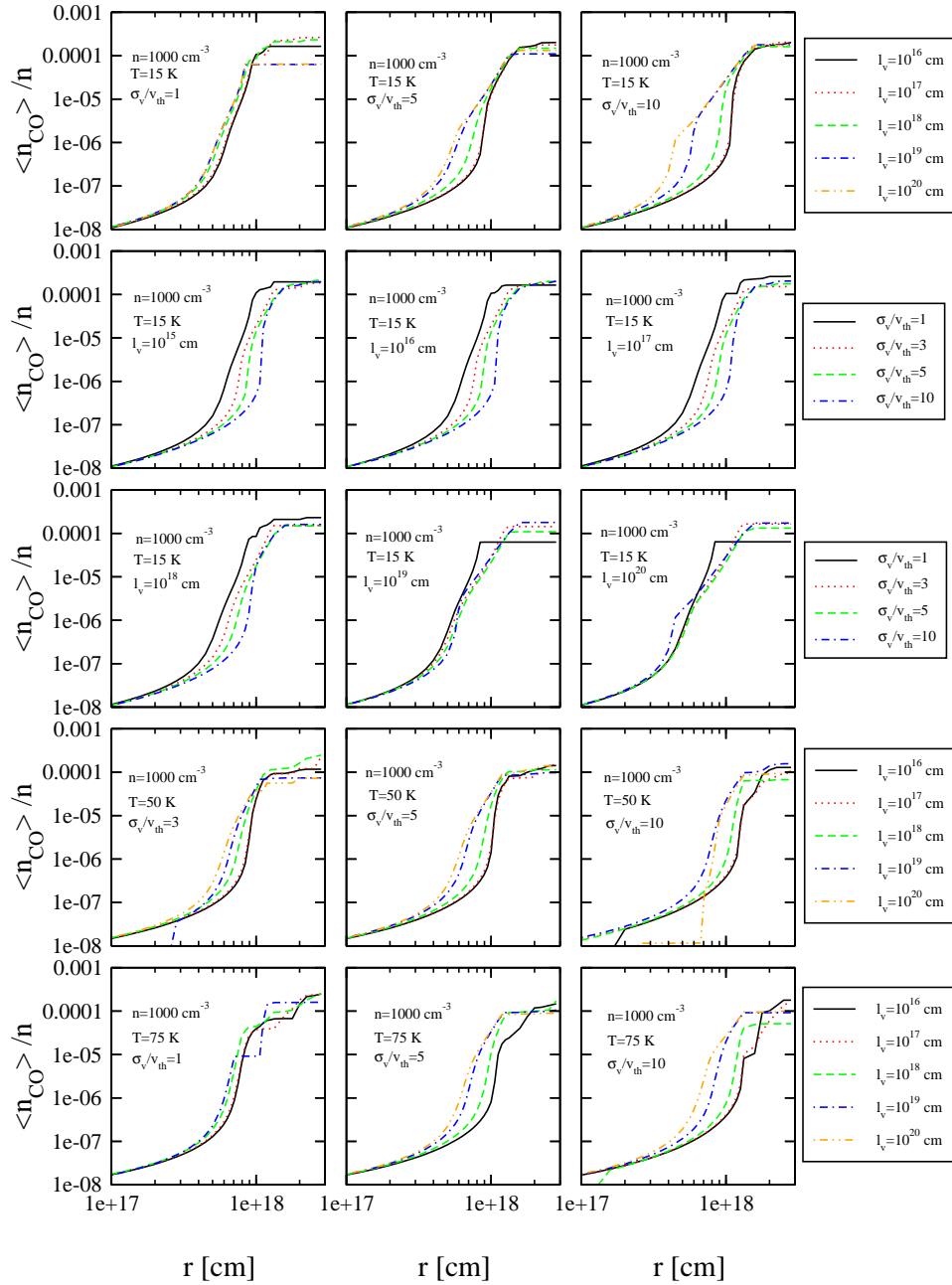
schen Reaktionsraten aus. Das sieht man deutlich am äußeren Rand der Wolke, wo die Intensität und damit auch die Photodissoziationsrate noch nicht abgeschwächt sind. Die CO-Dichte verhält sich proportional zur Temperatur, und ein Gleichgewicht zwischen Photodissoziation und Bildung von CO stellt sich durch die etwas stärkeren chemischen Reaktionen bei etwas größeren CO-Dichten ein.

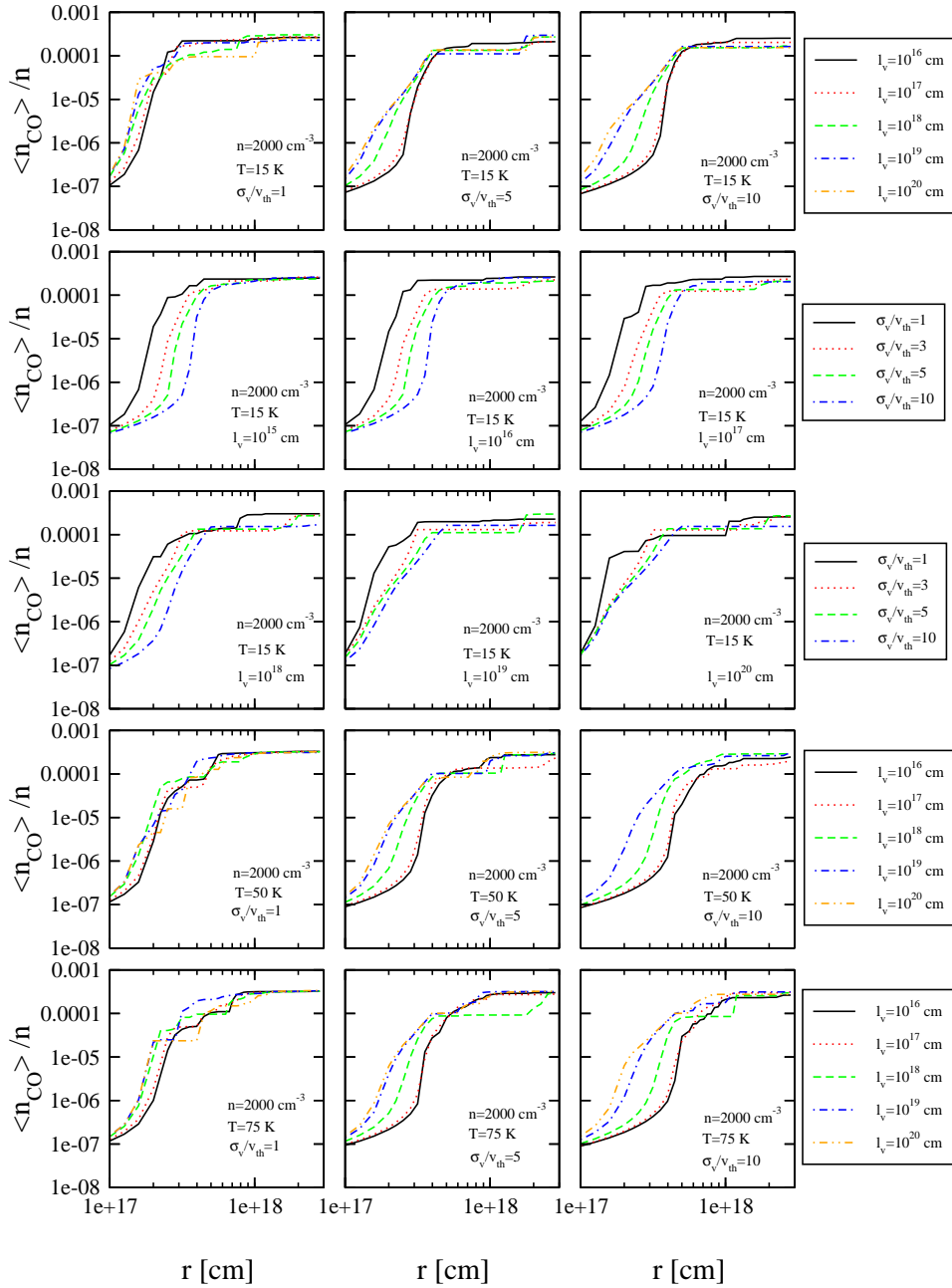
In den Abbildungen 5.6 bis 5.14 sind die wichtigsten Ergebnisse der Rechnungen mit nur einer berücksichtigten Linie noch einmal zusammenfassend dargestellt. Für jedes Modell ist der Erwartungswert der relativen CO-Dichte, des Photodissoziationsratenkoeffizienten von CO und die Wachstumskurve der betrachteten Linie abgebildet. Die Abbildungen zeigen Ergebnisse für Gesamtdichten von $n = 1000, 2000$ und 5000 cm^{-3} für verschiedene Korrelationslängen und Turbulenzgeschwindigkeiten. Die Ergebnisse für Rechnungen mit höheren Temperaturen sind jeweils auf den gleichen Seiten abgebildet.

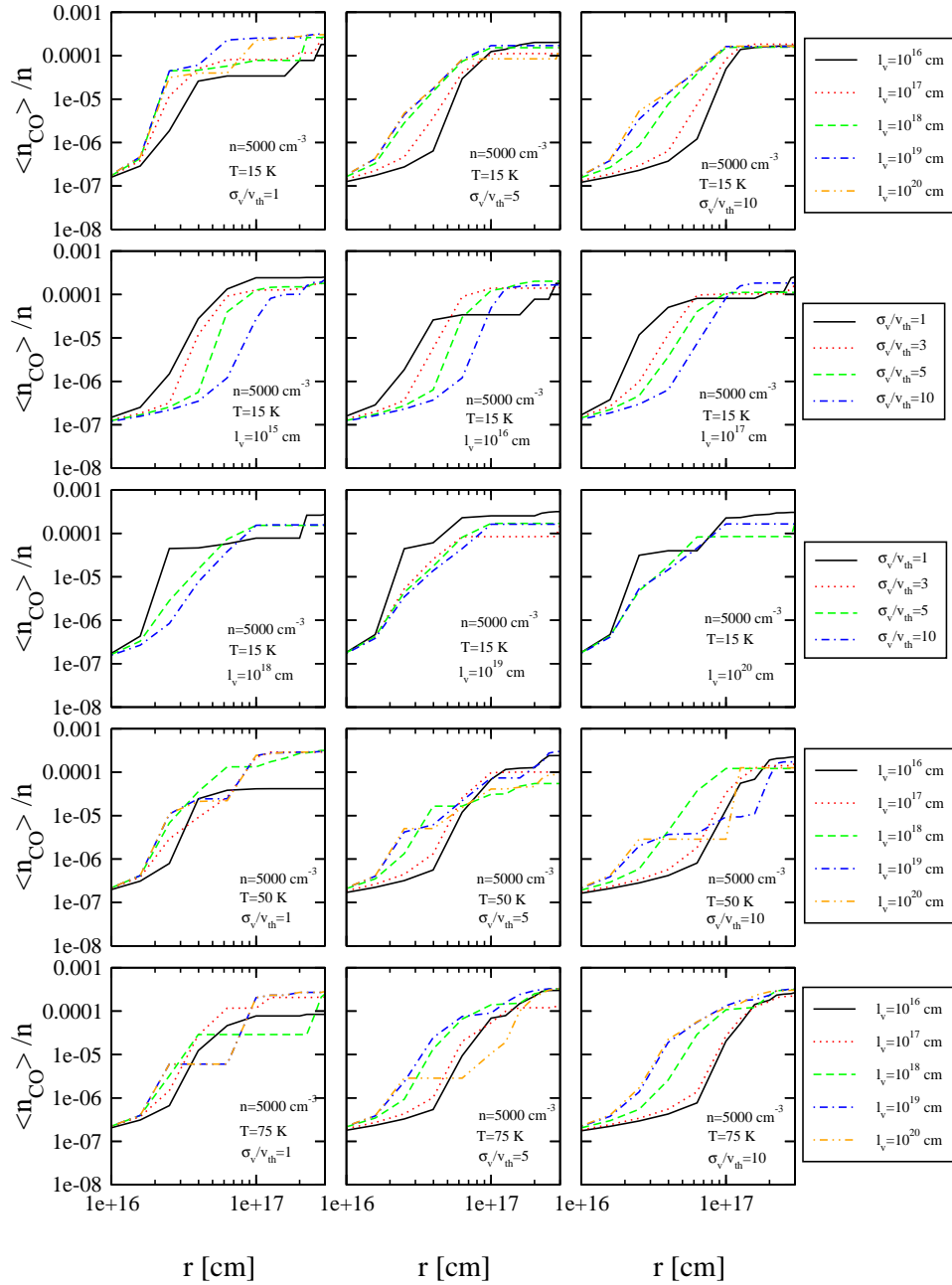
Für alle Ergebnisse dieses Abschnitts bleibt zu bemerken, dass die numerischen

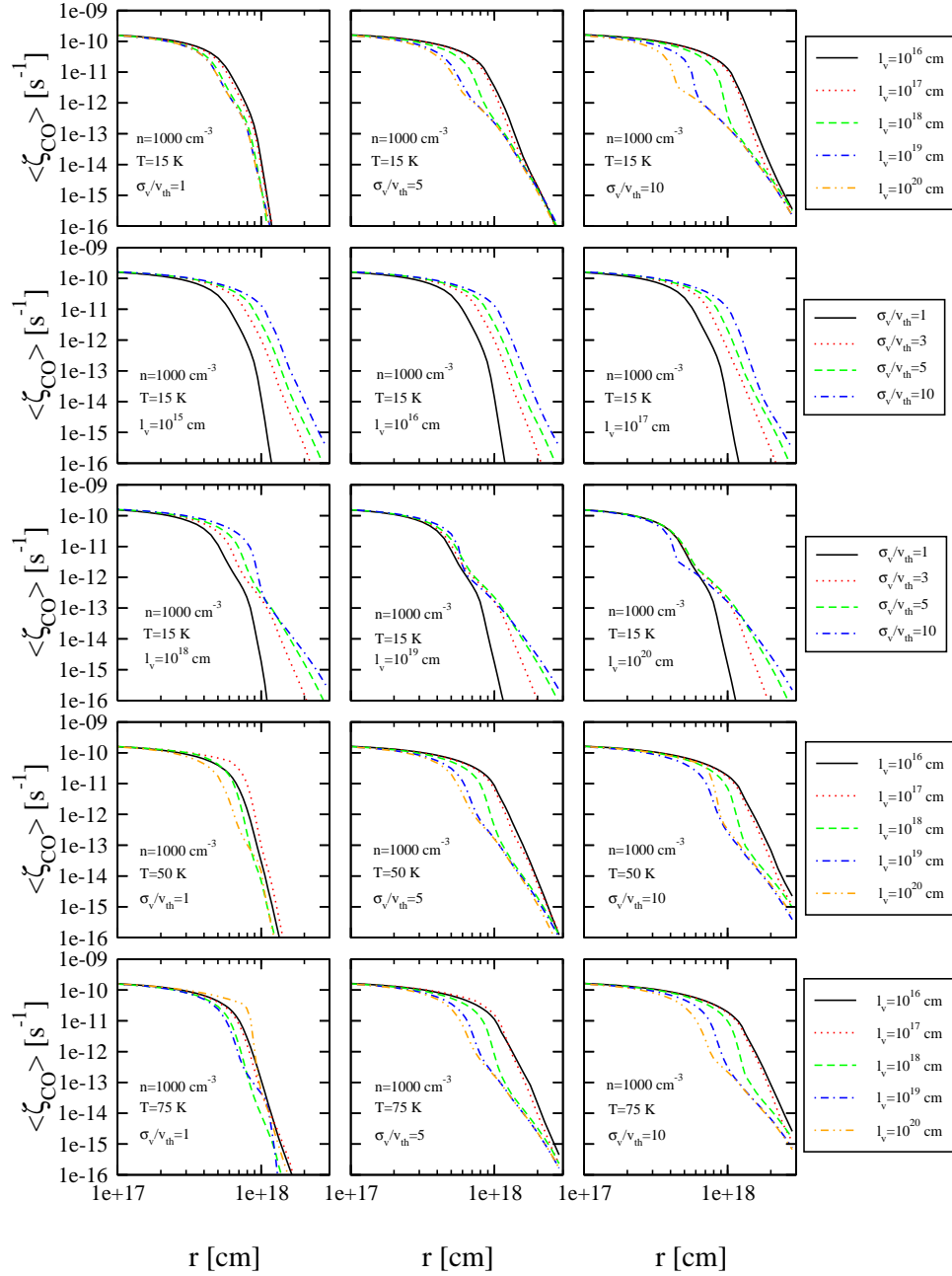
Ungenauigkeiten mit zunehmender optische Dicke größer werden. Das resultiert in einem stufigen Kurvenverlauf. Ausserdem sei angemerkt, dass die Wachstumskurven für kleine σ keine Dämpfungsfügel zeigen. Das ist modellbedingt und resultiert aus der Normierung des Geschwindigkeitsgitters auf σ^6 .

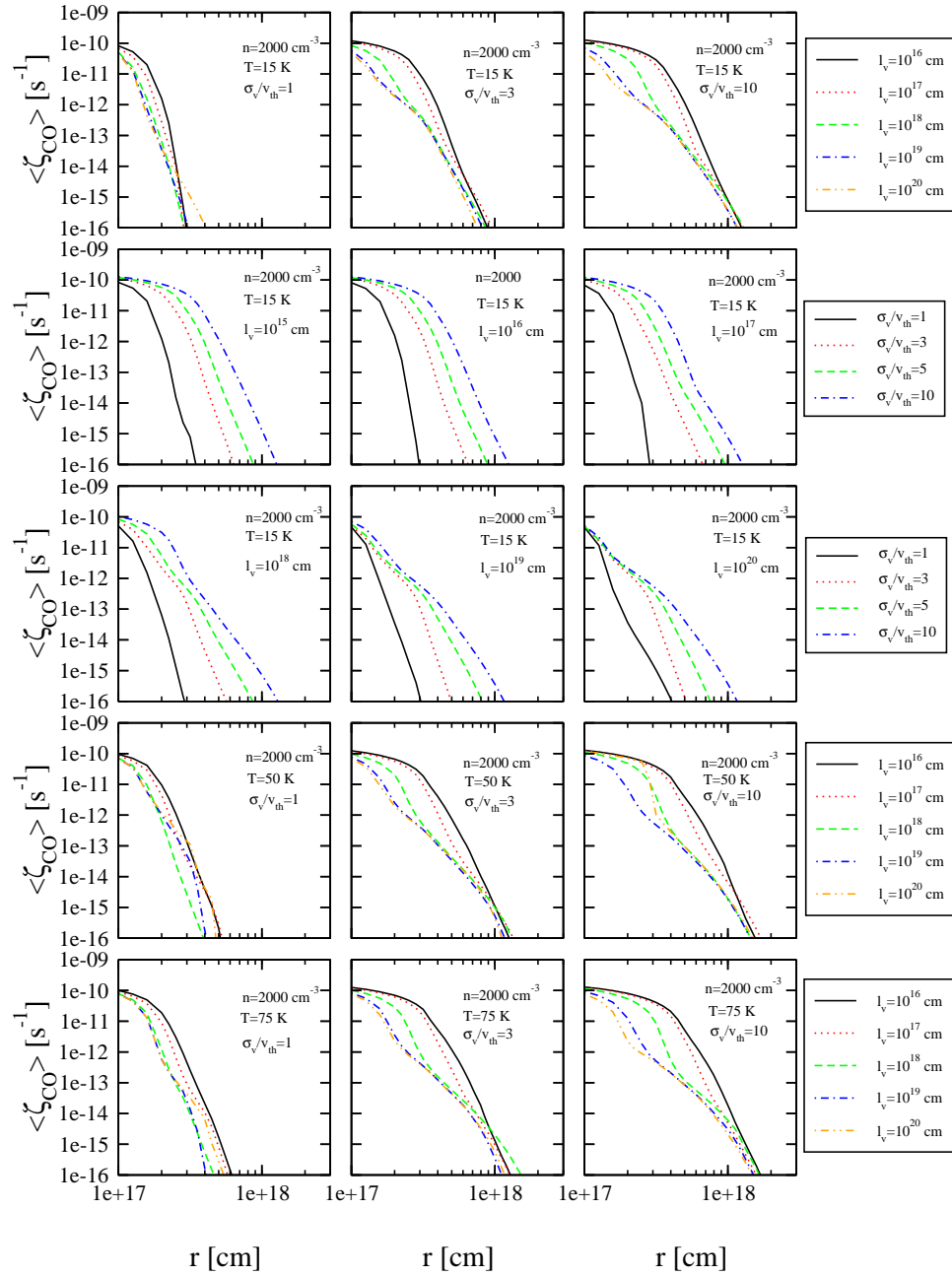
⁶Für kleine Turbulenzgeschwindigkeiten wird das Absorptionsprofil nicht mehr voll von dem Geschwindigkeitsgitter überdeckt, entsprechend gibt es keine Linienflügel, in denen Absorption stattfinden kann.

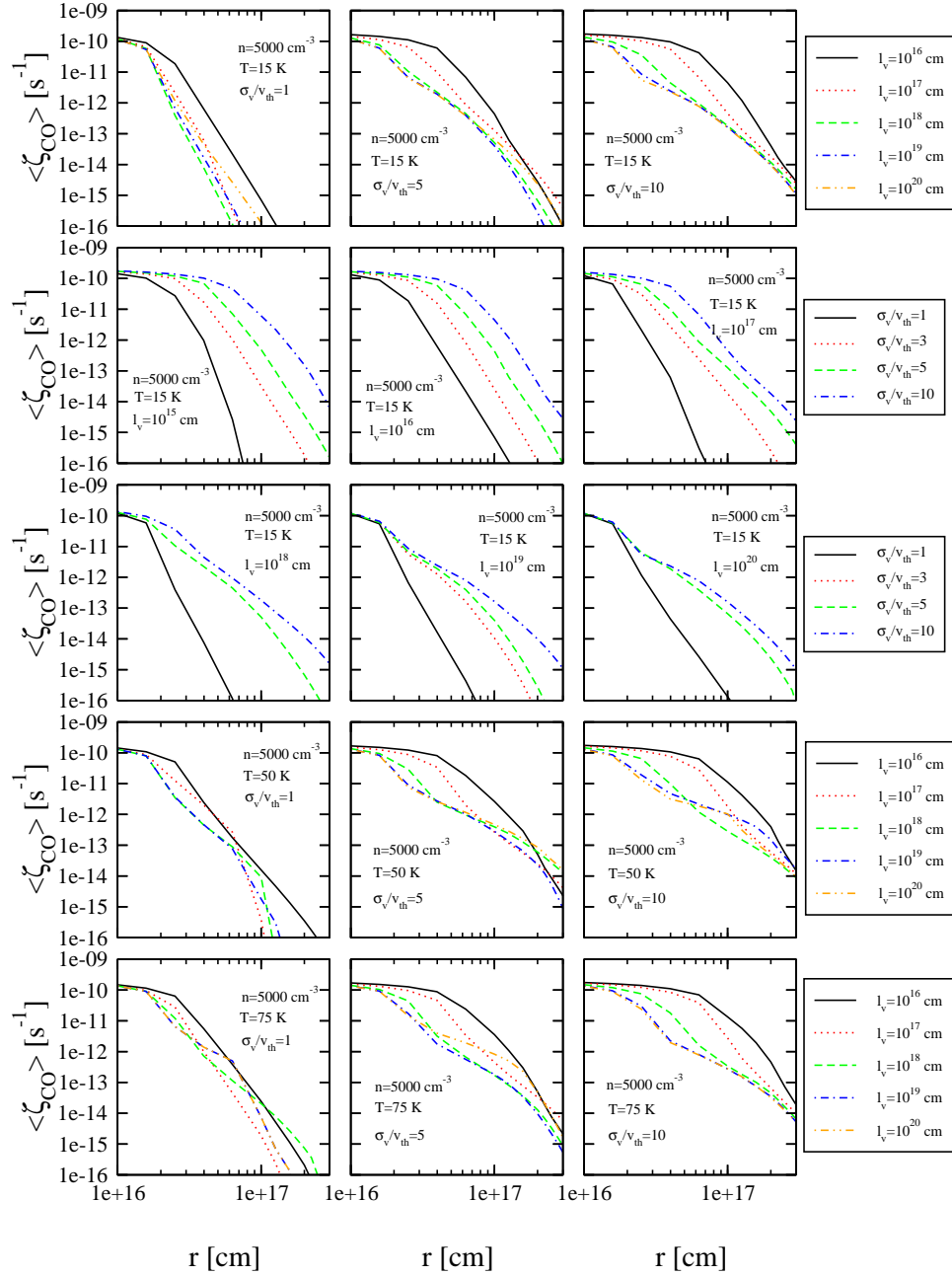
Abbildung 5.6: $\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 1000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie

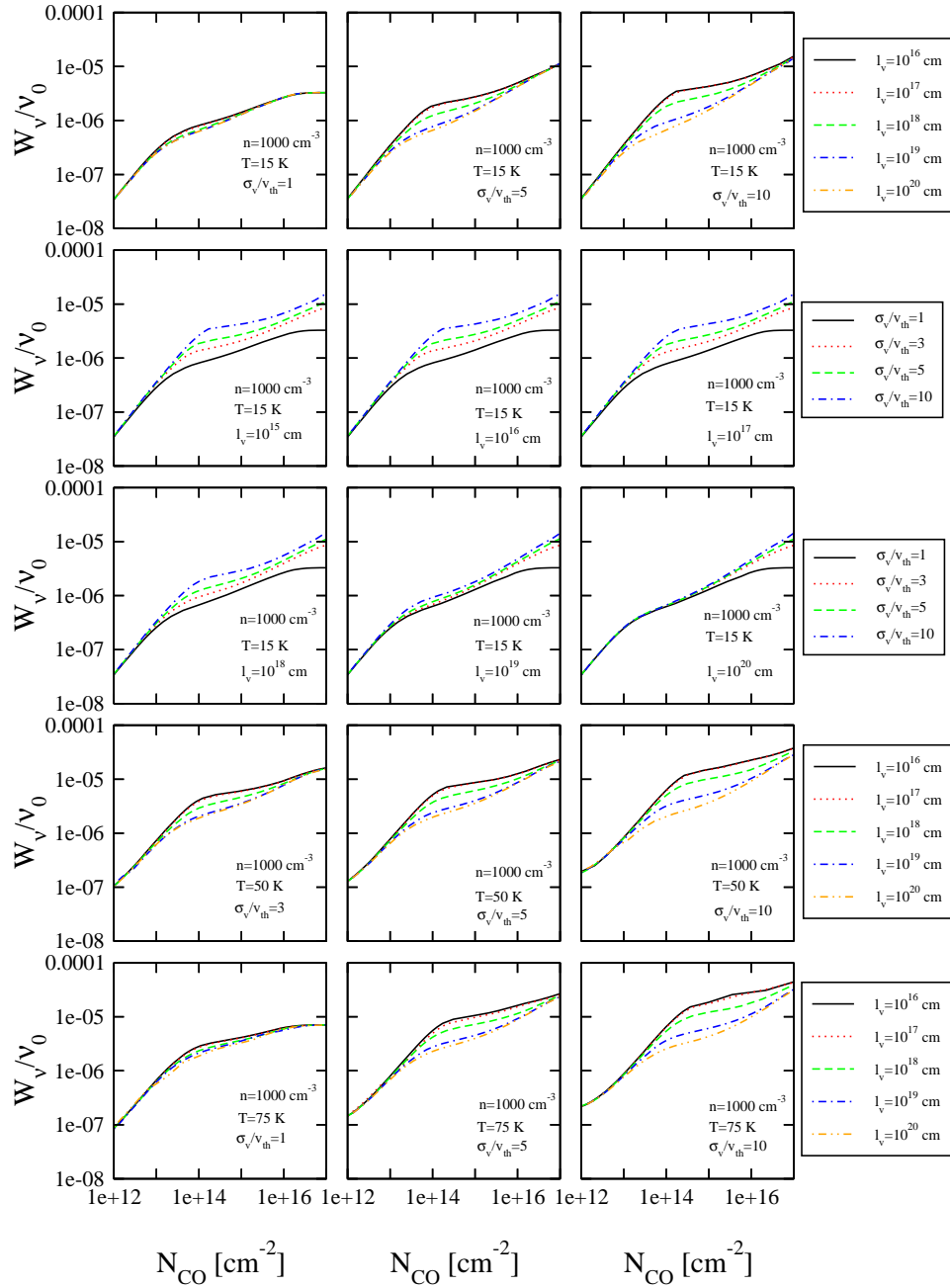
Abbildung 5.7: $\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie

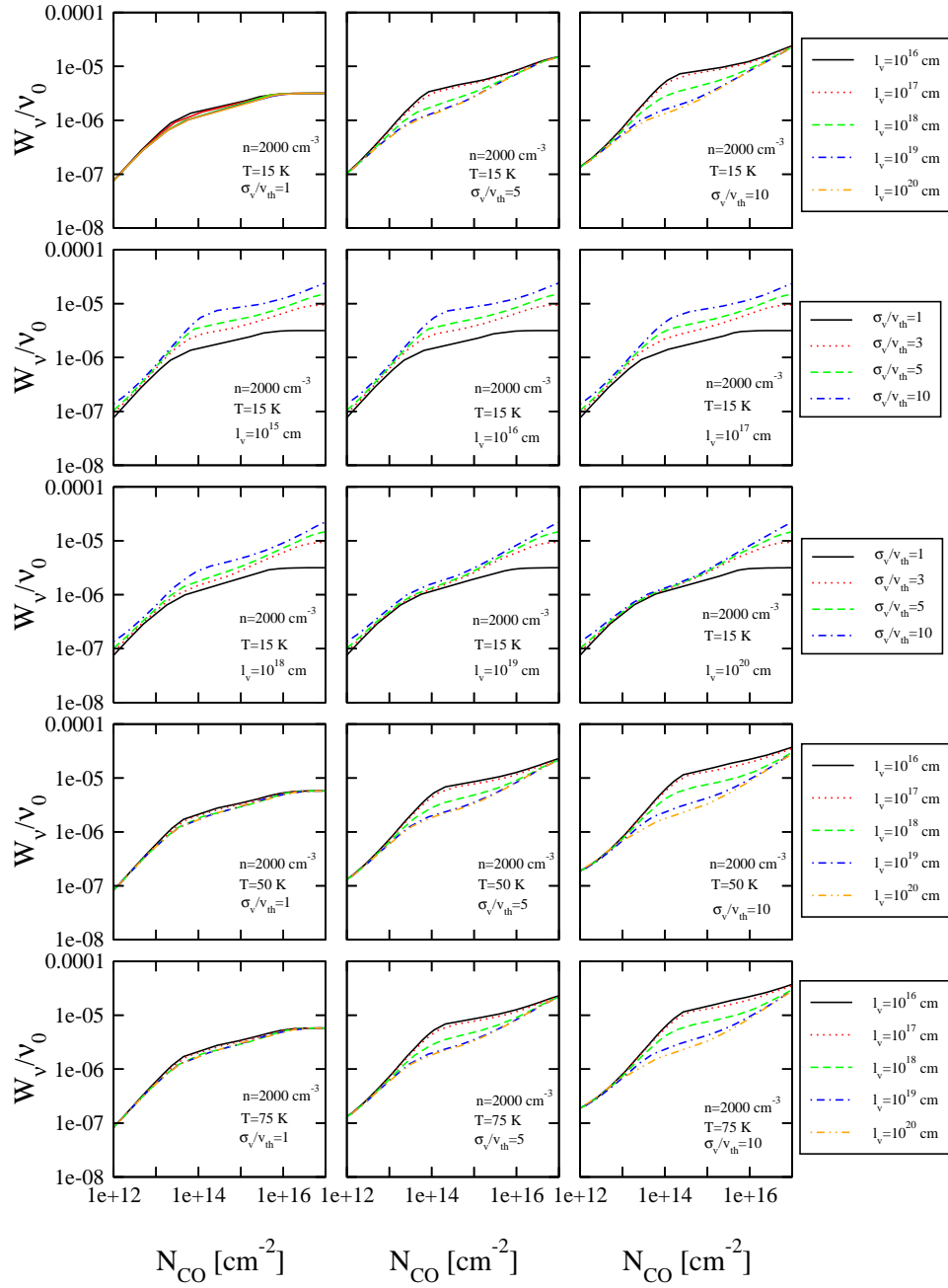
Abbildung 5.8: $\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 5000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie

