

Manfred Winnewisser

Interstellare Moleküle und Mikrowellenspektroskopie I

Traditionsgemäß war der Astronom ein Wissenschaftler, der durch das enge Fenster der Erdatmosphäre mit den Strahlen des sichtbaren Lichtes seine Forschungen betrieb. Der Frequenzbereich des für das menschliche Auge sichtbaren Lichtes umfaßt die Frequenzen von ca. $5 \cdot 10^{14}$ bis 10^{16} Hz. In diesem schmalen Frequenzbereich des elektromagnetischen Spektrums, das sich insgesamt vom Radiobereich bis hin zu den energiereichen γ -Strahlen erstreckt (Abbildung 1), ist erstaunlicherweise unsere Erdatmosphäre durchlässig, d.h. die Strahlung der Sonne trifft fast ungeschwächt auf die Erdoberfläche. Gleichzeitig besitzt die Sonne bei einer Oberflächentemperatur von ca. 6000 K im Frequenzbereich der sichtbaren Lichtstrahlen das Maximum in der Energieabstrahlung. Dies geht aus Abbildung 2 hervor und kann durch das Plancksche Strahlungsgesetz erklärt werden. Sowohl auf der hochfrequenten als auch der niederfrequenten Seite des sichtbaren Frequenzbandes ist unsere Erdatmosphäre für die elektromagnetische Strahlung undurchlässig (vgl. Abbildung 1). Gleichzeitig verliert auch das menschliche Auge als Strahlungsempfänger schnell an Empfindlichkeit. Trotzdem ist der Weltraum, der Milliarden von Sternen enthält, voll von elektromagnetischer Strahlung, die, wie die Strahlung im sichtbaren Bereich, eine Fülle verschlüsselter Informationen enthält. Das Entschlüsseln dieser kodierten Nachrichten ist heute Aufgabe der Astrophysiker und Astrochemiker.

Im Radiofrequenzbereich und im Bereich der Mikrowellen, d.h. im Frequenzbereich von einigen Kilohertz (kHz) bis ca. 180 Gigahertz ($1 \text{ GHz} = 10^9 \text{ Hz}$), stellt uns die Atmosphäre ein zweites Beobachtungsfenster zur Verfügung. In diesem Frequenzbereich strahlt die Sonne, je nach Sonnenfleckenaktivitäten, wesentlich mehr Energie ab, als dem Planckschen Gesetz bei einer Strahlungstemperatur von 6000 K entsprechen würde (vgl. Abbildung 2). Diese Radiostrahlung können

wir jedoch nicht mehr mit unseren Sinnen wahrnehmen. Trotzdem ist sie vorhanden. Wollen wir sie beobachten, dann müssen wir sie von der Erdoberfläche aus mit einem Radioteleskop vermessen. Vermessen bedeutet, daß wir die Strahlungsintensität als Funktion der Frequenz oder Wellenlänge verfolgen. Wollen wir jedoch im Spektralbereich der Infrarotwellen beobachten, dann können wir dies heute am besten von einer Satellitenstation aus tun, denn die Erdatmosphäre blockiert fast alle Infrarotstrahlung, die vom Weltraum auf die Erde einfällt (Abbildung 1). In diesem Beitrag will ich mich auf den Bereich der Radio- und Mikrowellen konzentrieren und berichten, welche Informationen wir durch das atmosphärische „Mikrowellenfenster“ erhalten können.

Durch die Erforschung der Radiostrahlung absorbierender oder emittierender Atome und Moleküle im Weltraum haben wir in den vergangenen zwanzig Jahren gelernt, daß Molekülbildung und die Emission von Radiostrahlung zwei wichtige Prozesse sind, die in den Tiefen des Weltraums ablaufen. Beide Prozesse finden nicht nur statt, wenn Energie von Sternen abgestrahlt wird (vgl. Abbildung 2), sondern auch dann, wenn die Sternbildung in interstellaren Wolken stattfindet. Interstellare Materie und Sterne bilden keine abgeschlossenen oder statischen Einheiten, sondern sind durch einen gigantischen Kreislauf miteinander verbunden (Abbildung 3) und einer strukturbildenden Evolution unterworfen. Über die Molekülspektren, also sozusagen die Fingerabdrücke eines bestimmten Moleküls, können wir die Existenz der Moleküle in den verschiedenen Phasen dieses Kreislaufes nachweisen. Der Nachweis gelingt durch den exakten Vergleich der Linienfrequenzen der interstellaren Spektren mit den Linienpositionen der im Laboratorium gemessenen Spektren. Ist die Identität eines Moleküls einmal festgelegt, können wir das Molekül seinerseits benutzen, um die physikalischen und chemischen Eigenschaf-

ten seines Aufenthaltsortes, d.h. der interstellaren Wolken, zu erforschen. Wir können aus der Intensität der Spektrallinien z.B. die Konzentration der Moleküle, die Temperatur und die Anregungsmechanismen ableiten, die mit der Chemie der Molekülbildung zusammenhängen [3a].

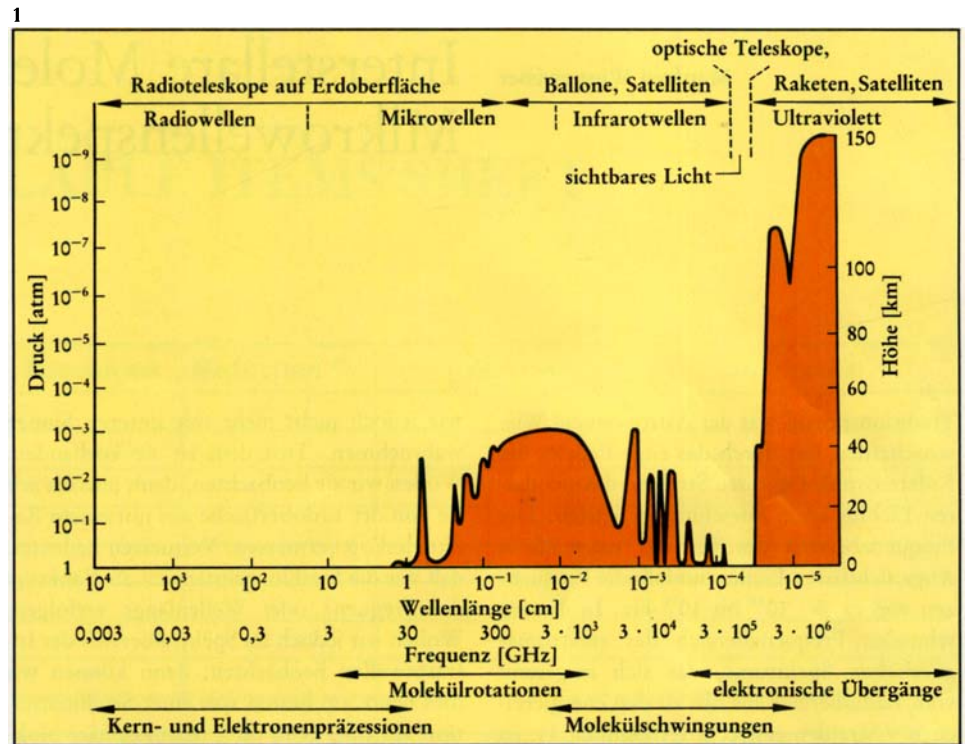
Interstellare Materie

Unsere Galaxis, die Milchstraße, besteht aus Sternen und aus interstellarer Materie. Die interstellare Materie besteht im allgemeinen aus zwei Komponenten, nämlich Gas und Staub, die ziemlich heterogen zwischen den Sternen verteilt sind. Die grobe Verteilung selbst folgt jedoch recht eindeutig der Verteilung der Sterne entlang den Spiralarmen. Allein diese Masseverteilung deutet schon auf die eingangs erwähnte Wechselbeziehung zwischen Sternmaterie und interstellarer Materie hin (vgl. Abbildung 3): Sterne bilden sich in den Regionen hoher Konzentrationen interstellarer Materie, d.h. den interstellaren Wolken. Diese Gebilde aus Gas und kosmischem Staub sind, soweit wir heute wissen, die größten galaktischen Objekte mit einer linearen Ausdehnung zwischen 0,5 pc bis 150 pc (lies parsec: $1 \text{ pc} = 3,26 \text{ Lichtjahre} = 3,09 \cdot 10^{18} \text{ cm}$). Die Korngrößen des interstellaren Staubes werden auf einige Mikrometer ($1 \mu\text{m} = 10^{-6} \text{ m} = 10^{-4} \text{ cm}$) geschätzt, die der Gasmoleküle liegen im Bereich einiger 100 pm oder 10^{-8} cm ($1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m} = 10^{-10} \text{ cm}$). In Abbildung 4 sind die Dimensionen des beobachtbaren Makro- und Mikrokosmos im logarithmischen Maßstab zusammengestellt. Aufgrund des geschätzten Alters des Universums von ca. 10^{10} Jahren und aufgrund der konstanten Lichtgeschwindigkeit von ca. $300\,000 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$ hat das beobachtbare Universum eine Ausdehnung von ca. 10^{10} Lichtjahren oder 10^{28} cm .

Nach unseren heutigen Erkenntnissen ist das Staub-zu-Gas-Verhältnis über die gesamte Galaxis hinweg nahezu konstant, mit Aus-

nahme des galaktischen Zentrums. Tabelle 1 enthält Information über die Masseverteilung in der Milchstraße und die Komponenten der interstellaren Materie. Gleichzeitig gibt sie in gedrängter Form einen Überblick über die Untersuchungsmethoden, die uns Informationen über die interstellaren Gas- und Staubwolken liefern können. Wie wir der Tabelle 1 ferner entnehmen können, wird die Masse der interstellaren Materie auf ca. 10 Prozent der gesamten galaktischen Masse von ca. $2 \cdot 10^{11}$ Sonnenmassen (1 Sonnenmasse = $1 M_{\odot} = 1,98 \cdot 10^{33}$ g) geschätzt. Vor etwa 10^{10} Jahren bei der Entstehung der Galaxis bestand diese Materie hauptsächlich aus Wasserstoffgas und etwas Heliumgas. Seit dieser Zeit sind 90 Prozent der galaktischen Masse in Sterne umgewandelt worden. Zum Teil wurde diese Materie wieder durch den eingangs erwähnten Kreisprozeß während der Phasen extensiven Massenverlusts der stellaren Evolution, wie stellare Winde, Novae- und Supernovae-Explosionen und planetare Nebel, an den interstellaren Raum zurückgegeben (vgl. Abbildung 3). Daraus können wir folgern, daß zwei Quellen für das heute vorhandene interstellare Material verantwortlich sind:

- die Materie, die vom Urknall herrührt, wie Wasserstoff, Deuterium und Helium, und



● die Asche, die durch die in den Sternen ablaufenden nuklearen Prozesse gebildet wird.

Dieser Teil der interstellaren Materie besteht aus Gas und Staub, dessen molekulare Zusammensetzung im wesentlichen alle Elemente enthält, deren Masse größer als die

Abb. 1. Dämpfung der elektromagnetischen Strahlung in der Erdatmosphäre. Die ausgezogene Kurve über den orange Gebieten gibt die Höhe an, in der die Intensität der externen Strahlung auf die Hälfte ihres ursprünglichen Wertes bei einer gegebenen Wellenlänge oder Frequenz abgesunken ist [1]. Für die verschiedenen Wellenlängenbereiche sind die physikalischen Phänomene und die Beobachtungsmethoden angegeben. Alle beobachteten interstellaren Linienfrequenzen liegen innerhalb der atmosphärischen Fenster [2].

Tabelle 1. Interstellare Materie in der Milchstraße (gesamte galaktische Masse ca. $2 \cdot 10^{11} M_{\odot}$; $1 M_{\odot} = 1,98 \cdot 10^{33}$ g).

Materieverteilung	Untersuchungsmethoden
Gesamtmasse der interstellaren Materie $\sim 5 \cdot 10^9 M_{\odot}$ davon: 1% Staub	Extinktion des Sternenlichtes FIR-Emissions- und Polarisationsmessung
99% Gas	3% ionisiert (H^+ , He^+ , C^+ , ...) Rekombinationslinien Pulsar-Dispersion Kontinuum-Emissionsstrahlung Emissionslinien von Nebeln
	97% neutral
	molekulare Form (H_2 , CO , H_2CO , ...) Moleküllinien

Abb. 2. Das solare Spektrum reicht von den Radiowellen bis zum Ultravioletten. Die solare Strahlungsflußdichte S folgt von einer Wellenlänge von 1 cm bis in den ultravioletten Bereich der Energieverteilung eines schwarzen Strahlers und gehorcht damit dem Planckschen Gesetz: $S = [(2h^3\Omega_s)/c^2] 1/(e^{h\nu/kT} - 1)$ Watt $m^{-2} Hz^{-1}$ mit $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ Js (Plancksche Konstante); ν = Frequenz in Hz; $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ JK $^{-1}$ (Boltzmannsche Konstante); T = Temperatur in K; Ω_s = Raumwinkel der Strahlungsquelle in ster; $c = 3 \cdot 10^8$ ms $^{-1}$ (Lichtgeschwindigkeit). – Im Radio- und Mikrowellenbereich strahlt die Sonne (rote Kurve) je nach Sonnenfleckaktivität deutlich mehr Energie ab, als einem schwarzen Strahler der Oberflächentemperatur 6000 K entspricht. Die äquivalenten Strahlungstemperaturen variieren zwischen 10^4 K und 10^{10} K je nach Wellenlänge [3].