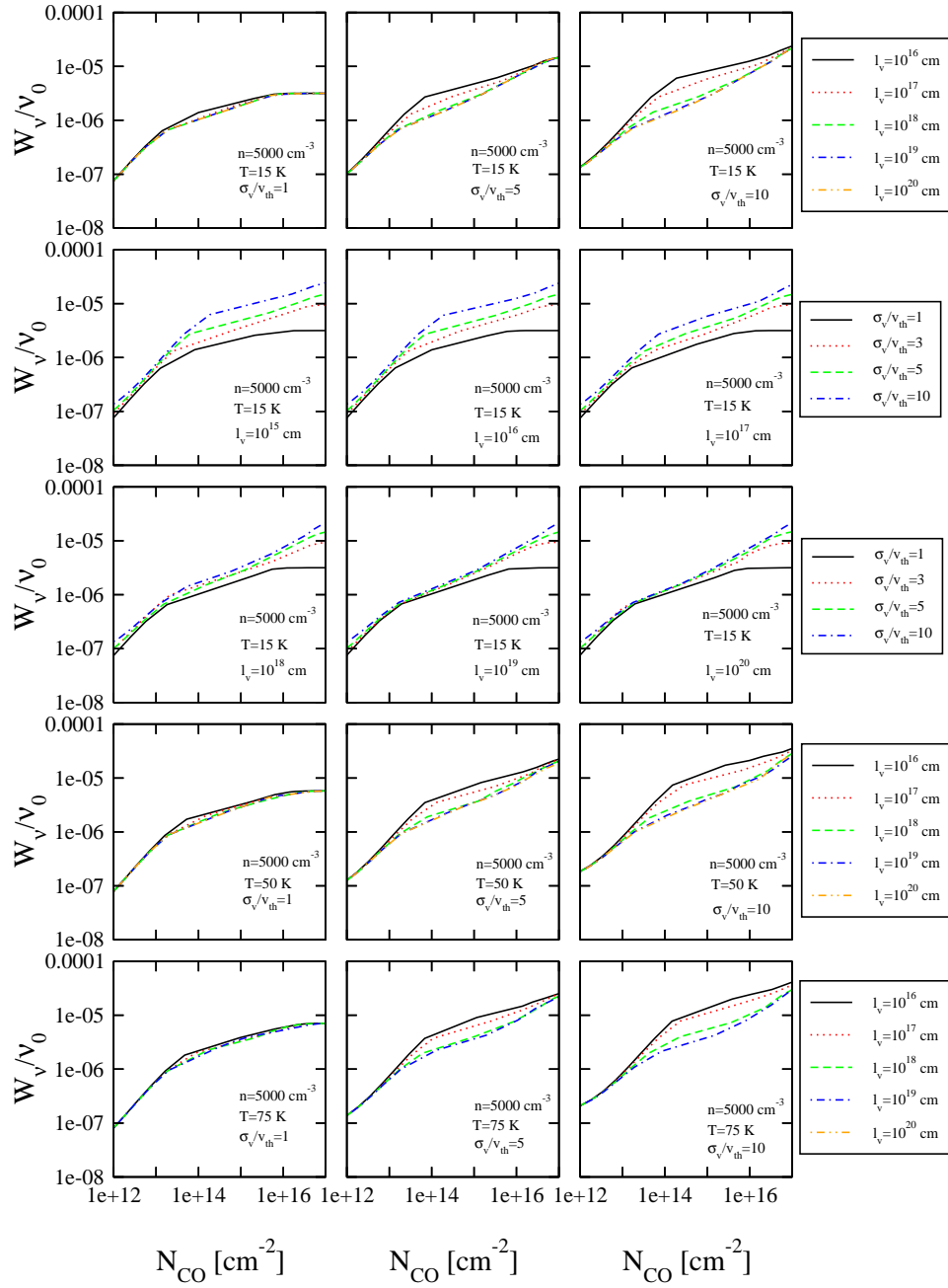
Abbildung 5.9: $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 1000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie

Abbildung 5.10: $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie


 Abbildung 5.11: $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 5000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie

Abbildung 5.12: Wachstumskurve für $n = 1000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie

Abbildung 5.13: Wachstumskurve für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie

Abbildung 5.14: Wachstumskurve für $n = 5000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie

5.2 Rechnungen mit vollem UV-Spektrum

In Abschnitt 5.1 haben wir Modelle betrachtet, in denen die UV-Absorption von CO nur in einer einzigen Linie stattfindet. Durch die Normierung auf den nicht-abgeschirmten Wert von $\bar{\zeta}_{\text{CO}} = 2 \cdot 10^{-10} \text{ s}^{-1}$ sind die auftretenden Effekte extrem verstärkt zu Tage getreten und konnten detailliert verstanden werden.

T [K]	σ_v/v_{th}	$\zeta_{\text{CO}}[\text{s}^{-1}]$
15	1	$1.05 \cdot 10^{-10}$
	5	$1.07 \cdot 10^{-10}$
	10	$1.19 \cdot 10^{-10}$
50	1	$1.07 \cdot 10^{-10}$
	5	$1.09 \cdot 10^{-10}$
	10	$1.52 \cdot 10^{-10}$
75	1	$1.08 \cdot 10^{-10}$
	5	$1.10 \cdot 10^{-10}$
	10	$1.81 \cdot 10^{-10}$
Beitrag breiter Linien		$1.54 \cdot 10^{-11}$

Tabelle 5.1: Gesamte Photodissoziationswahrscheinlichkeit am Rand der Wolke

Die Strahlungstransportgleichung wird für alle Absorptionslinien gelöst und die Beiträge jeder Linie zur gesamten Photodissoziationswahrscheinlichkeit nach Gleichung 4.3 ermittelt. Die summierten Einzelbeiträge ergeben, zusammen mit den analytisch berechneten Raten für die stark verbreiterten Banden (siehe Abschnitt 4.5), den gesamten Photodissoziationsratenkoeffizient ζ_{CO} , die in das chemische Ratengleichungssystem eingeht. Im Unterschied zu den Rechnungen in Abschnitt 5.1 ist die nicht abgeschirmte Photodissoziationswahrscheinlichkeit am Rand der Wolke nun Resultat der Rechnungen und hängt nur von dem angenommenen UV-Feld und dem Absorptionsprofil ab. Das Absorptionsprofil variiert in unserer Modellierung mit der Temperatur und der Turbulenzgeschwindigkeit. In vergleichbaren Studien ist Turbulenz immer im mikroturbulenten Grenzfall berücksichtigt worden, mit einem modifizierten Dopplerparameter b , analog zu Gleichung 4.10. Die verwendeten Geschwindigkeiten liegen im Bereich von $b = 0.3 \dots 5 \text{ km s}^{-1}$ (van Dis-

hoeck & Black (1988), Warin et al. (1996)). Je nach angenommenem interstellaren UV-Feld ⁷ ergaben sich die nicht abgeschirmten Photodissoziationswahrscheinlichkeiten zu $\zeta_{\text{CO}} = 2.0 \cdot 10^{-10} \text{s}^{-1}$, $1.6 \cdot 10^{-10} \text{s}^{-1}$ und $1.8 \cdot 10^{-10} \text{s}^{-1}$. Tabelle 5.1 zeigt die Photodissoziationswahrscheinlichkeiten, die sich für unterschiedliche Modellparameter am Rand der Wolke ergeben⁸. Wie man sieht, ergeben sich in unserem Modell vergleichbare numerische Werte. Da im Prinzip nur über das Absorptionsprofil und das nichtabgeschwächte Strahlungsfeld integriert wird, müssen sich hierbei auch ähnliche Werte ergeben. Abweichungen resultieren aus einer vereinfachten Modellierung des UV-Feldes und einer Berücksichtigung von Rotationszuständen nur bis zu $J=5$ bei einer Anregungstemperatur von $T=15 \text{ K}$.

Auf den folgenden Seiten sind der Verlauf der Photodissoziationsratenkoeffizienten für einzelne Banden, der Verlauf der CO-Häufigkeit und die generelle chemische Struktur entlang des Sehstrahls für verschiedene Parameterkombinationen abgebildet. Aufgrund der numerischen Komplexität des Problems resultiert die Forderung nach einer höheren Genauigkeit der Ergebnisse in wesentlich längeren Rechenzeiten. Es musste also ein Kompromiss zwischen beiden Größen gefunden werden. Dadurch ergeben sich gelegentlich kantig aussehende Graphen. Das sind numerische Effekte. Unsere derzeitige Motivation ist jedoch ein qualitatives Verständnis der modellierten Physik. Um quantitativ aussagekräftige Ergebnisse zu erhalten, muss die Numerik jedoch noch verfeinert werden.

5.2.1 Ergebnisse

In Abbildung 5.15 ist oben die Photodissoziationswahrscheinlichkeit und unten der dazugehörige CO-Dichteverlauf dargestellt. Die Wahrscheinlichkeiten für die beiden größten Korrelationslängen verlaufen so gut wie deckungsgleich. Das qualitative Verhalten für unterschiedliche Korrelationslängen bei $\sigma/\nu_{\text{th}} = 10$ ist natürlich identisch zu den Betrachtungen mit nur einer einzelnen Linie. Man sieht allerdings, dass die Variationen der Dichtestruktur mit der Koerrelationslänge nicht so ausgeprägt ist. Im Bereich von $r = 10^{17} \dots 10^{18} \text{ cm}$ fällt $\zeta_{\text{CO}}(r)$ um zwei bis vier Größenordnungen ab. Ein Vergleich mit Abbildung 5.10 (rechte obere Abbildung) zeigt,

⁷Im wesentlichen wurden die Ergebnisse dreier Studien verwendet: Draine (1978),Gondhalekar et al. (1980), Mathis et al. (1983).

⁸Das von uns verwendete Strahlungsfeld entspricht dem von Mathis et al. (1983).

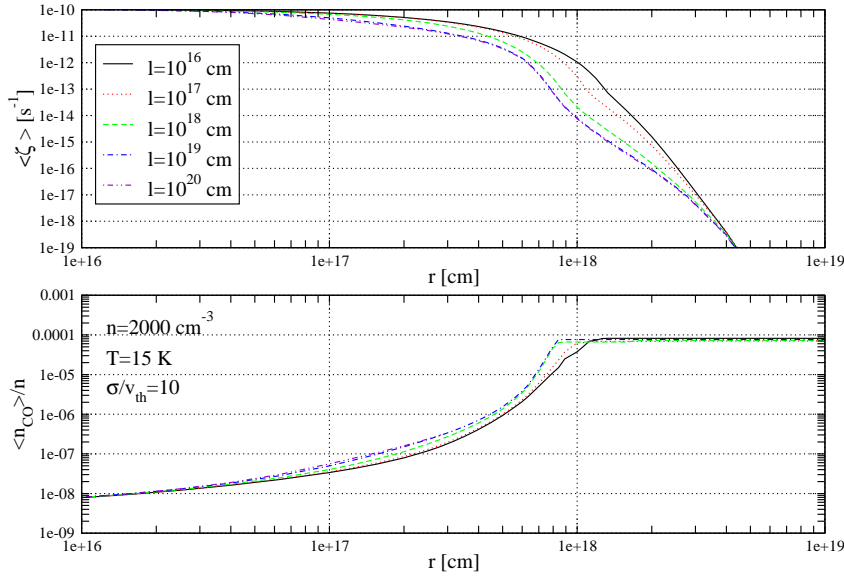


Abbildung 5.15: $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ und Dichteverlauf für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, $T = 15 \text{ K}$, und $\sigma/v_{\text{th}} = 10$.

dass bei den vorherigen Rechnungen die Photodissoziationswahrscheinlichkeit wesentlich steiler abfällt. Da bei Berücksichtigung des vollständigen UV-Absorptionsspektrums nicht alle Linien gleich schnell optisch dick werden, nimmt der Photodissoziationsratenkoeffizient nicht so rapide ab, wie bei nur einer einzigen Linie. Dabei ist die Variation desjenigen Anteils des Ratenkoeffizienten, der aus den breiten Banden kommt, von den Turbulenzparametern weitgehend unabhängig. Wie Abbildung 5.16 zeigt, variiert $\sum_i \zeta^{\text{B}_i}$ erwartungsgemäß kaum für unterschiedliche ℓ_v und σ/v_{th} . Trotzdem ist es interessant, sich die Photodissoziationsratenkoeffizienten der breiten Banden etwas genauer anzuschauen. Abbildung 5.17 zeigt die Ratenkoeffizienten der einzelnen Banden sowie die Summe über alle Banden. Es ist gut zu erkennen, dass die stärkeren Banden am Rand der Wolke zwar die Photodissoziation dominieren, aber auch früher und vor allem steiler als die schwächeren Banden abfallen. Am Rand sind die stärksten Banden: 12,17,18,21,22,26. Dieses Ergebnis deckt sich mit den Rechnungen von Warin et al. (1996) und van Dishoeck & Black

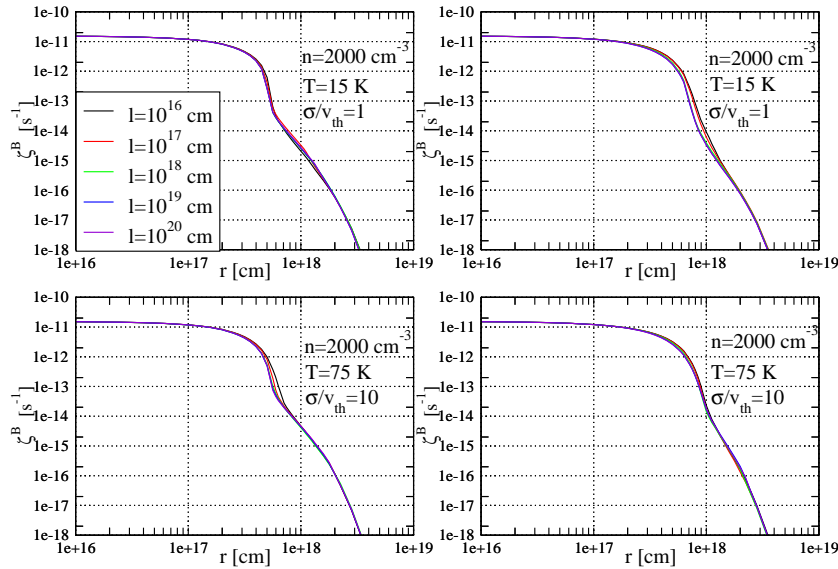


Abbildung 5.16: $\langle \zeta \rangle$ aller breiten Banden für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, $T=15\text{K}$.

(1988). Die Darstellung für die Anteile der engen Banden ist in Abbildung 5.18 zu sehen. Die Photodissoziationswahrscheinlichkeit wird durch den Anteil der Bande 39 dominiert. Das deckt sich mit den Erwartungen aus dem Absorptionsprofil (siehe Anhang), und ist ebenfalls von Warin et al. (1996) bestätigt worden. Man kann die engen Absorptionsbanden grob in drei Gruppen einteilen:

1. Bande 39 trägt am stärksten zur gesamten Photodissoziation bei.
2. Banden mit einem Ratenkoeffizienten von $10^{-11} \dots 10^{-12}$ am Rand der Wolke.
3. Banden mit einem Ratenkoeffizienten von $3 \cdot 10^{-13} \dots 5 \cdot 10^{-15}$ am Rand der Wolke.

Vergleicht man Abbildung 5.18 mit Abbildung 5.17, so fällt auf, dass die Photodissoziationsratenkoeffizienten aller engen Banden, im Gegensatz zu der Darstellung der breiten Banden, bei $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}$ abknicken. Das ist eine numerische Un-

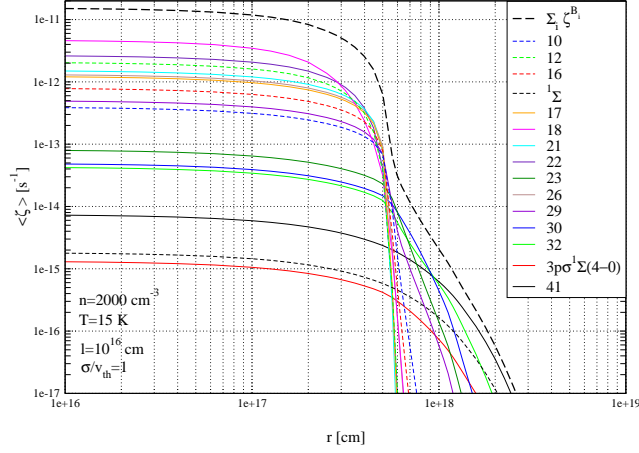


Abbildung 5.17: $\langle \zeta \rangle$ einzelner breiter Banden für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, $T=15 \text{ K}$.

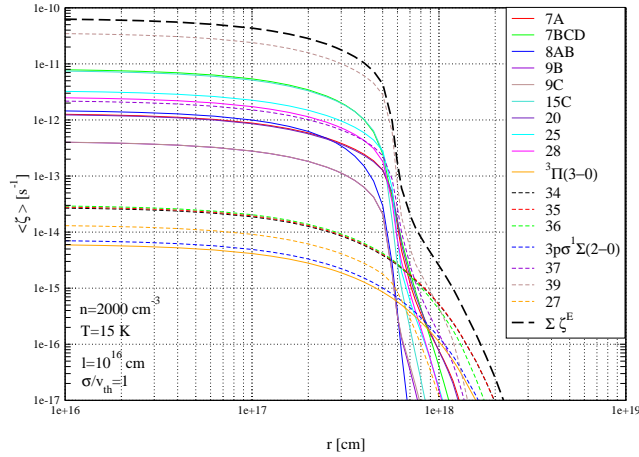


Abbildung 5.18: $\langle \zeta \rangle$ einzelner enger Banden für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, $T=15 \text{ K}$.

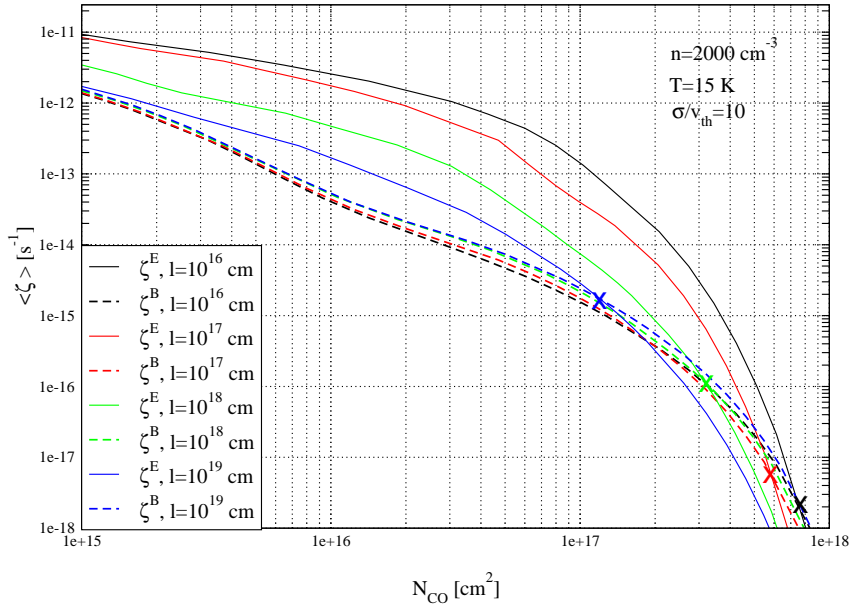


Abbildung 5.19: Schnittpunkte der *schmalen* Anteile mit den *breiten* Anteilen von $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für verschiedene Korrelationslängen in Abhängigkeit der CO-Säulendichte, für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, $T=15 \text{ K}$. Die Kreuze markieren den Schnittpunkt. Die Farbe der Kreuze entspricht der Farbkodierung der Linien.

genauigkeit. Es ist zu erwarten, dass die Raten der schwächeren Banden nach dem Schnittpunkt mit den Raten der dominanteren Banden weniger steil abfallen. Auf den Verlauf der CO-Dichte haben diese Ungenauigkeiten allerdings keinen wesentlichen Einfluss, da die Ratenkoeffizienten bereits vier bis fünf Größenordnungen abgefallen ist, bevor ihr Verlauf ungenau wird; damit sind die starken chemischen Reaktionen der dominanteren Einfluss auf die CO-Dichte. Es ist aufschlussreich, den Verlauf von $\sum \zeta^{\text{B}}$ und $\sum \zeta^{\text{E}}$ miteinander zu vergleichen⁹. In Abbildung 5.19 sind die *schmalen* Anteile und die *breiten* Anteile der Photodissoziationswahrscheinlichkeit für verschiedene Korrelationslängen dargestellt. Die farbigen Kreuze markieren

⁹ $\sum \zeta^{\text{B}}$ meint dabei die Summe aller Linien-Photodissoziationsraten, die zu *breiten* Banden gehören. Analog dazu bedeutet $\sum \zeta^{\text{E}}$, die Summe aller Photodissoziationsraten, die zu Banden mit *engen* Linien gehören.

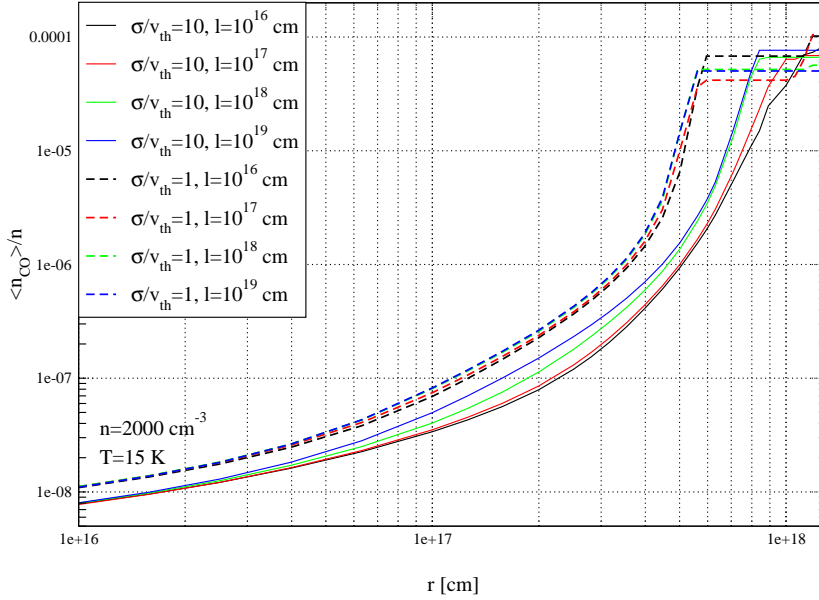


Abbildung 5.20: $\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für Korrelationslängen $\ell_v = 10^{16} \dots 10^{20}$ cm und $\sigma/v_{\text{th}} = 1$ und 10 , für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, $T = 15 \text{ K}$.

die Schnittpunkte zwischen beiden. In Gebieten links des Kreuzes findet die Photodissoziation vorwiegend in den Linienmitten statt. In Wolkengebieten, mit Säulendichten rechts des Kreuzes, verlagert sich die Photodissoziation in die Linienflügel, so dass Linien, die zu Banden mit kleinen Lebenszeiten τ (vergleiche Tabelle 4.1) gehören, den größten Beitrag zur gesamten Photodissoziationsrate liefern. Da die Photodissoziationsrate der schmalen Linien für größere Korrelationslängen immer steiler abfällt, die breiten Anteile jedoch nicht, verlagert sich der Schnittpunkt zu immer kleineren Säulendichten. Die Linien werden im Mittel früher optisch dick, und Absorption kann nur noch in den Linienflügeln geschehen (vergleiche auch Warin et al. (1996)).

Wie bereits erwähnt, ist der Abfall der Photodissoziationswahrscheinlichkeit entlang des Sehstrahls um einiges flacher, als dies bei den Ergebnissen mit nur einer Moleküllinie der Fall war. Mit umgekehrtem Vorzeichen gilt das natürlich auch für den Erwartungswert der CO-Dichte. Der Verlauf ist weniger steil als in den Er-

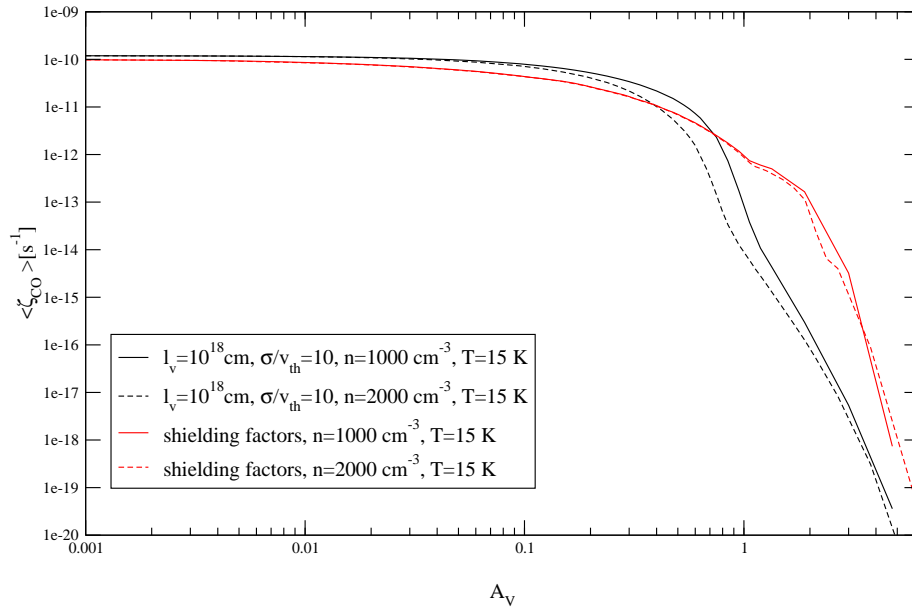


Abbildung 5.21: Vergleich der $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ aus *shielding Faktoren* und Strahlungstransportrechnungen bei Dichten von $n=1000, 2000 \text{ cm}^{-3}$, und $T=15 \text{ K}$.

gebnissen aus Abschnitt 5.1. Die quantitativen Aussagen über die Abhängigkeit der Dichte von den Parametern der Turbulenz bleiben natürlich gültig. Zum Vergleich zeigt Abbildung 5.20 den Verlauf der relativen CO-Dichte für verschiedene Parameterkombinationen von σ/v_{th} und ℓ_v . Der stufige Verlauf am äußeren rechten Rand ist auf numerische Ungenauigkeiten zurückzuführen¹⁰. Obwohl in dieser Darstellung der Unterschied in den engültigen Gleichgewichtsdichten von CO, im Inneren der Wolke, nicht besonders groß aussieht, so variiert die Tiefe, ab der sich die CO-Dichte nicht mehr wesentlich verändert um einiges. Je nach Korrelationslänge und Geschwindigkeit liegt die Tiefe der stabilen CO-Dichte zwischen $\approx 0.5 \dots 1.2 \times 10^{18} \text{ cm}$, variiert also grob um einen Faktor zwei. Das ist ein beachtlicher Effekt, der dazu führen kann, dass man den Radius der Wolke, oder das vorliegende CO-Isotopenverhältnis, wesentlich überschätzt. Dabei handelt es sich

¹⁰In sehr tiefen Schichten der Wolke ist es äußerst schwierig eine bezüglich der Ortsschritte stetige Konvergenz des Gleichungssystems zu erreichen.

nur um Variationen, die aus unterschiedlichen Korrelationslängen und Turbulenzgeschwindigkeiten resultieren. Trotzdem stellt sich natürlich die Frage, ob der numerische Aufwand überhaupt gerechtfertigt ist. Wie bereits erwähnt, besteht auch die Möglichkeit, den Verlauf von ζ_{CO} zu parametrisieren, und damit die Ratengleichungen zu lösen. Betrachtet man den zeitlichen Aufwand zwischen Parametrisierung und vollem stochastischen Strahlungstransport, so stehen eine Minute gegen 18 Stunden¹¹. Der Unterschied beträgt ungefähr einen Faktor 1000.

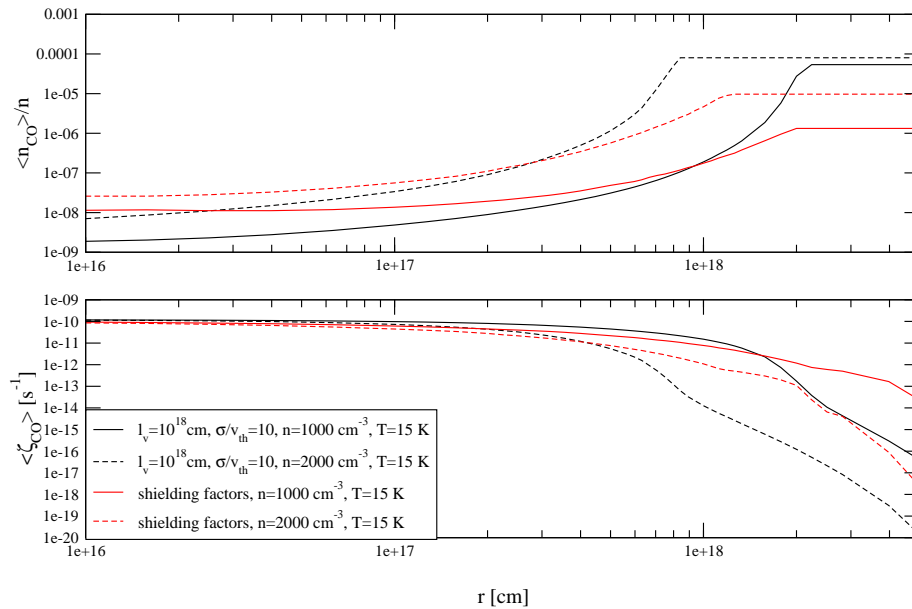


Abbildung 5.22: Vergleich der CO-Dichte und $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ aus *shielding Faktoren* und Strahlungstransportrechnungen bei Dichten von $n=1000, 2000 \text{ cm}^{-3}$, und $T=15 \text{ K}$.

Man sieht in Abbildung 5.21 die Ergebnisse der vollen Strahlungstransportrechnung in Schwarz und die der Parametrisierung durch Abschirmungsfaktoren in Rot¹². Wie man erkennt, ist die Übereinstimmung am äußeren Rand der Wolke einigermaßen gut, wird jedoch immer schlechter, je weiter man in die Wolke eindringt.

¹¹Gerechnet auf einer SUN Ultra 10, 333MHz, mit SUN F77 Compiler und geschwindigkeitsoptimiertem Programmcode.

¹²Man beachte, dass die Abszisse in Einheiten von A_v aufgetragen ist.

Die parametrisierten Werte fallen wesentlich früher ab, jedoch mit sehr geringem Steigungsbetrag. Demgegenüber verlaufen die Ergebnisse der kompletten Rechnung anfangs flacher, um, bei steigender optischer Dicke, plötzlich steil abzufallen. Dadurch ergeben sich natürlich auch unterschiedliche Verläufe der CO-Dichte. In Abbildung 5.22 ist, zusätzlich zur Photodissoziationswahrscheinlichkeit, auch der Dichteverlauf von CO dargestellt; diesmal in Abhängigkeit von der Eindringtiefe r . Die Photodissoziation bleibt sehr viel tiefer in der Wolke noch bestimmend für die CO-Dichte. Entsprechend tiefer innerhalb der Wolke werden die chemischen Reaktionsraten dominant. Die Resultate für große r sind jedoch vorerst von geringer Genauigkeit. Das zugrundegelegte Ortsgitter müsste wesentlich erweitert werden, um verlässliche Werte in diesen großen Tiefen zu liefern. Trotzdem erlauben uns die Ergebnisse, einen ersten Eindruck davon zu erhalten, welchen Einfluss die volle Berücksichtigung des turbulenten Strahlungstransports auf die Modelle haben kann.

Das Hauptaugenmerk unserer Untersuchungen ist eine verfeinerte Modellierung des Strahlungstransports in insterstellaren Molekülwolken. Das erforderte die Berücksichtigung eines chemischen Netzes, um die Bildung von CO korrekt abzubilden. Trotzdem haben wir uns dabei auf ein einfaches chemisches Modell der Wolke beschränkt¹³. Es macht daher auch nur wenig Sinn, die chemische Struktur, die sich auch unseren Rechnungen ergibt, detailliert zu analysieren, und mit anderen, in dieser Hinsicht viel detaillierteren, Studien zu vergleichen. Uns interessiert vor allem der Verlauf der CO-Dichte in Abhängigkeit von der Turbulenz. Trotzdem sollen einige exemplarische Ergebnisse vorgestellt werden. Abbildung 5.23 zeigt die chemische Struktur einer Wolke bei einer Wasserstoffdichte von $n=2000\text{ cm}^{-3}$ und einer Temperatur von $T=15\text{ K}$. Die Korrelationslänge und die Turbulenzgeschwindigkeit sind willkürlich ausgewählt worden. Der Verlauf der CO-Dichte ist etwas dicker dargestellt. Wie man sieht, ist CO nicht die einzige Spezies, deren Häufigkeit entlang des Sehstrahls um viele Größenordnungen variiert. Vor allem mit Ansteigen der optischen Dicke und dem Erreichen einer Grenzdichte von CO wird die Wolke chemisch umstrukturiert. Variationen in der Korrelationslänge und der durchschnittlichen Turbulenzgeschwindigkeit haben in unserem Modell nur geringe Auswirkungen auf die generelle chemische Struktur. Die Dichte und die Temperatur sind von

¹³Physikalische formuliert: $n_{\text{H}} = \text{const.}, T = \text{const.}$.

größerer Bedeutung¹⁴. Die häufigsten Spezies sind für verschiedene Werte von n und T in Abbildung 5.24 abgebildet¹⁵.

Abschließend sind in den Abbildungen 5.25 bis 5.36 die Ergebnisse der Modellrechnungen mit vollem UV-Spektrum zusammenfassend dargestellt. Dabei variierten wir die Gesamtdichte von 500 bis 5000 cm⁻³ für Temperaturen von 15, 50 und 75 Kelvin.

¹⁴Es wird nur der Einfluss auf die Photodissoziation von CO untersucht. Die Abhängigkeit der Temperatur von der Photodissoziation, die einen starken Heizmechanismus darstellt, wird nicht berücksichtigt.

¹⁵Der Vollständigkeit halber sind im Anhang alle Häufigkeiten abgebildet.

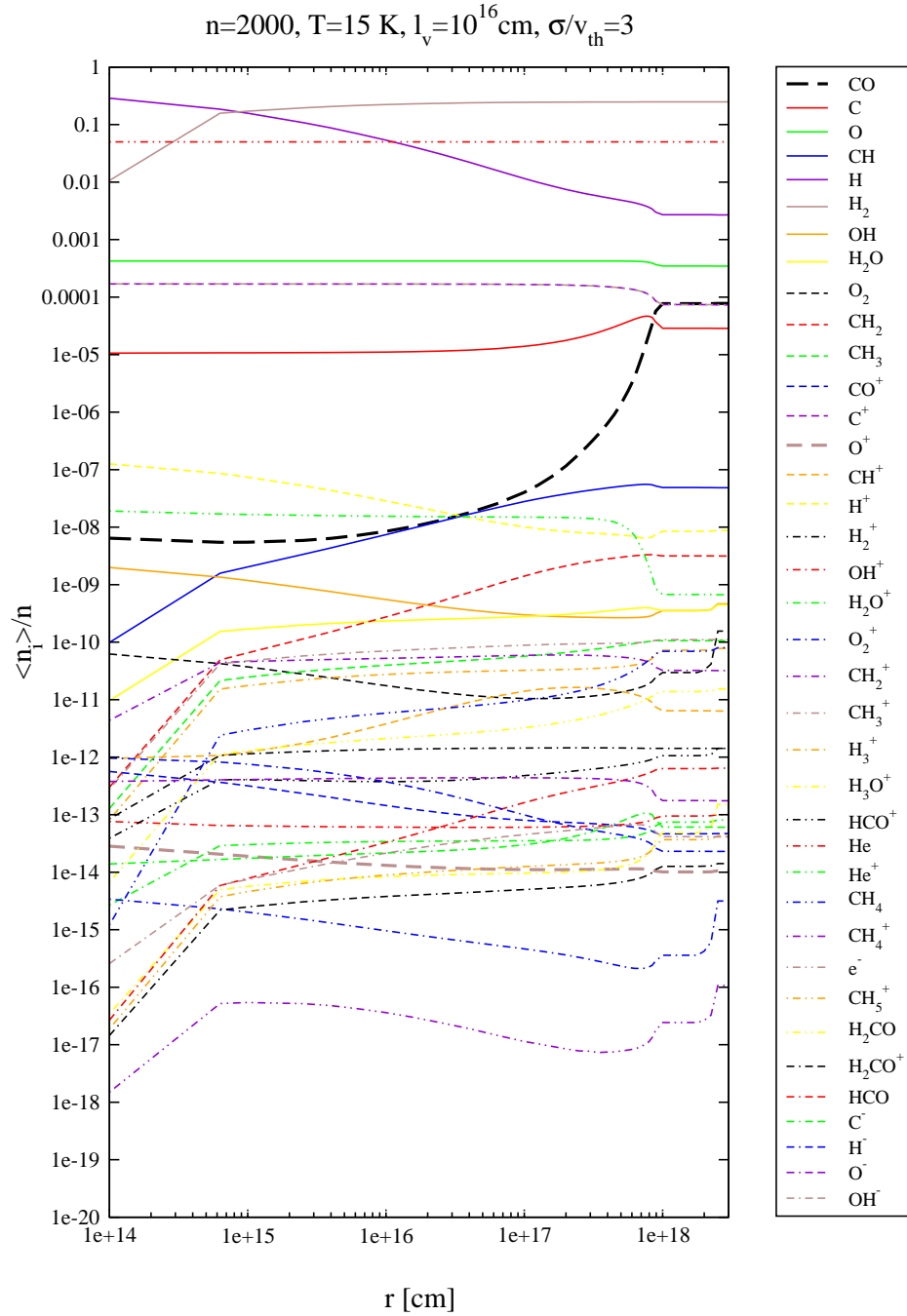


Abbildung 5.23: Chemische Struktur einer Wolke mit $n=2000 \text{ cm}^{-3}$, $T=15 \text{ K}$, $\ell_v = 10^{16} \text{ cm}$ und $\sigma/v_{\text{th}} = 3$.

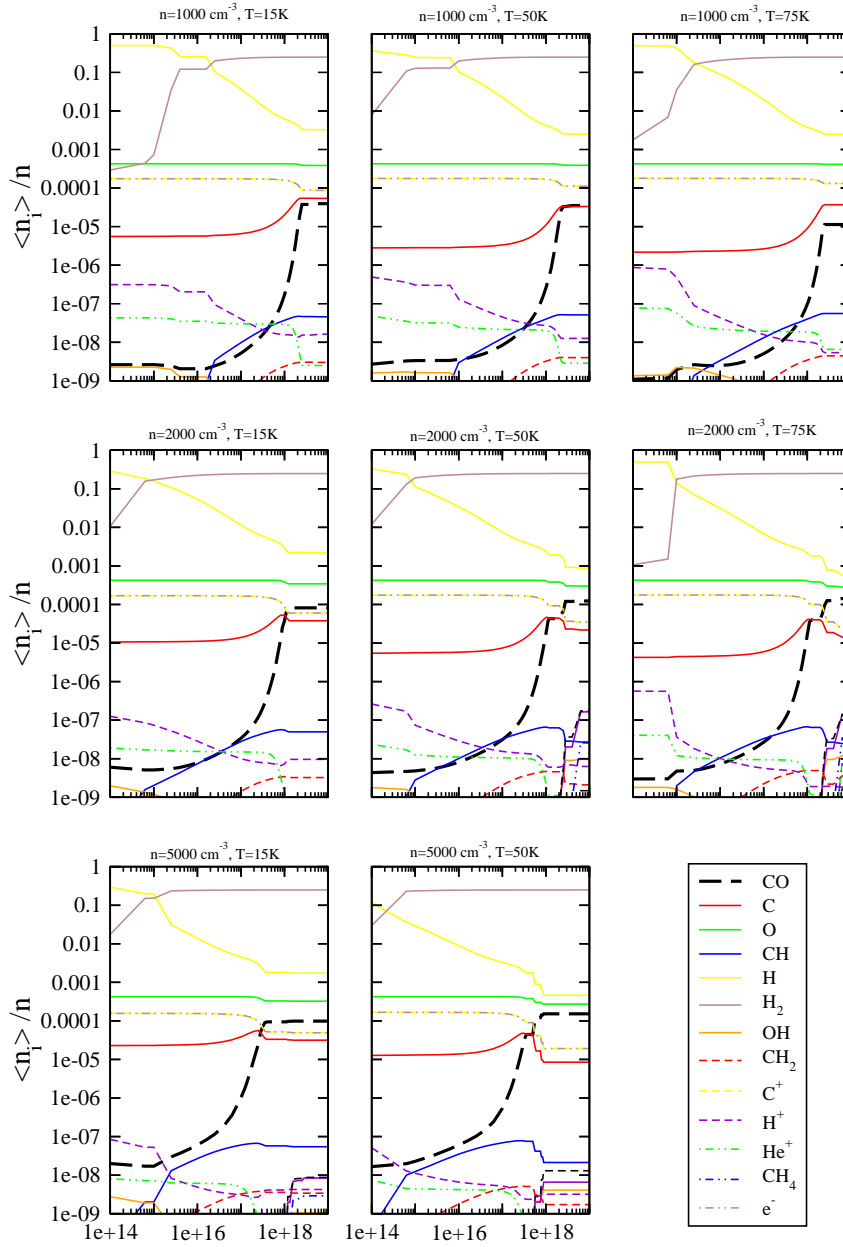
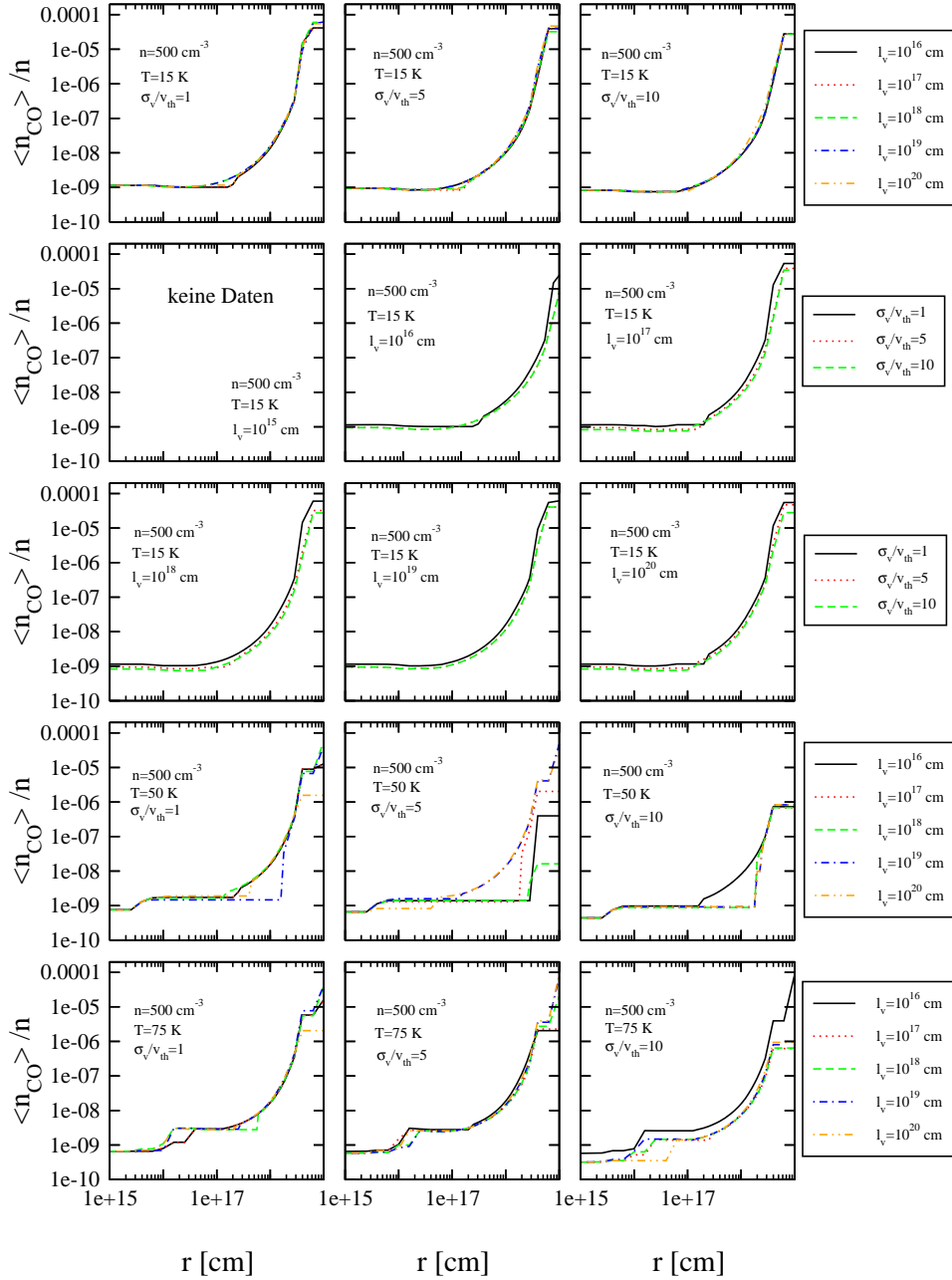
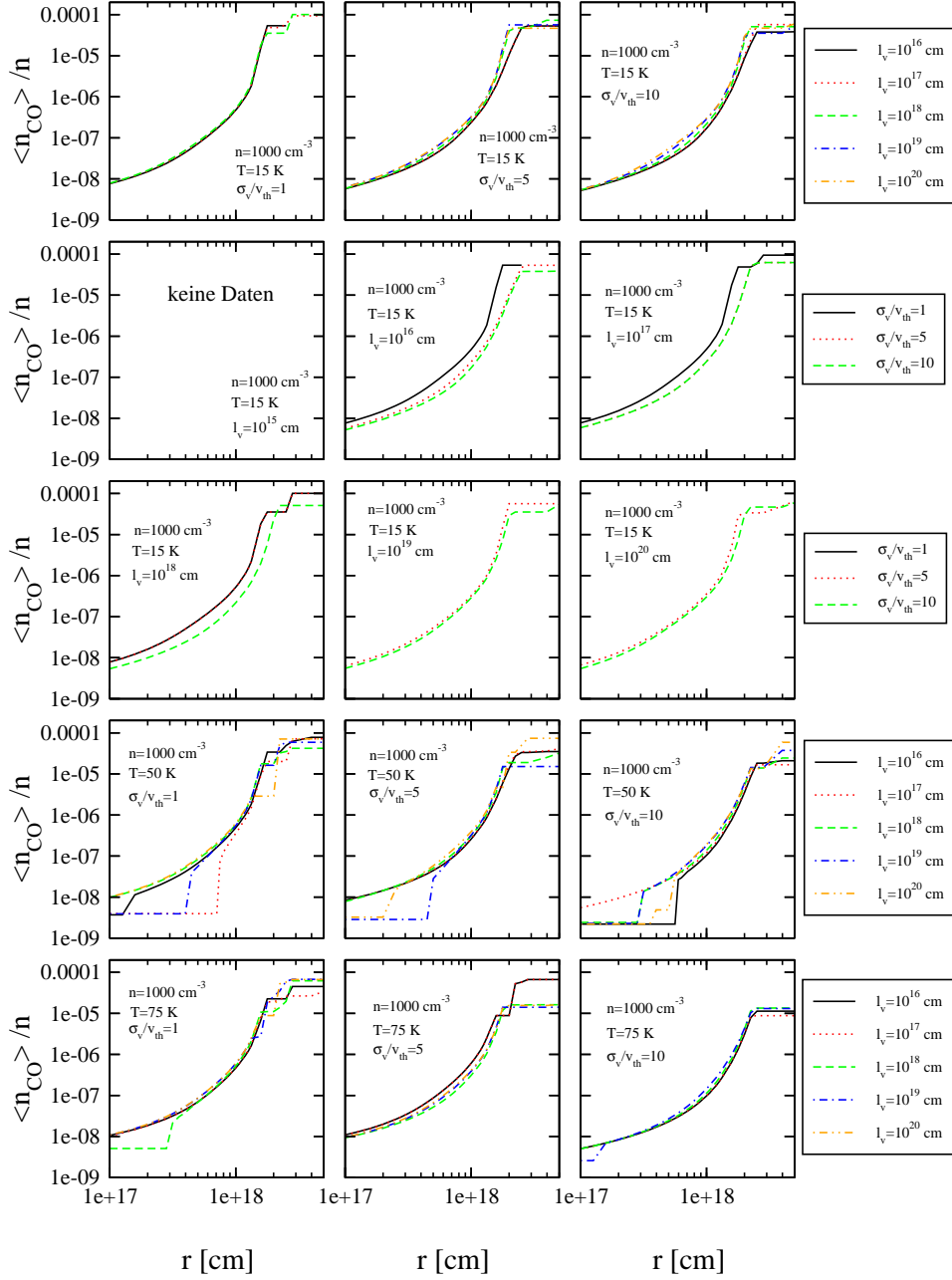
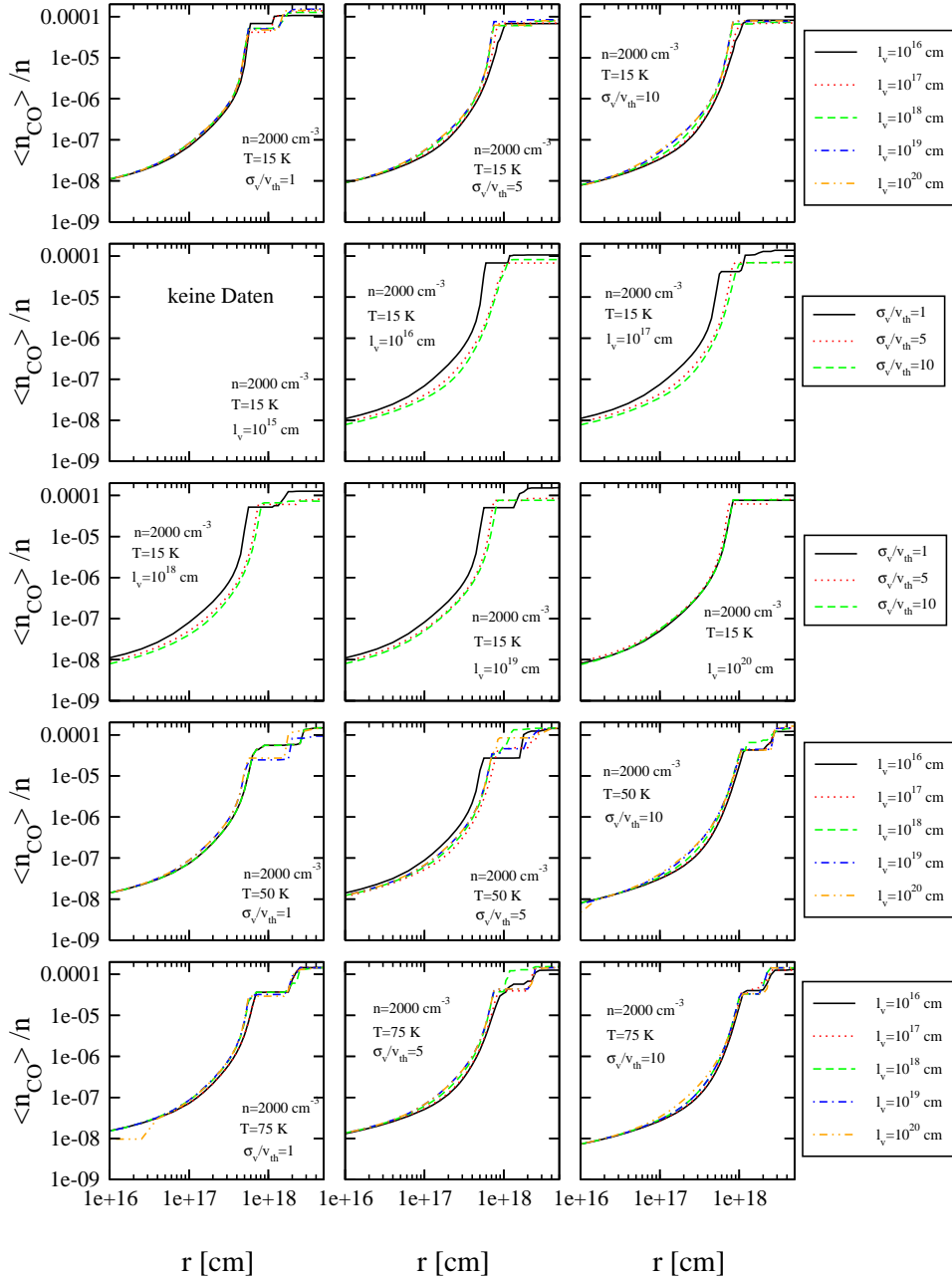
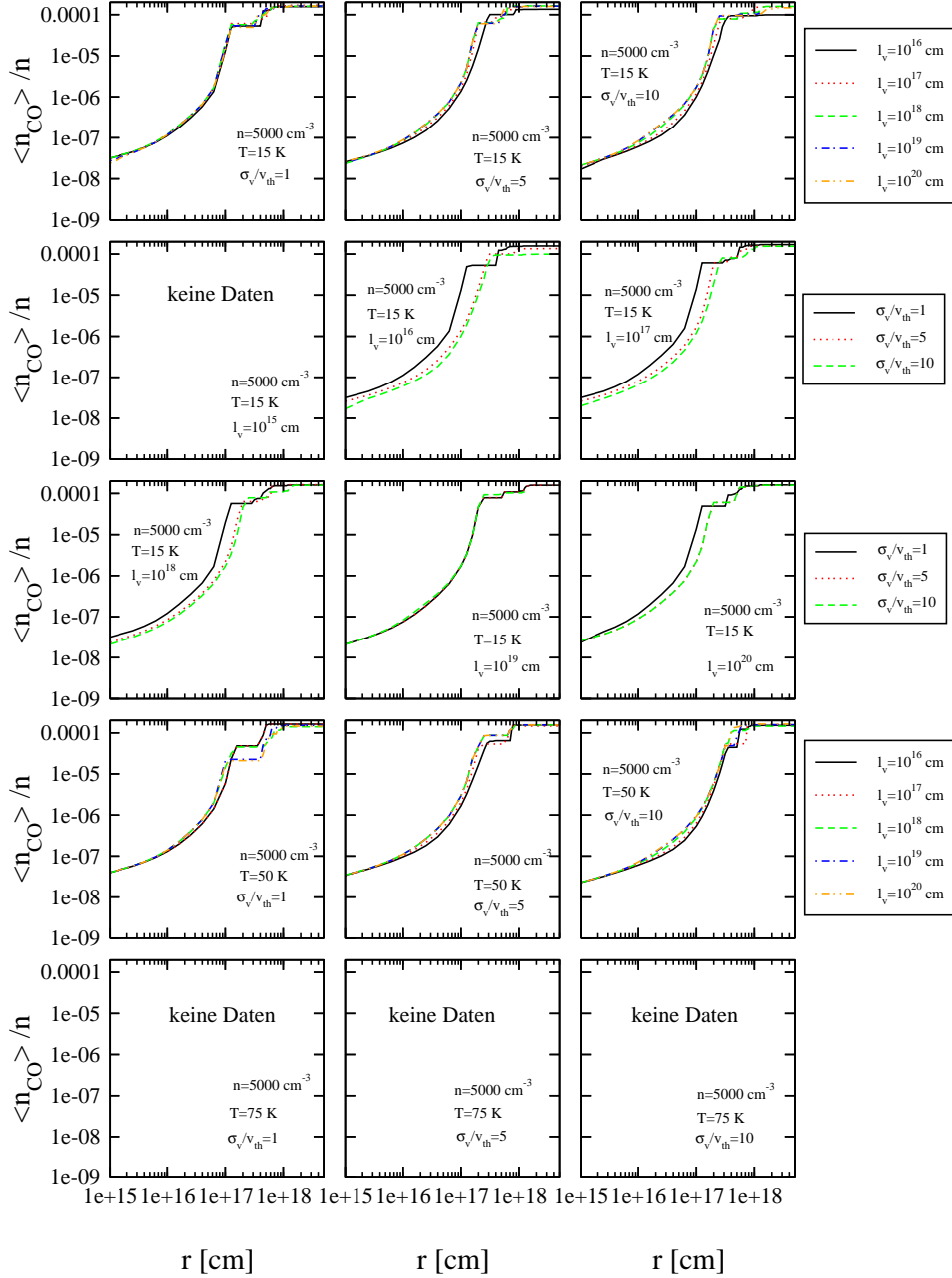


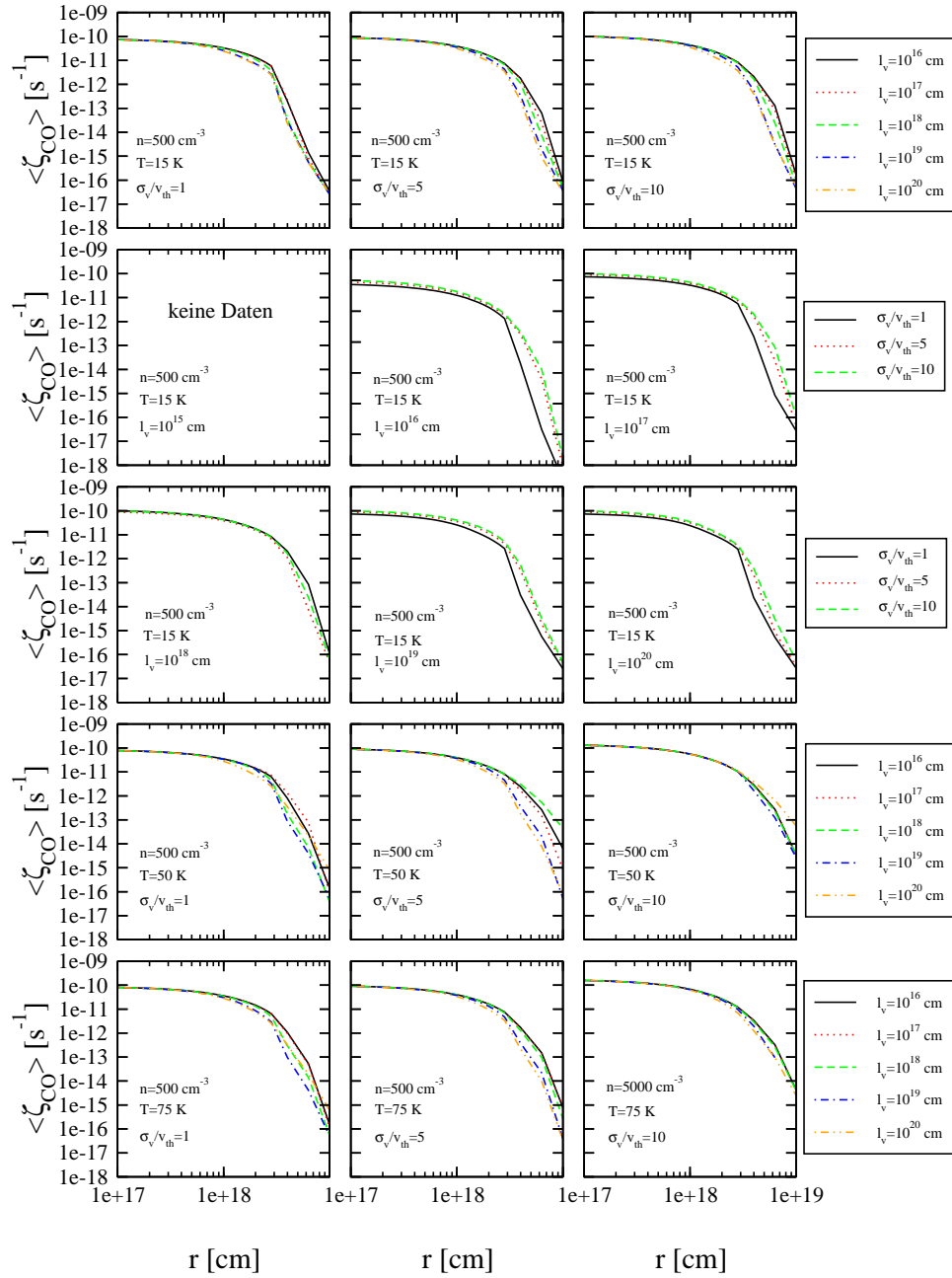
Abbildung 5.24: Chemische Struktur für $n = 1000, 2000, 5000$ cm⁻³, $\ell_v = 10^{16}$ cm, $\sigma/v_{\text{th}} = 10$ und $T = 15, 50$ und 75 K