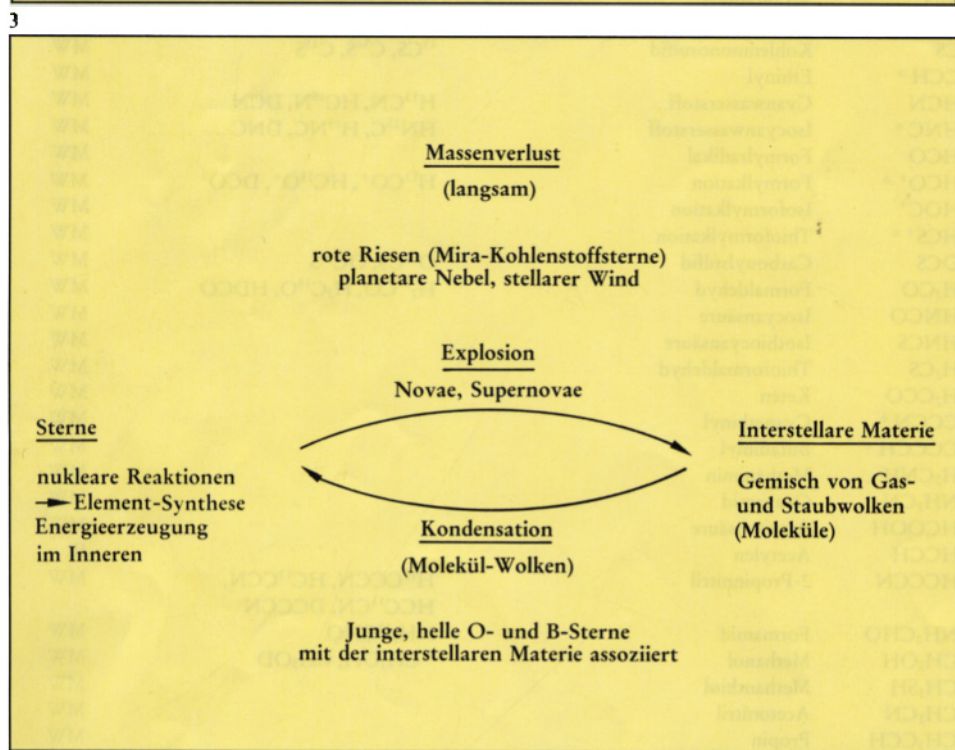
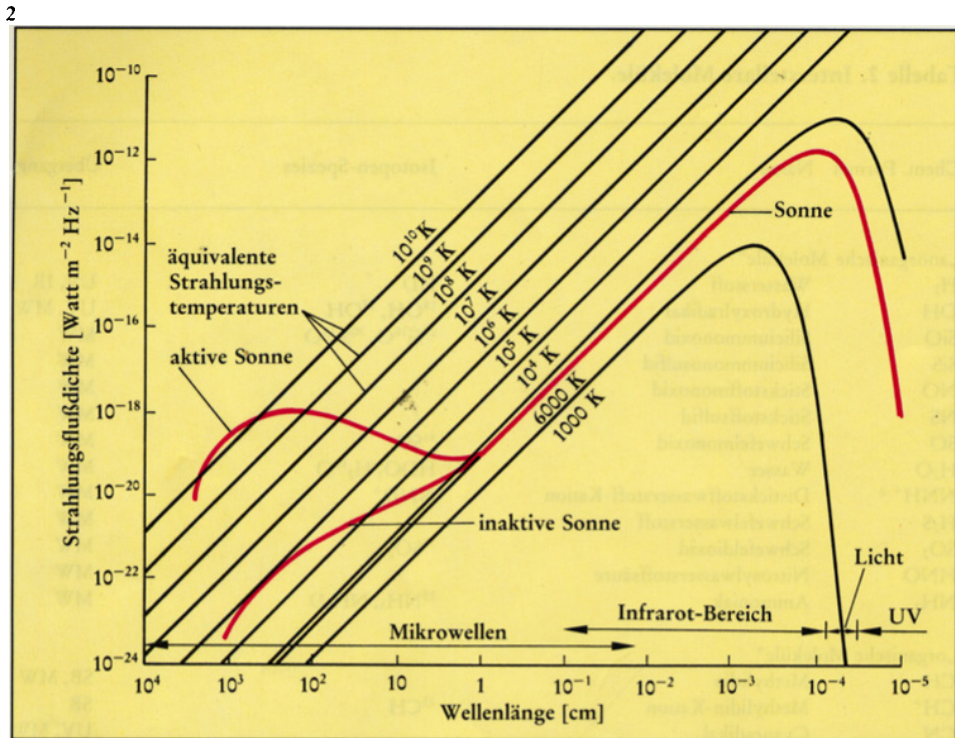
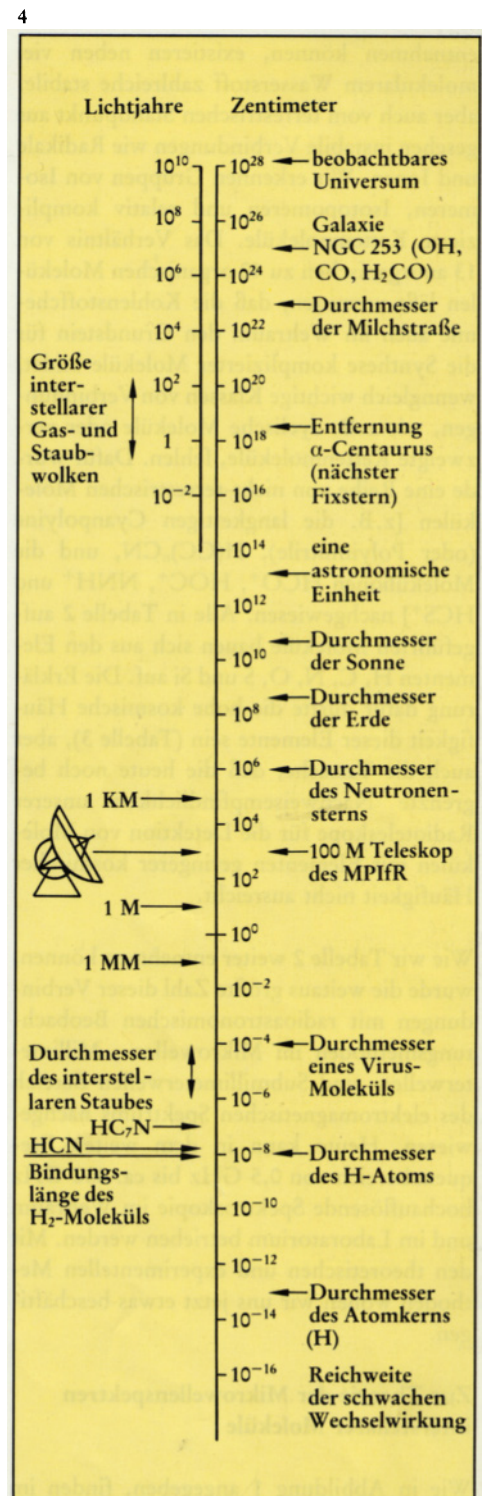


Abb. 3. Massenaustausch zwischen Sternen und interstellarer Materie. Sterne, die sich einmal aus der Materie interstellarer Wolken gebildet haben, geben über verschiedene Mechanismen in den späten Phasen ihrer Entwicklung wieder Materie an das interstellare Medium zurück. Diese Materie ist aufgrund der in den Sternen abgelaufenen Kernreaktionen mit schweren Elementen angereichert.

Abb. 4. Vergleich zwischen den astronomischen Dimensionen des Makrokosmos und den Dimensionen des Mikrokosmos. Die interstellaren Wolken gehören zu den größten galaktischen Objekten, die man heute mit Hilfe der Mikrowellenspektren ihrer atomaren und molekularen Bestandteile untersuchen kann.



Masse des Kohlenstoffs ist. Die chemische Zusammensetzung des interstellaren Staubes ist nicht bekannt. Vermutlich handelt es sich um Silicate, Kohlenstoff- und Eisenverbindungen sowie Eis. Wesentlich besser Bescheid wissen wir über die Gaskomponenten in den interstellaren Wolken, denn über die Molekülspektren können wir diese sehr genau vermessen. In Tabelle 2 sind die heute sicher nachgewiesenen interstellaren Moleküle zusammengestellt. Wie wir dieser Tabelle

entnehmen können, existieren neben viel molekularem Wasserstoff zahlreiche stabile, aber auch vom terrestrischen Standpunkt aus gesehen instabile Verbindungen wie Radikale und Ionen. Wir erkennen Gruppen von Isomeren, Isotopomeren und relativ komplizierte Kettenmoleküle. Das Verhältnis von 13 anorganischen zu 40 organischen Molekülen läßt vermuten, daß die Kohlenstoffchemie auch im Weltraum den Grundstein für die Synthese komplizierter Moleküle bildet, wengleich wichtige Klassen von Verbindungen, wie z.B. cyclische Moleküle oder verzweigte Kettenmoleküle, fehlen. Dafür wurde eine Reihe von nicht-terrestrischen Molekülen [z.B. die langkettigen Cyanpolyine (oder Polyinnitrile), $H(CC)_nCN$, und die Molekülionen HCO^+ , HOC^+ , NNH^+ und HCS^+] nachgewiesen. Alle in Tabelle 2 aufgeführten Moleküle bauen sich aus den Elementen H, C, N, O, S und Si auf. Die Erklärung dafür dürfte die hohe kosmische Häufigkeit dieser Elemente sein (Tabelle 3), aber auch die Tatsache, daß die heute noch begrenzte Nachweisempfindlichkeit unserer Radioteleskope für die Detektion von Molekülen mit Elementen geringerer kosmischer Häufigkeit nicht ausreicht.

Wie wir Tabelle 2 weiter entnehmen können, wurde die weitaus größte Zahl dieser Verbindungen mit radioastronomischen Beobachtungsmethoden im Mikrowellen-, Millimeterwellen- und Submillimeterwellen-Bereich des elektromagnetischen Spektrums nachgewiesen. Heute kann in dem weiten Frequenzbereich von 0,5 GHz bis ca. 650 GHz hochauflösende Spektroskopie im Weltraum und im Laboratorium betrieben werden. Mit den theoretischen und experimentellen Methoden wollen wir uns jetzt etwas beschäftigen.

Zur Theorie der Mikrowellenspektren interstellarer Moleküle

Wie in Abbildung 1 angegeben, finden im Mikrowellenbereich hauptsächlich die Molekülrotationen statt. Warum benötigen wir einen Ausflug in die Theorie der Molekül-

*erste Identifizierung des Moleküls aufgrund des interstellaren Spektrums

UV = Ultraviolett

IR = Infrarot

MW = Mikrowellen

SB = sichtbarer Wellenlängenbereich

Tabelle 2. Interstellare Moleküle.

Chem. Formel	Name	Isotopen-Spezies	Übergang
„anorganische Moleküle“			
H ₂	Wasserstoff	HD	UV, IR
OH	Hydroxylradikal	¹⁸ OH, ¹⁷ OH	UV, MW
SiO	Siliciummonoxid	²⁹ Si ¹⁶ O, ³⁰ Si ¹⁶ O	MW
SiS	Siliciummonosulfid		MW
NO	Stickstoffmonoxid		MW
NS	Stickstoffsulfid		MW
SO	Schwefelmonoxid	³⁴ SO	MW
H ₂ O	Wasser	HDO, H ₂ ¹⁸ O	MW
NNH ⁺ *	Distickstoffwasserstoff-Kation	NND ⁺	MW
H ₂ S	Schwefelwasserstoff		MW
SO ₂	Schwefeldioxid	³⁴ SO ₂	MW
HNO	Nitrosylwasserstoffsäure		MW
NH ₃	Ammoniak	¹⁵ NH ₃ , NH ₂ D	MW
„organische Moleküle“			
CH	Methylidin		SB, MW
CH ⁺	Methylidin-Kation	¹³ CH	SB
CN	Cyanradikal		UV, MW
CO	Kohlenmonoxid	¹³ CO, C ¹⁸ O, C ¹⁷ O, ¹³ C ¹⁸ O	UV, MW
CS	Kohlenmonosulfid	¹³ CS, C ³⁴ S, C ³³ S	MW
CCH *	Ethynyl		MW
HCN	Cyanwasserstoff	H ¹³ CN, HC ¹⁵ N, DCN	MW
HNC *	Isocyanwasserstoff	HN ¹³ C, H ¹⁵ NC, DNC	MW
HCO	Formylradikal		MW
HCO ⁺ *	Formylkation	H ¹³ CO ⁺ , HC ¹⁸ O ⁺ , DCO ⁺	MW
HOC ⁺	Isoformylkation		MW
HCS ⁺ *	Thioformylkation		MW
OCS	Carbonylsulfid	O ¹³ CS, OC ³⁴ S	MW
H ₂ CO	Formaldehyd	H ₂ ¹³ CO, H ₂ C ¹⁸ O, HDCO	MW
HNCO	Isocyansäure		MW
HNCS	Isothiocyansäure		MW
H ₂ CS	Thioformaldehyd		MW
H ₂ CCO	Keten		MW
CCCN *	Cyanethinyl		MW
CCCCH *	Butadiinyl		MW
H ₂ CNH	Methanimin		MW
NH ₂ CN	Cyanamid		MW
HCOOH	Ameisensäure		MW
HCCH	Acetylen		IR
HCCCN	2-Propinnitril	H ¹³ CCCN, HC ¹³ CCN, HCC ¹³ CN, DCCCN	MW
NH ₂ CHO	Formamid	NH ₂ ¹³ CHO	MW
CH ₃ OH	Methanol	¹³ CH ₃ OH, CH ₃ OD	MW
CH ₃ SH	Methanthiol		MW
CH ₃ CN	Acetonitril		MW
CH ₃ CCH	Propin		MW
CH ₃ NH ₂	Methylamin		MW
CH ₃ CHO	Acetaldehyd		MW
H ₂ CCHCN	2-Propennitril		MW
HCCCCCN	2,4-Pentadiinnitril	DCCCCCN	MW
HCOOCH ₃	Ameisensäuremethylester		MW
(CH ₃) ₂ O	Dimethylether		MW
CH ₃ CH ₂ OH	Ethanol		MW
CH ₃ CH ₂ CN	Propionitril		MW
HC ₇ N	2,4,6-Heptatriinnitril		MW
HC ₉ N *	2,4,6,8-Nonatetrainnitril		MW
HC ₁₁ N *	2,4,6,8,10-Undecapentainnitril		MW
HOCO ⁺ oder HOCN (mögliche Moleküle für unbekannte Spezies)			

Tabelle 3. Kosmische Häufigkeit der molekülbildenden Elemente (Teilchenhäufigkeit bezogen auf Wasserstoff H = 1,00).