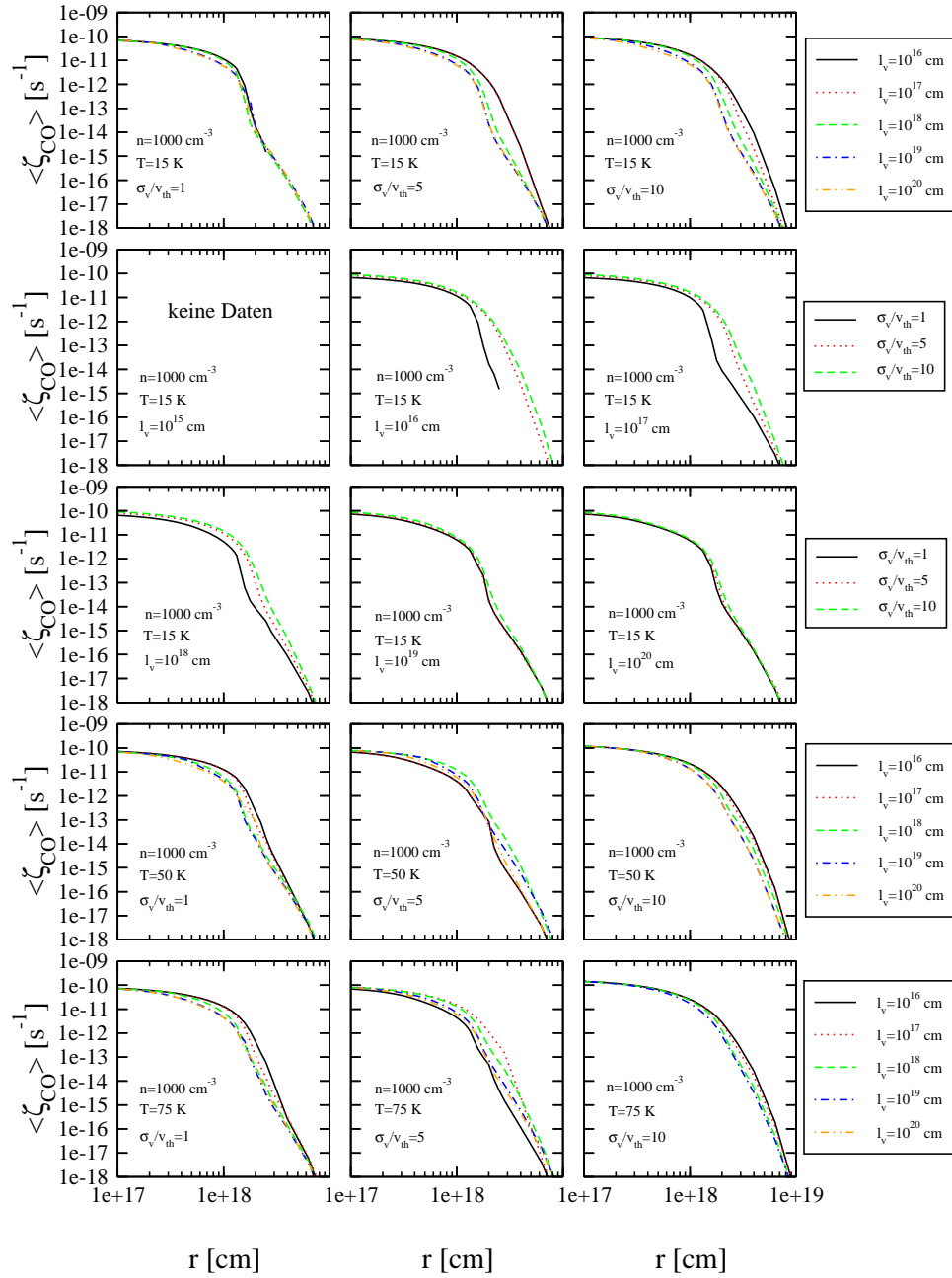
Abbildung 5.25: $\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 500 \text{ cm}^{-3}$

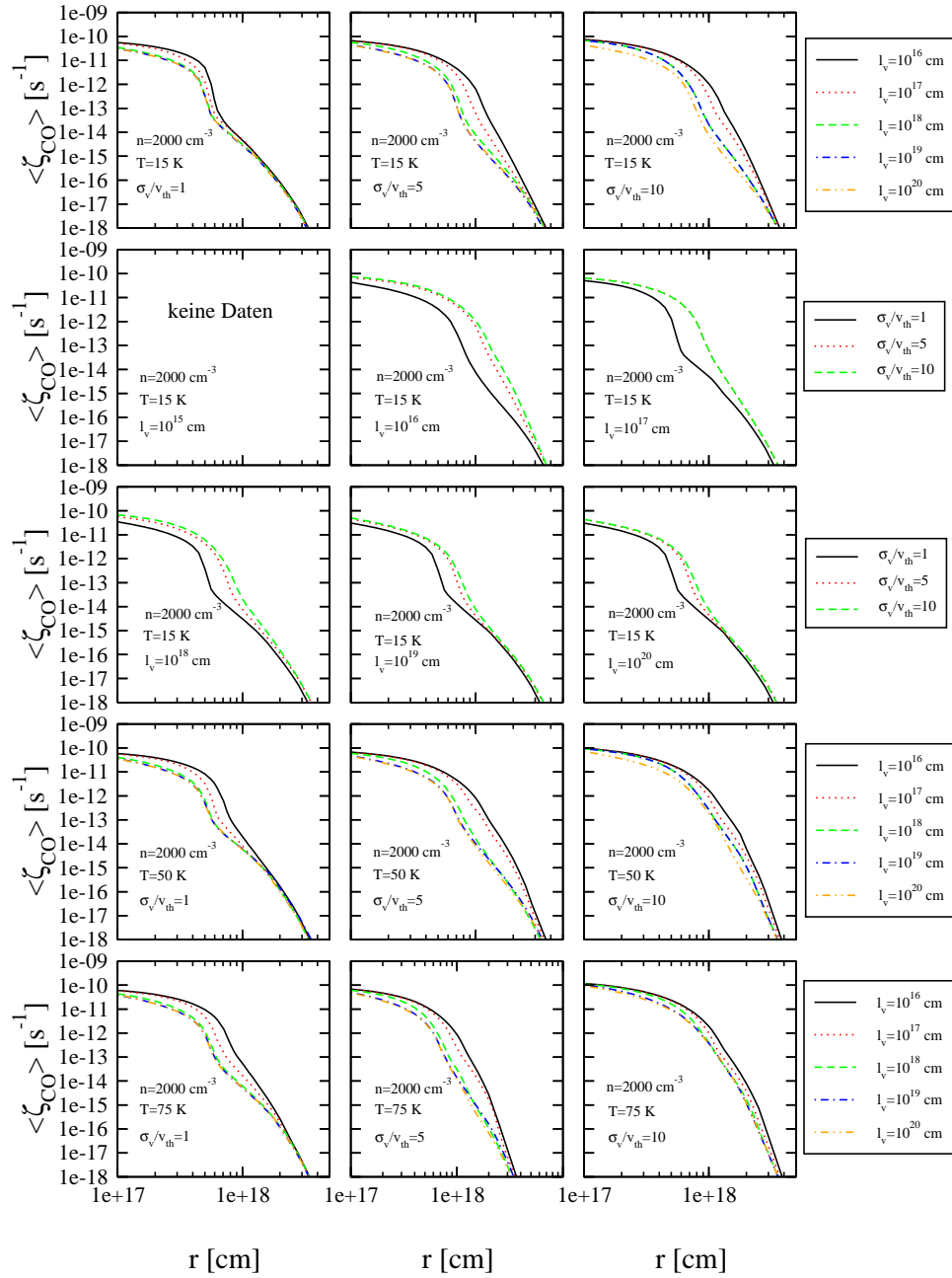
Abbildung 5.26: $\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 1000 \text{ cm}^{-3}$

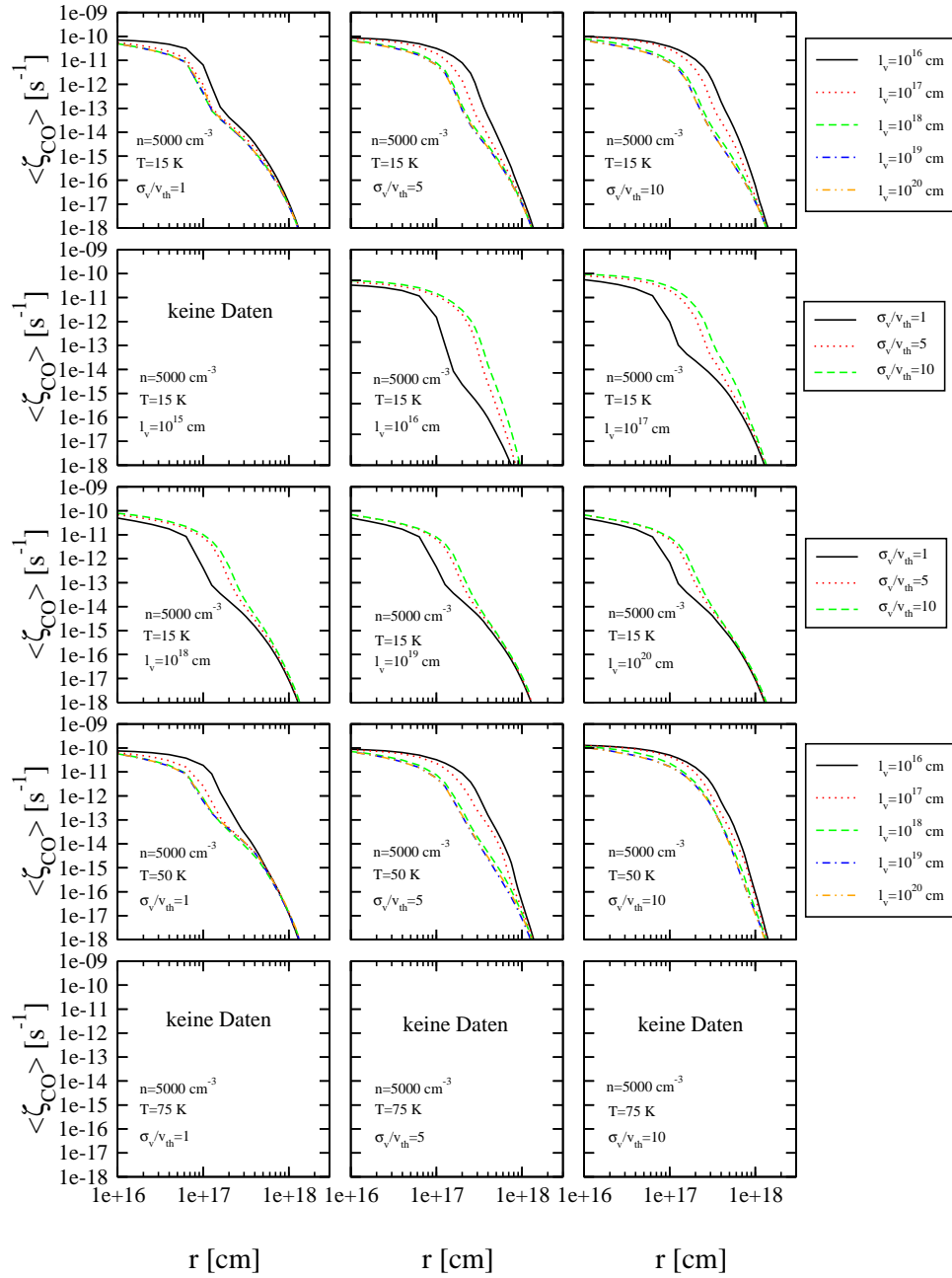
Abbildung 5.27: $\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$


 Abbildung 5.28: $\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 5000 \text{ cm}^{-3}$

Abbildung 5.29: $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 500 \text{ cm}^{-3}$

Abbildung 5.30: $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 1000 \text{ cm}^{-3}$

Abbildung 5.31: $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$

Abbildung 5.32: $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 5000 \text{ cm}^{-3}$

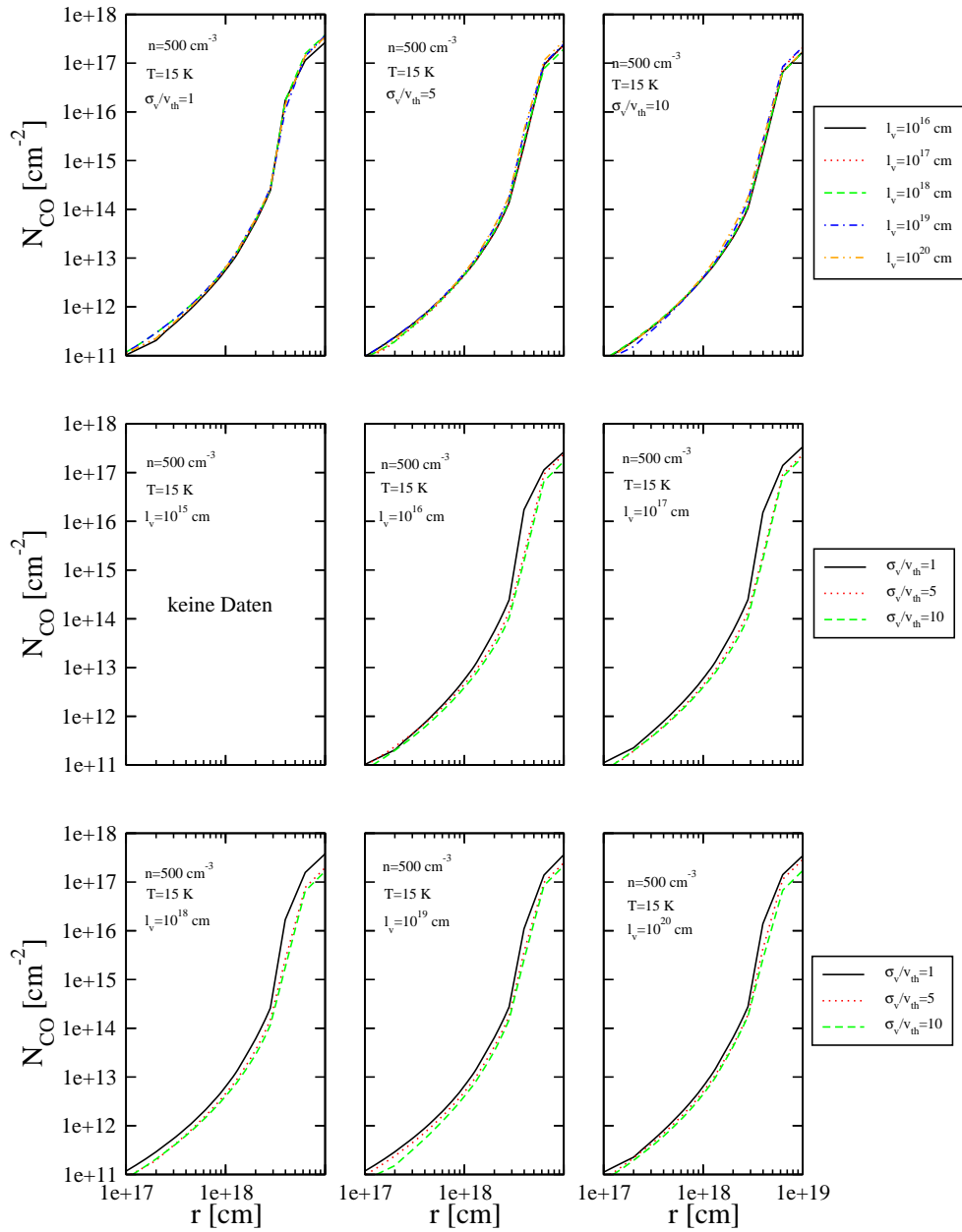
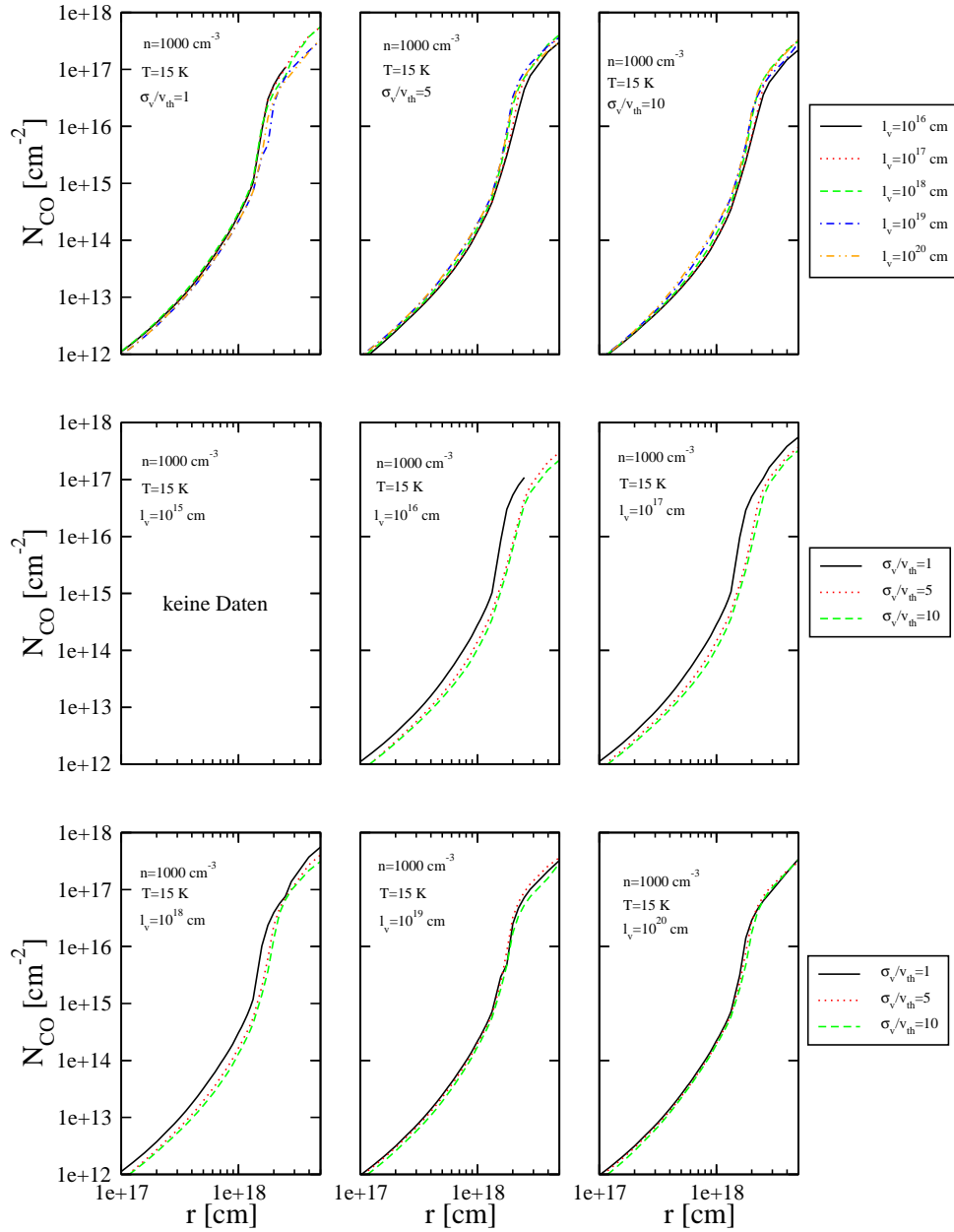


Abbildung 5.33: N_{CO} für $n = 500 \text{ cm}^{-3}$, $T = 15 \text{ K}$

Abbildung 5.34: N_{CO} für $n = 1000 \text{ cm}^{-3}$, $T = 15 \text{ K}$

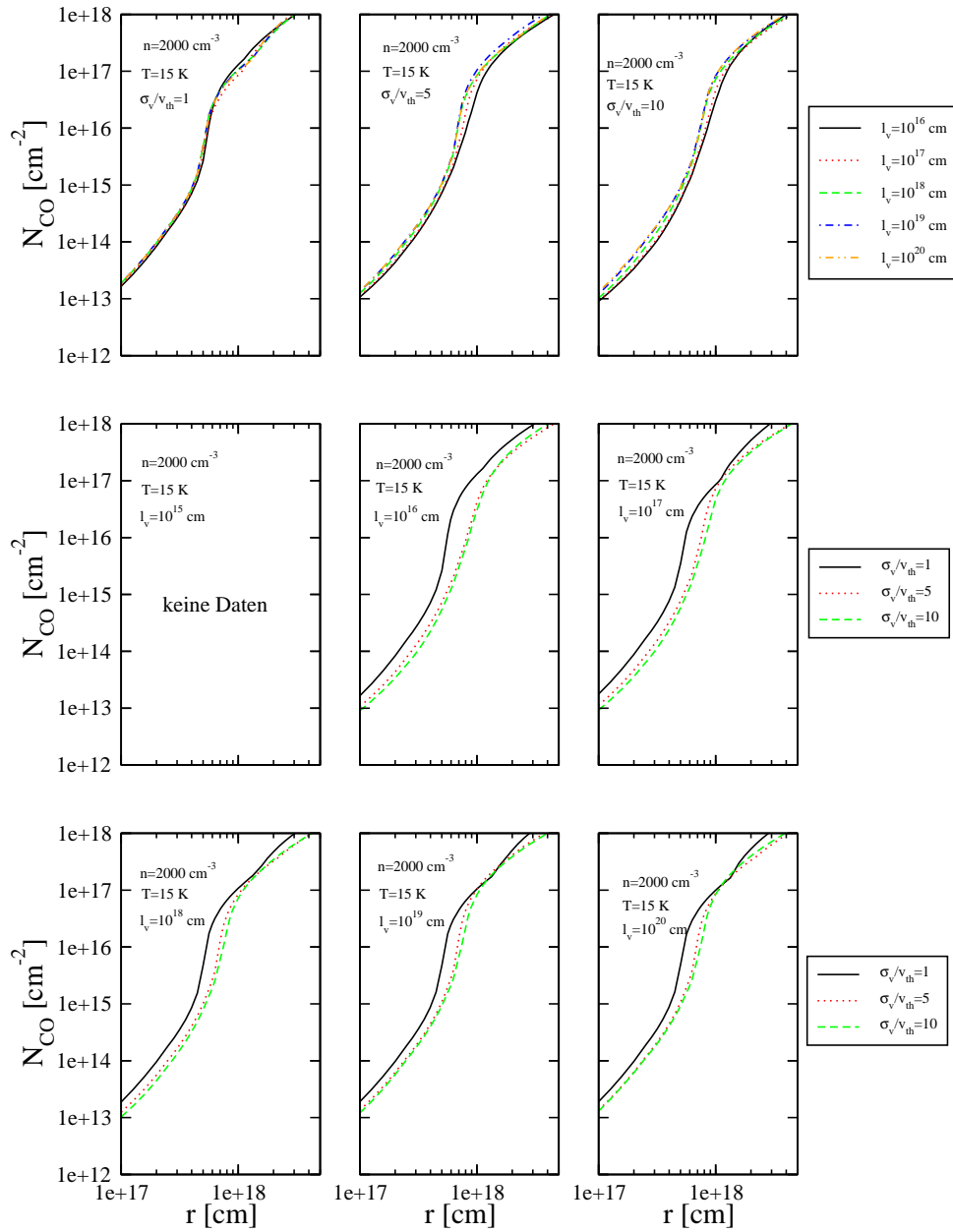
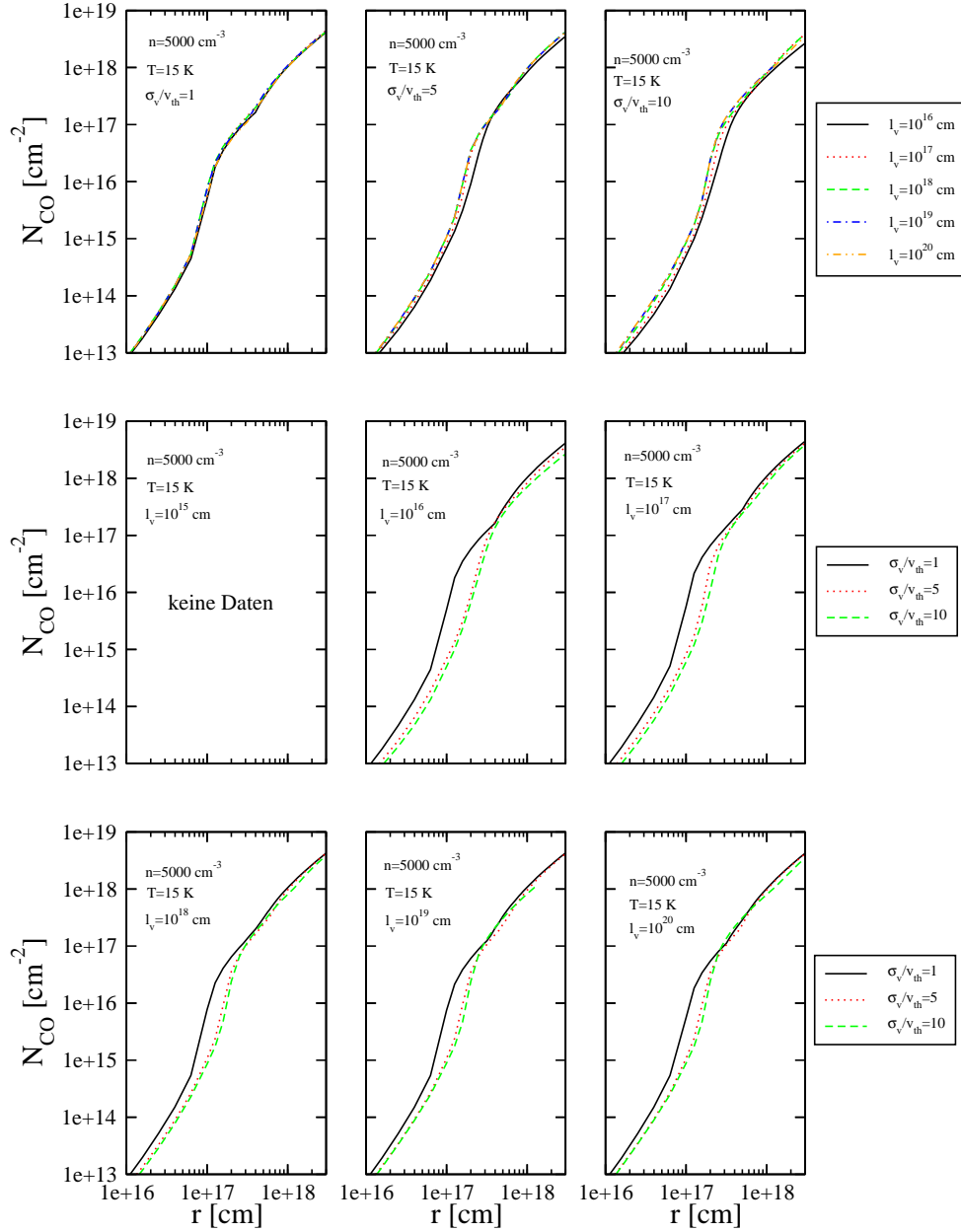


Abbildung 5.35: N_{CO} für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, $T = 15 \text{ K}$

Abbildung 5.36: N_{CO} für $n = 5000 \text{ cm}^{-3}$, $T = 15 \text{ K}$

5.2.2 NGC 2024

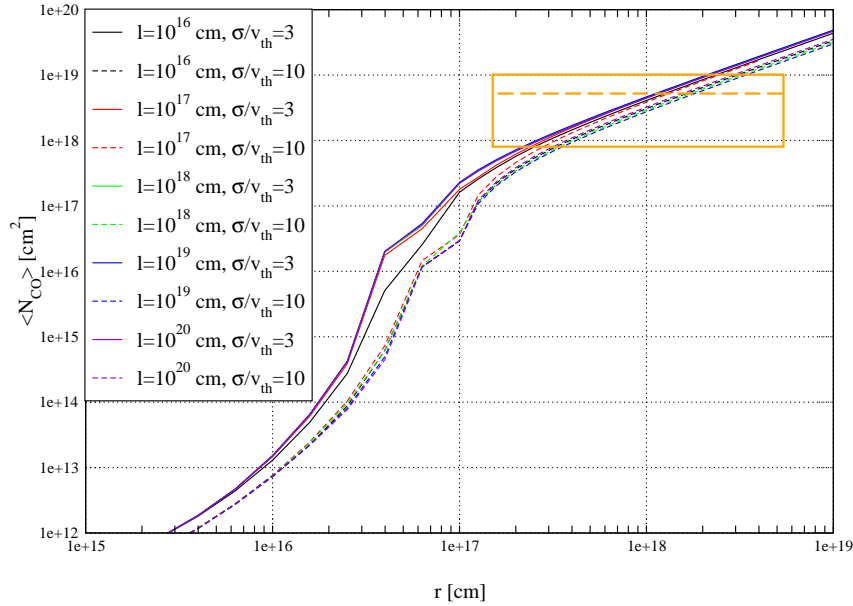


Abbildung 5.37: CO-Säulendichten von NGC 2024 für verschiedene Modelle

Abgesehen von Modellen mit Dichten zwischen 500 und 5000 Teilchen pro cm^{-3} haben wir zusätzlich einige Simulationen der Region NGC 2024 gemacht. Die Region NGC 2024 (Orion B, W12) ist ein komplexes Sternentstehungsgebiet in einer Entfernung von 415 pc. Seine komplizierte Struktur wurde beispielsweise von Barnes et al. (1989) ausführlich studiert. Er identifizierte eine dichte Molekülwolke, in der ein Haufen junger, hell infrarot strahlender Sterne eine expandierende HII Region erschaffen hat. Man nimmt an (Mezger et al. (1992)), dass diese HII Region in dem verdichteten Gas entlang seiner Ionisationsfront an einer Reihe von Stellen Sternentstehungen ausgelöst hat. Tatsächlich konnten bisher sieben protostellare Kondensationen (FIR1 bis FIR7) direkt vor der HII Region identifiziert werden. Aufgrund der geringen Entfernung und der hohen Anzahl junger, massereicher Sterne ist NGC 2024 eine der am intensivsten studierten Photodissoziationsregionen. Auch van Dishoeck & Black (1988) haben in ihrer Untersuchung Säulendichten, Dichte und Temperatur dieser Region modelliert. Sie erhielten folgende Werte:

$n_{\text{H}}(r)$	$700 \dots 3 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$
$A_{\text{v}}^{\text{tot}}$	16.7 mag
T	40 K
G_0	20
N_{H_2}	$1.3 \times 10^{22} \text{ cm}^2$
N_{HI}	$1.6 \times 10^{21} \text{ cm}^2$
N_{C}	$1.1 \times 10^{18} \text{ cm}^2$
N_{C^+}	$1.2 \times 10^{28} \text{ cm}^2$
N_{CO}	$2.6 \times 10^{18} \text{ cm}^2$
\mathcal{A}_{C}	$0.4 \times 4.68 \times 10^{-4}$

Tabelle 5.2: Von van Dishoeck berechnete Werte für NGC 2024. Die ersten vier Zeilen sind die vorgegebenen Modellparameter.

Giannini et al. (2000) haben durch die Auswertung von hohen CO-Rotationslinienverhältnissen mittels eines LVG-Codes¹⁶ Säulendichten von $N_{\text{H}_2} = 8 \times 10^{21} - 1 \times 10^{23} \text{ cm}^2$ und $N_{\text{CO}} = 8 \times 10^{17} - 1 \times 10^{19} \text{ cm}^2$ ermittelt. Sie haben eine Temperatur von 100 K und eine relative CO-Häufigkeit von 10^{-4} angesetzt. Aus dem Verhältnis von H₂-Säulen- zu Anzahldicke ermitteln sie eine Ausdehnung von 0.016 pc. Im Vergleich dazu beträgt der aus der Winkelausdehnung gewonnene Durchmesser ≈ 0.32 pc. Geht man von einer einigermaßen sphärischen Symmetrie aus, weichen beide Werte um den Faktor 20 voneinander ab¹⁷. Die Autoren deuten dies als starken Hinweis auf eine klumpige Struktur des warmen Gases, die notwendig sei, um die nötige Selbstabsorption zu produzieren. Nur so ließe sich eine hohe CO-Säulendichte trotz starken UV-Feldes erklären.

Eine weitere Möglichkeit zur Deutung dieser Daten, besteht in der Annahme von Geschwindigkeitsfluktuationen. Genau wie Dichtefluktuationen können sie dazu führen, dass die Photodissoziationsrate wesentlich schneller absinkt, als das in bisherigen Studien angenommen wurde. Wir haben auf Basis der Modellparameter von van Dishoeck & Black (1988) verschiedene Modelle von NGC 2024 gerechnet. In

¹⁶LVG: *large velocity gradient*.

¹⁷Das sind natürlich sehr grobe Schätzungen. Allein die Annahme der sphärischen Symmetrie ist in solch einer aktiven Region höchst fragwürdig. Außerdem haben wir im Verlauf der vorangegangenen Seiten gezeigt, dass die relative CO-Häufigkeit entlang eines Sehstrahls keineswegs konstant bleibt.

Abbildung 5.37 sind die CO-Säulendichten für verschiedene Turbulenzparameter aufgetragen. Der Bereich der CO-Säulendichte, der von Giannini et al. (2000) ermittelt wurde, ist durch das Rechteck in Orange gekennzeichnet. Die gestrichelte Linie zeigt den von van Dishoeck & Black (1988) berechneten Wert an. Ausgehend von den Säulendichten aus den beiden genannten Studien, ergeben sich mit unserem Modell die Werte aus Tabelle 5.3.

	Originalergebnisse	Unsere Ergebnisse
van Dishoeck	$A_v = 16.8 \text{ mag}$ $\odot = 0.4 \text{ pc}$	$A_v = 8 \dots 15 \text{ mag}$ $\odot = 0.19 \dots 0.33 \text{ pc}$
Giannini	$A_v = 3.8 \dots 47.5 \text{ mag}$ $\odot(n = 1 \times 10^6) = 0.0026 \dots 0.03 \text{ pc}$ $\odot(n = 3 \times 10^4) = 0.09 \dots 1.1 \text{ pc}$	$A_v = 1.5 \dots 25.7 \text{ mag}$ $\odot = 0.035 \dots 0.6 \text{ pc}$

Tabelle 5.3: Vergleich der Wolkenparameter für NGC 2024

Dabei wurde berücksichtigt, dass unsere Modelle nur eine Hälfte der Wolke abbilden. Die mit \odot gekennzeichneten Werte sind die ermittelten Wolkentiefen. Die Ergebnisse von Giannini sind ursprünglich nur für eine *angenommene* Dichte von $n = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$ angegeben worden. Wenn man stattdessen eine Dichte von $n = 3 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ unterstellt, erhält man die oben angegebenen Werte. Vergleicht man die Werte von van Dishoeck & Black (1988) mit unseren Ergebnissen, so sieht man den bereits beschriebenen Effekt der Überschätzung der Wolkenausdehnung. Der direkte Vergleich mit den Ergebnissen von Giannini et al. (2000) ist etwas schwieriger, da die verwendeten Wolkenmodelle stärker voneinander abweichen. Bei der von uns angenommenen Dichte von $3 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ rechnen sich die ermittelten Säulendichten jedoch in Durchmesser um, die sich nicht um Größenordnungen von unseren Ergebnissen unterscheiden. Der Unterschied zwischen dem Winkeldurchmesser an der Himmelsphäre und dem aus Säulendichten ermittelten Durchmesser ist nun nicht mehr so drastisch. Dabei unterstellen wir, dass wir den Winkeldurchmesser tatsächlich kennen. Die Bestimmung eines Wolkenradius ist jedoch keine einfache Aufgabe, da es schwierig ist, festzulegen wo die Wolke aufhört und wo das umliegende interstellare Medium anfängt. Wir übernehmen der Einfachheit halber die Werte aus Giannini et al. (2000).

Kapitel 6

Zusammenfassung

Seit 1988 ist bekannt, dass die Photodissoziation von CO-Molekülen durch Linienabsorption von UV-Photonen stattfindet. Wie jede Linienabsorption ist damit auch die Photodissoziation von CO abhängig von Geschwindigkeitsfeldern innerhalb des absorbierenden Mediums. Doppler-Verschiebung kann die Absorption in einen Frequenzbereich verschieben, in dem sich die lokale Intensität von der Intensität in der Linienmitte wesentlich unterscheidet. Jede Untersuchung, die sich mit der Bildung und Vernichtung von CO-Molekülen am Rand interstellarer Wolken beschäftigt, muss diese turbulenten Geschwindigkeitsfelder berücksichtigen. Da die Existenz von turbulenten Strömungen in interstellaren Molekülwolken unbestritten ist, wird in Untersuchungen üblicherweise der Dopplerparameter der Gaußschen Profelfunktion um eine Turbulenzgeschwindigkeit erweitert. Diese mikroturbulente Näherung ist die simpelste Möglichkeit zur Berücksichtigung von Turbulenz. In vorangegangenen Arbeiten (Albrecht, M.A., Kegel, W.H. (1987)), (Kegel, W.H., Piehler, G., Albrecht, M.A. (1993)), (Piehler, G., Kegel, W.H. (1995)) ist gezeigt worden, dass die Berücksichtigung eines turbulenten Geschwindigkeitsfeldes mit endlicher Korrelationslänge (*Mesoturbulenz*) jedoch wesentlich dazu beitragen kann, realistischere Linienprofile zu erhalten.

Während in den letzten Jahren einiger Aufwand betrieben wurde, die Berechnung der chemischen und thermischen Struktur einer Molekülwolke zu verfeinern, ist der Modellierung des zugrundegelegten Strahlungstransports weniger Aufmerksamkeit gewidmet worden. Die Ergebnisse unserer Rechnungen zeigen, dass die Berücksichtigung eines mesoturbulenten Strahlungstransports den Verlauf der CO-Häufig-

keit entlang des Sehstrahls wesentlich beeinflussen kann. Zusammengefasst haben wir folgende Ergebnisse erhalten:

- Rechnungen mit einem Einzellinien-Modell zeigen den großen Einfluss von Korrelationslänge und Turbulenzgeschwindigkeit auf den Verlauf der Photodissoziationsrate und damit auch auf die resultierende CO-Häufigkeit.
- Bei Mesoturbulenz werden die absorptionsrelevanten Linien schneller optisch dick als bei reiner Mikroturbulenz. Dadurch kann sich eine stabile Zone großer CO-Dichte in Tiefen bilden, von denen bisher angenommen wurde, sie würden eine zu große UV-Intensität aufweisen.
- Rechnungen, die das volle UV-Spektrum berücksichtigen, zeigen eine geringere Sensitivität der CO-Häufigkeit gegenüber Variationen der Turbulenzparameter als solche mit nur einer Linie. Trotzdem haben Korrelationslänge und Turbulenzgeschwindigkeit starken Einfluss auf die Tiefe, ab der eine stabile CO-Häufigkeit erreicht wird.
- Im Vergleich zu Rechnungen mit einer parametrisierten Photodissoziationswahrscheinlichkeit fällt im mesoturbulenten Fall ζ_{CO} wesentlich schneller ab. Das bedeutet, dass in größeren Tiefen der Wolke die Werte für ζ_{CO} um einige Größenordnungen voneinander abweichen können. Für Größe und Isotopenverhältnis des Wolkenmodells kann das zu einer signifikanten Überschätzung der wahren Werte führen.
- Das zugrundegelegte Modell der chemischen Reaktionen weist eine hohe Stabilität gegenüber Veränderungen der Turbulenzparameter auf. Auch wenn die CO-Häufigkeit davon relativ stark betroffen ist, wirken sich diese Veränderungen nur sehr langsam auf die chemische Gesamtstruktur der Wolke aus.
- Die Anwendung unserer Ergebnisse auf Beobachtungen von NGC 2024 zeigen, dass sich die Werte, die man für Dichte und Größe der Region aus den Modellen ermittelt, stark von dem zugrundegelegten Strahlungstransportmodell abhängen. Folgerungen, die aufgrund einer zu einfachen Modellierung gemacht werden, sind somit mit einiger Vorsicht zu betrachten.

Es zeigt sich, dass der numerische Aufwand, stochastische Strahlungstransportmodelle zu rechnen, durchaus gerechtfertigt ist. Möchte man die Bildung von CO-Molekülen am Rand einer interstellaren Molekülwolke genauer verstehen, muss eine endliche Korrelationslänge berücksichtigt werden. Es macht wenig Sinn, immer detailliertere chemische Modelle zu entwickeln und die wichtigen Effekte mesoturbulenten Strahlungstransports zu vernachlässigen.

Tabellenverzeichnis

4.1	Spektroskopische Parameter der $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ Linien	49
4.2	Spektroskopische Parameter der $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ und $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ Linien	50
4.3	Liste der Elemente des Wolkenmodells	59
4.4	Liste der Spezies des chemischen Netzwerkes	60
4.5	Modellparameter	65
5.1	Gesamte Photodissoziationswahrscheinlichkeit am Rand der Wolke	87
5.2	Von van Dishoeck & Black (1988) berechnete Werte für NGC 2024.	114
5.3	Vergleich der Wolkenparameter für NGC 2024	115
A.1	Abschirmungsfaktoren $\Theta[N(\text{H}_2)]$ für H_2	127
A.2	Abschirmungsfaktoren für CO	129
C.1	Liste aller Spezies, die im chemischen Netzwerk enthalten sind . . .	138
C.2	Gas-Gas-Reaktionen des chemischen Netzwerkes	140
C.3	Photoreaktionen des chemischen Netzwerkes	160

Abbildungsverzeichnis

1.1	Integrierte CO (2-1) Intensität in ρ Oph	10
1.2	<i>Channel maps</i> der CO (2-1) Emissionen in ρ Oph	11
1.3	Linienprofil der ^{12}CO (2-1) und ^{12}CO (3-2) Emissionen in CB24 . .	12
1.4	Karte der ^{12}CO (2-1) Emissionen in CB24	13
3.1	Verlauf von Geschwindigkeits und Dichtefluktuationen	32
4.1	Schematisches Energie-Level-Diagramm für eine $\Sigma \rightarrow \Pi$ -Bande . .	44
4.2	Absorptionskoeffizient für $3p\pi^1\Pi - X^1\Sigma^+ (0-0)$	45
4.3	Vergleich verschiedener Profilfunktionen	47
4.4	Termschema für einen Auger-Prozess	52
4.5	Prädissoziation des Übergangs $3p\sigma^1\Pi - X^1\Sigma(1-0)$	53
4.6	$\langle \zeta \rangle$ einzelner enger Banden	54
4.7	Absorptionspektrum von C^{18}O , ^{13}CO , CO , H_2 und H	57
4.8	Abschirmungsfaktoren von H_2 und CO	61
4.9	H_2 -Bildungsratenkoeffizient auf Stauboberflächen	62
4.10	Schematischer Aufbau des Molekülwolkenmodells	64
5.1	$\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für verschiedene σ und ℓ_v	71
5.2	Abknickpunkt von $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $\sigma/v_{\text{th}} = 10$	72
5.3	$\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ und $\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für verschiedene Gesamtdichten.	73
5.4	Dichteabhängigkeit von $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$	74

5.5	Temperaturabhängigkeit der CO-Dichte	76
5.6	$\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 1000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie	78
5.7	$\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie	79
5.8	$\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 5000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie	80
5.9	$\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 1000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie	81
5.10	$\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie	82
5.11	$\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 5000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie	83
5.12	Wachstumskurve für $n = 1000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie	84
5.13	Wachstumskurve für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie	85
5.14	Wachstumskurve für $n = 5000 \text{ cm}^{-3}$, Einzellinie	86
5.15	$\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ und Dichteverlauf für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, $T=15\text{K}$, und $\sigma/v_{\text{th}} = 10$	89
5.16	$\langle \zeta \rangle$ aller breiten Banden für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, $T=15\text{K}$	90
5.17	$\langle \zeta \rangle$ einzelner breiter Banden für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, $T=15\text{K}$	91
5.18	$\langle \zeta \rangle$ einzelner enger Banden für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, $T=15\text{K}$	91
5.19	Schnittpunkte der <i>schmalen</i> Anteile mit den <i>breiten</i> Anteilen von $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$	92
5.20	$\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $\ell_v = 10^{16} \dots 10^{20} \text{ cm}$ und $\sigma/v_{\text{th}} = 1$ und 10	93
5.21	Vergleich der $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ mit <i>shielding Faktoren</i>	94
5.22	Vergleich der Dichte und $\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ aus <i>shielding Faktoren</i> und Strahlungstransport	95
5.23	Chemische Struktur einer Wolke mit $n=2000$	98
5.24	Chemische Struktur für $n = 1000, 2000, 5000 \text{ cm}^{-3}$, $\ell_v = 10^{16} \text{ cm}$, $\sigma/v_{\text{th}} = 10$ und $T=15, 50$ und 75 K	99
5.25	$\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 500 \text{ cm}^{-3}$	100
5.26	$\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 1000 \text{ cm}^{-3}$	101
5.27	$\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$	102
5.28	$\langle n_{\text{CO}} \rangle / n$ für $n = 5000 \text{ cm}^{-3}$	103

5.29	$\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 500 \text{ cm}^{-3}$	104
5.30	$\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 1000 \text{ cm}^{-3}$	105
5.31	$\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$	106
5.32	$\langle \zeta_{\text{CO}} \rangle$ für $n = 5000 \text{ cm}^{-3}$	107
5.33	N_{CO} für $n = 500 \text{ cm}^{-3}$, $T=15 \text{ K}$	108
5.34	N_{CO} für $n = 1000 \text{ cm}^{-3}$, $T=15 \text{ K}$	109
5.35	N_{CO} für $n = 2000 \text{ cm}^{-3}$, $T=15 \text{ K}$	110
5.36	N_{CO} für $n = 5000 \text{ cm}^{-3}$, $T=15 \text{ K}$	111
5.37	N_{rmCO} von NGC 2024 für verschiedene Modelle	113
B.1	Absorptionsbanden 7A bis 15C	132
B.2	Absorptionsbanden 16 bis 23	133
B.3	Absorptionsbanden 25 bis $^3\Pi$	134
B.4	Absorptionsbanden $3p\sigma^1\Sigma(4-0)$ bis 41	135
C.1	Chemische Struktur für $n = 1000, 2000, 5000 \text{ cm}^{-3}$ und $T=15,50$ und 75 K , $n_i/n = 10^{-9} \dots 1$, $\ell_v = 10^{16} \text{ cm}$, $\sigma/v_{\text{th}} = 10$	163
C.2	Chemische Struktur für $n = 1000, 2000, 5000 \text{ cm}^{-3}$ und $T=15,50$ und 75 K , $n_i/n = 10^{-16} \dots 10^{-9}$, $\ell_v = 10^{16} \text{ cm}$, $\sigma/v_{\text{th}} = 10$	164

Anhang A

Shieldingfaktoren

Alle Abschirmungsfaktoren stammen von Lee et al. (1996).

H₂ – Faktoren

Tabelle A.1: Abschirmungsfaktoren $\Theta[N(\text{H}_2)]$ für H₂

N_{H_2} (cm ⁻²)	$\Theta[N(\text{H}_2)]$	N_{H_2} (cm ⁻²)	$\Theta[N(\text{H}_2)]$	N_{H_2} (cm ⁻²)	$\Theta[N(\text{H}_2)]$
0.000(00)	0.100(01)	0.539(18)	0.688(-03)	0.906(21)	0.774(-07)
0.369(12)	0.998(00)	0.894(18)	0.538(-03)	0.963(21)	0.568(-07)
0.372(13)	0.985(00)	0.138(19)	0.435(-03)	0.101(22)	0.439(-07)
0.395(14)	0.876(00)	0.216(19)	0.347(-03)	0.107(22)	0.323(-07)
0.123(15)	0.720(00)	0.333(19)	0.277(-03)	0.112(22)	0.238(-07)
0.254(15)	0.573(00)	0.502(19)	0.220(-03)	0.118(22)	0.175(-07)
0.434(15)	0.446(00)	0.740(19)	0.175(-03)	0.125(22)	0.125(-07)
0.665(15)	0.343(00)	0.903(19)	0.155(-03)	0.133(22)	0.839(-08)
0.669(15)	0.342(00)	0.132(20)	0.121(-03)	0.143(22)	0.503(-08)
0.908(15)	0.273(00)	0.181(20)	0.967(-04)	0.158(22)	0.238(-08)
0.123(16)	0.211(00)	0.245(20)	0.771(-04)	0.185(22)	0.626(-09)
0.163(16)	0.162(00)	0.325(20)	0.615(-04)	0.213(22)	0.165(-09)
0.210(16)	0.124(00)	0.422(20)	0.490(-04)	0.230(22)	0.740(-10)
0.236(16)	0.108(00)	0.537(20)	0.391(-04)	0.239(22)	0.482(-10)

Tabelle A.1: (Fortsetzung)

N_{H_2} (cm^{-2})	$\Theta[N(H_2)]$	N_{H_2} (cm^{-2})	$\Theta[N(H_2)]$	N_{H_2} (cm^{-2})	$\Theta[N(H_2)]$
0.290(16)	0.845(-01)	0.672(20)	0.311(-04)	0.246(22)	0.347(-10)
0.321(16)	0.741(-01)	0.828(20)	0.247(-04)	0.252(22)	0.263(-10)
0.385(16)	0.577(-01)	0.989(20)	0.200(-04)	0.257(22)	0.207(-10)
0.464(16)	0.442(-01)	0.119(21)	0.158(-04)	0.262(22)	0.166(-10)
0.555(16)	0.339(-01)	0.140(21)	0.124(-04)	0.271(22)	0.110(-10)
0.660(16)	0.262(-01)	0.164(21)	0.977(-05)	0.279(22)	0.751(-11)
0.786(16)	0.205(-01)	0.191(21)	0.763(-05)	0.289(22)	0.483(-11)
0.937(16)	0.161(-01)	0.220(21)	0.593(-05)	0.300(22)	0.286(-11)
0.112(17)	0.126(-01)	0.251(21)	0.458(-05)	0.314(22)	0.153(-11)
0.135(17)	0.999(-02)	0.285(21)	0.351(-05)	0.330(22)	0.732(-12)
0.164(17)	0.794(-02)	0.321(21)	0.268(-05)	0.350(22)	0.309(-12)
0.202(17)	0.634(-02)	0.360(21)	0.203(-05)	0.372(22)	0.113(-12)
0.252(17)	0.509(-02)	0.402(21)	0.153(-05)	0.398(22)	0.359(-13)
0.319(17)	0.409(-02)	0.446(21)	0.114(-05)	0.428(22)	0.969(-14)
0.413(17)	0.328(-02)	0.492(21)	0.852(-06)	0.464(22)	0.204(-14)
0.544(17)	0.264(-02)	0.539(21)	0.633(-06)	0.513(22)	0.262(-15)
0.732(17)	0.213(-02)	0.589(21)	0.469(-06)	0.594(22)	0.892(-17)
0.101(18)	0.172(-02)	0.639(21)	0.348(-06)	0.820(22)	0.304(-20)
0.143(18)	0.140(-02)	0.691(21)	0.257(-06)	0.102(23)	0.174(-22)
0.209(18)	0.113(-02)	0.743(21)	0.191(-06)		
0.312(18)	0.910(-03)	0.796(21)	0.141(-06)		
0.474(18)	0.734(-03)	0.850(21)	0.105(-06)		

CO – Abschirmungsfaktoren

Tabelle A.2: Abschirmungsfaktoren für CO. Die Faktoren für Selbstabschirmung Θ_1 , Abschirmung durch H_2 Θ_2 und Abschirmung durch Staub Θ_3 sind separat dargestellt.

N_{CO} (cm^{-2})	$\Theta_1[N(CO)]$	N_{H_2} (cm^{-2})	$\Theta_2[N(H_2)]$	A_v	$\Theta_3[A_v]$
0.000(00)	0.100(01)	0.000(00)	0.100(01)	0.000(00)	0.100(01)
0.100(13)	0.999(00)	0.267(14)	0.100(01)	0.100(-06)	0.100(00)
0.165(13)	0.998(00)	0.380(15)	0.989(00)	0.100(-05)	0.100(00)
0.300(13)	0.996(00)	0.663(16)	0.968(00)	0.100(-04)	0.100(00)
0.598(13)	0.991(00)	0.883(17)	0.947(00)	0.100(-03)	0.999(00)
0.131(14)	0.982(00)	0.927(18)	0.914(00)	0.100(-02)	0.989(00)
0.317(14)	0.960(00)	0.101(19)	0.912(00)	0.109(-02)	0.988(00)
0.849(14)	0.913(00)	0.202(19)	0.897(00)	0.217(-02)	0.976(00)
0.246(15)	0.809(00)	0.304(19)	0.886(00)	0.326(-02)	0.964(00)
0.792(15)	0.628(00)	0.405(19)	0.878(00)	0.434(-02)	0.952(00)
0.167(16)	0.481(00)	0.507(19)	0.872(00)	0.543(-02)	0.941(00)
0.260(16)	0.389(00)	0.608(19)	0.866(00)	0.651(-02)	0.931(00)
0.444(16)	0.283(00)	0.710(19)	0.861(00)	0.760(-02)	0.920(00)
0.601(16)	0.229(00)	0.811(19)	0.857(00)	0.869(-02)	0.910(00)
0.895(16)	0.170(00)	0.934(19)	0.852(00)	0.100(-01)	0.898(00)
0.133(17)	0.122(00)	0.101(20)	0.850(00)	0.109(-01)	0.891(00)
0.166(17)	0.102(00)	0.203(20)	0.826(00)	0.217(-01)	0.808(00)
0.227(17)	0.776(-01)	0.304(20)	0.812(00)	0.326(-01)	0.742(00)
0.312(17)	0.593(-01)	0.406(20)	0.801(00)	0.434(-01)	0.688(00)
0.427(17)	0.455(-01)	0.508(20)	0.792(00)	0.543(-01)	0.640(00)
0.584(17)	0.351(-01)	0.609(20)	0.784(00)	0.651(-01)	0.599(00)
0.800(17)	0.273(-01)	0.711(20)	0.777(00)	0.760(-01)	0.562(00)
0.110(18)	0.214(-01)	0.812(20)	0.770(00)	0.869(-01)	0.528(00)
0.150(18)	0.170(-01)	0.935(20)	0.763(00)	0.100(00)	0.492(00)
0.206(18)	0.136(-01)	0.102(21)	0.758(00)	0.109(00)	0.470(00)
0.282(18)	0.109(-01)	0.203(21)	0.709(00)	0.217(00)	0.276(00)

Tabelle A.2: (Fortsetzung)

N_{CO} (cm^{-2})	$\Theta_1[N(\text{CO})]$	N_{H_2} (cm^{-2})	$\Theta_2[N(\text{H}_2)]$	A_v	$\Theta_3[A_v]$
0.424(18)	0.827(-02)	0.305(21)	0.671(00)	0.326(00)	0.171(00)
0.639(18)	0.628(-02)	0.406(21)	0.638(00)	0.434(00)	0.108(00)
0.962(18)	0.477(-02)	0.508(21)	0.607(00)	0.543(00)	0.701(-01)
0.145(19)	0.361(-02)	0.609(21)	0.579(00)	0.651(00)	0.459(-01)
0.218(19)	0.270(-02)	0.711(21)	0.552(00)	0.760(00)	0.304(-01)
0.329(19)	0.199(-02)	0.812(21)	0.527(00)	0.869(00)	0.202(-01)
0.412(19)	0.166(-02)	0.936(21)	0.498(00)	0.100(01)	0.125(-01)
0.568(19)	0.126(-02)	0.102(22)	0.479(00)	0.109(01)	0.913(-02)
0.784(19)	0.933(-03)	0.203(22)	0.284(00)	0.217(01)	0.213(-03)
0.108(20)	0.674(-03)	0.305(22)	0.153(00)	0.326(01)	0.627(-05)
0.128(20)	0.560(-03)	0.406(22)	0.777(-01)	0.434(01)	0.211(-06)
0.168(20)	0.412(-03)	0.508(22)	0.395(-01)	0.543(01)	0.763(-08)
0.220(20)	0.298(-03)	0.609(22)	0.209(-01)	0.651(01)	0.287(-09)
0.254(20)	0.249(-03)	0.711(22)	0.120(-01)	0.760(01)	0.110(-10)
0.322(20)	0.183(-03)	0.812(22)	0.767(-02)	0.869(01)	0.427(-12)
0.409(20)	0.132(-03)	0.936(22)	0.533(-02)	0.100(02)	0.841(-14)
0.519(20)	0.947(-04)	0.102(23)	0.467(-02)	0.109(02)	0.651(-15)
0.589(20)	0.789(-04)				
0.736(20)	0.567(-04)				
0.827(20)	0.473(-04)				
0.925(20)	0.397(-04)				
0.103(21)	0.333(-04)				
0.115(21)	0.279(-04)				
0.128(21)	0.233(-04)				
0.142(21)	0.194(-04)				
0.158(21)	0.162(-04)				

Anhang B

Bandenprofile

Bei der Berechnung der Linienprofile der Absorptionsbanden haben wir ein Voigt-Profil angesetzt. Die Rotationsniveaus wurden in allen gerechneten Modellen bis $J=4$ berücksichtigt, und mit einer Temperatur von 15 Kelvin thermisch besetzt. Alle spektroskopischen Daten wurden aus Arbeiten von Eidelsberg & Rostas (1990), Eidelsberg et al. (1991), Eidelsberg et al. (1992) und Warin et al. (1996) entnommen.

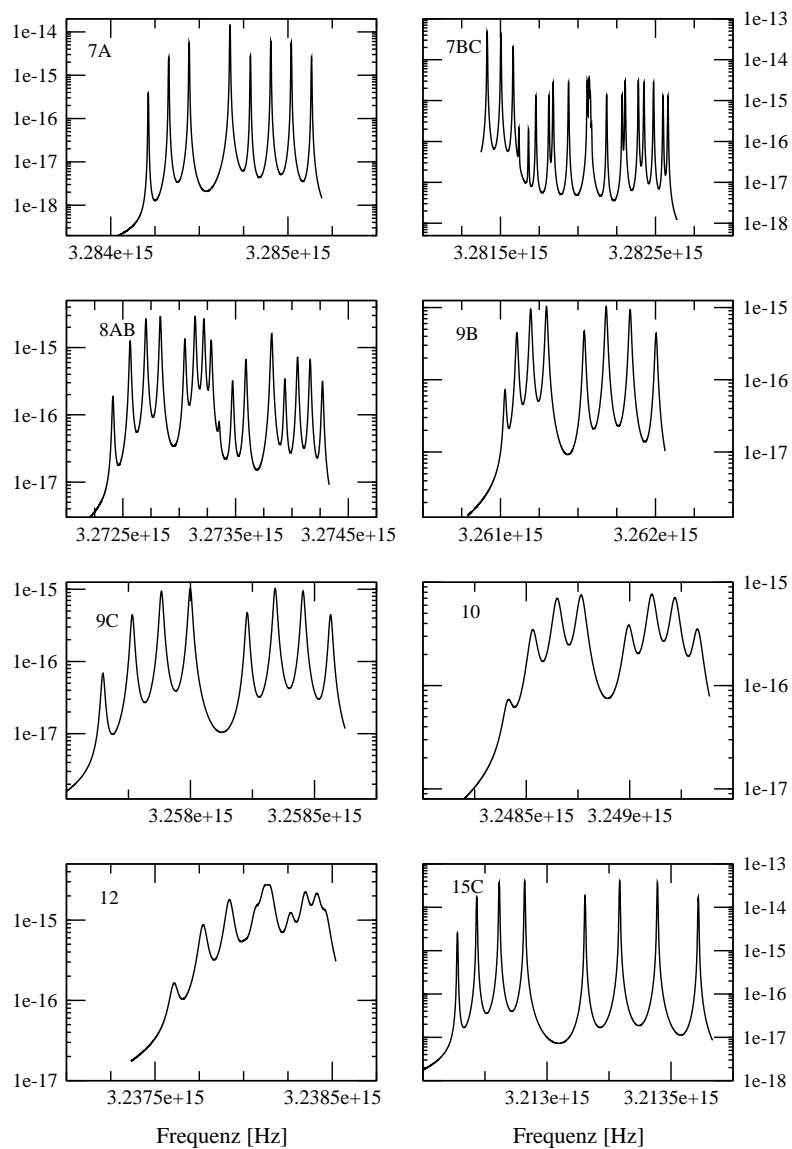


Abbildung B.1: Absorptionsbanden 7A bis 15C von CO für $T_{kin} = 50\text{K}$ und $T_{ex} = 15\text{K}$

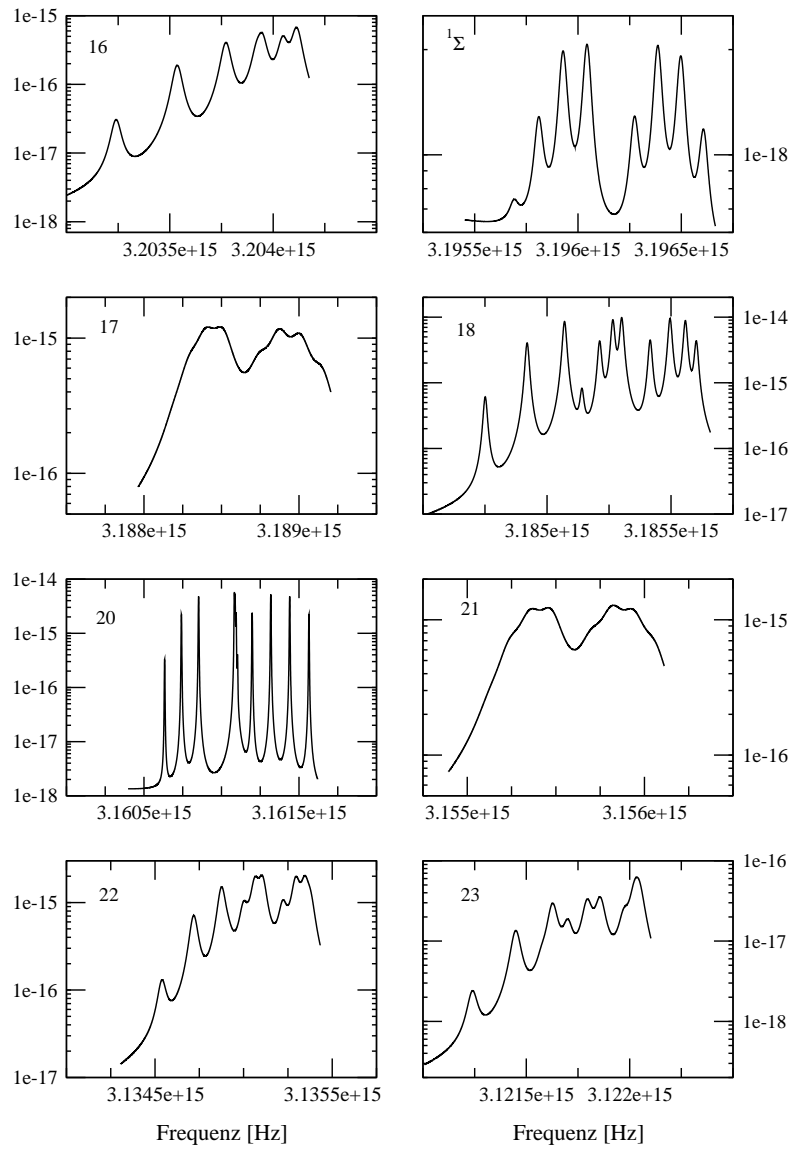


Abbildung B.2: Absorptionsbanden 16 bis 23 von CO für $T_{kin} = 50\text{K}$ und $T_{ex} = 15\text{K}$