He = 0,09	Si = $4,8 \cdot 10^{-5}$
C = $2,3 \cdot 10^{-4}$	S = $2,1 \cdot 10^{-5}$
N = $1,3 \cdot 10^{-4}$	Na = $4,4 \cdot 10^{-6}$
O = $6,0 \cdot 10^{-4}$	Ca = $2,5 \cdot 10^{-6}$
Mg = $4,4 \cdot 10^{-5}$	Fe = $3,2 \cdot 10^{-5}$

H : He : (alle schwereren Elemente)
= 70 : 28 : 2 (Massenverhältnisse) oder
92 : 7,8 : 0,12 (Teilchenzahlverhältnisse).

spektren? Um das „Fingerabdruck“-Spektrum eines Moleküls zu verstehen, muß man seine Struktur, den Aufbau seines Energieniveauschemas sowie die Auswahlregeln kennen. Will man über die Intensitäten der beobachtbaren Spektrallinien Informationen wie Dichte der Moleküle in den interstellaren Wolken, ihre Temperatur und aus den Linienbreiten Informationen über die Molekülbewegungen (Doppler-Effekt) ableiten, muß man zuerst die grundsätzlichen physikalischen Phänomene verstehen. Um die Rotation eines Moleküls korrekt beschreiben zu können, müssen wir uns der Quantenmechanik bedienen. Wir wollen jedoch keine ausführliche Diskussion der Schrödinger-Gleichung beginnen, sondern nur die wesentlichen Energiebeiträge, die zur Beschreibung und Analyse der hochaufgelösten interstellaren und terrestrischen Spektren gebraucht werden, entsprechend ihrer Größenordnung erwähnen:

● **Starre Rotation des Moleküls.** Die Struktur des Moleküls bestimmt über die Trägheitsmomente die Rotationskonstanten und damit die Rotationsenergien.

● **Zentrifugalaufweitung.** Durch die bei der Rotation eines Moleküls entstehende Zentrifugalkraft kommt es zu einer Verzerrung der nicht mehr starr gedachten chemischen Bindung, was im allgemeinen zur Aufweitung oder Verlängerung des Moleküls führt.

● **Inversion.** Enthält ein Molekül z.B. eine H₂N-Gruppe, wie in NH₃ oder H₂N-CN, dann kann diese Gruppe eine Inversionsschwingung ausführen (näher erläutert in der Legende zu Abbildung 10), was zu einer Aufspaltung der Energieniveaus führt.

● **Interne Rotation.** Enthält ein Molekül z.B. eine Methylgruppe, dann kann diese Gruppe gegen den als starr angenommenen Rest des Moleküls rotieren.

● **Kernquadrupolkopplung.** Enthält ein im Molekülverband vorhandenes Atom einen von der Kugelgestalt abweichenden Kern, dann besitzt ein solcher Kern ein elektrisches Kernquadrupolmoment. Der Einfluß des Kernquadrupolmomentes auf die Rotation des Moleküls muß berücksichtigt werden. Der Stickstoffkern mit Kernspin $I = 1\hbar$ besitzt ein solches Quadrupolmoment.

● **Spin-Rotations-Kopplung** liegt vor, wenn ein ungepaartes Elektron im Molekül vorhanden ist.

● Ferner ist noch eine Reihe von weiteren Effekten, wie Kern-Spin-Rotations-Kopplung, Coriolis-Kopplung etc., zu berücksichtigen, die wir hier nur erwähnen, aber nicht besprechen wollen.

Zweiatomige und lineare Moleküle

Fast alle Spektren, die im Frequenzbereich von 0,5 GHz bis 650 GHz untersucht werden, sind reine Rotationsspektren, d.h. im klassischen Modell, daß die Moleküle um eine durch den Schwerpunkt gelegte Achse rotieren. Das Rotationsspektrum hängt hauptsächlich von der geometrischen Struktur des Moleküls ab. Für die zweiatomigen oder linearen Moleküle wie CO, CS, HCO⁺, HOC⁺, HCS⁺, HNC, HCN und HCCCN etc. nimmt das Rotationsspektrum eine sehr einfache Form an. Es besteht aus einer Serie äquidistanter Linien, sofern das Molekül als starr angenommen wird. Die Absorptions- oder Emissionsfrequenzen ν_{ou} ergeben sich als Differenz von je zwei Rotationsenergieniveaus (Gleichung 1), wobei E_o und E_u die

$$\nu_{ou} = (E_o - E_u)/h \quad (1)$$

Energien des jeweils oberen und unteren Rotationsenergieniveaus sind und $h = 6,626176 \cdot 10^{-34}$ Js das Plancksche Wirkungsquantum ist. Aufgrund der Quantenmechanik ergibt sich als Lösung des Rotationsproblems eines starren Rotators für die Energie der Ausdruck in (Gleichung 2).

$$E = [h^2/(8\pi^2 I_0)]J(J+1) \quad (2)$$

mit $J = 0, 1, 2, 3, \dots$

In diesem Ausdruck bedeutet I_0 das Haupt-

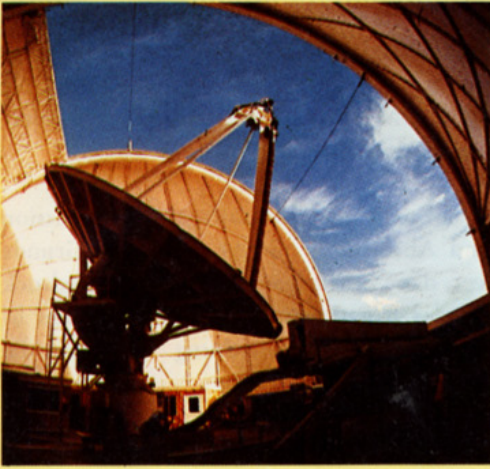
trägheitsmoment des Moleküls um eine zur Figurenachse senkrechte Rotationsachse, wie dies in Abbildung 5 für die Moleküle HCN, HCC-CN etc. angedeutet ist. J ist die Rotationsquantenzahl.

Wenn man die Auswahlregeln für Emission und Absorption mit $\Delta J = \pm 1$ zu Grunde legt, dann erhält man den Frequenzausdruck für das Rotationsspektrum eines starren linearen Rotators (Gleichung 3), wobei die

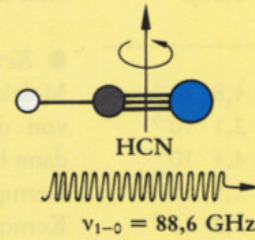
$$\nu = (E_{J+1} - E_J)/h = [2(h)/(8\pi^2 I_0)]J(J+1) = 2B_0 J(J+1) \quad (3)$$

Rotationskonstante B_0 dem Trägheitsmoment des Moleküls umgekehrt proportional ist. J bedeutet die Rotationsquantenzahl für das jeweils untere Energieniveau. Wie wir der Abbildung 5 entnehmen können, variieren die B_0 -Werte der interstellaren Moleküle HCN bis HC₁₁N über einen weiten Bereich, und damit sind natürlich auch die Frequenzabstände der zugehörigen Rotationsenergieniveaus stark verschieden. Dieses charakteristische Verhalten ist in Abbildung 6 dramatisch dargestellt. Betrachten wir nochmals Abbildung 5, dann sehen wir, daß der Rotationsübergang $J = 1 - 0$ entsprechend der Zunahme des Trägheitsmomentes des Moleküls nach tieferen Frequenzen verschoben ist. Die sich nach höheren Frequenzen anschließenden Rotationsübergänge erstrecken sich, wie sich Abbildung 6 entnehmen läßt, über einen weiten Frequenzbereich bis hin zu den Submillimeterwellen und Infrarotwellen. Damit wird ganz eindeutig demonstriert, daß die Rotationskonstante eine molekülspezifische Größe ist und daß man sowohl bei der Spektroskopie im Laboratorium als auch bei der interstellaren Spektroskopie einen weiten Frequenzbereich benötigt, will man einerseits die Übergänge den Molekülen zuordnen und andererseits über die Intensitäten der Spektrallinien die Besetzungsverhältnisse der Energieniveaus erfahren.

Die präzise Bestimmung der Rotationskonstante eines zweiatomigen Moleküls erlaubt auch eine präzise Ermittlung des Kernabstandes für den jeweiligen Schwingungszustand, in dem sich das zu untersuchende Molekül befindet. Befindet sich das Molekül im Grundzustand, dann bezeichnen wir diesen Zustand mit der Schwingungsquantenzahl $v = 0$, d.h. alle spektroskopischen Größen, die sich auf diesen Zustand beziehen, bekommen den Index 0. Damit ist B_0 die Rotationskonstante für den Grundzustand und I_0 das ent-

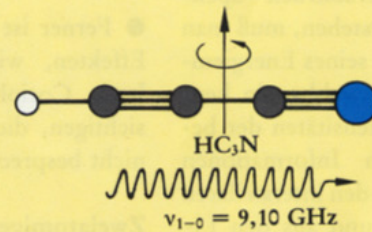


Entdeckt Juni 1970
11 m-Teleskop
National Radio
Astronomy Observatory
Kitt Peak, Arizona, U.S.A.



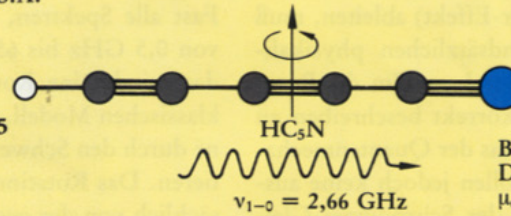
Blausäure
 $B_0 = 44315,975 \text{ MHz}$
 $D_0 = 872,40 \text{ kHz}$
 $\mu_e = 3,06 \text{ Debye}$

Entdeckt Juli 1970
43 m-Teleskop
National Radio
Astronomy Observatory
Greenbank,
West-Virginia, U.S.A.



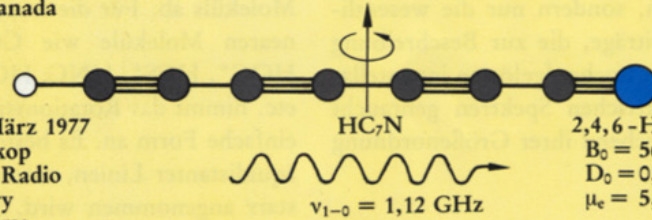
2-Propinnitril
 $B_0 = 4549,0583 \text{ MHz}$
 $D_0 = 0,5444 \text{ kHz}$
 $\mu_e = 3,72 \text{ Debye}$

Entdeckt Nov. 1975
46 m-Teleskop
Algonquin Radio
Observatory
Lake Traverse,
Ontario, Canada



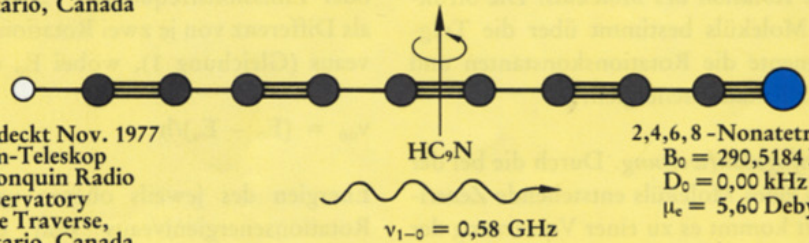
2,4-Pentadiinnitril
 $B_0 = 1331,3313 \text{ MHz}$
 $D_0 = 0,0257 \text{ kHz}$
 $\mu_e = 4,33 \text{ Debye}$

Entdeckt März 1977
46 m-Teleskop
Algonquin Radio
Observatory
Lake Traverse,
Ontario, Canada



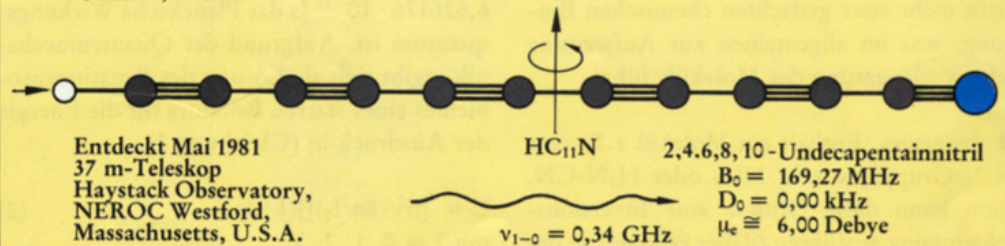
2,4,6-Heptatriinnitril
 $B_0 = 564,00074 \text{ MHz}$
 $D_0 = 0,00008 \text{ kHz}$
 $\mu_e = 5,00 \text{ Debye}$

Entdeckt Nov. 1977
46 m-Teleskop
Algonquin Radio
Observatory
Lake Traverse,
Ontario, Canada



2,4,6,8-Nonatetrainnitril
 $B_0 = 290,5184 \text{ MHz}$
 $D_0 = 0,00 \text{ kHz}$
 $\mu_e = 5,60 \text{ Debye}$

Entdeckt Mai 1981
37 m-Teleskop
Haystack Observatory,
NEROC Westford,
Massachusetts, U.S.A.