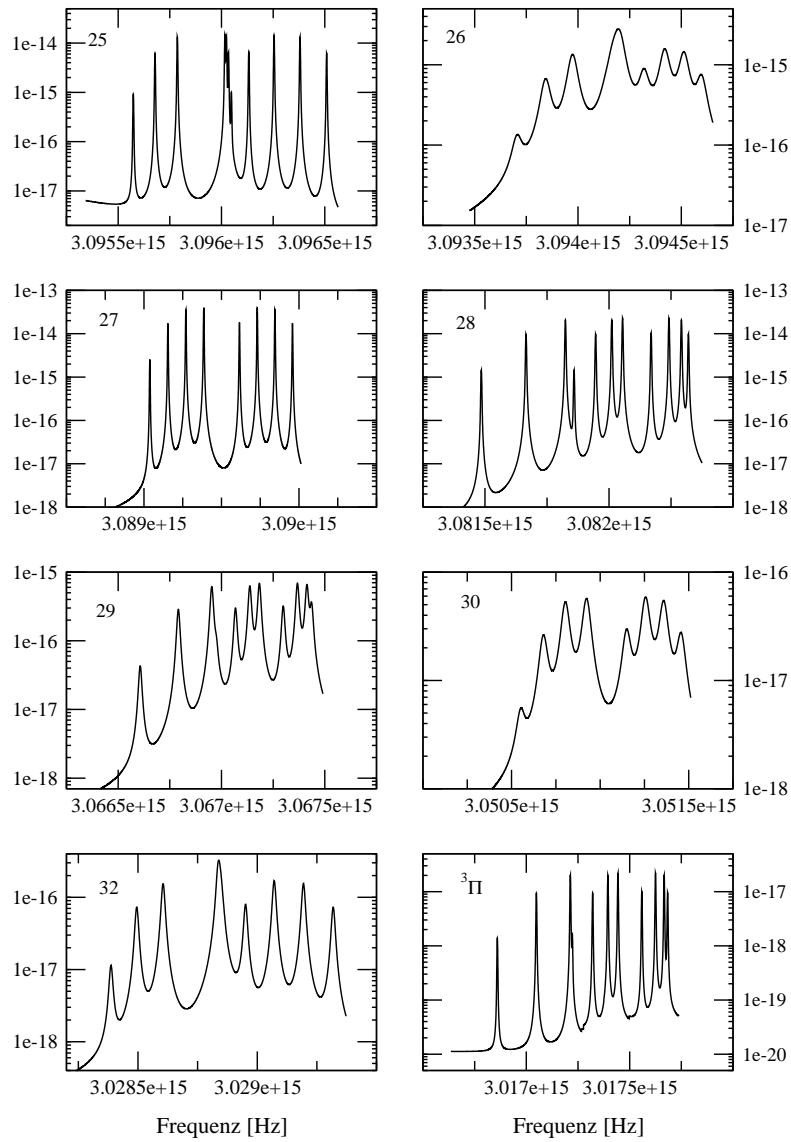


Abbildung B.3: Absorptionsbanden 25 bis $^3\Pi$ von CO für $T_{kin} = 50K$ und $T_{ex} = 15K$

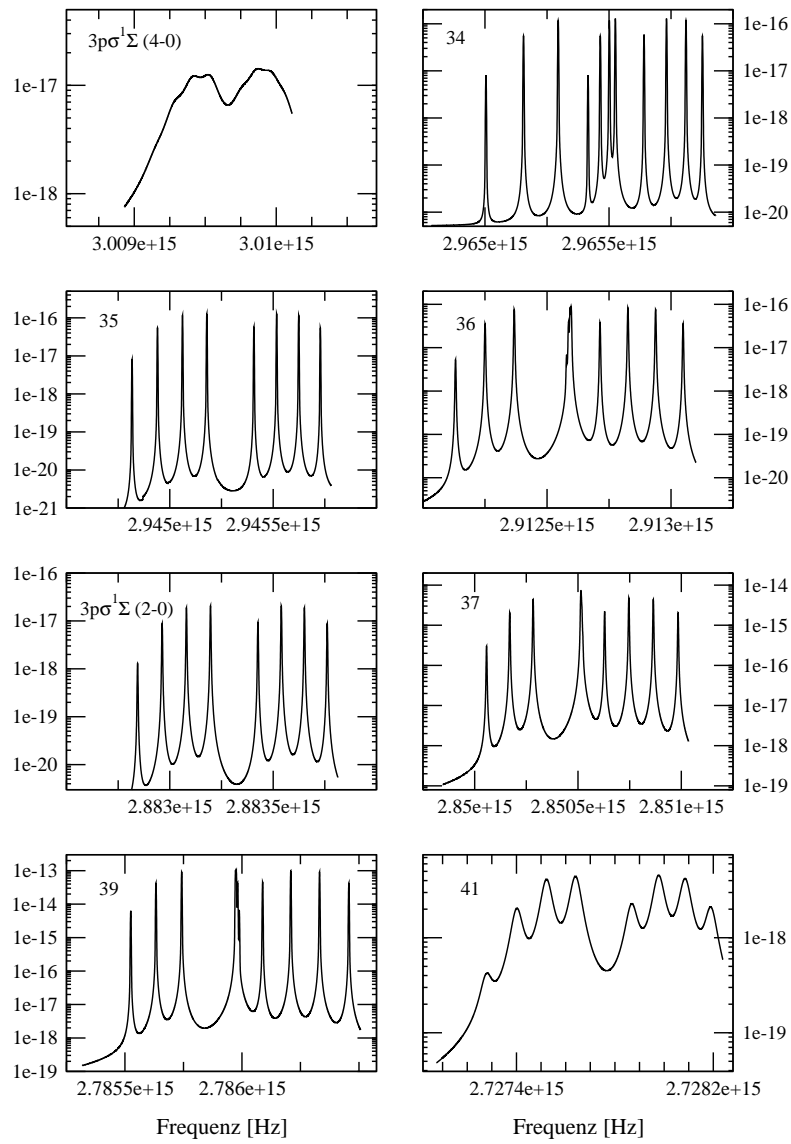


Abbildung B.4: Absorptionsbanden $3p\sigma^1\Sigma(4-0)$ bis 41 von CO für $T_{kin} = 50K$ und $T_{ex} = 15K$

Anhang C

Chemische Reaktionsraten

Die Ratengleichung lautet

$$n_i \left\{ \tilde{\zeta}_i + \sum_q n_q k_{qi} \right\} = \sum_r \sum_s k_{rs} n_r n_s + \sum_t n_t \tilde{\zeta}_{ti} , \quad (\text{C.1})$$

ζ wird in Einheiten von s^{-1} angegeben, alle anderen k in Einheiten von $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$. Die Photodissoziationswahrscheinlichkeit ζ ist abhängig vom UV-Feld am Ort z innerhalb der Wolke.

Die folgenden Tabellen führen die im chemischen Netzwerk berücksichtigten Reaktionen mit ihren entsprechenden Koeffizienten auf. Beispielhaft sind für alle temperaturabhängigen Reaktionen die endgültigen Koeffizienten für die Temperatur von 15, 50 und 300 Kelvin angegeben. Bei den Reaktionsraten, die von der Tiefe innerhalb der Wolke abhängen, sind exemplarisch zwei verschiedene Werte angegeben. Die Reaktionen sind der *UMIST-Datenbank für Astrochemie 1995*¹ entnommen, die insgesamt 3864 Gasphasenreaktionen von 395 Spezies mit 12 beteiligten Elementen (H, He, C, N, O, Na, Mg, Si, P, S, Cl, Fe) enthält. Dabei haben wir uns auf die 4 Elemente H, He, C und O beschränkt. Obwohl neutrales Helium als Edelgas an keiner chemischen Reaktion teilnimmt, stellt He^+ einen wichtigen Reaktionspartner in wesentlichen Reaktionen dar. Weiterhin haben wir uns bei der Auswahl der beteiligten Spezies auf 38 (siehe C.1) beschränkt. In der UMIST-Datenbank werden zu jeder Reaktion drei Koeffizienten k_1, k_2, k_3 angegeben, aus denen sich die

¹T.J.Millar et.al, 1997, A&A Suppl. **121**, 121

An dem chemischen Netz beteiligte Spezies									
CO	C	O	CH	H	H ₂	OH	H ₂ O	O ₂	CH ₂
CH ₃	CO ⁺	C ⁺	O ⁺	CH ⁺	H ⁺	H ₂ ⁺	OH ⁺	H ₂ O ⁺	O ₂ ⁺
CH ₂ ⁺	CH ₃ ⁺	H ₃ ⁺	H ₃ O ⁺	HCO ⁺	He	He ⁺	CH ₄	CH ₄ ⁺	e ⁻
CH ₅ ⁺	H ₂ CO	H ₂ CO ⁺	HCO	C ⁻	H ⁻	O ⁻	OH ⁻		

Tabelle C.1: Liste aller Spezies, die im chemischen Netzwerk enthalten sind

endgültigen Reaktionsratenkoeffizienten folgendermaßen ermitteln:

$$k = k_1 \cdot \left(\frac{T}{300K} \right)^{k_2} e^{(-k_3/T)} \text{cm}^3 \text{s}^{-1} \quad (\text{C.2})$$

für Zwei-Körper Reaktionen, mit der kinetischen Gastemperatur T,

$$\Lambda = k_1 \text{cm}^{-1} \quad (\text{C.3})$$

für direkte Ionisation durch Kosmische Strahlung (v_{cr}),

$$\Lambda = k_1 e^{-k_3 A_v} \text{cm}^{-1} \quad (\text{C.4})$$

für interstellare Photoreaktionen, wobei k_1 die Rate im nicht abgeschirmten UV-Feld ist, und der Parameter k_3 die Staubabsorption des UV-Feldes berücksichtigt, und

$$\Lambda = k_1 \frac{k_3}{1 - \omega} \text{cm}^{-1} \quad (\text{C.5})$$

für durch kosmische Strahlung induzierte Photoreaktionen² ($v_{\text{cr}}^{\text{UV}}$) mit der Staub-Albedo ω , typischerweise 0.6 bei 150 nm, k_3 , ist die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten dieser Reaktion pro Ionisation durch Kosmische Strahlung. (Siehe auch Gredel et al. (1989).)

Anschließend an Tabelle C.3 sind die Ergebnisse verschiedener Modellrechnungen in den Abbildungen C.1 und C.2 für verschiedene Dichten und Temperaturen

²Auch in tieferen Schichten der Wolke existiert ein Fluss von FUV-Photonen, die bei dem Zerfall von elektronisch angeregten Wasserstoffmolekülen entstehen. Dieses angeregte H₂ wird durch Stöße von H₂ mit den energiereichen Sekundärelektronen, die in Folge der Ionisation von H₂ durch kosmische Strahlung entstehen, produziert (Prasad & Tarafdar (1983)). Diese Photonen werden durch Staub, Atome und Moleküle in Photoionisations- und Photodissoziationsreaktionen absorbiert.

gezeigt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind die Häufigkeiten jedes Modells auf zwei Diagramme verteilt worden. Die Abbildung C.1 deckt dabei den relativen Häufigkeitsbereich von $10^{-9} \dots 1$ ab, Abbildung C.2 von $10^{-16} \dots 10^{-9}$.

Tabelle C.2: Gas-Gas-Reaktionen des chemischen Netzwerks mit drei beispielhaften Reaktionsraten bei T=15, 50 und 300 K.

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
H + H ₂	→ H + H + H	4.67(-07)	-1.00	55000.0	0.00(00)	0.00(00)	1.12(-86)
H + C	→ CH + v	1.00(-17)	0.00	0.0	1.00(-17)	1.00(-17)	1.00(-17)
H + CH	→ C + H ₂	4.98(-11)	0.00	0.0	4.98(-11)	4.98(-11)	4.98(-11)
H + CH	→ C + H + H	6.00(-09)	0.00	40200.0	0.00(00)	0.00(00)	3.83(-67)
H + CH ₂	→ CH + H ₂	2.70(-10)	0.00	0.0	2.70(-10)	2.70(-10)	2.70(-10)
H + CH ₃	→ CH ₂ + H ₂	1.00(-10)	0.00	7600.0	9.07(-231)	9.71(-77)	9.95(-22)
H + O	→ OH + v	9.90(-19)	-0.38	0.0	3.09(-18)	1.96(-18)	9.90(-19)
H + CH ₄	→ H ₂ + CH ₃	5.82(-13)	3.00	4045.0	5.59(-134)	1.98(-50)	8.11(-19)
H + OH	→ H ₂ + O	7.00(-14)	2.80	1950.0	5.55(-74)	5.36(-33)	1.05(-16)
H + OH	→ O + H + H	6.00(-09)	0.00	50900.0	0.00(00)	0.00(00)	1.24(-82)
H + H ₂ O	→ OH + H ₂	6.83(-12)	1.60	9720.0	2.14(-295)	1.45(-97)	5.80(-26)
H + H ₂ O	→ OH + H + H	5.80(-09)	0.00	52900.0	0.00(00)	0.00(00)	1.52(-85)
H + CO	→ C + OH	1.10(-10)	0.50	77700.0	0.00(00)	0.00(00)	3.62(-123)
H + HCO	→ CO + H ₂	1.50(-10)	0.00	0.0	1.50(-10)	1.50(-10)	1.50(-10)
H + H ₂ CO	→ HCO + H ₂	1.50(-11)	1.05	1650.0	1.09(-60)	1.06(-26)	6.13(-14)
H + O ₂	→ OH + O	3.30(-10)	0.00	8460.0	3.77(-255)	1.09(-83)	1.87(-22)
H + O ₂	→ O + O + H	6.00(-09)	0.00	52300.0	0.00(00)	0.00(00)	1.16(-84)
H ₂ + e ⁻	→ H + e ⁻ + H	3.22(-09)	0.35	102000.0	0.00(00)	0.00(00)	7.04(-157)
H ₂ + H ₂	→ H + H + H ₂	1.00(-08)	0.00	84100.0	0.00(00)	0.00(00)	1.79(-130)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$\text{H}_2 + \text{C}$	$\longrightarrow \text{CH}_2 + \text{v}$	1.00(-17)	0.00	0.0	1.00(-17)	1.00(-17)	1.00(-17)
$\text{H}_2 + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}_2 + \text{H}$	2.38(-10)	0.00	1760.0	2.63(-61)	1.23(-25)	6.74(-13)
$\text{H}_2 + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{C} + \text{H} + \text{H}_2$	6.00(-09)	0.00	40200.0	0.00(00)	0.00(00)	3.83(-67)
$\text{H}_2 + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_3 + \text{H}$	5.18(-11)	0.17	6400.0	1.56-196	9.83(-67)	2.81(-20)
$\text{H}_2 + \text{CH}_3$	$\longrightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$	6.86(-14)	2.74	4740.0	1.08-154	3.41(-57)	9.43(-21)
$\text{H}_2 + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	1.55(-12)	1.60	1660.0	1.11(-62)	3.36(-28)	6.13(-15)
$\text{H}_2 + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{O} + \text{H} + \text{H}_2$	6.00(-09)	0.00	50900.0	0.00(00)	0.00(00)	1.24(-82)
$\text{H}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{OH} + \text{H} + \text{H}_2$	5.80(-09)	0.00	52900.0	0.00(00)	0.00(00)	1.52(-85)
$\text{H}_2 + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{OH} + \text{OH}$	3.16(-10)	0.00	21890.0	0.00(00)	2.32-200	6.47(-42)
$\text{H}_2 + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{O} + \text{O} + \text{H}_2$	6.00(-09)	0.00	52300.0	0.00(00)	0.00(00)	1.16(-84)
$\text{C} + \text{H}_2$	$\longrightarrow \text{CH} + \text{H}$	6.64(-10)	0.00	11700.0	0.00(00)	1.57-111	7.67(-27)
$\text{C} + \text{O}$	$\longrightarrow \text{CO} + \text{v}$	2.10(-19)	0.00	0.0	2.10(-19)	2.10(-19)	2.10(-19)
$\text{C} + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{CO} + \text{H}$	1.10(-10)	0.50	0.0	2.46(-11)	4.49(-11)	1.10(-10)
$\text{C} + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{CH} + \text{O}$	2.25(-11)	0.50	14800.0	0.00(00)	2.58-140	8.45(-33)
$\text{C} + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{CH} + \text{CO}$	1.00(-11)	0.00	0.0	1.00(-11)	1.00(-11)	1.00(-11)
$\text{C} + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{CO} + \text{O}$	3.30(-11)	0.00	0.0	3.30(-11)	3.30(-11)	3.30(-11)
$\text{CH} + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}_2 + \text{CH}_3$	2.28(-11)	0.70	3000.0	3.88(-99)	5.70(-38)	1.04(-15)
$\text{CH} + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{HCO} + \text{H}$	1.44(-11)	0.50	5000.0	5.53-157	2.19(-55)	8.32(-19)
$\text{CH} + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{CH}_2 + \text{CO}$	2.87(-12)	0.70	500.0	1.18(-27)	3.72(-17)	5.42(-13)
$\text{CH} + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{CH}_2 + \text{HCO}$	9.21(-12)	0.70	2000.0	1.40(-70)	1.12(-29)	1.17(-14)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
CH + O ₂	→ HCO + O	1.44(-11)	0.50	3000.0	4.46(-99)	5.15(-38)	6.54(-16)
CH ₂ + CH ₂	→ CH + CH ₃	4.00(-10)	0.00	5000.0	6.87-155)	1.49(-53)	2.31(-17)
CH ₂ + CH ₄	→ CH ₃ + CH ₃	7.13(-12)	0.00	5050.0	4.37-158)	9.76(-56)	3.49(-19)
CH ₂ + HCO	→ CH ₃ + CO	3.00(-11)	0.00	0.0	3.00(-11)	3.00(-11)	3.00(-11)
CH ₂ + H ₂ CO	→ CH ₃ + HCO	3.30(-13)	0.00	3270.0	6.96-108)	1.31(-41)	6.09(-18)
CH ₃ + H ₂ O	→ CH ₄ + OH	1.20(-14)	2.90	7480.0	5.47-235)	7.11(-82)	1.78(-25)
CH ₃ + HCO	→ CH ₄ + CO	2.00(-10)	0.00	0.0	2.00(-10)	2.00(-10)	2.00(-10)
CH ₃ + H ₂ CO	→ CH ₄ + HCO	6.80(-12)	0.00	4450.0	9.81-141)	1.51(-50)	2.46(-18)
O + H ₂	→ OH + H	3.43(-13)	2.67	3160.0	3.72-108)	1.02(-42)	9.14(-18)
O + CH	→ CO + H	6.60(-11)	0.00	0.0	6.60(-11)	6.60(-11)	6.60(-11)
O + CH	→ HCO ⁺ + e ⁻	2.00(-11)	0.44	0.0	5.35(-12)	9.09(-12)	2.00(-11)
O + CH	→ OH + C	2.52(-11)	0.00	2381.0	2.91(-80)	5.25(-32)	9.01(-15)
O + CH ₂	→ CH + OH	4.98(-10)	0.00	6000.0	9.54-184)	3.82(-62)	1.03(-18)
O + CH ₂	→ HCO + H	1.44(-11)	0.50	2000.0	4.00(-70)	2.50(-29)	1.83(-14)
O + CH ₂	→ CO + H + H	2.00(-10)	0.00	0.0	2.00(-10)	2.00(-10)	2.00(-10)
O + CH ₃	→ H ₂ CO + H	1.40(-10)	0.00	0.0	1.40(-10)	1.40(-10)	1.40(-10)
O + O	→ O ₂ + ν	4.90(-20)	1.58	0.0	4.31(-22)	2.89(-21)	4.90(-20)
O + CH ₄	→ CH ₃ + OH	8.32(-12)	1.56	4270.0	1.83-137)	4.14(-50)	5.48(-18)
O + OH	→ O ₂ + H	4.34(-11)	-0.50	30.0	2.63(-11)	5.83(-11)	3.93(-11)
O + H ₂ O	→ OH + OH	1.85(-11)	0.95	8571.0	7.50-261)	1.21(-86)	7.23(-24)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
O + HCO	→ OH + CO	5.00(-11)	0.00	0.0	5.00(-11)	5.00(-11)	5.00(-11)
O + H ₂ CO	→ HCO + OH	1.78(-11)	0.57	1390.0	1.84(-52)	5.41(-24)	1.73(-13)
OH + CH ₂	→ CH ₃ + O	1.44(-11)	0.50	3000.0	4.46(-99)	5.15(-38)	6.54(-16)
OH + CH ₂	→ H ₂ O + CH	1.44(-11)	0.50	3000.0	4.46(-99)	5.15(-38)	6.54(-16)
OH + CH ₂	→ H ₂ CO + H	3.00(-11)	0.00	0.0	3.00(-11)	3.00(-11)	3.00(-11)
OH + CH ₃	→ H ₂ O + CH ₂	5.42(-11)	0.70	1000.0	7.42(-41)	3.19(-20)	1.93(-12)
OH + CH ₃	→ CH ₄ + O	3.22(-14)	2.20	2240.0	6.18(-82)	2.19(-35)	1.84(-17)
OH + CH ₄	→ H ₂ O + CH ₃	8.87(-13)	1.83	1400.0	1.08(-55)	2.31(-26)	8.34(-15)
OH + OH	→ H ₂ O + O	1.65(-12)	1.14	50.0	1.93(-15)	7.87(-14)	1.40(-12)
OH + HCO	→ H ₂ O + CO	1.70(-10)	0.00	0.0	1.70(-10)	1.70(-10)	1.70(-10)
OH + H ₂ CO	→ H ₂ O + HCO	4.98(-11)	1.00	601.0	9.90(-30)	5.00(-17)	6.72(-12)
HCO + HCO	→ H ₂ CO + CO	5.00(-11)	0.00	0.0	5.00(-11)	5.00(-11)	5.00(-11)
O ₂ + CH ₂	→ HCO + OH	4.10(-11)	0.00	750.0	7.91(-33)	1.25(-17)	3.37(-12)
O ₂ + CH ₂	→ H ₂ CO + O	1.44(-11)	0.50	3500.0	1.49(-113)	2.34(-42)	1.23(-16)
O ₂ + CH ₃	→ H ₂ CO + OH	5.50(-13)	0.00	4500.0	2.83(-143)	4.51(-52)	1.68(-19)
H ⁺ + H	→ H ₂ ⁺ + v	2.00(-20)	1.00	0.0	1.00(-21)	3.33(-21)	2.00(-20)
H ⁺ + H-	→ H + H	2.30(-07)	-0.50	0.0	1.03(-06)	5.63(-07)	2.30(-07)
H ⁺ + H ₂	→ H ₂ ⁺ + H	1.00(-10)	0.00	21200.0	0.00(00)	7.23(-195)	2.04(-41)
H ⁺ + C-	→ H + C	2.30(-07)	-0.50	0.0	1.03(-06)	5.63(-07)	2.30(-07)
H ⁺ + CH	→ CH ⁺ + H	1.90(-09)	0.00	0.0	1.90(-09)	1.90(-09)	1.90(-09)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$\text{H}^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{H}_2$	1.40(-09)	0.00	0.0	1.40(-09)	1.40(-09)	1.40(-09)
$\text{H}^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{H}$	1.40(-09)	0.00	0.0	1.40(-09)	1.40(-09)	1.40(-09)
$\text{H}^+ + \text{CH}_3$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{H}$	3.40(-09)	0.00	0.0	3.40(-09)	3.40(-09)	3.40(-09)
$\text{H}^+ + \text{O}$	$\longrightarrow \text{O}^+ + \text{H}$	7.00(-10)	0.00	232.0	1.34(-16)	6.76(-12)	3.23(-10)
$\text{H}^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{H}_2$	2.30(-09)	0.00	0.0	2.30(-09)	2.30(-09)	2.30(-09)
$\text{H}^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}_4^+ + \text{H}$	1.50(-09)	0.00	0.0	1.50(-09)	1.50(-09)	1.50(-09)
$\text{H}^+ + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{OH}^+ + \text{H}$	2.10(-09)	0.00	0.0	2.10(-09)	2.10(-09)	2.10(-09)
$\text{H}^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}$	6.90(-09)	0.00	0.0	6.90(-09)	6.90(-09)	6.90(-09)
$\text{H}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{CO}^+ + \text{H}_2$	9.40(-10)	0.00	0.0	9.40(-10)	9.40(-10)	9.40(-10)
$\text{H}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{H}_2^+ + \text{CO}$	9.40(-10)	0.00	0.0	9.40(-10)	9.40(-10)	9.40(-10)
$\text{H}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}$	9.40(-10)	0.00	0.0	9.40(-10)	9.40(-10)	9.40(-10)
$\text{H}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{H}$	2.96(-09)	0.00	0.0	2.96(-09)	2.96(-09)	2.96(-09)
$\text{H}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}_2$	3.57(-09)	0.00	0.0	3.57(-09)	3.57(-09)	3.57(-09)
$\text{H}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{CO}^+ + \text{H}_2 + \text{H}$	1.06(-09)	0.00	0.0	1.06(-09)	1.06(-09)	1.06(-09)
$\text{H}^+ + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{O}_2^+ + \text{H}$	2.00(-09)	0.00	0.0	2.00(-09)	2.00(-09)	2.00(-09)
$\text{H} - + \text{H}$	$\longrightarrow \text{H}_2 + \text{e}^-$	1.30(-09)	0.00	0.0	1.30(-09)	1.30(-09)	1.30(-09)
$\text{H} - + \text{C}$	$\longrightarrow \text{CH} + \text{e}^-$	1.00(-09)	0.00	0.0	1.00(-09)	1.00(-09)	1.00(-09)
$\text{H} - + \text{O}$	$\longrightarrow \text{OH} + \text{e}^-$	1.00(-09)	0.00	0.0	1.00(-09)	1.00(-09)	1.00(-09)
$\text{H} - + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}_2 + \text{e}^-$	1.00(-10)	0.00	0.0	1.00(-10)	1.00(-10)	1.00(-10)
$\text{H} - + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_3 + \text{e}^-$	1.00(-09)	0.00	0.0	1.00(-09)	1.00(-09)	1.00(-09)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$\text{H} - + \text{CH}_3$	$\longrightarrow \text{CH}_4 + \text{e}^-$	1.00(-09)	0.00	0.0	1.00(-09)	1.00(-09)	1.00(-09)
$\text{H} - + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{e}^-$	1.00(-10)	0.00	0.0	1.00(-10)	1.00(-10)	1.00(-10)
$\text{H} - + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{OH} - + \text{H}_2$	3.80(-09)	0.00	0.0	3.80(-09)	3.80(-09)	3.80(-09)
$\text{H} - + \text{CO}$	$\longrightarrow \text{HCO} + \text{e}^-$	5.00(-11)	0.00	0.0	5.00(-11)	5.00(-11)	5.00(-11)
$\text{H} - + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{e}^-$	1.00(-09)	0.00	0.0	1.00(-09)	1.00(-09)	1.00(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{H}$	$\longrightarrow \text{H}^+ + \text{H}_2$	6.40(-10)	0.00	0.0	6.40(-10)	6.40(-10)	6.40(-10)
$\text{H}_2^+ + \text{C}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{H}$	2.40(-09)	0.00	0.0	2.40(-09)	2.40(-09)	2.40(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{O}$	$\longrightarrow \text{OH}^+ + \text{H}$	1.50(-09)	0.00	0.0	1.50(-09)	1.50(-09)	1.50(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{H} -$	$\longrightarrow \text{H} + \text{H}_2$	2.30(-07)	-0.50	0.0	1.03(-06)	5.63(-07)	2.30(-07)
$\text{H}_2^+ + \text{H}_2$	$\longrightarrow \text{H}_3^+ + \text{H}$	2.08(-09)	0.00	0.0	2.08(-09)	2.08(-09)	2.08(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{H}_2$	7.10(-10)	0.00	0.0	7.10(-10)	7.10(-10)	7.10(-10)
$\text{H}_2^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{H}$	7.10(-10)	0.00	0.0	7.10(-10)	7.10(-10)	7.10(-10)
$\text{H}_2^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{H}$	1.00(-09)	0.00	0.0	1.00(-09)	1.00(-09)	1.00(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{H}_2$	1.00(-09)	0.00	0.0	1.00(-09)	1.00(-09)	1.00(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}_4^+ + \text{H}_2$	1.40(-09)	0.00	0.0	1.40(-09)	1.40(-09)	1.40(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}_5^+ + \text{H}$	1.14(-10)	0.00	0.0	1.14(-10)	1.14(-10)	1.14(-10)
$\text{H}_2^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{H} + \text{H}_2$	2.30(-09)	0.00	0.0	2.30(-09)	2.30(-09)	2.30(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{OH}^+ + \text{H}_2$	7.60(-10)	0.00	0.0	7.60(-10)	7.60(-10)	7.60(-10)
$\text{H}_2^+ + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}$	7.60(-10)	0.00	0.0	7.60(-10)	7.60(-10)	7.60(-10)
$\text{H}_2^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}_2$	3.90(-09)	0.00	0.0	3.90(-09)	3.90(-09)	3.90(-09)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$\text{H}_2^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{H}$	3.40(-09)	0.00	0.0	3.40(-09)	3.40(-09)	3.40(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{CO}$	$\longrightarrow \text{CO}^+ + \text{H}_2$	6.40(-10)	0.00	0.0	6.40(-10)	6.40(-10)	6.40(-10)
$\text{H}_2^+ + \text{CO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}$	2.16(-09)	0.00	0.0	2.16(-09)	2.16(-09)	2.16(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{H}_3^+ + \text{CO}$	1.00(-09)	0.00	0.0	1.00(-09)	1.00(-09)	1.00(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}_2$	1.00(-09)	0.00	0.0	1.00(-09)	1.00(-09)	1.00(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{H}_2$	1.40(-09)	0.00	0.0	1.40(-09)	1.40(-09)	1.40(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H} + \text{H}_2$	1.40(-09)	0.00	0.0	1.40(-09)	1.40(-09)	1.40(-09)
$\text{H}_2^+ + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{O}_2^+ + \text{H}_2$	8.00(-10)	0.00	0.0	8.00(-10)	8.00(-10)	8.00(-10)
$\text{H}_3^+ + \text{C}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{H}_2$	2.00(-09)	0.00	0.0	2.00(-09)	2.00(-09)	2.00(-09)
$\text{H}_3^+ + \text{O}$	$\longrightarrow \text{OH}^+ + \text{H}_2$	8.00(-10)	0.00	0.0	8.00(-10)	8.00(-10)	8.00(-10)
$\text{H}_3^+ + \text{H}-$	$\longrightarrow \text{H}_2 + \text{H}_2$	2.30(-07)	-0.50	0.0	1.03(-06)	5.63(-07)	2.30(-07)
$\text{H}_3^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{H}_2$	1.20(-09)	0.00	0.0	1.20(-09)	1.20(-09)	1.20(-09)
$\text{H}_3^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{H}_2$	1.70(-09)	0.00	0.0	1.70(-09)	1.70(-09)	1.70(-09)
$\text{H}_3^+ + \text{CH}_3$	$\longrightarrow \text{CH}_4^+ + \text{H}_2$	2.10(-09)	0.00	0.0	2.10(-09)	2.10(-09)	2.10(-09)
$\text{H}_3^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}_5^+ + \text{H}_2$	2.40(-09)	0.00	0.0	2.40(-09)	2.40(-09)	2.40(-09)
$\text{H}_3^+ + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}_2$	1.30(-09)	0.00	0.0	1.30(-09)	1.30(-09)	1.30(-09)
$\text{H}_3^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{H}_2$	5.90(-09)	0.00	0.0	5.90(-09)	5.90(-09)	5.90(-09)
$\text{H}_3^+ + \text{CO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}_2$	1.70(-09)	0.00	0.0	1.70(-09)	1.70(-09)	1.70(-09)
$\text{H}_3^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{H}_2$	1.70(-09)	0.00	0.0	1.70(-09)	1.70(-09)	1.70(-09)
$\text{He}^+ + \text{H}$	$\longrightarrow \text{H}^+ + \text{He}$	1.90(-15)	0.00	0.0	1.90(-15)	1.90(-15)	1.90(-15)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$\text{He}^+ + \text{H}^-$	$\longrightarrow \text{H} + \text{He}$	2.30(-07)	-0.50	0.0	1.03(-06)	5.63(-07)	2.30(-07)
$\text{He}^+ + \text{H}_2$	$\longrightarrow \text{H}^+ + \text{H} + \text{He}$	3.70(-14)	0.00	35.0	3.59(-15)	1.84(-14)	3.29(-14)
$\text{He}^+ + \text{H}_2$	$\longrightarrow \text{H}_2^+ + \text{He}$	7.20(-15)	0.00	0.0	7.20(-15)	7.20(-15)	7.20(-15)
$\text{He}^+ + \text{C}$	$\longrightarrow \text{C}^+ + \text{He}$	6.30(-15)	0.75	0.0	6.66(-16)	1.64(-15)	6.30(-15)
$\text{He}^+ + \text{C}^-$	$\longrightarrow \text{C} + \text{He}$	2.30(-07)	-0.50	0.0	1.03(-06)	5.63(-07)	2.30(-07)
$\text{He}^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{C}^+ + \text{H} + \text{He}$	1.10(-09)	0.00	0.0	1.10(-09)	1.10(-09)	1.10(-09)
$\text{He}^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{He}$	5.00(-10)	0.00	0.0	5.00(-10)	5.00(-10)	5.00(-10)
$\text{He}^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{H} + \text{He}$	7.50(-10)	0.00	0.0	7.50(-10)	7.50(-10)	7.50(-10)
$\text{He}^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{C}^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	7.50(-10)	0.00	0.0	7.50(-10)	7.50(-10)	7.50(-10)
$\text{He}^+ + \text{CH}_3$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	1.80(-09)	0.00	0.0	1.80(-09)	1.80(-09)	1.80(-09)
$\text{He}^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}_3 + \text{H}^+ + \text{He}$	4.80(-10)	0.00	0.0	4.80(-10)	4.80(-10)	4.80(-10)
$\text{He}^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{H}_2 + \text{He} + \text{H}$	2.40(-10)	0.00	0.0	2.40(-10)	2.40(-10)	2.40(-10)
$\text{He}^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	9.50(-10)	0.00	0.0	9.50(-10)	9.50(-10)	9.50(-10)
$\text{He}^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{He} + \text{H}$	8.50(-11)	0.00	0.0	8.50(-11)	8.50(-11)	8.50(-11)
$\text{He}^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}_4^+ + \text{He}$	5.10(-11)	0.00	0.0	5.10(-11)	5.10(-11)	5.10(-11)
$\text{He}^+ + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{O}^+ + \text{H} + \text{He}$	1.10(-09)	0.00	0.0	1.10(-09)	1.10(-09)	1.10(-09)
$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{H}^+ + \text{OH} + \text{He}$	2.04(-10)	0.00	0.0	2.04(-10)	2.04(-10)	2.04(-10)
$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{OH}^+ + \text{H} + \text{He}$	2.86(-10)	0.00	0.0	2.86(-10)	2.86(-10)	2.86(-10)
$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{He}$	6.05(-11)	0.00	0.0	6.05(-11)	6.05(-11)	6.05(-11)
$\text{He}^+ + \text{CO}$	$\longrightarrow \text{C}^+ + \text{O} + \text{He}$	1.60(-09)	0.00	0.0	1.60(-09)	1.60(-09)	1.60(-09)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$\text{He}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{CO}^+ + \text{H} + \text{He}$	4.90(-10)	0.00	0.0	4.90(-10)	4.90(-10)	4.90(-10)
$\text{He}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{O} + \text{He}$	4.90(-10)	0.00	0.0	4.90(-10)	4.90(-10)	4.90(-10)
$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{CO}^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	1.88(-09)	0.00	0.0	1.88(-09)	1.88(-09)	1.88(-09)
$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H} + \text{He}$	1.14(-09)	0.00	0.0	1.14(-09)	1.14(-09)	1.14(-09)
$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{He}$	9.69(-10)	0.00	0.0	9.69(-10)	9.69(-10)	9.69(-10)
$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{O} + \text{He}$	1.71(-09)	0.00	0.0	1.71(-09)	1.71(-09)	1.71(-09)
$\text{He}^+ + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{O}^+ + \text{O} + \text{He}$	1.00(-09)	0.00	0.0	1.00(-09)	1.00(-09)	1.00(-09)
$\text{He}^+ + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{O}_2^+ + \text{He}$	3.30(-11)	0.00	0.0	3.30(-11)	3.30(-11)	3.30(-11)
$\text{C}^+ + \text{H}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \nu$	1.70(-17)	0.00	0.0	1.70(-17)	1.70(-17)	1.70(-17)
$\text{C}^+ + \text{O}$	$\longrightarrow \text{CO}^+ + \nu$	2.50(-18)	0.00	0.0	2.50(-18)	2.50(-18)	2.50(-18)
$\text{C}^+ + \text{H}-$	$\longrightarrow \text{H} + \text{C}$	2.30(-07)	-0.50	0.0	1.03(-06)	5.63(-07)	2.30(-07)
$\text{C}^+ + \text{H}_2$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{H}$	1.00(-10)	0.00	4640.0	4.55-145	4.98(-51)	1.92(-17)
$\text{C}^+ + \text{H}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \nu$	4.00(-16)	-0.20	0.0	7.28(-16)	5.72(-16)	4.00(-16)
$\text{C}^+ + \text{C}-$	$\longrightarrow \text{C} + \text{C}$	2.30(-07)	-0.50	0.0	1.03(-06)	5.63(-07)	2.30(-07)
$\text{C}^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{C}$	3.80(-10)	0.00	0.0	3.80(-10)	3.80(-10)	3.80(-10)
$\text{C}^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{C}$	5.20(-10)	0.00	0.0	5.20(-10)	5.20(-10)	5.20(-10)
$\text{C}^+ + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{CO}^+ + \text{H}$	7.70(-10)	0.00	0.0	7.70(-10)	7.70(-10)	7.70(-10)
$\text{C}^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}$	9.00(-10)	0.00	0.0	9.00(-10)	9.00(-10)	9.00(-10)
$\text{C}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{C}$	4.80(-10)	0.00	0.0	4.80(-10)	4.80(-10)	4.80(-10)
$\text{C}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{CO}$	4.80(-10)	0.00	0.0	4.80(-10)	4.80(-10)	4.80(-10)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$C^+ + H_2CO$	$\longrightarrow CH_2^+ + CO$	2.34(-09)	0.00	0.0	2.34(-09)	2.34(-09)	2.34(-09)
$C^+ + H_2CO$	$\longrightarrow HCO^+ + CH$	7.80(-10)	0.00	0.0	7.80(-10)	7.80(-10)	7.80(-10)
$C^+ + H_2CO$	$\longrightarrow H_2CO^+ + C$	7.80(-10)	0.00	0.0	7.80(-10)	7.80(-10)	7.80(-10)
$C^+ + O_2$	$\longrightarrow CO^+ + O$	3.80(-10)	0.00	0.0	3.80(-10)	3.80(-10)	3.80(-10)
$C^+ + O_2$	$\longrightarrow O^+ + CO$	6.20(-10)	0.00	0.0	6.20(-10)	6.20(-10)	6.20(-10)
$C - + H$	$\longrightarrow CH + e^-$	5.00(-10)	0.00	0.0	5.00(-10)	5.00(-10)	5.00(-10)
$C - + O$	$\longrightarrow CO + e^-$	5.00(-10)	0.00	0.0	5.00(-10)	5.00(-10)	5.00(-10)
$C - + H_2$	$\longrightarrow CH_2 + e^-$	1.00(-13)	0.00	0.0	1.00(-13)	1.00(-13)	1.00(-13)
$C - + OH$	$\longrightarrow HCO + e^-$	5.00(-10)	0.00	0.0	5.00(-10)	5.00(-10)	5.00(-10)
$C - + H_2O$	$\longrightarrow H_2CO + e^-$	5.00(-10)	0.00	0.0	5.00(-10)	5.00(-10)	5.00(-10)
$C - + O_2$	$\longrightarrow O - + CO$	4.00(-10)	0.00	0.0	4.00(-10)	4.00(-10)	4.00(-10)
$CH^+ + H$	$\longrightarrow C^+ + H_2$	7.50(-10)	-0.50	0.0	3.35(-09)	1.84(-09)	7.50(-10)
$CH^+ + O$	$\longrightarrow CO^+ + H$	3.50(-10)	0.00	0.0	3.50(-10)	3.50(-10)	3.50(-10)
$CH^+ + H_2$	$\longrightarrow CH_2^+ + H$	1.20(-09)	0.00	0.0	1.20(-09)	1.20(-09)	1.20(-09)
$CH^+ + OH$	$\longrightarrow CO^+ + H_2$	7.50(-10)	0.00	0.0	7.50(-10)	7.50(-10)	7.50(-10)
$CH^+ + H_2O$	$\longrightarrow HCO^+ + H_2$	2.90(-09)	0.00	0.0	2.90(-09)	2.90(-09)	2.90(-09)
$CH^+ + H_2O$	$\longrightarrow H_3O^+ + C$	5.80(-10)	0.00	0.0	5.80(-10)	5.80(-10)	5.80(-10)
$CH^+ + H_2O$	$\longrightarrow H_2CO^+ + H$	5.80(-10)	0.00	0.0	5.80(-10)	5.80(-10)	5.80(-10)
$CH^+ + CO$	$\longrightarrow HCO^+ + C$	7.00(-12)	0.00	0.0	7.00(-12)	7.00(-12)	7.00(-12)
$CH^+ + HCO$	$\longrightarrow CH_2^+ + CO$	4.60(-10)	0.00	0.0	4.60(-10)	4.60(-10)	4.60(-10)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$\text{CH}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{CH}$	4.60(-10)	0.00	0.0	4.60(-10)	4.60(-10)	4.60(-10)
$\text{CH}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{CO}$	9.60(-10)	0.00	0.0	9.60(-10)	9.60(-10)	9.60(-10)
$\text{CH}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{CH}_2$	9.60(-10)	0.00	0.0	9.60(-10)	9.60(-10)	9.60(-10)
$\text{CH}^+ + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{O}$	9.70(-10)	0.00	0.0	9.70(-10)	9.70(-10)	9.70(-10)
$\text{CH}^+ + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{HCO} + \text{O}^+$	1.00(-11)	0.00	0.0	1.00(-11)	1.00(-11)	1.00(-11)
$\text{CH}^+ + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{CO}^+ + \text{OH}$	1.00(-11)	0.00	0.0	1.00(-11)	1.00(-11)	1.00(-11)
$\text{CH}_2^+ + \text{H}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{H}_2$	1.00(-09)	0.00	7080.0	1.03-214	3.19(-71)	5.63(-20)
$\text{CH}_2^+ + \text{O}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}$	7.50(-10)	0.00	0.0	7.50(-10)	7.50(-10)	7.50(-10)
$\text{CH}_2^+ + \text{H}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{H}$	1.60(-09)	0.00	0.0	1.60(-09)	1.60(-09)	1.60(-09)
$\text{CH}_2^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{CO}$	4.50(-10)	0.00	0.0	4.50(-10)	4.50(-10)	4.50(-10)
$\text{CH}_2^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{CH}_3$	2.81(-09)	0.00	0.0	2.81(-09)	2.81(-09)	2.81(-09)
$\text{CH}_2^+ + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{OH}$	9.10(-10)	0.00	0.0	9.10(-10)	9.10(-10)	9.10(-10)
$\text{CH}_3^+ + \text{H}$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{H}_2$	7.00(-10)	0.00	10560.0	1.26-315	1.32-101	3.61(-25)
$\text{CH}_3^+ + \text{O}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}_2$	4.00(-10)	0.00	0.0	4.00(-10)	4.00(-10)	4.00(-10)
$\text{CH}_3^+ + \text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{H}$	4.00(-11)	0.00	0.0	4.00(-11)	4.00(-11)	4.00(-11)
$\text{CH}_3^+ + \text{H}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_5^+ + \text{v}$	1.30(-14)	-1.00	0.0	2.60(-13)	7.80(-14)	1.30(-14)
$\text{CH}_3^+ + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{H}_2$	7.20(-10)	0.00	0.0	7.20(-10)	7.20(-10)	7.20(-10)
$\text{CH}_3^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{CH}_4^+ + \text{CO}$	4.40(-10)	0.00	0.0	4.40(-10)	4.40(-10)	4.40(-10)
$\text{CH}_3^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{CH}_3$	4.40(-10)	0.00	0.0	4.40(-10)	4.40(-10)	4.40(-10)
$\text{CH}_3^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{CH}_4$	1.60(-09)	0.00	0.0	1.60(-09)	1.60(-09)	1.60(-09)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$O^+ + H$	$\longrightarrow H^+ + O$	6.80(-10)	0.00	0.0	6.80(-10)	6.80(-10)	6.80(-10)
$O^+ + H^-$	$\longrightarrow H + O$	2.30(-07)	-0.50	0.0	1.03(-06)	5.63(-07)	2.30(-07)
$O^+ + H_2$	$\longrightarrow OH^+ + H$	1.70(-09)	0.00	0.0	1.70(-09)	1.70(-09)	1.70(-09)
$O^+ + C^-$	$\longrightarrow O + C$	2.30(-07)	-0.50	0.0	1.03(-06)	5.63(-07)	2.30(-07)
$O^+ + CH$	$\longrightarrow CH^+ + O$	3.50(-10)	0.00	0.0	3.50(-10)	3.50(-10)	3.50(-10)
$O^+ + CH$	$\longrightarrow CO^+ + H$	3.50(-10)	0.00	0.0	3.50(-10)	3.50(-10)	3.50(-10)
$O^+ + CH_2$	$\longrightarrow CH_2^+ + O$	9.70(-10)	0.00	0.0	9.70(-10)	9.70(-10)	9.70(-10)
$O^+ + CH_4$	$\longrightarrow CH_3^+ + OH$	1.10(-10)	0.00	0.0	1.10(-10)	1.10(-10)	1.10(-10)
$O^+ + CH_4$	$\longrightarrow CH_4^+ + O$	8.90(-10)	0.00	0.0	8.90(-10)	8.90(-10)	8.90(-10)
$O^+ + OH$	$\longrightarrow OH^+ + O$	3.60(-10)	0.00	0.0	3.60(-10)	3.60(-10)	3.60(-10)
$O^+ + OH$	$\longrightarrow O_2^+ + H$	3.60(-10)	0.00	0.0	3.60(-10)	3.60(-10)	3.60(-10)
$O^+ + H_2O$	$\longrightarrow H_2O^+ + O$	3.20(-09)	0.00	0.0	3.20(-09)	3.20(-09)	3.20(-09)
$O^+ + HCO$	$\longrightarrow OH^+ + CO$	4.30(-10)	0.00	0.0	4.30(-10)	4.30(-10)	4.30(-10)
$O^+ + HCO$	$\longrightarrow HCO^+ + O$	4.30(-10)	0.00	0.0	4.30(-10)	4.30(-10)	4.30(-10)
$O^+ + H_2CO$	$\longrightarrow HCO^+ + OH$	1.40(-09)	0.00	0.0	1.40(-09)	1.40(-09)	1.40(-09)
$O^+ + H_2CO$	$\longrightarrow H_2CO^+ + O$	2.10(-09)	0.00	0.0	2.10(-09)	2.10(-09)	2.10(-09)
$O^+ + O_2$	$\longrightarrow O_2^+ + O$	1.90(-11)	0.00	0.0	1.90(-11)	1.90(-11)	1.90(-11)
$O^- + H$	$\longrightarrow OH + e^-$	5.00(-10)	0.00	0.0	5.00(-10)	5.00(-10)	5.00(-10)
$O^- + C$	$\longrightarrow CO + e^-$	5.00(-10)	0.00	0.0	5.00(-10)	5.00(-10)	5.00(-10)
$O^- + O$	$\longrightarrow O_2 + e^-$	1.90(-10)	0.00	0.0	1.90(-10)	1.90(-10)	1.90(-10)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen	k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$O - + H_2$	\longrightarrow	$OH - + H$	$3.00(-11)$	0.00	0.0	$3.00(-11)$
$O - + H_2$	\longrightarrow	$H_2O + e^-$	$7.00(-10)$	0.00	0.0	$7.00(-10)$
$O - + CH$	\longrightarrow	$HCO + e^-$	$5.00(-10)$	0.00	0.0	$5.00(-10)$
$O - + CH_2$	\longrightarrow	$H_2CO + e^-$	$5.00(-10)$	0.00	0.0	$5.00(-10)$
$O - + CH_4$	\longrightarrow	$OH - + CH_3$	$1.00(-10)$	0.00	0.0	$1.00(-10)$
$CH_4^+ + H$	\longrightarrow	$CH_3^+ + H_2$	$1.00(-11)$	0.00	0.0	$1.00(-11)$
$CH_4^+ + O$	\longrightarrow	$CH_3^+ + OH$	$1.00(-09)$	0.00	0.0	$1.00(-09)$
$CH_4^+ + H_2$	\longrightarrow	$CH_5^+ + H$	$3.30(-11)$	0.00	0.0	$3.30(-11)$
$CH_4^+ + CH_4$	\longrightarrow	$CH_5^+ + CH_3$	$1.50(-09)$	0.00	0.0	$1.50(-09)$
$CH_4^+ + H_2O$	\longrightarrow	$H_3O^+ + CH_3$	$2.60(-09)$	0.00	0.0	$2.60(-09)$
$CH_4^+ + CO$	\longrightarrow	$HCO^+ + CH_3$	$1.40(-09)$	0.00	0.0	$1.40(-09)$
$CH_4^+ + H_2CO$	\longrightarrow	$H_2CO^+ + CH_4$	$1.62(-09)$	0.00	0.0	$1.62(-09)$
$CH_4^+ + O_2$	\longrightarrow	$O_2^+ + CH_4$	$4.00(-10)$	0.00	0.0	$4.00(-10)$
$OH^+ + C$	\longrightarrow	$CH^+ + O$	$1.20(-09)$	0.00	0.0	$1.20(-09)$
$OH^+ + O$	\longrightarrow	$O_2^+ + H$	$7.10(-10)$	0.00	0.0	$7.10(-10)$
$OH^+ + H_2$	\longrightarrow	$H_2O^+ + H$	$1.01(-09)$	0.00	0.0	$1.01(-09)$
$OH^+ + CH$	\longrightarrow	$CH^+ + OH$	$3.50(-10)$	0.00	0.0	$3.50(-10)$
$OH^+ + CH$	\longrightarrow	$CH_2^+ + O$	$3.50(-10)$	0.00	0.0	$3.50(-10)$
$OH^+ + CH_2$	\longrightarrow	$CH_2^+ + OH$	$4.80(-10)$	0.00	0.0	$4.80(-10)$
$OH^+ + CH_2$	\longrightarrow	$CH_3^+ + O$	$4.80(-10)$	0.00	0.0	$4.80(-10)$

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$\text{OH}^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CH}_2$	1.31(-09)	0.00	0.0	1.31(-09)	1.31(-09)	1.31(-09)
$\text{OH}^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}_5^+ + \text{O}$	1.95(-10)	0.00	0.0	1.95(-10)	1.95(-10)	1.95(-10)
$\text{OH}^+ + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{O}$	7.00(-10)	0.00	0.0	7.00(-10)	7.00(-10)	7.00(-10)
$\text{OH}^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{OH}$	1.59(-09)	0.00	0.0	1.59(-09)	1.59(-09)	1.59(-09)
$\text{OH}^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{O}$	1.30(-09)	0.00	0.0	1.30(-09)	1.30(-09)	1.30(-09)
$\text{OH}^+ + \text{CO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{O}$	1.05(-09)	0.00	0.0	1.05(-09)	1.05(-09)	1.05(-09)
$\text{OH}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{CO}$	2.80(-10)	0.00	0.0	2.80(-10)	2.80(-10)	2.80(-10)
$\text{OH}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{OH}$	2.80(-10)	0.00	0.0	2.80(-10)	2.80(-10)	2.80(-10)
$\text{OH}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{O}$	2.80(-10)	0.00	0.0	2.80(-10)	2.80(-10)	2.80(-10)
$\text{OH}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{OH}$	7.44(-10)	0.00	0.0	7.44(-10)	7.44(-10)	7.44(-10)
$\text{OH}^+ + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{O}_2^+ + \text{OH}$	5.90(-10)	0.00	0.0	5.90(-10)	5.90(-10)	5.90(-10)
$\text{OH} - + \text{H}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{e}^-$	1.40(-09)	0.00	0.0	1.40(-09)	1.40(-09)	1.40(-09)
$\text{OH} - + \text{C}$	$\longrightarrow \text{HCO} + \text{e}^-$	5.00(-10)	0.00	0.0	5.00(-10)	5.00(-10)	5.00(-10)
$\text{OH} - + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{e}^-$	5.00(-10)	0.00	0.0	5.00(-10)	5.00(-10)	5.00(-10)
$\text{CH}_5^+ + \text{H}$	$\longrightarrow \text{CH}_4^+ + \text{H}_2$	2.00(-11)	0.00	0.0	2.00(-11)	2.00(-11)	2.00(-11)
$\text{CH}_5^+ + \text{C}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{CH}_4$	1.20(-09)	0.00	0.0	1.20(-09)	1.20(-09)	1.20(-09)
$\text{CH}_5^+ + \text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CH}_2$	2.20(-10)	0.00	0.0	2.20(-10)	2.20(-10)	2.20(-10)
$\text{CH}_5^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{CH}_4$	6.90(-10)	0.00	0.0	6.90(-10)	6.90(-10)	6.90(-10)
$\text{CH}_5^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{CH}_4$	9.60(-10)	0.00	0.0	9.60(-10)	9.60(-10)	9.60(-10)
$\text{CH}_5^+ + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{CH}_4$	7.00(-10)	0.00	0.0	7.00(-10)	7.00(-10)	7.00(-10)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$\text{CH}_3^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CH}_4$	3.70(-09)	0.00	0.0	3.70(-09)	3.70(-09)	3.70(-09)
$\text{CH}_3^+ + \text{CO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{CH}_4$	1.00(-09)	0.00	0.0	1.00(-09)	1.00(-09)	1.00(-09)
$\text{CH}_3^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{CH}_4$	8.50(-10)	0.00	0.0	8.50(-10)	8.50(-10)	8.50(-10)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{C}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{OH}$	1.10(-09)	0.00	0.0	1.10(-09)	1.10(-09)	1.10(-09)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{O}$	$\longrightarrow \text{O}_2^+ + \text{H}_2$	4.00(-11)	0.00	0.0	4.00(-11)	4.00(-11)	4.00(-11)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}_2$	$\longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{H}$	8.30(-10)	0.00	0.0	8.30(-10)	8.30(-10)	8.30(-10)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{H}_2\text{O}$	3.40(-10)	0.00	0.0	3.40(-10)	3.40(-10)	3.40(-10)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{OH}$	3.40(-10)	0.00	0.0	3.40(-10)	3.40(-10)	3.40(-10)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{OH}$	4.70(-10)	0.00	0.0	4.70(-10)	4.70(-10)	4.70(-10)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{H}_2\text{O}$	4.70(-10)	0.00	0.0	4.70(-10)	4.70(-10)	4.70(-10)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CH}_3$	1.11(-09)	0.00	0.0	1.11(-09)	1.11(-09)	1.11(-09)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{O}$	6.90(-10)	0.00	0.0	6.90(-10)	6.90(-10)	6.90(-10)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}$	2.10(-09)	0.00	0.0	2.10(-09)	2.10(-09)	2.10(-09)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{CO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{OH}$	5.00(-10)	0.00	0.0	5.00(-10)	5.00(-10)	5.00(-10)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CO}$	2.80(-10)	0.00	0.0	2.80(-10)	2.80(-10)	2.80(-10)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}_2\text{O}$	2.80(-10)	0.00	0.0	2.80(-10)	2.80(-10)	2.80(-10)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{OH}$	2.80(-10)	0.00	0.0	2.80(-10)	2.80(-10)	2.80(-10)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{H}_2\text{O}$	1.41(-09)	0.00	0.0	1.41(-09)	1.41(-09)	1.41(-09)
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{O}_2^+ + \text{H}_2\text{O}$	4.30(-10)	0.00	0.0	4.30(-10)	4.30(-10)	4.30(-10)
$\text{H}_3\text{O}^+ + \text{C}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}_2$	1.00(-11)	0.00	0.0	1.00(-11)	1.00(-11)	1.00(-11)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$\text{H}_3\text{O}^+ + \text{H}^-$	$\longrightarrow \text{OH} + \text{H}_2 + \text{H}$	2.30(-07)	-0.50	0.0	1.03(-06)	5.63(-07)	2.30(-07)
$\text{H}_3\text{O}^+ + \text{H}^-$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2$	2.30(-07)	-0.50	0.0	1.03(-06)	5.63(-07)	2.30(-07)
$\text{H}_3\text{O}^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{H}_2\text{O}$	6.80(-10)	0.00	0.0	6.80(-10)	6.80(-10)	6.80(-10)
$\text{H}_3\text{O}^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{H}_2\text{O}$	9.40(-10)	0.00	0.0	9.40(-10)	9.40(-10)	9.40(-10)
$\text{CO}^+ + \text{H}$	$\longrightarrow \text{H}^+ + \text{CO}$	7.50(-10)	0.00	0.0	7.50(-10)	7.50(-10)	7.50(-10)
$\text{CO}^+ + \text{C}$	$\longrightarrow \text{C}^+ + \text{CO}$	1.10(-10)	0.00	0.0	1.10(-10)	1.10(-10)	1.10(-10)
$\text{CO}^+ + \text{O}$	$\longrightarrow \text{O}^+ + \text{CO}$	1.40(-10)	0.00	0.0	1.40(-10)	1.40(-10)	1.40(-10)
$\text{CO}^+ + \text{H}_2$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}$	1.80(-09)	0.00	0.0	1.80(-09)	1.80(-09)	1.80(-09)
$\text{CO}^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{CO}$	3.20(-10)	0.00	0.0	3.20(-10)	3.20(-10)	3.20(-10)
$\text{CO}^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{C}$	3.20(-10)	0.00	0.0	3.20(-10)	3.20(-10)	3.20(-10)
$\text{CO}^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{CO}$	4.30(-10)	0.00	0.0	4.30(-10)	4.30(-10)	4.30(-10)
$\text{CO}^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{CH}$	4.30(-10)	0.00	0.0	4.30(-10)	4.30(-10)	4.30(-10)
$\text{CO}^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{CH}_4^+ + \text{CO}$	7.93(-10)	0.00	0.0	7.93(-10)	7.93(-10)	7.93(-10)
$\text{CO}^+ + \text{CH}_4$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{CH}_3$	4.55(-10)	0.00	0.0	4.55(-10)	4.55(-10)	4.55(-10)
$\text{CO}^+ + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{OH}^+ + \text{CO}$	3.10(-10)	0.00	0.0	3.10(-10)	3.10(-10)	3.10(-10)
$\text{CO}^+ + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{O}$	3.10(-10)	0.00	0.0	3.10(-10)	3.10(-10)	3.10(-10)
$\text{CO}^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{CO}$	1.72(-09)	0.00	0.0	1.72(-09)	1.72(-09)	1.72(-09)
$\text{CO}^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{OH}$	8.84(-10)	0.00	0.0	8.84(-10)	8.84(-10)	8.84(-10)
$\text{CO}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{CO}$	7.40(-10)	0.00	0.0	7.40(-10)	7.40(-10)	7.40(-10)
$\text{CO}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{HCO}$	1.65(-09)	0.00	0.0	1.65(-09)	1.65(-09)	1.65(-09)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$\text{CO}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{CO}$	1.35(-09)	0.00	0.0	1.35(-09)	1.35(-09)	1.35(-09)
$\text{CO}^+ + \text{O}_2$	$\longrightarrow \text{O}_2^+ + \text{CO}$	1.20(-10)	0.00	0.0	1.20(-10)	1.20(-10)	1.20(-10)
$\text{HCO}^+ + \text{C}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{CO}$	1.10(-09)	0.00	0.0	1.10(-09)	1.10(-09)	1.10(-09)
$\text{HCO}^+ + \text{H}-$	$\longrightarrow \text{CO} + \text{H}_2$	2.30(-07)	-0.50	0.0	1.03(-06)	5.63(-07)	2.30(-07)
$\text{HCO}^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{CO}$	6.30(-10)	0.00	0.0	6.30(-10)	6.30(-10)	6.30(-10)
$\text{HCO}^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{CO}$	8.60(-10)	0.00	0.0	8.60(-10)	8.60(-10)	8.60(-10)
$\text{HCO}^+ + \text{OH}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{CO}$	6.20(-10)	0.00	0.0	6.20(-10)	6.20(-10)	6.20(-10)
$\text{HCO}^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CO}$	2.50(-09)	0.00	0.0	2.50(-09)	2.50(-09)	2.50(-09)
$\text{HCO}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{CO}$	7.30(-10)	0.00	0.0	7.30(-10)	7.30(-10)	7.30(-10)
$\text{H}_2\text{CO}^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	3.10(-10)	0.00	0.0	3.10(-10)	3.10(-10)	3.10(-10)
$\text{H}_2\text{CO}^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{HCO}$	3.10(-10)	0.00	0.0	3.10(-10)	3.10(-10)	3.10(-10)
$\text{H}_2\text{CO}^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_3^+ + \text{HCO}$	4.30(-10)	0.00	0.0	4.30(-10)	4.30(-10)	4.30(-10)
$\text{H}_2\text{CO}^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{CH}_2^+ + \text{H}_2\text{CO}$	4.30(-10)	0.00	0.0	4.30(-10)	4.30(-10)	4.30(-10)
$\text{H}_2\text{CO}^+ + \text{H}_2\text{O}$	$\longrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HCO}$	2.60(-09)	0.00	0.0	2.60(-09)	2.60(-09)	2.60(-09)
$\text{H}_2\text{CO}^+ + \text{HCO}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	3.60(-10)	0.00	0.0	3.60(-10)	3.60(-10)	3.60(-10)
$\text{O}_2^+ + \text{C}$	$\longrightarrow \text{CO}^+ + \text{O}$	5.20(-11)	0.00	0.0	5.20(-11)	5.20(-11)	5.20(-11)
$\text{O}_2^+ + \text{C}$	$\longrightarrow \text{C}^+ + \text{O}_2$	5.20(-11)	0.00	0.0	5.20(-11)	5.20(-11)	5.20(-11)
$\text{O}_2^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{CH}^+ + \text{O}_2$	3.10(-10)	0.00	0.0	3.10(-10)	3.10(-10)	3.10(-10)
$\text{O}_2^+ + \text{CH}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{O}$	3.10(-10)	0.00	0.0	3.10(-10)	3.10(-10)	3.10(-10)
$\text{O}_2^+ + \text{CH}_2$	$\longrightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{O}$	4.30(-10)	0.00	0.0	4.30(-10)	4.30(-10)	4.30(-10)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$O_2^+ + CH_2$	$\longrightarrow CH_2^+ + O_2$	4.30(-10)	0.00	0.0	4.30(-10)	4.30(-10)	4.30(-10)
$O_2^+ + HCO$	$\longrightarrow HCO^+ + O_2$	3.60(-10)	0.00	0.0	3.60(-10)	3.60(-10)	3.60(-10)
$O_2^+ + H_2CO$	$\longrightarrow HCO^+ + O_2 + H$	2.30(-10)	0.00	0.0	2.30(-10)	2.30(-10)	2.30(-10)
$O_2^+ + H_2CO$	$\longrightarrow H_2CO^+ + O_2$	2.07(-09)	0.00	0.0	2.07(-09)	2.07(-09)	2.07(-09)
$H + e^-$	$\longrightarrow H - + v$	5.57(-17)	0.50	0.0	1.25(-17)	2.27(-17)	5.57(-17)
$C + e^-$	$\longrightarrow C - + v$	3.00(-15)	0.00	0.0	3.00(-15)	3.00(-15)	3.00(-15)
$O + e^-$	$\longrightarrow O - + v$	1.50(-15)	0.00	0.0	1.50(-15)	1.50(-15)	1.50(-15)
$H^+ + e^-$	$\longrightarrow H + v$	3.50(-12)	-0.75	0.0	3.31(-11)	1.34(-11)	3.50(-12)
$H_2^+ + e^-$	$\longrightarrow H + H$	1.60(-08)	-0.43	0.0	5.80(-08)	3.46(-08)	1.60(-08)
$H_3^+ + e^-$	$\longrightarrow H_2 + H$	1.50(-08)	-0.50	0.0	6.71(-08)	3.67(-08)	1.50(-08)
$H_3^+ + e^-$	$\longrightarrow H + H + H$	1.50(-08)	-0.50	0.0	6.71(-08)	3.67(-08)	1.50(-08)
$He^+ + e^-$	$\longrightarrow He + v$	2.36(-12)	-0.64	0.0	1.61(-11)	7.43(-12)	2.36(-12)
$C^+ + e^-$	$\longrightarrow C + v$	4.40(-12)	-0.61	0.0	2.74(-11)	1.31(-11)	4.40(-12)
$CH^+ + e^-$	$\longrightarrow C + H$	1.50(-07)	-0.42	0.0	5.28(-07)	3.18(-07)	1.50(-07)
$CH_2^+ + e^-$	$\longrightarrow C + H_2$	1.25(-07)	-0.50	0.0	5.59(-07)	3.06(-07)	1.25(-07)
$CH_2^+ + e^-$	$\longrightarrow CH + H$	1.25(-07)	-0.50	0.0	5.59(-07)	3.06(-07)	1.25(-07)
$CH_3^+ + e^-$	$\longrightarrow CH_2 + H$	7.75(-08)	-0.50	0.0	3.47(-07)	1.90(-07)	7.75(-08)
$CH_3^+ + e^-$	$\longrightarrow CH + H_2$	1.95(-07)	-0.50	0.0	8.72(-07)	4.78(-07)	1.95(-07)
$CH_3^+ + e^-$	$\longrightarrow CH + H + H$	7.75(-08)	-0.50	0.0	3.47(-07)	1.90(-07)	7.75(-08)
$CH_3^+ + e^-$	$\longrightarrow CH_3 + v$	1.10(-10)	-0.50	0.0	4.92(-10)	2.69(-10)	1.10(-10)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$O^+ + e^-$	$\longrightarrow O + v$	3.40(-12)	-0.63	0.0	2.24(-11)	1.05(-11)	3.40(-12)
$CH_4^+ + e^-$	$\longrightarrow CH_3 + H$	1.75(-07)	-0.50	0.0	7.83(-07)	4.29(-07)	1.75(-07)
$CH_4^+ + e^-$	$\longrightarrow CH_2 + H + H$	1.75(-07)	-0.50	0.0	7.83(-07)	4.29(-07)	1.75(-07)
$OH^+ + e^-$	$\longrightarrow O + H$	3.75(-08)	-0.50	0.0	1.68(-07)	9.19(-08)	3.75(-08)
$CH_5^+ + e^-$	$\longrightarrow CH_4 + H$	5.50(-07)	-0.30	0.0	1.35(-06)	9.41(-07)	5.50(-07)
$CH_5^+ + e^-$	$\longrightarrow CH_3 + H_2$	5.50(-07)	-0.30	0.0	1.35(-06)	9.41(-07)	5.50(-07)
$H_2O^+ + e^-$	$\longrightarrow OH + H$	1.60(-07)	-0.50	0.0	7.16(-07)	3.92(-07)	1.60(-07)
$H_2O^+ + e^-$	$\longrightarrow O + H_2$	2.00(-07)	-0.50	0.0	8.94(-07)	4.90(-07)	2.00(-07)
$H_3O^+ + e^-$	$\longrightarrow H_2O + H$	3.50(-07)	-0.50	0.0	1.57(-06)	8.57(-07)	3.50(-07)
$H_3O^+ + e^-$	$\longrightarrow OH + H + H$	6.50(-07)	-0.50	0.0	2.91(-06)	1.59(-06)	6.50(-07)
$CO^+ + e^-$	$\longrightarrow O + C$	1.00(-07)	-0.46	0.0	3.97(-07)	2.28(-07)	1.00(-07)
$HCO^+ + e^-$	$\longrightarrow CO + H$	1.10(-07)	-1.00	0.0	2.20(-06)	6.60(-07)	1.10(-07)
$H_2CO^+ + e^-$	$\longrightarrow HCO + H$	1.00(-07)	-0.50	0.0	4.47(-07)	2.45(-07)	1.00(-07)
$H_2CO^+ + e^-$	$\longrightarrow CO + H + H$	5.00(-07)	-0.50	0.0	2.24(-06)	1.22(-06)	5.00(-07)
$H_2CO^+ + e^-$	$\longrightarrow H_2CO + v$	1.10(-10)	-0.70	0.0	8.96(-10)	3.86(-10)	1.10(-10)
$O_2^+ + e^-$	$\longrightarrow O + O$	1.95(-07)	-0.70	0.0	1.59(-06)	6.84(-07)	1.95(-07)
$H + v_{c.r.}$	$\longrightarrow H^+ + e^-$	5.98(-18)	0.00	0.0	5.98(-18)	5.98(-18)	5.98(-18)
$He + v_{c.r.}$	$\longrightarrow He^+ + e^-$	6.50(-18)	0.00	0.0	6.50(-18)	6.50(-18)	6.50(-18)
$C + v_{c.r.}$	$\longrightarrow C^+ + e^-$	2.30(-17)	0.00	0.0	2.30(-17)	2.30(-17)	2.30(-17)
$O + v_{c.r.}$	$\longrightarrow O^+ + e^-$	3.40(-17)	0.00	0.0	3.40(-17)	3.40(-17)	3.40(-17)