2,4,6,8,10-Undecapainnitril
 $B_0 = 169,27 \text{ MHz}$
 $D_0 = 0,00 \text{ kHz}$
 $\mu_e = 6,00 \text{ Debye}$

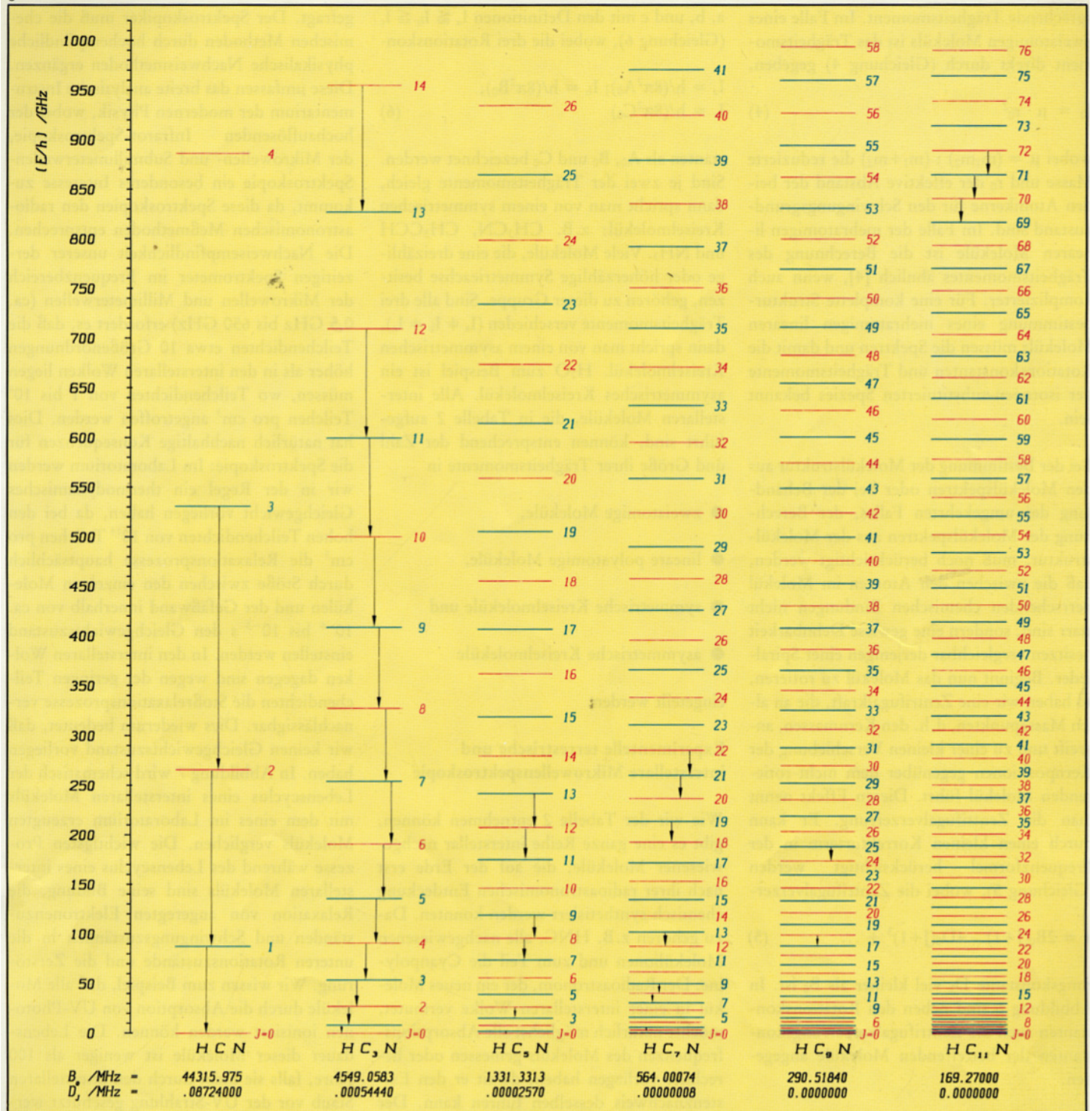


Abb. 5. Schematische Darstellung der interstellar bis heute nachgewiesenen Cyanpolyine. An diesen Entdeckungen waren vier Radioteleskope in den USA und Kanada beteiligt. Die Cyanpolyine lassen sich mit einigen Superlativen beschreiben: 1. Die Reihe beginnt mit der Blausäure HCN und einer Moleküllänge von 2,219 Å (1 Å = 10^{-8} cm = 100 pm) und endet zur Zeit mit 2,4,6,8,10-Undecapentainnitril, HC₁₁N, das eine Länge von 15,085 Å hat. Damit ist

HC₁₁N das längste bekannte lineare Molekül. 2. Gleichzeitig ist HC₁₁N das schwerste interstellare Molekül mit einer Masse von 147 amu (atomic mass units = Atomare Masseneinheiten) und dem größten Trägheitsmoment $I_b = 2985,6 \text{ amu} \cdot \text{Å}^2$ sowie der kleinsten Rotationskonstanten $B_0 = 169,27 \text{ MHz}$. 3. Die Cyanpolyine haben sehr große elektrische Dipolmomente, die zwischen 3,00 Debye und 6,00 Debye liegen. Ihre Rotationspektren sind daher

sehr intensiv und erlauben es, Dichte, Temperatur und Dynamik der Molekülwolken zu bestimmen.

Abb. 6. Ausschnitt aus dem Rotationsenergietermschema der Cyanpolyine im Schwingungsgrundzustand. Die Pfeile bezeichnen die interstellar beobachteten Emissionslinien.

sprechende Trägheitsmoment. Im Falle eines zweiatomigen Moleküls ist das Trägheitsmoment direkt durch (Gleichung 4) gegeben,

$$I_0 = \mu \cdot r_0^2 \quad (4)$$

wobei $\mu = (m_1 m_2) : (m_1 + m_2)$ die reduzierte Masse und r_0 der effektive Abstand der beiden Atomkerne für den Schwingungsgrundzustand sind. Im Falle der mehratomigen linearen Moleküle ist die Berechnung des Trägheitsmomentes ähnlich [4], wenn auch komplizierter. Für eine komplette Strukturbestimmung eines mehratomigen linearen Moleküls müssen die Spektren und damit die Rotationskonstanten und Trägheitsmomente der isotonen-substituierten Spezies bekannt sein.

Bei der Bestimmung der Molekülstruktur aus den Molekülspektren oder bei der Behandlung des umgekehrten Falles, der Berechnung der Molekülspektren aus der Molekülstruktur, muß noch berücksichtigt werden, daß die zwischen den Atomen im Molekül herrschenden chemischen Bindungen nicht starr sind, sondern eine gewisse Dehnbarkeit besitzen vergleichbar derjenigen einer Spiralfeder. Beginnt nun das Molekül zu rotieren, so haben wir eine Zentrifugalkraft, die an allen Massepunkten, d.h. den Kernmassen, angreift und zu einer kleinen Verschiebung der Kernpositionen gegenüber dem nicht-rotierenden Molekül führt. Diesen Effekt nennt man die Zentrifugalverzerrung. Er kann durch einen kleinen Korrekturterm in der Frequenzformel berücksichtigt werden (Gleichung 5), wobei die Zentrifugalverzer-

$$v = 2B_0(J+1) - 4D_0(J+1)^3 + \dots \quad (5)$$

rungskonstante D_0 viel kleiner als B_0 ist. In Abbildung 6 sind neben den Rotationskonstanten auch die Zentrifugalverzerrungskonstanten der betreffenden Moleküle angegeben.

Symmetrische und asymmetrische Kreisel-moleküle

Für nicht-lineare Moleküle sind die Berechnungen der Struktur, der Rotationsenergien und Zentrifugalverzerrungsterme sowie der aufgrund der Auswahlregeln daraus abgeleiteten Spektren viel komplizierter. Trotzdem können sie mit der gleichen Präzision wie bei linearen Molekülen durchgeführt werden. Wir haben im allgemeinen drei Trägheitsmomente bezogen auf die Hauptrotationsachsen

a, b, und c mit den Definitionen $I_a \leq I_b \leq I_c$ (Gleichung 6), wobei die drei Rotationskon-

$$\begin{aligned} I_a &= h/(8\pi^2 A_0); & I_b &= h/(8\pi^2 B_0); \\ I_c &= h/(8\pi^2 C_0) \end{aligned} \quad (6)$$

stanten als A_0 , B_0 und C_0 bezeichnet werden. Sind je zwei der Trägheitsmomente gleich, dann spricht man von einem symmetrischen Kreisel-molekül: z.B. CH_3CN , CH_3CCH und NH_3 . Viele Moleküle, die eine dreizählige oder höherzählige Symmetrieachse besitzen, gehören zu dieser Gruppe. Sind alle drei Trägheitsmomente verschieden ($I_a \neq I_b \neq I_c$), dann spricht man von einem asymmetrischen Kreisel-molekül. H_2O zum Beispiel ist ein asymmetrisches Kreisel-molekül. Alle interstellaren Moleküle, die in Tabelle 2 aufgeführt sind, können entsprechend der Zahl und Größe ihrer Trägheitsmomente in

- zweiatomige Moleküle,
- lineare polyatomige Moleküle,
- symmetrische Kreisel-moleküle und
- asymmetrische Kreisel-moleküle

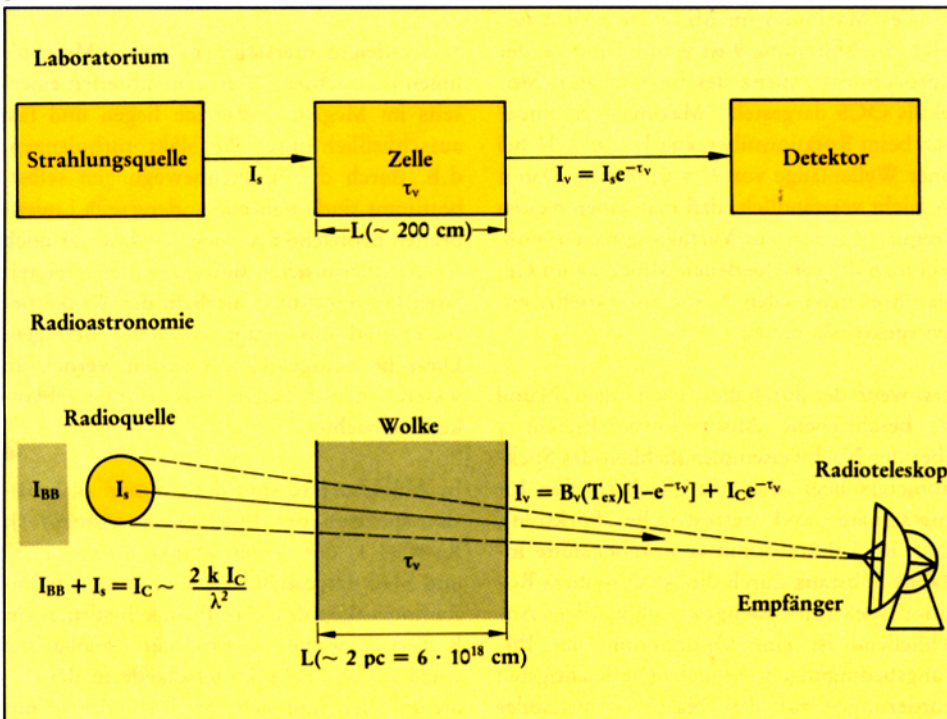
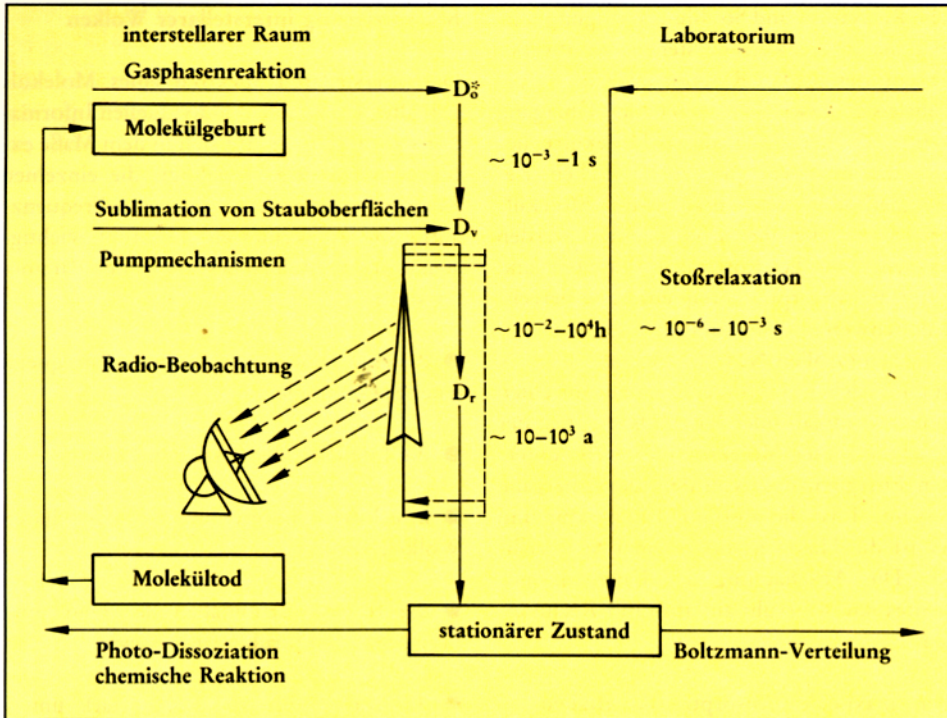
eingeteilt werden.

Experimentelle terrestrische und interstellare Mikrowellenspektroskopie

Wie wir der Tabelle 2 entnehmen können, gibt es eine ganze Reihe interstellar nachgewiesener Moleküle, die auf der Erde erst nach ihrer radioastronomischen Entdeckung chemisch synthetisiert werden konnten. Dazu gehören z.B. HNC , alle nachgewiesenen Moleküle und zum Teil die Cyanpolymere. Der Radioastronom, der ein neues Molekül in einer interstellaren Wolke vermutet, möchte natürlich möglichst alle Absorptionsfrequenzen des Moleküls gemessen oder berechnet vorliegen haben, damit er den Existenznachweis desselben führen kann. Der Chemiker muß dann im terrestrischen Laboratorium nach Synthesewegen suchen, diese Substanzen in nachweisbaren Konzentrationen herzustellen. Dazu wird er das gesamte Instrumentarium der modernen Chemie einsetzen, wie z.B. Photolyse, Blitzlichtphotolyse und Pyrolyse geeigneter Vorläufersubstanzen, bei deren Zersetzung die Bildung der gewünschten Substanz zu erwarten ist. Plasmachemische und physikalische Methoden sowie die Methoden der präparativen organischen und anorganischen Chemie sind

gefragt. Der Spektroskopiker muß die chemischen Methoden durch hochempfindliche physikalische Nachweismethoden ergänzen. Diese umfassen das breite analytische Instrumentarium der modernen Physik, wobei der hochauflösenden Infrarot-Spektroskopie, der Mikrowellen- und Submillimeterwellen-Spektroskopie ein besonderes Interesse zukommt, da diese Spektroskopien den radioastronomischen Meßmethoden entsprechen. Die Nachweisempfindlichkeit unserer derzeitigen Spektrometer im Frequenzbereich der Mikrowellen und Millimeterwellen (ca. 0,5 GHz bis 650 GHz) erfordert es, daß die Teilchendichten etwa 10 Größenordnungen höher als in den interstellaren Wolken liegen müssen, wo Teilchendichten von 1 bis 10^{14} Teilchen pro cm^3 angetroffen werden. Dies hat natürlich nachhaltige Konsequenzen für die Spektroskopie: Im Laboratorium werden wir in der Regel ein thermodynamisches Gleichgewicht vorliegen haben, da bei den hohen Teilchendichten von 10^{14} Teilchen pro cm^3 die Relaxationsprozesse hauptsächlich durch Stöße zwischen den einzelnen Molekülen und der Gefäßwand innerhalb von ca. 10^{-6} bis 10^{-3} s den Gleichgewichtszustand einstellen werden. In den interstellaren Wolken dagegen sind wegen der geringen Teilchendichten die Stoßrelaxationsprozesse vernachlässigbar. Dies wiederum bedeutet, daß wir keinen Gleichgewichtszustand vorliegen haben. In Abbildung 7 wird schematisch der Lebenszyklus eines interstellaren Moleküls mit dem eines im Laboratorium erzeugten Moleküls verglichen. Die wichtigsten Prozesse während des Lebenszyklus eines interstellaren Moleküls sind seine Bildung, die Relaxation von angeregten Elektronenzuständen und Schwingungszuständen in die unteren Rotationszustände und die Zerstörung. Wir wissen zum Beispiel, daß alle Moleküle durch die Absorption von UV-Photonen ionisiert werden können. Die Lebensdauer dieser Moleküle ist weniger als 100 Jahre, falls sie nicht durch den interstellaren Staub vor der UV-Strahlung geschützt werden. In Wolken mit viel interstellarem Staub kann die UV-Strahlung nicht so weit eindringen, so daß im Innern dieser Wolken die Lebensdauer um etliche Größenordnungen auf bis zu 10^6 Jahre ansteigen kann.

Die Entstehungs- und Relaxationsprozesse, die während des Lebenszyklus eines Moleküls stattfinden können, sind für die Deutung und das Verständnis der Beobachtungsdaten wichtig, d.h. man wird vermuten, daß hauptsächlich Emissionsspektren von inter-



stellaren Molekülen zu erwarten sind, während im terrestrischen Laboratorium hauptsächlich Absorptionsspektren beobachtet werden. Tatsächlich ist dies auch der Fall.

In Abbildung 8 sind die grundsätzliche Spektrometeranordnung im Laboratorium und das radioastronomische Spektrometersystem schematisch dargestellt. Die Strahlungstransferfunktion $I_v = f(\nu)$ ist ebenfalls in Abbildung 8 angegeben. Der interessierte Leser

findet eine ausführliche Diskussion dieser Funktion für den terrestrischen und radioastronomischen Nachweis von Molekülen in Lit. [6].

Während bei der Spektroskopie im Laboratorium die Strahlungsquelle fast ausschließlich aus einem monochromatischen, durchstimmbaren Oszillator, z. B. einem Reflexklystron oder einem Rückwärtswellenoszillator, besteht, setzt sich in der Radioastro-

Abb. 7. Lebenszyklus eines Moleküls im interstellaren Raum und im Laboratorium. Die Zeit, die zwischen der Geburt des Moleküls und einem stationären Zustand verstreicht, wird durch die verschiedenen Relaxationsprozesse bestimmt. Vom elektronisch angeregten Zustand D_0^* geht das Molekül über den schwingungsangeregten Zustand D_v in den Rotationszustand D_r über. In den niedrigen Rotationszuständen unterliegt das Molekül den unterschiedlichsten Pumpmechanismen. Z. B. kann es durch Stöße mit angeregten H-Atomen oder H_2 -Molekülen aufgrund der Energieübertragung seinen Rotationszustand verlassen und wieder in einen angeregten Schwingungszustand zurückkehren. Im Laboratorium stellt sich dagegen in der Absorptionszelle im Bruchteil einer Sekunde die Boltzmann-Verteilung des thermodynamischen Gleichgewichtes ein.

Abb. 8. Grundanordnung eines Absorptionsexperiments im Laboratorium im oberen Teil der Abbildung. Im unteren Teil der Abbildung ist entlang des Fahrstrahles die geometrische Anordnung einer radioastronomischen Beobachtung skizziert. Für beide Fälle ist die Energietransferfunktion I_v angegeben. I_s ist die Intensität einer Strahlungsquelle und τ_v ist die optische Tiefe. Im Falle der radioastronomischen Beobachtung haben wir neben der Intensität einer Radioquelle I_s noch die Intensität der kosmischen 2,7 K-Hintergrundstrahlung I_{BB} . $B_\nu(T_{ex})$ ist die Plancksche Funktion einer Strahlungsquelle, einschließlich der Molekülwolke selbst bei der Anregungstemperatur T_{ex} . Die Plancksche Funktion ist in Abbildung 2 dargestellt. Eine ausführliche Diskussion der Energietransferfunktion findet sich in Lit. [6].

her entweder in Absorption gegen diese Kontinuums- oder die kosmische Hintergrundstrahlung gemessen werden oder, wie es im Millimeterwellen-Bereich fast ausnahmslos der Fall ist, als Emissionsstrahlung der angeregten Moleküle nachgewiesen werden. Zur spektralen Zerlegung interstellarer Strahlung benutzt man Autokorrelations-, Filter- und akusto-optische Spektrometer [3].

Terrestrische Spektroskopie extraterrestrischer Moleküle

Sowohl das interstellare Spektrometersystem, das ein Radioteleskop als Strahlungsempfänger enthält, als auch ein terrestrisches Millimeterwellen-Spektrometer können bei etwa gleichen Säulendichten $N_s = N \cdot l$ (N = Teilchenzahl pro cm^3 , l = Länge des Absorptionsweges in cm) absorbierende oder emittierende Moleküle nachweisen, nämlich zwischen 10^{12} bis 10^{14} Teilchen pro cm^2 . Daher haben sie annähernd gleiche Grenzempfindlichkeiten [6].

Wie schon erwähnt, müssen für Moleküle, deren Existenz extraterrestrisch postuliert wird, auf der Erde chemische Methoden entwickelt werden, die es ermöglichen, nachweisbare Mengen der gesuchten Substanz in der Gasphase herzustellen. Um das Suchproblem nach dem unbekanntem Spektrum zu minimalisieren, müssen alle Variablen in der Formel für den Absorptionskoeffizienten einer Spektrallinie optimiert werden. Der Absorptionskoeffizient γ einer Rotationslinie ist in der optischen Tiefe $\tau_\nu = \gamma(\nu, P_0) \cdot l$ enthalten (vgl. Abbildung 8) und durch Gleichung (7) gegeben, in der γ_0 der maximale Absorptionskoeffizient ist (Gleichung 8).

$$\gamma(\nu, P_0) = (\gamma_0) / \{[(\nu - \nu_0) / \Delta\nu]^2 + 1 + KP_0\} \quad (7)$$

$$\gamma_0 = [8\pi^2 f N \nu_0^2 | \langle \mu_{ij} \rangle |^2 / (3ckT\Delta\nu)] \quad (8)$$

Alle physikalischen Größen, die in Gleichung (8) enthalten sind, sollten entweder berechnet, gemessen oder abgeschätzt werden, will man das Suchproblem reduzieren. Aus Gleichung (7) geht klar hervor, daß $\gamma(\nu, P_0)$ nur dann gleich γ_0 ist, wenn das Produkt KP_0 gegen Null geht und ν gegen ν_0 . P_0 ist die eingestrahlte Leistung und K ist die Sättigungskonstante, die vom jeweiligen Relaxationsmechanismus abhängt. Damit deuten die beiden Gleichungen an, daß thermi-

sche Relaxation und Strahlungssättigung miteinander in Konkurrenz stehen, um die Besetzung der beiden Rotationsniveaus zu gewährleisten, zwischen denen der Übergang stattfindet. Bei unbekanntem Molekülen liefern die heutigen quantenchemischen Rechenmethoden sehr brauchbare Molekülstrukturen, die ihrerseits benutzt werden können, um die Rotationskonstanten und damit die Absorptionsfrequenzen zu berechnen. Schwerer vorherzusagen sind die physikalischen Größen N , f , T , $\Delta\nu$ und $\langle \mu_{ij} \rangle$. N ist die Teilchenzahl pro cm^3 der gewünschten Ionen-, Radikal- oder Molekülsorte, f ist der Bruchteil dieser Moleküle im jeweils untersten Energieniveau, von dem der Übergang ausgeht. T ist die absolute Temperatur und $\Delta\nu$ ist die Halbwertsbreite einer Spektrallinie. Die Abschätzung des Übergangsmomentes $\langle \mu_{ij} \rangle$ beruht auf ab-initio-Rechnungen.

Der maximale Absorptionskoeffizient γ_0 durchläuft für jedes Molekül ein charakteristisches Maximum im Millimeterwellen-Bereich. In Abbildung 9 ist γ_0 als Funktion der Absorptionsfrequenz des interstellaren Moleküls OCS dargestellt. Maximales γ_0 findet sich beim Rotationsübergang $J = 32 - 31$ bei einer Wellenlänge von $\lambda = 0,77$ mm. Damit ist leicht verständlich, daß man einen weiten Frequenzbereich zur Verfügung haben muß, will man die verschiedenen Moleküle im Gebiet ihres maximalen Absorptionskoeffizienten spektroskopieren.

Erst wenn der durch die Gleichungen (7) und (8) beschriebene Absorptionskoeffizient γ über der Nachweisempfindlichkeit des Spektrometers liegt (dies gilt gleichermaßen für interstellare und terrestrische Spektren), kann im Laboratorium eine unbekannt instabile Substanz durch die Analyse ihres Rotationspektrums nachgewiesen werden. Anschließend ist eine Optimierung der Bildungsbedingungen möglich. Die wichtigsten Forderungen für den Nachweis instabiler Spezies sind also:

- effiziente Produktion der in Frage kommenden Spezies,
- Optimierung aller chemischen und physikalischen Parameter bei möglichst niedrigen Temperaturen und
- hohe Spektrometerempfindlichkeit sowie
- gute Frequenzvorhersagen.

Klassifizierung interstellarer Wolken

Die interstellaren Spektren eines Moleküls enthalten einen hohen individuellen Informationsgehalt. Dieser läßt sich in dem Maße extrahieren, in dem es gelingt, die einzelnen Rotationsübergänge in höchster Frequenzauflösung zu vermessen. Die fünf wichtigsten experimentell zu bestimmenden Parameter sind:

- die Absorptions- oder Emissionsfrequenz einer Spektrallinie,
- die Intensität der einzelnen Linien,
- ihre Intensitätsverteilung in interstellaren Wolken,
- die Intensitätsanomalien der Fein- und Hyperfeinstrukturübergänge sowie
- die von Wolke zu Wolke stark unterschiedlichen Linienprofile.

So wurden in interstellaren Wolken Moleküllinien beobachtet, deren Linienbreiten einerseits im Megahertz-Bereich liegen und fast ausschließlich durch die Makroturbulenzen, d.h. durch die Wolkenbewegungen selbst, bestimmt sind, während andererseits Linienbreiten beobachtet werden, die fast nur noch auf der thermischen Bewegung der interstellaren Gasmoleküle innerhalb der Wolke beruhen und nur einige Kilohertz betragen. Diese hochaufgelösten Spektren werden im wesentlichen in kalten, ruhigen Dunkelwolken beobachtet.