Tabelle C.2: (Fortsetzung)

Reaktionen		k_1	k_2	k_3	15K	50K	300K
$\text{H}_2 + \text{v}_{\text{c.r.}}$	$\longrightarrow \text{H}^+ + \text{e}^- + \text{H}$	2.20(-19)	0.00	0.0	2.20(-19)	2.20(-19)	2.20(-19)
$\text{H}_2 + \text{v}_{\text{c.r.}}$	$\longrightarrow \text{H}_2^+ + \text{e}^-$	1.20(-17)	0.00	0.0	1.20(-17)	1.20(-17)	1.20(-17)
$\text{H}_2 + \text{v}_{\text{c.r.}}$	$\longrightarrow \text{H} + \text{H}$	1.30(-18)	0.00	0.0	1.30(-18)	1.30(-18)	1.30(-18)
$\text{H}_2 + \text{v}_{\text{c.r.}}$	$\longrightarrow \text{H}^+ + \text{H}^-$	3.90(-21)	0.00	0.0	3.90(-21)	3.90(-21)	3.90(-21)
$\text{CO} + \text{v}_{\text{c.r.}}$	$\longrightarrow \text{CO}^+ + \text{e}^-$	3.90(-17)	0.00	0.0	3.90(-17)	3.90(-17)	3.90(-17)
$\text{C} + \text{v}_{\text{c.r.}}^{\text{ind.}}$	$\longrightarrow \text{C}^+ + \text{e}^-$	1.30(-17)	0.00	510.0	1.66(-14)	1.66(-14)	1.66(-14)
$\text{CH} + \text{v}_{\text{c.r.}}^{\text{ind.}}$	$\longrightarrow \text{C} + \text{H}$	1.30(-17)	0.00	730.0	2.37(-14)	2.37(-14)	2.37(-14)
$\text{CH}^+ + \text{v}_{\text{c.r.}}^{\text{ind.}}$	$\longrightarrow \text{C}^+ + \text{H}$	1.30(-17)	0.00	176.0	5.72(-15)	5.72(-15)	5.72(-15)
$\text{CH}_4 + \text{v}_{\text{c.r.}}^{\text{ind.}}$	$\longrightarrow \text{CH}_2 + \text{H}_2$	1.30(-17)	0.00	2339.0	7.60(-14)	7.60(-14)	7.60(-14)
$\text{OH} + \text{v}_{\text{c.r.}}^{\text{ind.}}$	$\longrightarrow \text{O} + \text{H}$	1.30(-17)	0.00	509.0	1.65(-14)	1.65(-14)	1.65(-14)
$\text{H}_2\text{O} + \text{v}_{\text{c.r.}}^{\text{ind.}}$	$\longrightarrow \text{OH} + \text{H}$	1.30(-17)	0.00	971.0	3.16(-14)	3.16(-14)	3.16(-14)
$\text{CO} + \text{v}_{\text{c.r.}}^{\text{ind.}}$	$\longrightarrow \text{C} + \text{O}$	1.30(-17)	1.17	210.0	6.83(-15)	6.83(-15)	6.83(-15)
$\text{HCO} + \text{v}_{\text{c.r.}}^{\text{ind.}}$	$\longrightarrow \text{H} + \text{CO}$	1.30(-17)	0.00	421.0	1.37(-14)	1.37(-14)	1.37(-14)
$\text{HCO} + \text{v}_{\text{c.r.}}^{\text{ind.}}$	$\longrightarrow \text{HCO}^+ + \text{e}^-$	1.30(-17)	0.00	1169.0	3.80(-14)	3.80(-14)	3.80(-14)
$\text{H}_2\text{CO} + \text{v}_{\text{c.r.}}^{\text{ind.}}$	$\longrightarrow \text{CO} + \text{H}_2$	1.30(-17)	0.00	2659.0	8.64(-14)	8.64(-14)	8.64(-14)
$\text{O}_2 + \text{v}_{\text{c.r.}}^{\text{ind.}}$	$\longrightarrow \text{O} + \text{O}$	1.30(-17)	0.00	751.0	2.44(-14)	2.44(-14)	2.44(-14)
$\text{O}_2 + \text{v}_{\text{c.r.}}^{\text{ind.}}$	$\longrightarrow \text{O}_2^+ + \text{e}^-$	1.30(-17)	0.00	117.0	3.80(-15)	3.80(-15)	3.80(-15)

Tabelle C.3: Photoreaktionen mit Reaktionsquerschnitten bei $l = 0$ und $l = 10^{17}$ cm

Reaktionen			k_1	k_2	k_3	$l = 0$	$l = 10^{17}$ cm
$C + v$	\longrightarrow	$C^+ + e^-$	3.00(-10)	0.00	3.0	3.00(-10)	2.60(-10)
$H^- + v$	\longrightarrow	$H + e^-$	2.40(-07)	0.00	0.5	2.40(-07)	2.34(-07)
$H_2^+ + v$	\longrightarrow	$H^+ + H$	5.70(-10)	0.00	1.9	5.70(-10)	5.21(-10)
$H_3^+ + v$	\longrightarrow	$H_2^+ + H$	5.00(-13)	0.00	2.3	5.00(-13)	4.48(-13)
$H_3^+ + v$	\longrightarrow	$H^+ + H_2$	5.00(-13)	0.00	1.8	5.00(-13)	4.59(-13)
$C^- + v$	\longrightarrow	$C + e^-$	2.40(-07)	0.00	0.9	2.40(-07)	2.30(-07)
$CH + v$	\longrightarrow	$CH^+ + e^-$	7.60(-10)	0.00	2.8	7.60(-10)	6.65(-10)
$CH + v$	\longrightarrow	$C + H$	8.60(-10)	0.00	1.2	8.60(-10)	8.12(-10)
$CH^+ + v$	\longrightarrow	$C^+ + H$	2.50(-10)	0.00	2.5	2.50(-10)	2.22(-10)
$CH_2 + v$	\longrightarrow	$CH_2^+ + e^-$	1.00(-09)	0.00	2.3	1.00(-09)	8.97(-10)
$CH_2 + v$	\longrightarrow	$CH + H$	7.20(-10)	0.00	1.7	7.20(-10)	6.64(-10)
$CH_2^+ + v$	\longrightarrow	$CH^+ + H$	1.70(-09)	0.00	1.7	1.70(-09)	1.57(-09)
$CH_3 + v$	\longrightarrow	$CH + H_2$	2.50(-10)	0.00	1.9	2.50(-10)	2.28(-10)
$CH_3 + v$	\longrightarrow	$CH_2 + H$	2.50(-10)	0.00	1.9	2.50(-10)	2.28(-10)
$CH_3 + v$	\longrightarrow	$CH_3^+ + e^-$	1.00(-10)	0.00	2.1	1.00(-10)	9.05(-11)
$CH_3^+ + v$	\longrightarrow	$CH_2^+ + H$	1.00(-09)	0.00	1.7	1.00(-09)	9.22(-10)
$CH_3^+ + v$	\longrightarrow	$CH^+ + H_2$	1.00(-09)	0.00	1.7	1.00(-09)	9.22(-10)
$O^- + v$	\longrightarrow	$O + e^-$	2.40(-07)	0.00	0.5	2.40(-07)	2.34(-07)
$CH_4 + v$	\longrightarrow	$CH_3 + H$	2.20(-10)	0.00	2.2	2.20(-10)	1.98(-10)
$CH_4 + v$	\longrightarrow	$CH_2 + H_2$	9.80(-10)	0.00	2.2	9.80(-10)	8.83(-10)
$CH_4 + v$	\longrightarrow	$CH + H + H_2$	2.20(-10)	0.00	2.2	2.20(-10)	1.98(-10)
$OH + v$	\longrightarrow	$O + H$	3.50(-10)	0.00	1.7	3.50(-10)	3.23(-10)
$OH + v$	\longrightarrow	$OH^+ + e^-$	1.60(-12)	0.00	3.1	1.60(-12)	1.38(-12)
$OH^+ + v$	\longrightarrow	$H^+ + O$	1.00(-12)	0.00	1.8	1.00(-12)	9.18(-13)
$OH^- + v$	\longrightarrow	$OH + e^-$	2.40(-07)	0.00	0.9	2.40(-07)	2.30(-07)
$H_2O + v$	\longrightarrow	$OH + H$	5.90(-10)	0.00	1.7	5.90(-10)	5.44(-10)
$H_2O + v$	\longrightarrow	$H_2O^+ + e^-$	3.30(-11)	0.00	3.9	3.30(-11)	2.74(-11)
$CO + v$	\longrightarrow	$C + O$	2.00(-10)	0.00	2.5	2.00(-10)	1.78(-10)
$HCO + v$	\longrightarrow	$CO + H$	1.10(-09)	0.00	0.8	1.10(-09)	1.06(-09)
$HCO + v$	\longrightarrow	$HCO^+ + e^-$	5.60(-10)	0.00	2.1	5.60(-10)	5.07(-10)
$H_2CO + v$	\longrightarrow	$CO + H_2$	7.00(-10)	0.00	1.7	7.00(-10)	6.46(-10)
$H_2CO + v$	\longrightarrow	$CO + H + H$	7.00(-10)	0.00	1.7	7.00(-10)	6.46(-10)
$H_2CO + v$	\longrightarrow	$H_2CO^+ + e^-$	4.70(-10)	0.00	2.8	4.70(-10)	4.11(-10)

Tabelle C.3: (Fortsetzung)

Reaktionen				k_1	k_2	k_3	$l = 0$	$l = 10^{17} \text{ cm}$
$\text{H}_2\text{CO} + \nu$	\longrightarrow	$\text{HCO}^+ + \text{e}^- + \text{H}$		1.40(-11)	0.00	3.1	1.40(-11)	1.21(-11)
$\text{O}_2 + \nu$	\longrightarrow	$\text{O} + \text{O}$		6.90(-10)	0.00	1.8	6.90(-10)	6.33(-10)
$\text{O}_2 + \nu$	\longrightarrow	$\text{O}_2^+ + \text{e}^-$		5.60(-11)	0.00	3.7	5.60(-11)	4.70(-11)

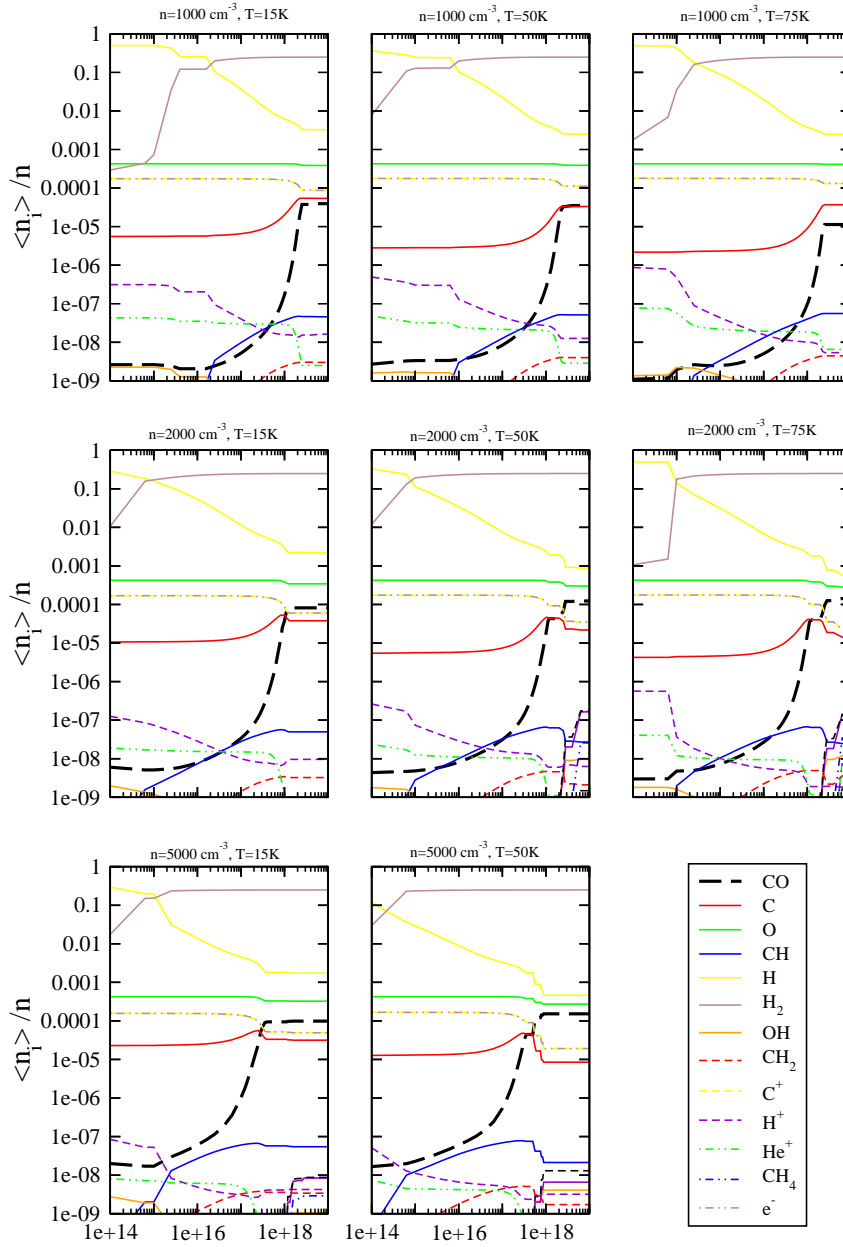


Abbildung C.1: Chemische Struktur für $n = 1000, 2000, 5000$ cm⁻³ und $T=15, 50$ und 75 K, $n_i/n = 10^{-9} \dots 1$, $\ell_v = 10^{16}$ cm, $\sigma/v_{th} = 10$

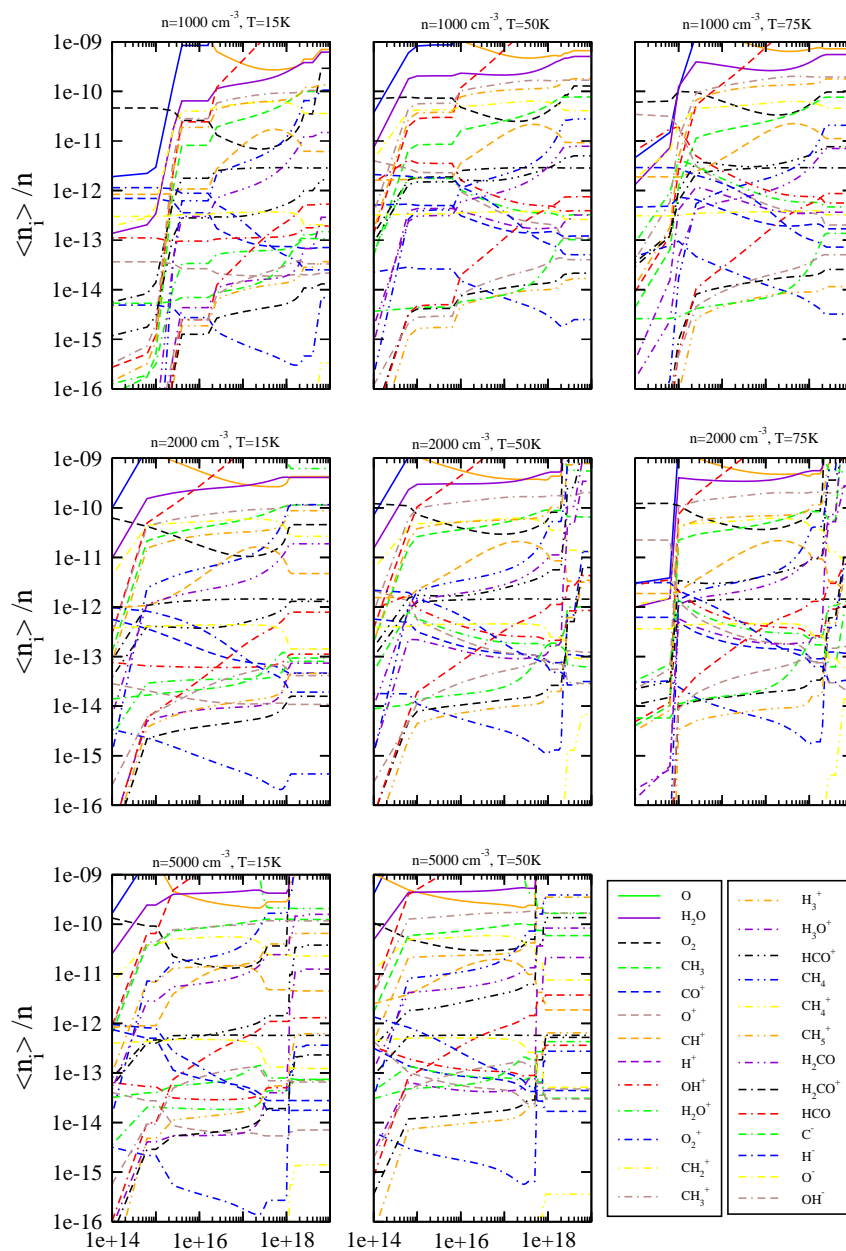


Abbildung C.2: Chemische Struktur für $n = 1000, 2000, 5000 \text{ cm}^{-3}$ und $T=15, 50$ und 75 K , $n_i/n = 10^{-16} \dots 10^{-9}$, $\ell_v = 10^{16} \text{ cm}$, $\sigma/v_{\text{th}} = 10$

Literaturverzeichnis

- Abgrall, H., Le Boulrot, J., Pineau Des Forets, G., Roueff, E., Flower, D. R., & Heck, L. 1992, *Astron. Astrophys.*, 253, 525
- Abramowitz, M., Stegun, I. 1964, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications)
- Albrecht, M.A., Kegel, W.H. 1987, *Astron. Astrophys.*, 176, 317
- Anders, E. & Grevesse, N. 1989, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 53, 197
- Barnes, P. J., Crutcher, R. M., Biegging, J. H., Storey, J. W. V., & Willner, S. P. 1989, *Astrophys. J.*, 342, 883
- Burke, J. R. & Hollenbach, D. J. 1983, *Astrophys. J.*, 265, 223
- Draine, B. T. 1978, *Astrophys. J. Suppl.*, 36, 595+
- Duley, W. W. & Williams, D. A. 1984, *Interstellar chemistry* (Academic Press Inc. (London) Ltd.)
- Eidelsberg, M., Benayoun, J. J., Viala, Y., & Rostas, F. 1991, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, 90, 231
- Eidelsberg, M., Benayoun, J. J., Viala, Y., Rostas, F., Smith, P. L., Yoshino, K., Stark, G., & Shettle, C. A. 1992, *Astron. Astrophys.*, 265, 839
- Eidelsberg, M. & Rostas, F. 1990, *Astron. Astrophys.*, 235, 472
- Gail, H.-P., Sedlmayr, E., Traving, G. 1975, *Astron. Astrophys.*, 44, 421
- Gail, H.P., Hundt, E., Kegel, W.H., Schmid-Burgk, J., Traving, G. 1974, *Astron. Astrophys.*, 32, 65

- Giannini, T., Nisini, B., Lorenzetti, D., Di Giorgio, A. M., Spinoglio, L., Benedettini, M., Saraceno, P., Smith, H. A., & White, G. J. 2000, *Astron. Astrophys.*, 358, 310
- Glassgold, A. E. 1996, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, 34, 241
- Glassgold, A. E., Huggins, P. J., & Langer, W. D. 1985, *Astrophys. J.*, 290, 615
- Gnedenko, B.W. 1987, *Lehrbuch der Wahrscheinlichkeitsrechnung* (Harri Deutsch)
- Gondhalekar, P. M., Phillips, A. P., & Wilson, R. 1980, *Astron. Astrophys.*, 85, 272+
- Gredel, R., Lepp, S., Dalgarno, A., & Herbst, E. 1989, *Astrophys. J.*, 347, 289
- Gruebner, O. 1995, *Diplomarbeit*, J.W.Goethe-Univ. Frankfurt a.M. (Germany).
- Hegmann, M. 1999, *Dissertation*, J.W.Goethe-Univ. Frankfurt a.M. (Germany).
- Hegmann, M., Kegel, W.H. 1996, *Mon. Notices Roy. Astr. Soc.*, 283, 167
- . 2000, *Astron. Astrophys.*, 359, 405
- Hollenbach, D. J., Takahashi, T., & Tielens, A. G. G. M. 1991, *Astrophys. J.*, 377, 192
- Hollenbach, D. J. & Tielens, A. G. G. M. 1997, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, 35, 179
- Kegel, W.H., Piehler, G., Albrecht, M.A. 1993, *Astron. Astrophys.*, 270, 407
- Le Teuff, Y. H., Millar, T. J., & Markwick, A. J. 2000, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, 146, 157
- Lee, H. H., Herbst, E., Pineau Des Forets, G., Roueff, E., & Le Bourlot, J. 1996, *Astron. Astrophys.*, 311, 690
- Letzelter, C., Eidelsberg, M., Rostas, F., Breton, J., & Thieblemont, B. 1987, *Chem.Phys.*, 114, 273
- Lis, D. C., Keene, J., Li, Y., Phillips, T. G., & Pety, J. 1998, *Astrophys. J.*, 504, 889+

- Mathis, J. S., Mezger, P. G., & Panagia, N. 1983, *Astron. Astrophys.*, 128, 212
- Mezger, P. G., Mathis, J. S., & Panagia, N. 1982, *Astron. Astrophys.*, 105, 372
- Mezger, P. G., Sievers, A. W., Haslam, C. G. T., Kreysa, E., Lemke, R., Mauersberger, R., & Wilson, T. L. 1992, *Astron. Astrophys.*, 256, 631
- Millar, T. J., Farquhar, P. R. A., & Willacy, K. 1997, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, 121, 139
- Papoulis, A. 1991, *Probability, Random Variables, and Stochastic Processes* (McGraw-Hill)
- Piehler, G., Kegel, W.H. 1995, *Astron. Astrophys.*, 297, 841
- Prasad, S. S. & Tarafdar, S. P. 1983, *Astrophys. J.*, 267, 603
- Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A., & Vetterling, W. T. 1988, *Numerical Recipes*, 3. edn. (Cambridge University Press)
- Risken, H. 1988, *The Fokker–Planck Equation* (Springer)
- Spitzer, L. 1978, *Physical Processes in the Interstellar Medium* (John Wiley & Sons)
- Steiman-Cameron, T. Y., Haas, M. R., Tielens, A. G. G. M., & Burton, M. G. 1997, *Astrophys. J.*, 478, 261+
- Sternberg, A. & Dalgarno, A. 1995, *Astrophys. J. Suppl.*, 99, 565+
- Thompson, W. J. 1997, *Atlas for computing mathematical functions* (Wiley-Interscience)
- Tielens, A. G. G. M. & Hollenbach, D. 1985a, *Astrophys. J.*, 291, 747+
- . 1985b, *Astrophys. J.*, 291, 722
- van Dishoeck, E. F. & Black, J. H. 1986, *Astrophys. J. Suppl.*, 62, 109
- . 1988, *Astrophys. J.*, 334, 771
- . 1990, *Astrophys. J.*, 360, 314+

Vemuri, V., Karplus, W.J. 1981, Digital Computer Treatment of Partial Differential Equations (Prentice Hall)

Warin, S., Benayoun, J. J., & Viala, Y. P. 1996, Astron. Astrophys., 308, 535

Danksagung

Mein Dank geht an erster Stelle an meinen Doktorvater Herrn Prof. Dr. W.H. Kegel für seine freundliche Unterstützung, stete Diskussionsbereitschaft und nicht zuletzt für die interessante Themstellung.

Bedanken möchte ich mich auch bei allen Mitgliedern des Instituts für die freundschaftliche Zusammenarbeit. Besonderer Dank gilt dabei den Herrn Dr. M. Hegmann und C. Hengel für die vielen hilf- und lehrreichen Diskussionen und Anregungen.

Für das Korrekturlesen der Arbeit möchte ich mich bei Frau A. Strech und Herrn Dr. M. Hegmann herzlich bedanken.

Die Arbeit wurde zum Teil von der FAZIT Stiftung finanziell unterstützt – auch dafür meinen herzlichen Dank.

Lebenslauf

Name: Markus Röllig
Geburtsdatum: 22.11.1969, Offenbach a.M.

1976-1982: Grundschule & Förderstufe
Eichendorffschule, Obertshausen

1982-1986: Gymnasium, Hermann-Hesse Schule Obertshausen

1986-1989: Gymnasiale Oberstufe,
Technisch-Gewerbliche Schulen Offenbach a.M.

19.05.1989: Abitur

1989-1990: Zivildienst beim Deutschen Roten Kreuz, Offenbach a.M.

1990-1992: Studium der Physik an der T.H. Darmstadt

30.09.1992: Vordiplom-Physik an der T.H. Darmstadt

1992-1997: Studium der Physik und der Wirtschaftswissenschaften
an der J.W.Goethe-Universität Frankfurt a.M.

13.05.1994: Vordiplom in Betriebswirtschaftslehre

10.07.1997: Physik-Diplom
Diplomarbeit am Inst. für Theoretische Physik
bei Prof.Dr. W.H. Kegel,
Thema: *A-Typ Methanol Maser in interstellaren
Molekülwolken unter Berücksichtigung von
IR/HII Quellen und Linienüberlapp*

seit 1997: Promotionsstudent und wissenschaftlicher Mitarbeiter
im Inst. für Theoretische Physik bei Prof.Dr. W.H. Kegel