In Abbildung 10 sind die Ammoniak-Emissionsspektren des Inversionsüberganges (J, K) = (1,1) der beiden Dunkelwolken L183 und S140 dargestellt, wie sie mit dem 100m-Radioteleskop des Max-Planck-Institutes für Radioastronomie in Effelsberg beobachtet wurden. Deutliche Unterschiede in den Linienprofilen sind sichtbar. Im Falle der nur 300 Lichtjahre entfernten Dunkelwolke L183 ist die magnetische Aufspaltung der einzelnen ^{14}N -Hyperfeinstrukturkomponenten aufgelöst, während für die Wolke S140, deren Entfernung zur Erde ca. 3000 Lichtjahre beträgt, nur noch die ^{14}N -Hyperfeinstruktur zu erkennen ist. Bei entfernteren Quellen verursachen die Makroturbulenzen oft einen beträchtlichen Beitrag zur beobachteten Linienbreite, was besonders gut in Abbildung 11 zu sehen ist. Die großen Molekülwolken mit assoziierten Regionen ionisierten Was-

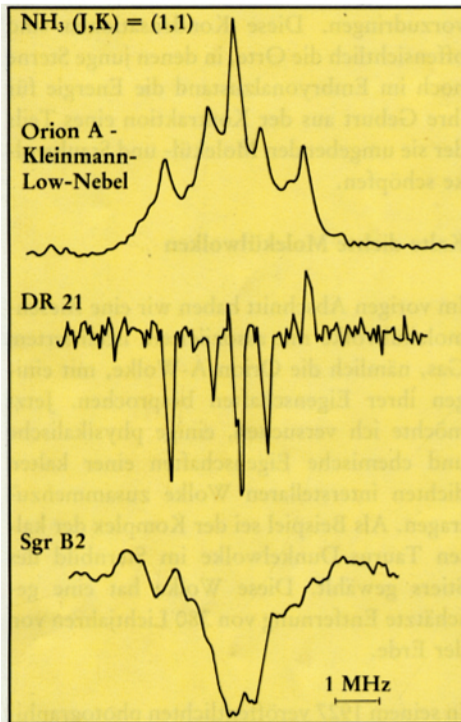
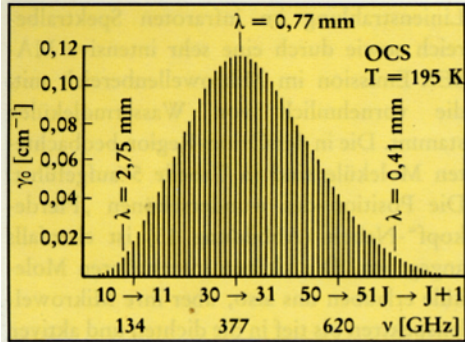
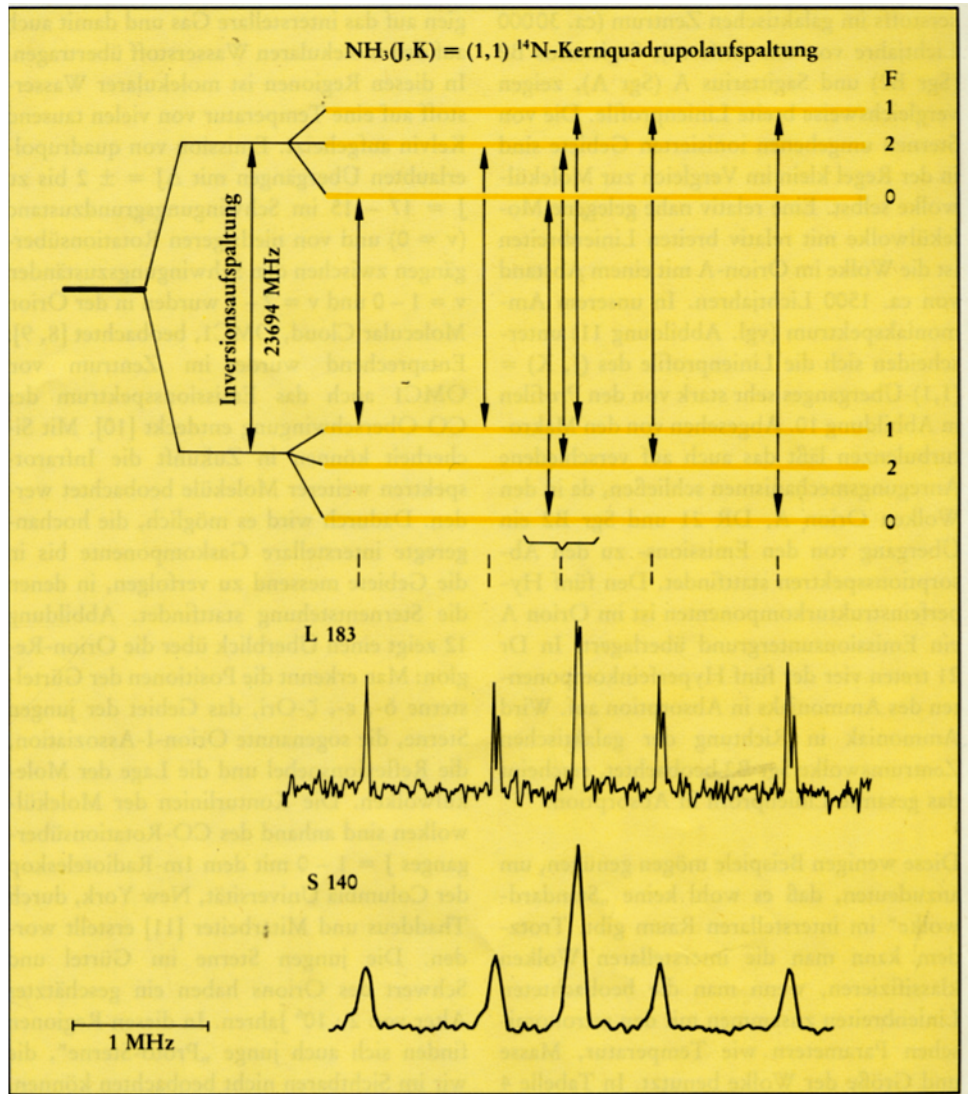


Abb. 9. Verlauf des maximalen Absorptionskoeffizienten γ_0 für Rotationslinien von OCS im Schwingungsgrundzustand als Funktion der Absorptionsfrequenz ν [4].

Abb. 10. Aufgrund des quantenmechanischen Tunneffektes können pyramidal gebaute Moleküle wie z.B. NH_3 eine Inversionsbewegung ausführen. Im Falle des NH_3 würde das Stickstoffatom durch die Ebene der drei H-Atome hindurchschwingen und so eine identische, aber invertierte pyramidale Konfiguration erzeugen. Mathematisch erhält man eine solche invertierte Konfiguration, wenn man einen Vorzeichenwechsel aller Schwerpunktskoordinaten der vier Kernpositionen im NH_3 durchführt. Damit besitzt die potentielle Energiefunktion des Ammoniakmoleküls als Funktion des Abstandes des N-Atoms zur Ebene der drei H-Atome zwei Minima äquivalenter Konfiguration H_3N



und NH_3 . Aufgrund der Mischung der Wellenfunktionen für die beiden NH_3 -Konfigurationen kommt es zu einer Inversionsaufspaltung der Energieniveaus. Da der ^{14}N -Kern von der Kugelgestalt abweicht, besitzt er ein elektrisches Quadrupolmoment, das zu einer weiteren Aufspaltung der Energieniveaus führt. F ist die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses, der sich aus dem Drehimpuls der End-über-End-Rotation des NH_3 -Moleküls und dem Kernspin des Stickstoffkerns zusammensetzt. Die Ammoniak-Emissionsspektren des Inversionsüberganges $(J,K) = (1,1)$ der beiden Dunkelwolken L183 und S140 zeigen Unterschiede in der Breite der Linienprofile. Im Falle der nahe gelegenen Dunkelwolke L183 (Entfernung 300 Lichtjahre) ist die magnetische Aufspaltung der einzelnen ^{14}N -Hyperfeinstrukturkomponenten klar aufgelöst, während für S140 (Entfernung 3000 Lichtjahre) nur noch die ^{14}N -Kernquadrupolhyperfeinstruktur zu er-

kennen ist. Diese Aufnahmen wurden von Winnewisser und Mitarbeitern [7] mit dem 100m-Radioteleskop des Max-Planck-Institutes für Radioastronomie in Effelsberg erhalten.

Abb. 11. Drei ausgewählte Profile des $(J,K) = (1,1)$ -Inversionsüberganges von NH_3 , aufgenommen mit dem 100m-Radioteleskop von Winnewisser und Mitarbeitern [7]. Diese Beobachtungen zeigen die verschiedenen Anregungsbedingungen in den interstellaren Wolken Orion A, DR 21 und Sgr B2. Den fünf Hyperfeinstrukturkomponenten ist im Orion A ein „Emissionsuntergrund“ überlagert. In DR 21 treten vier oder fünf Hyperfeinstrukturkomponenten in Absorption auf, während in Richtung der galaktischen Zentrumswolke Sgr B2 das gesamte Profil in Absorption erscheint.

serstoffs im galaktischen Zentrum (ca. 30000 Lichtjahre von uns entfernt), Sagittarius B2 (Sgr B2) und Sagittarius A (Sgr A), zeigen vergleichsweise breite Linienprofile. Die von Sternen umgebenen ionisierten Gebiete sind in der Regel klein im Vergleich zur Molekülwolke selbst. Eine relativ nahe gelegene Molekülwolke mit relativ breiten Linienbreiten ist die Wolke im Orion-A mit einem Abstand von ca. 1500 Lichtjahren. In unserem Ammoniakspektrum (vgl. Abbildung 11) unterscheiden sich die Linienprofile des (J, K) = (1,1)-Überganges sehr stark von den Profilen in Abbildung 10. Abgesehen von den Makroturbulenzen läßt das auch auf verschiedene Anregungsmechanismen schließen, da in den Wolken Orion A, DR 21 und Sgr B2 ein Übergang von den Emissions- zu den Absorptionsspektren stattfindet. Den fünf Hyperfeinstrukturkomponenten ist im Orion A ein Emissionsuntergrund überlagert. In DR 21 treten vier der fünf Hyperfeinstrukturkomponenten des Ammoniaks in Absorption auf. Wird Ammoniak in Richtung der galaktischen Zentrumswolke Sgr B2 beobachtet, erscheint das gesamte Linienprofil in Absorption.

Diese wenigen Beispiele mögen genügen, um anzudeuten, daß es wohl keine „Standardwolke“ im interstellaren Raum gibt. Trotzdem kann man die interstellaren Wolken klassifizieren, wenn man die beobachteten Linienbreiten zusammen mit den astronomischen Parametern wie Temperatur, Masse und Größe der Wolke benutzt. In Tabelle 4 ist die Klassifizierung von Winnewisser und Mitarbeitern [6] zusammengestellt.

Heiße Molekülwolken und Sternbildung

Wie wir gesehen haben, werden fast alle Moleküle anhand ihrer Mikrowellenspektren im interstellaren Raume nachgewiesen. Eine Ausnahme bildet der molekulare Wasserstoff, da er als homonukleares Molekül kein permanentes elektrisches Dipolmoment besitzt und damit kein Rotationsspektrum liefert. Bei ihm sind molekulare Quadrupolübergänge schwach erlaubt und liegen im Bereich der Infrarot-Wellen. In den dichteren Wolken liegt der Wasserstoff hauptsächlich in molekularer Form vor. Falls diese Molekülwolken keine eigenen Wärmequellen in Form von Sternen besitzen, sind sie kalt mit Temperaturen zwischen 10 und 50 K, so daß die höheren Energieniveaus des H₂ nicht besetzt werden können. In Regionen jedoch, in denen die Sternbildung stattfindet, entstehen Schockwellen, welche die Anregungsener-

gien auf das interstellare Gas und damit auch auf den molekularen Wasserstoff übertragen. In diesen Regionen ist molekularer Wasserstoff auf eine Temperatur von vielen tausend Kelvin aufgeheizt. Emission von quadrupol-erlaubten Übergängen mit $\Delta J = \pm 2$ bis zu $J = 17 - 15$ im Schwingungsgrundzustand ($v = 0$) und von niedrigeren Rotationsübergängen zwischen den Schwingungszuständen $v = 1 - 0$ und $v = 2 - 1$ wurden in der Orion Molecular Cloud, OMC1, beobachtet [8, 9]. Entsprechend wurde im Zentrum von OMC1 auch das Emissionsspektrum der CO-Oberschwingung entdeckt [10]. Mit Sicherheit können in Zukunft die Infrarotspektren weiterer Moleküle beobachtet werden. Dadurch wird es möglich, die hochangeregte interstellare Gaskomponente bis in die Gebiete messend zu verfolgen, in denen die Sternentstehung stattfindet. Abbildung 12 zeigt einen Überblick über die Orion-Region: Man erkennt die Positionen der Gürtelsterne δ -, ϵ -, ζ -Ori, das Gebiet der jungen Sterne, die sogenannte Orion-I-Assoziation, die Reflexionsnebel und die Lage der Molekülwolken. Die Konturlinien der Molekülwolken sind anhand des CO-Rotationsüberganges $J = 1 - 0$ mit dem 1m-Radioteleskop der Columbia Universität, New York, durch Thaddeus und Mitarbeiter [11] erstellt worden. Die jungen Sterne im Gürtel und Schwert des Orions haben ein geschätztes Alter von $2 \cdot 10^6$ Jahren. In diesen Regionen finden sich auch junge „Proto-Sterne“, die wir im Sichtbaren nicht beobachten können, da sie noch von einer dichten Hülle aus Gas und Staub umgeben sind, aus der sie sich gebildet haben. Sie teilen uns aber ihre Existenz durch die Emission von Kontinuums- und

Linienstrahlung im infraroten Spektralbereich sowie durch eine sehr intensive MASER-Emission im Mikrowellenbereich mit, die vornehmlich von Wassermolekülen stammt. Die in der Orion-Region beobachteten Moleküle sind in Tabelle 5 aufgeführt. Die Position des wunderschönen „Pferdekopf“-Nebels (Abbildung 13) ist ebenfalls angegeben. Die kleinen interstellaren Moleküle erlauben uns also, über ihre Mikrowellenspektren bis tief in die dichten und aktiven Zentralregionen der interstellaren Wolken vorzudringen. Diese Kondensationen sind offensichtlich die Orte, in denen junge Sterne noch im Embryonalzustand die Energie für ihre Geburt aus der Kontraktion eines Teils der sie umgebenden Molekül- und Staubwolke schöpfen.

Kalte dichte Molekülwolken

Im vorigen Abschnitt haben wir eine Riesemolekülwolke mit assoziiertem ionisiertem Gas, nämlich die Orion-A-Wolke, mit einigen ihrer Eigenschaften besprochen. Jetzt möchte ich versuchen, einige physikalische und chemische Eigenschaften einer kalten dichten interstellaren Wolke zusammenzutragen. Als Beispiel sei der Komplex der kalten Taurus-Dunkelwolke im Sternbild des Stiers gewählt. Diese Wolke hat eine geschätzte Entfernung von 380 Lichtjahren von der Erde.

In seinem 1927 veröffentlichten photographischen „Atlas of Selected Regions in the Milky Way“ hat Barnard [12] das Gebiet der heutigen Taurus-Dunkelwolke als eine der interessantesten Regionen in unserer Galaxis be-

Tabelle 4. Klassifizierung interstellarer Molekülwolken.

Wolkentyp	Linienbreite [km · s ⁻¹]	lineare Ausdehnung [pc]	Dichte lg n _{H2} [cm ⁻³]	Temperatur [K]	Masse lg M [M _⊙]
Dunkelwolken	0,2–1	1–10	3–5	10–20	2–4
Wolken mit H ⁺ -Region	3–30	1–50	4–6	20–80	5–6
Maserobjekte	0,1–2	< 10 ⁻³	> 6	100–1000	1
Circumstellare Hüllen	20–30	0,01–5	4–6	100–1000	≤ 2
Diffuse Wolken	1	< 20	10–100	≤ 10	

Tabelle 5. Nachgewiesene Moleküle in der Orion- und Taurus-Molekülwolke.

Orion (OMC1)		Taurus (TMC1)
Hydride	H ₂ CH OH H ₂ O NH ₃ NNH ⁺ H ₂ S	CH OH NH ₃ NNH ⁺
Oxide, Sulfide	CO CS SO SiO O ₃ SO ₂ OCS HCS ⁺	CO CS SO
Acetylene, Cyanide und verwandte Verbindungen	CN HCN HNC HC ₃ N CH ₃ CN H ₂ CCHCN CH ₃ CH ₂ CN CCH CH ₃ CCH HNCO CH ₃ NH ₂	CN HCN HNC HC ₃ N HC ₅ N HC ₇ N HC ₉ N CCH CCCN HNCO CCCCH CH ₃ CCH
Aldehyde, Alkohole, Ester, Ether	H ₂ CO HCO ⁺ CH ₃ CHO H ₂ CS HCOOCH ₃ CH ₃ OH (CH ₃) ₂ O	H ₂ CO HCO ⁺

Folgende Moleküle wurden nur im galaktischen Zentrum entdeckt: NO, NS, HNO, HCO, CH₃SH, HNCS, HCOOH, CH₂NH, NH₂CHO, CH₃CH₂OH

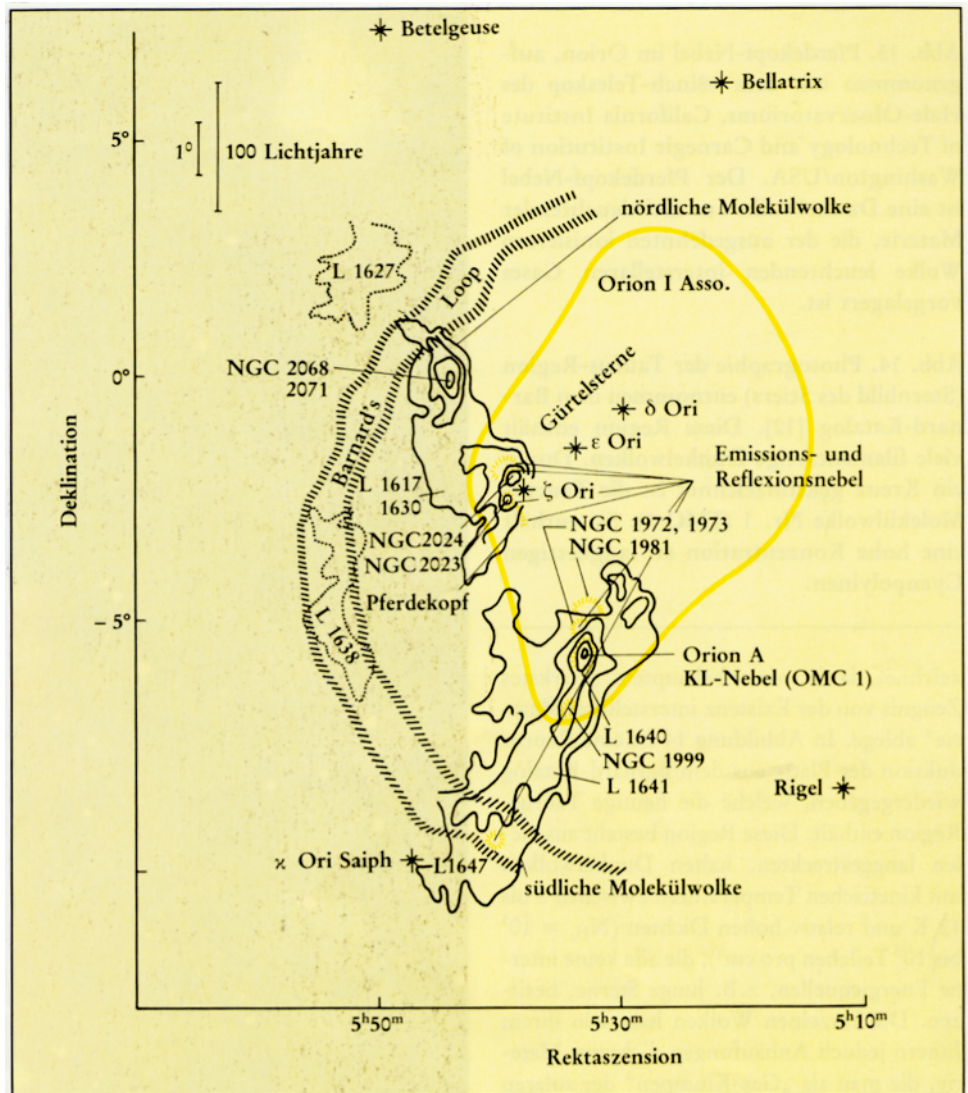


Abb. 12. Werden die Gas- und Staubwolken nur angeleuchtet, z.B. von einem relativ kühlen (roten) Stern, dann reflektieren sie das Sternlicht. Man spricht von einem Reflexionsnebel. Befindet sich in der Nähe einer Wolke ein sehr heißer Stern, so können die Gasatome und Moleküle zu eigenem Leuchten angeregt werden. Man spricht von einem Emissionsnebel. Reflexions- und Emissionsnebel können zusammen mit Dunkelwolken auftreten. Eines der schönsten und interessantesten galaktischen Nebelsysteme, das eingelagerte Dunkelwolken enthält, findet sich im Sternbild des Orion. Unser Überblick über die Orion-Region zeigt die bekanntesten Sterne, die Emissions- und Reflexionsnebel (kräftig gelb gestrichelt umgrenzte Gebiete) sowie die Positionen der Molekülwolken. Die Konturlinien der Molekülwolken sind anhand des $J = 1 - 0$ -Rotationsüberganges des CO-Moleküls mit dem 1m-Radioteleskop der Columbia-Universität New

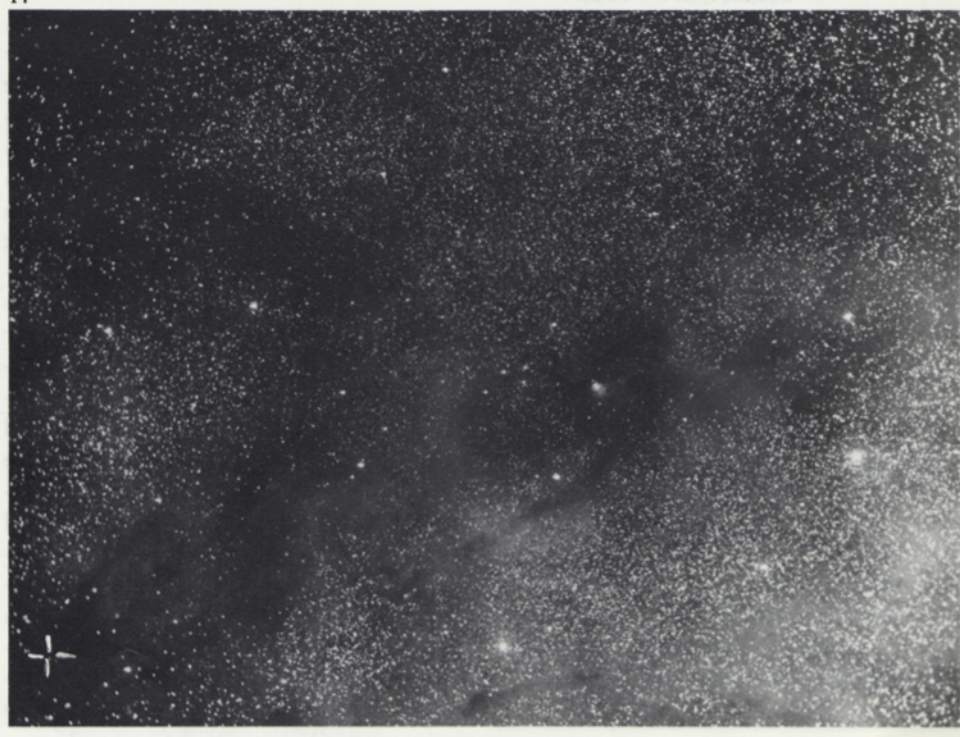
York von Thaddeus und Mitarbeitern [11] erstellt worden. Die jüngsten Sterne (ca. 10^6 Jahre) innerhalb der Orion-I-Assoziation, z.B. die Trapez-Sterne, finden sich in der Umgebung des Orion-A-Kleinmann-Low-Nebels. Die Zentralpositionen der Dunkelwolken sind durch die entsprechenden Nummern im Lynd's Katalog angegeben. Der Orion-Nebel ist 480 pc oder 1500 Lichtjahre von der Erde entfernt. Die Koordinaten eines Sterns oder einer Molekülwolke werden durch Deklination und Rektaszension angegeben. Unter Deklination versteht man den Winkel zwischen der Ebene des Himmelsäquators und des Fahrstrahls zur Position des Sterns oder der Wolke. Die Rektaszension ist der Winkel zwischen dem Stundenkreis des Frühlingspunktes und dem Stundenkreis des astronomischen Objektes. Die Rektaszension kann sowohl in Graden zwischen 0° und 360° als auch in Zeiteinheiten ($15^\circ = 1h$) ausgedrückt werden [3].

Abb. 13. Pferdekopf-Nebel im Orion, aufgenommen mit dem 48inch-Teleskop des Hale-Observatoriums, California Institute of Technology and Carnegie Institution of Washington/USA. Der Pferdekopf-Nebel ist eine Dunkelwolke aus nichtleuchtender Materie, die der ausgedehnten ionisierten Wolke leuchtenden interstellaren Gases vorgelagert ist.

Abb. 14. Photographie der Taurus-Region (Sternbild des Stiers) entnommen dem Barnard-Katalog [12]. Diese Region enthält viele filamentartige Dunkelwolken. Durch ein Kreuz gekennzeichnet ist die Taurus-Molekülwolke Nr. 1 (TMC 1). Sie enthält eine hohe Konzentration an langkettigen Cyanpolyinen.



14

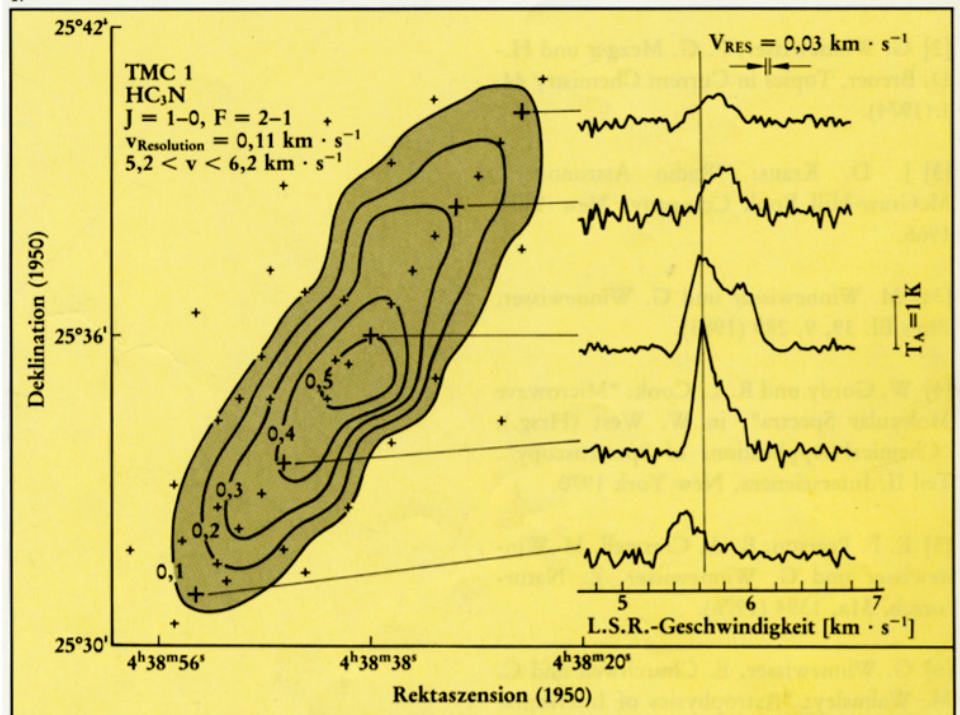
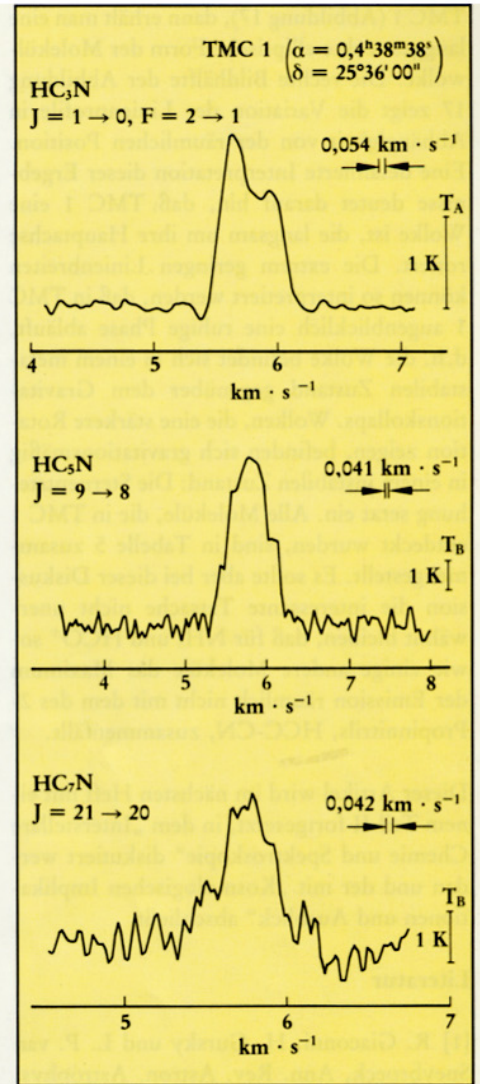
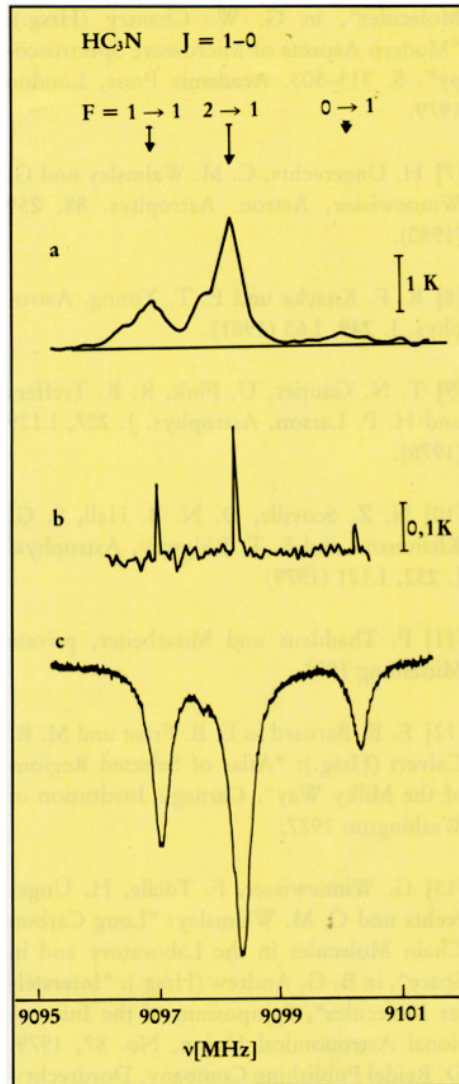


zeichnet, da sie, wie er behauptete, „stärkstes Zeugnis von der Existenz interstellarer Materie“ ablege. In Abbildung 14 ist eine Reproduktion der Platte aus dem Barnard-Katalog wiedergegeben, welche die heutige Taurus-Region enthält. Diese Region besteht aus vielen langgestreckten, kalten Dunkelwolken mit kinetischen Temperaturen zwischen 8 bis 12 K und relativ hohen Dichten ($N_{\text{H}_2} = 10^3$ bis 10^5 Teilchen pro cm^3), die alle keine interne Energiequellen, z.B. junge Sterne, besitzen. Die einzelnen Wolken haben in ihrem Innern jedoch Anhäufungen dichter Materie, die man als „Gas-Klumpen“ der solaren Masse (1 bis $5 M_{\odot}$) auffassen kann. Die Taurus-Molecular-Cloud 1 (TMC 1) ist eine solche dichte Dunkelwolke, die in die Heiles' Cloud 2 eingebettet ist. Heiles' Cloud 2 ist eine ausgedehnte, aber verdünnte (ca. 10^3 Teilchen pro cm^3) Dunkelwolke, die ein hochaufgelöstes Emissionsspektrum des Moleküls HCC-CN liefert, das in Abbildung 15 gezeigt ist. In TMC 1 wurden die bis heute schwersten und vielleicht interessantesten Moleküle gefunden, nämlich die gesamte Reihe der Cyanpolyine mit der Summenformel $\text{H}(\text{CC})_n\text{CN}$ mit $n = 0, 1, 2, 3, 4$ (vgl. Abbildung 5 und 6). In Abbildung 16 sind die Spektren der Moleküle HC_3N , HC_5N und HC_7N zusammengestellt, wie sie mit dem 100m-Radioteleskop des Max-Planck-Institutes für Radioastronomie in Effelsberg von Winnewisser und Mitarbeitern beobachtet wurden [13]. Nimmt man nun die mittlere Hyperfeinstrukturkomponente $F = 2 - 1$ des Rotationsüberganges $J = 1 - 0$ von 2-Propinitril, HCC-CN (vgl. Abbildung 15) zur Anfertigung einer Intensitätskonturkarte von

Abb. 15. Vergleich zwischen zwei interstellaren Emissionsspektren des 2-Propinnitrils, $\text{HC}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{N}$, mit dem im Gießener Laboratorium erhaltenen Absorptionsspektrum: a) Molekülwolke mit assoziierter H^+ -Region, SGR B2; b) kalte Dunkelwolke im Tauruskomplex (Cloud 2); c) Absorptionsspektrum im Laboratorium aufgenommen. Man beobachtet in Cloud 2 eine äußerst geringe Linienbreite und vollständig aufgelöste Kernquadrupolhyperfeinstruktur, die durch den Kernspin des Stickstoffkerns ^{14}N verursacht wird.

Abb. 16. Emissionsprofile verschiedener Rotationsübergänge von HC_3N , HC_5N und HC_7N in der Taurus Molecular Cloud 1 (TMC 1). Diese Moleküllinien wurden mit dem 100m-Radioteleskop des Max-Planck-Instituts für Radioastronomie in Effelsberg beobachtet [13]. Die Relativgeschwindigkeit aufgrund der Dopplerverschiebung ist auf die entsprechende Ruhfrequenz der Übergänge bezogen. Die entsprechenden Rotationsübergänge sind im Energiediagramm in Abbildung 6 eingezeichnet. Bei der Beobachtung von galaktischen und extragalaktischen Objekten hat es sich als nützlich herausgestellt, entweder die Erde oder die Sonne als Ursprung für die Positionsbestimmung zu verwenden. Dabei werden alle Bewegungen auf einen "Local Standard of Rest" (Lokalen Standard der Ruhe) bezogen, der durch den Bewegungsschwerpunkt aller in der Nachbarschaft der Sonne (innerhalb von 100 pc) gelegenen Sterne definiert ist [3]. Die Relativgeschwindigkeit der Molekülwolke in km s^{-1} bezogen auf den L. S. R. wird als Abszisse angegeben. Sie entspricht einer Doppler-Verschiebung der Spektrallinien.

Abb. 17. Die langgestreckte elliptische Form der Molekülwolke TMC 1 wird durch die Intensitätskonturen des $J = 1 - 0$ -Rotationsüberganges von $\text{HC}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{N}$ verdeutlicht. Die rechte Bildhälfte zeigt die Änderung der Linienprofile in Abhängigkeit von der räumlichen Position. Die Linienintensitäten werden in Kelvin-Einheiten der Antennentemperatur T_A angegeben. Auf der Abszisse ist für die Linien die Relativgeschwindigkeit aufgetragen, die auf die Ruhfrequenz des Überganges bezogen ist.



TMC 1 (Abbildung 17), dann erhält man eine langgestreckte elliptische Form der Molekülwolke. Die rechte Bildhälfte der Abbildung 17 zeigt die Variation der Linienprofile in Abhängigkeit von der räumlichen Position. Eine detaillierte Interpretation dieser Ergebnisse deutet darauf hin, daß TMC 1 eine Wolke ist, die langsam um ihre Hauptachse rotiert. Die extrem geringen Linienbreiten können so interpretiert werden, daß in TMC 1 augenblicklich eine ruhige Phase abläuft, d.h. die Wolke befindet sich in einem metastabilen Zustand gegenüber dem Gravitationskollaps. Wolken, die eine stärkere Rotation zeigen, befinden sich gravitationsmäßig in einem instabilen Zustand: Die Sternentstehung setzt ein. Alle Moleküle, die in TMC 1 entdeckt wurden, sind in Tabelle 5 zusammengestellt. Es sollte aber bei dieser Diskussion die interessante Tatsache nicht unerwähnt bleiben, daß für NH_3 und HCO^+ sowie einige andere Moleküle das Maximum der Emission räumlich nicht mit dem des 2-Propinnitrils, HCC-CN , zusammenfällt.

Dieser Artikel wird im nächsten Heft mit einem Teil II fortgesetzt, in dem „Interstellare Chemie und Spektroskopie“ diskutiert werden und der mit „Kosmologischen Implikationen und Ausblick“ abschließt.

Literatur

- [1] R. Giacconi, H. Gursky und L. P. van Speybroeck, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* **6**, 373 (1968).
- [2] G. Winnewisser, P. G. Mezger und H.-D. Breuer, *Topics in Current Chemistry* **44**, 1 (1974).
- [3] J. D. Kraus: „Radio Astronomy“. McGraw-Hill Book Company, New York 1966.
- [3a] M. Winnewisser und G. Winnewisser, *Phys Bl.* **39**, 9, 289 (1983).
- [4] W. Gordy und R. L. Cook: „Microwave Molecular Spectra“, in W. West (Hrsg.): „Chemical Applications of Spectroscopy“. Teil II. Intersciences, New York 1970.
- [5] E. F. Pearson, R. A. Creswell, M. Winnewisser und G. Winnewisser, *Z. Naturforsch.* **31a**, 1394 (1976).
- [6] G. Winnewisser, E. Churchwell und C. M. Walmsley: „Astrophysics of Interstellar Molecules“, in G. W. Chantry (Hrsg.): „Modern Aspects of Microwave Spectroscopy“. S. 313–503. Academic Press, London 1979.
- [7] H. Ungerechts, C. M. Walmsley und G. Winnewisser, *Astron. Astrophys.* **88**, 259 (1980).
- [8] R. F. Knacke und E. T. Young, *Astrophys. J.* **249**, L65 (1981).
- [9] T. N. Gautier, U. Fink, R. R. Treffers und H. P. Larson, *Astrophys. J.* **207**, L129 (1976).
- [10] N. Z. Scoville, D. N. B. Hall, S. G. Kleinmann und S. T. Ridgway, *Astrophys. J.* **232**, L121 (1979).
- [11] P. Thaddeus und Mitarbeiter, private Mitteilung 1981.
- [12] E. E. Barnard in E. B. Frost und M. R. Calvert (Hrsg.): „Atlas of Selected Regions of the Milky Way“. Carnegie Institution of Washington 1927.
- [13] G. Winnewisser, F. Toelle, H. Ungerechts und C. M. Walmsley: „Long Carbon Chain Molecules in the Laboratory and in Space“, in B. G. Andrew (Hrsg.): „Interstellar Molecules“, Symposium of the International Astronomical Union, No. 87, 1979. D. Reidel Publishing Company, Dordrecht – Boston – London 1980.

Prof. Dr. M. Winnewisser, geb. 1934, studierte Chemie an der Technischen Hochschule Karlsruhe. Doktorarbeit am Institut für Physikalische Chemie der TH Karlsruhe bei Prof. Dr. W. Zeil auf dem Gebiet der Molekülspektroskopie. Forschungsaufenthalte an der Duke University bei Prof. W. Gordy, der Universität Kiel und der Ohio State University bei Prof. Rao. Seit 1973 Professor für Physikalische Chemie an der Justus-Liebig-Universität Gießen. Arbeitsgebiete: Millimeter- und Submillimeterwellen-Spektroskopie, Molekülstruktur und Rotations-Vibrations-Wechselwirkungen. Spektroskopie astrophysikalisch interessanter Moleküle. Computermethoden in der chemischen Physik. – Der Autor dankt Herrn Dr. J. M. MacLeod vom Herzberg Institute of Astrophysics, National Research Council of Canada, Ottawa, für die Überlassung von Bildmaterial, Herrn Prof. Dr. Gisbert Winnewisser vom I. Physikalischen Institut der Universität zu Köln für seine Ratschläge und die Erlaubnis, einige der neuesten Forschungsergebnisse zu verwenden, Frau Dr. Brenda P. Winnewisser, Herrn Dr. Jürgen Vogt, Herrn Jürgen Reinstaedtler und Herrn Klaus Möller für ihre Beiträge bei der Anfertigung der Zeichnungen und des Manuskriptes. Dem National Radio Astronomy Observatory, operated by Associated Universities, Inc. under contract with the National Science Foundation, dankt er für die Überlassung von Photographien der Radioteleskope.